



HAL
open science

Hydrodynamique dans les circuits de refroidissement industriels : influence sur les phénomènes d'encrassement, caractérisation et modélisation

Nicolas Jourdan

► **To cite this version:**

Nicolas Jourdan. Hydrodynamique dans les circuits de refroidissement industriels : influence sur les phénomènes d'encrassement, caractérisation et modélisation. Génie des procédés. Université de Lorraine, 2020. Français. NNT : 2020LORR0179 . tel-03176226

HAL Id: tel-03176226

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-03176226>

Submitted on 22 Mar 2021

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.



AVERTISSEMENT

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

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

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

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

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>



Thèse de Doctorat

Présentée et soutenue publiquement le 9 Novembre 2020
pour l'obtention du titre de

Docteur de l'Université de Lorraine

Discipline : Génie des Procédés, des Produits et des Molécules

par

Nicolas JOURDAN

Hydrodynamique dans les circuits de refroidissement industriels : influence sur les phénomènes d'encrassement, caractérisation et modélisation

Composition du jury

| | | |
|--------------------|--|--|
| <i>Présidente</i> | Béatrice BISCANS | Université Toulouse 3 (LGC) |
| <i>Rapporteurs</i> | Caroline GENTRIC Sergio CHIVA | Université de Nantes (GEPEA) Universitat Jaume I |
| <i>Examineurs</i> | Angélique DELAFOSSE Olivier POTIER Thibaut NEVEUX | Université de Liège Université de Lorraine (LRGP), directeur de thèse EDF R&D, co-directeur de thèse |
| <i>Invités</i> | Jean-Claude CHARPENTIER Pascal ALIX Mohamed KANNICHE | Université de Lorraine (LRGP) IFPEN EDF R&D |

Préambule et remerciements

Ces travaux de thèse ont été réalisés au sein du département LNHE d'EDF R&D à Chatou et au Laboratoire Réactions et Génie des Procédés (LRGP) à Nancy sous la direction d'Olivier Potier et de Thibaut Neveux. Cette thèse a été financée par le projet ALCHIMIC d'EDF R&D et par l'Association Nationale de la Recherche et de la Technologie (ANRT) dans le cadre d'une bourse CIFRE.

Je tiens à remercier tout d'abord Olivier Potier (Experto) et Thibaut Neveux de m'avoir fait confiance et de m'avoir permis de réaliser cette thèse sous leur direction. Je leur suis très reconnaissant pour leur encadrement au quotidien, leurs connaissances scientifiques, leurs conseils et leur rigueur mais aussi pour tous les bons moments passés au cours de ces trois années et demi. Je remercie aussi Mohamed Kanniche pour son expertise et son savoir, notamment en Mécanique des Fluides.

Je remercie Vincent Jean-Baptiste et Sylvain Blairon ainsi que toute l'équipe P77 "Chimie, Microbiologie, Eau et Environnement" de la R&D pour leur accueil au sein du groupe. Je remercie Céline Bouteleux pour son aide et pour mon intégration dans le projet ALCHIMIC.

J'exprime tous mes remerciements à l'ensemble des membres du jury de thèse pour avoir accepté de participer à l'évaluation de mes travaux ainsi que pour les échanges et discussions que nous avons pu avoir au cours de la soutenance.

Je remercie les services de l'Atelier et du SIEL du LRGP pour la construction et la réalisation du dispositif expérimental, tout particulièrement Charly, Christian, David et Franck avec qui j'ai eu beaucoup d'échanges afin de parvenir au bon fonctionnement du dispositif. Je tiens aussi à remercier Thibault Roques-Carmes pour son aide sur les mesures des angles de contact et Cécile Lemaitre pour le prêt d'une caméra rapide du GEMICO. Merci à l'équipe de développement de CODE_SATURNE et NEPTUNE_CFD, particulièrement Mathieu Guingo, Nicolas Merigoux et Jérôme Lavieville.

Un grand merci aussi à Lydia, Raphaëlle, Jean-Baptiste et Fanny, que j'ai eu la chance d'encadrer ou de superviser, pour leurs stages et leur temps.

Merci à Florian et Mélanie de m'avoir laissé divaguer de nombreuses fois dans leur bureau. Merci à

l'Équipe Cantine du LRGP et à son Grand Leader Rainier pour tous les repas et les cafés partagés. Merci à Anaïs, Julien et Azénor avec qui j'ai partagé plus ou moins longtemps mon bureau, pour leur patience et tous les bons moments partagés. Merci à l'after en 207.

Merci à ma famille de son soutien moral tout au long de ma thèse et pour leur accompagnement matériel sous la forme de (très) nombreux bocaux de victuailles du Sud-Ouest. Merci enfin à Coline pour son accompagnement au quotidien et son soutien dans les meilleurs moments comme dans les plus difficiles.

De manière générale, je remercie tous ceux qui ont participé directement ou indirectement à mes travaux de thèse et qui m'ont permis d'aboutir à cette réalisation.

Table des matières

| | |
|--------------------------|------|
| Liste des figures | xiii |
| Liste des tableaux | xvi |
| Nomenclature | xvii |

I Objet de la thèse et approche méthodologique

| | |
|--|-----------|
| CHAPITRE 1 - Introduction générale : éléments bibliographiques sur l'encrassement des circuits de refroidissement et propos de la thèse | 3 |
| 1.1 Les circuits de refroidissement industriels | 3 |
| 1.1.1 Description générale des circuits de refroidissement industriels | 3 |
| 1.1.2 Les tours aéroréfrigérantes | 6 |
| 1.2 Encrassement des circuits de refroidissement | 10 |
| 1.2.1 Encrassement physique | 12 |
| 1.2.2 Encrassement chimique | 14 |
| 1.2.3 Encrassement biologique | 15 |
| 1.2.4 Problématique de l'encrassement d'un point de vue industriel | 17 |
| 1.3 Positionnement de la thèse et verrou scientifique | 19 |
| 1.3.1 Rôle de l'hydrodynamique dans le développement de l'encrassement | 19 |
| 1.3.2 Objet de la thèse | 20 |
| 1.3.3 Articulation de la thèse | 21 |
| CHAPITRE 2 - Choix de l'approche de modélisation | 23 |
| 2.1 Approches de modélisations en Génie Chimique | 23 |
| 2.2 Compartmental Modelling in chemical engineering : A critical review | 25 |
| 2.3 Choix de l'approche compartimentale pour le circuit de refroidissement | 46 |

II Caractérisation hydrodynamique

| | |
|--|-----------|
| CHAPITRE 3 - Vue d'ensemble des conditions hydrodynamiques dans le circuit et démarche de caractérisation | 51 |
| 3.1 Écoulements dans les bassins froids | 51 |
| 3.1.1 Géométrie et nature des écoulements dans les bassins froids | 51 |
| 3.1.2 Aperçu des méthodes de caractérisation de l'hydrodynamique des bassins | 52 |
| 3.1.3 Informations disponibles et stratégie de caractérisation des écoulements | 55 |
| 3.2 Écoulements en conduite | 55 |
| 3.2.1 Géométrie et nature des écoulements dans les conduites | 55 |
| 3.2.2 Caractérisation des écoulements établis | 57 |
| 3.2.3 Cas des écoulements non établis | 59 |
| 3.3 Écoulements dans les garnissages industriels | 59 |
| 3.3.1 Géométrie et nature des écoulements dans les garnissages | 59 |
| 3.3.2 Hydrodynamique à l'échelle système dans les garnissages industriels | 63 |
| 3.3.3 Hydrodynamique locale dans les garnissages | 64 |
| 3.3.4 Simulations de MFN dans les garnissages industriels | 66 |

| | | |
|-------------------|--|------------|
| 3.3.5 | Stratégie de caractérisation des écoulements dans les garnissages | 73 |
| 3.4 | Conclusion | 73 |
| CHAPITRE 4 | - Caractérisation expérimentale des écoulements dans les garnissages | 75 |
| 4.1 | Dispositif expérimental de caractérisation des écoulements | 75 |
| 4.1.1 | Objectif du dispositif et représentativité | 75 |
| 4.1.2 | Présentation du dispositif expérimental | 77 |
| 4.1.3 | Conception et validation des éléments | 80 |
| 4.2 | Méthodes expérimentales | 82 |
| 4.2.1 | Méthodes expérimentales de mesure et de caractérisation des films ruisselants . . . | 83 |
| 4.2.2 | Synthèse bibliographique et choix des méthodes de mesure | 86 |
| 4.2.3 | Matériel de visualisation | 88 |
| 4.2.4 | Mesure des épaisseurs de film liquide | 89 |
| 4.2.5 | Mesure du taux de mouillage | 92 |
| 4.3 | Résultats et discussions | 93 |
| 4.3.1 | Plan d'expérience et paramètres considérés | 93 |
| 4.3.2 | Observations qualitatives des écoulements dans les garnissages | 94 |
| 4.3.3 | Mesure des épaisseurs de film liquide | 95 |
| 4.3.4 | Mesure du taux de mouillage | 103 |
| 4.3.5 | Conclusion et discussion sur les résultats | 107 |
| 4.4 | Conclusion | 108 |
| CHAPITRE 5 | - Caractérisation numérique des écoulements dans les garnissages | 111 |
| 5.1 | Choix d'une approche de simulation | 111 |
| 5.1.1 | Présentation des deux approches testées | 111 |
| 5.1.2 | Choix d'une approche sur la base d'un cas test | 113 |
| 5.2 | Matériel et méthode | 115 |
| 5.2.1 | Géométrie et maillage | 115 |
| 5.2.2 | Choix des conditions aux limites et des paramètres de simulation | 117 |
| 5.2.3 | Post-traitement et grandeurs mesurées | 121 |
| 5.3 | Résultats des simulations de MFN : caractérisation du garnissage à l'échelle système | 123 |
| 5.3.1 | Taux de mouillage | 123 |
| 5.3.2 | Taux de rétention liquide | 125 |
| 5.3.3 | Aire interfaciale | 126 |
| 5.4 | Résultats des simulations locales des écoulements par méthode VOF | 127 |
| 5.4.1 | Simulation de la vitesse du liquide | 127 |
| 5.4.2 | Simulation de la contrainte de cisaillement | 132 |
| 5.4.3 | Simulation des épaisseurs de film | 137 |
| 5.5 | Conclusion | 144 |
| CHAPITRE 6 | - Synthèse sur les écoulements dans les circuits de refroidissement | 145 |
| 6.1 | Hydrodynamique dans les bassins froids | 145 |
| 6.1.1 | Géométrie et maillage | 145 |
| 6.1.2 | Paramètres des simulations | 146 |
| 6.1.3 | Résultats | 147 |
| 6.2 | Hydrodynamique dans les conduites | 154 |
| 6.2.1 | Écoulement turbulent établi | 154 |
| 6.2.2 | Écoulements dans la zone de transition turbulente | 157 |
| 6.3 | Synthèse de l'hydrodynamique dans les garnissages | 159 |
| 6.3.1 | Données hydrodynamiques disponibles | 159 |
| 6.3.2 | Caractérisation pour le transfert de matière | 161 |
| 6.3.3 | Hydrodynamiques dans les autres garnissages des tours aéroréfrigérantes | 163 |
| 6.4 | Discussion sur les résultats | 167 |
| 6.4.1 | Informations disponibles et validation des résultats | 167 |

| | | |
|---|---|------------|
| 6.4.2 | Limites méthodologiques | 168 |
| 6.4.3 | Retombées des résultats | 170 |
| 6.4.4 | Perspectives des études hydrodynamiques | 171 |
| 6.5 | Conclusion | 172 |
| | | |
| III Modélisation compartimentale appliquée au développement de biofilm | | |
| | | |
| CHAPITRE 7 - Modèle d'encrassement biologique | | 175 |
| 7.1 | Détermination des régimes des phénomènes | 176 |
| 7.1.1 | Compétition entre phénomènes de transfert et réaction biologique | 176 |
| 7.1.2 | Dans le biofilm | 178 |
| 7.1.3 | Dans le fluide | 179 |
| 7.2 | Modélisation du biofilm | 182 |
| 7.2.1 | Influence du régime bio-physico-chimique : définition des critères d'efficacité | 183 |
| 7.2.2 | Influence des conditions environnementales | 184 |
| 7.2.3 | Influence de l'hydrodynamique | 187 |
| 7.2.4 | Modèle de biofilm proposé dans ce travail | 188 |
| 7.3 | Détermination des paramètres du modèle | 192 |
| 7.3.1 | Données disponibles | 192 |
| 7.3.2 | Détermination des paramètres de l'équation | 194 |
| 7.3.3 | Étude de sensibilité des différents paramètres | 202 |
| 7.3.4 | Discussion du modèle proposé | 205 |
| 7.4 | Conclusion | 206 |
| | | |
| CHAPITRE 8 - Modèle compartimental du circuit de refroidissement | | 209 |
| 8.1 | Construction des compartiments | 209 |
| 8.1.1 | Écoulements en conduites cylindriques : tubes de condenseur et conduites en béton | 210 |
| 8.1.2 | Écoulements dans les garnissages | 212 |
| 8.1.3 | Écoulements dans le bassin froid | 214 |
| 8.1.4 | Modèle compartimental du circuit de refroidissement complet | 219 |
| 8.2 | Scénarios simulés et résultats | 221 |
| 8.2.1 | Simulation de la croissance du biofilm dans les différents éléments du circuit | 222 |
| 8.2.2 | Influence des paramètres hydrodynamiques dans les garnissages | 224 |
| 8.2.3 | Influence des paramètres hydrodynamiques dans le bassin froid | 227 |
| 8.2.4 | Influence des paramètres hydrodynamiques dans la zone d'établissement de la turbulence dans les conduites | 231 |
| 8.2.5 | Simulation de la variation de température au cours d'une année | 234 |
| 8.2.6 | Simulation de la qualité d'eau | 236 |
| 8.3 | Discussions et perspectives du modèle | 238 |
| 8.3.1 | Retombées du modèle : utilisation de la modélisation du biofilm | 238 |
| 8.3.2 | Limites du modèle compartimental | 240 |
| 8.3.3 | Perspectives du modèle | 241 |
| 8.4 | Conclusion | 242 |
| | | |
| Conclusion | | 245 |
| | | |
| Bibliographie | | 251 |
| | | |
| Annexe 1 - Liste des communications réalisées pendant la thèse | | 261 |
| | | |
| Annexe 2 - Plan d'expérience réalisé sur le dispositif expérimental | | 263 |
| | | |
| Annexe 3 - Conditions opératoires simulées par Mécanique des Fluides Numérique | | 265 |

Table des figures

| | | |
|-----|--|----|
| 1.1 | Schéma de fonctionnement des circuits de refroidissement : circuit ouvert (à gauche) et circuit semi-fermé (à droite) (source : EDF) | 4 |
| 1.2 | Schéma d'un circuit de refroidissement semi-fermé (Neveux <i>et al.</i> , 2016) | 5 |
| 1.3 | Structure interne et externe (gauche) et dessin de coupe verticale en fonctionnement (droite) d'une tour aéroréfrigérante humide à contre-courant (source : EDF) | 7 |
| 1.4 | Photos de garnissage de type feuille (gauche), hybride (centre) et grille (droite) | 7 |
| 1.5 | Exemples de surfaces encrassées : garnissage entartré (gauche) et dépôt de biofilm avec des matières en suspension dans un tube de condenseur (droite) | 11 |
| 1.6 | Diagramme de Hjulstrom - Régimes de sédimentation en fonction de la taille des particules et de la vitesse du fluide (Hjulstrom, 1935) | 13 |
| 1.7 | Schéma des étapes de développement d'un biofilm sur une paroi (adapté de Aqua-free Journal) | 15 |
| 1.8 | Représentation de temps caractéristiques des différents phénomènes intervenant dans l'équilibre des biofilms [D'après Picioreanu <i>et al.</i> (2000)] | 16 |
| 3.1 | Courbes de la fonction E(t) pour des réacteurs idéaux, réponse à une impulsion : réacteur piston (à gauche) et réacteur parfaitement agité (à droite) (Levenspiel, 1998) | 53 |
| 3.2 | Profils de vitesse dans une conduite cylindrique en fonction du régime d'écoulement turbulent (adapté de White (2011)) | 56 |
| 3.3 | Tracé des deux corrélations donnant le rapport de la longueur d'établissement L_e sur le diamètre d de la conduite en fonction du nombre de Reynolds | 57 |
| 3.4 | Dimensions du garnissage feuille | 60 |
| 3.5 | Valeurs des nombres adimensionnels en fonction de la vitesse du liquide et de l'épaisseur de film pour de l'eau à 20°C | 62 |
| 3.6 | Valeurs des nombres adimensionnels en fonction de la vitesse du liquide et de l'épaisseur de film pour de l'eau à 20°C - Focalisation sur les conditions de fonctionnement des tours aéroréfrigérantes et détermination des zones d'application des forces | 63 |
| 3.7 | Taux de mouillage apparent obtenu par simulations de MFN en fonction des nombres de Reynolds et de Weber comparé à un cas réel (Haroun <i>et al.</i> , 2014) | 68 |
| 3.8 | Taux de mouillage apparent obtenu par simulations de MFN en fonction des débits liquides (Sebastia-Saez <i>et al.</i> , 2015) | 69 |
| 3.9 | Diagramme de Wallis permettant de comparer les gammes de fonctionnement du garnissage feuille avec différents garnissages industriels de surface spécifique similaire (adapté de Lassauce <i>et al.</i> (2014)) | 72 |
| 4.1 | Schéma de procédé du dispositif expérimental | 78 |
| 4.2 | Plan et dimension du plateau de distribution gaz (gauche) et schéma de conception 3D (droite) | 81 |
| 4.3 | Champs de vitesses d'air pour une coupe horizontale : sans plateau de distribution (gauche-haut) et avec plateau de distribution à cheminées (gauche-bas) - Lignes de courant et vitesses d'air obtenues par simulations de MFN (droite) | 82 |
| 4.4 | Schéma du principe de mesure de l'épaisseur de film liquide par méthode ultrasonique (Pedersen <i>et al.</i> , 2000) | 83 |
| 4.5 | Schéma de la méthode de mesure d'épaisseur de film par fluorescence (Makarytchev <i>et al.</i> , 2001) (gauche) et méthode de mesure par focalisation laser (Han et Shikazono, 2009) (droite) | 85 |

| | | |
|------|---|-----|
| 4.6 | Schéma du test en laboratoire pour la rhodamine B (gauche) et spectre d'absorption de la rhodamine B | 89 |
| 4.7 | (a) Photo du garnissage. (b) Image de référence à sec. (c) Image du garnissage mouillé. (d) Différence des images pour obtenir les images de film. | 90 |
| 4.8 | Image du film ruisselant (gauche) et évolution de l'épaisseur du film liquide en fonction du seuil de niveau de gris choisi et présenté en légende (droite) | 91 |
| 4.9 | Image du garnissage sous exposition à la lumière UV (gauche), identification des trous (centre) et taux de mouillage obtenu par analyse d'image (droite) | 92 |
| 4.10 | Exemples des localisations choisies pour les points expérimentaux d'observation sur les garnissages : de côté pour les films ruisselants (gauche) et de face pour le taux de mouillage (droite) | 94 |
| 4.11 | Image obtenue avec la caméra endoscopique pour visualiser le film ruisselant et les lentilles d'eau formées dans les perforations | 95 |
| 4.12 | Visualisation de l'évolution de l'épaisseur du film en fonction de la position verticale et du temps pour deux zones différentes (Taux d'arrosage de $10 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ et Fa/Fe constant à 0,8) : film liquide instable au cours du temps (gauche) et film liquide stable (droite) | 96 |
| 4.13 | Évolution de l'épaisseur du film liquide en fonction du temps en une position verticale donnée pour les deux films liquides étudiés à la Figure 4.12 : film liquide instable (Figure 4.12 gauche) et film liquide stable (Figure 4.12 droite) | 97 |
| 4.14 | Évolution de l'épaisseur moyenne temporelle du film avec incertitude du post-traitement pour quatre zones (Taux d'arrosage de $7,5 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ pour Fa/Fe constant à 0,8) | 98 |
| 4.15 | Évolution de l'épaisseur moyenne temporelle du film avec incertitude du post-traitement - Mise en avant des difficultés d'automatisation de l'analyse d'images (Taux d'arrosage de $7,5 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ pour Fa/Fe constant à 0,8) | 99 |
| 4.16 | Distribution des épaisseurs de films pour les trois taux d'arrosage (vitesse d'air fixée à 1,88 m/s) - Deux tailles de classes ont été utilisées : 0,2 mm (gauche) et 0,1 mm (droite) | 101 |
| 4.17 | Distribution des épaisseurs de films pour les quatre vitesses de gaz (taux d'arrosage fixé à $10 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$) | 102 |
| 4.18 | Distribution des taux de mouillage pour les trois taux d'arrosage considérés (vitesse d'air fixée à 1,88 m/s) | 104 |
| 4.19 | Distributions des valeurs du taux de mouillage en fonction du taux d'arrosage en cinq localisations du garnissage : représentation des paramètres statistiques (moyenne, médiane, quartiles) | 106 |
| 5.1 | Géométrie et maillage du cas test | 113 |
| 5.2 | Simulation du cas test avec les deux approches de MFN : Euler-Euler (gauche) et VOF (droite) | 114 |
| 5.3 | Photographie de la partie du garnissage feuille que l'on veut simuler (gauche) et de la géométrie correspondante réalisée par ordinateur (droite) | 116 |
| 5.4 | Maillage en paroi du garnissage vu de dessus (gauche) et maillage d'une perforation (droite) | 117 |
| 5.5 | Bilan des forces de tension de surface pour une goutte liquide déposée sur une surface solide - Représentation de l'angle de contact statique θ | 118 |
| 5.6 | Représentation de la valeur du y^+ en paroi pour les zones mouillées | 119 |
| 5.7 | Principe de mesure des angles de contact statiques par goniométrie | 120 |
| 5.8 | Exemples de coupes verticales du garnissage utilisées pour le post-traitement : coupe centrale sur les perforations (gauche), coupe centrale entre les perforations (centre) et coupe sur les perforations latérales (droite) | 122 |
| 5.9 | Visualisation de la formation de la lentille d'eau lors de l'augmentation du débit liquide au cours du temps (de $7,5$ à $10 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$) | 123 |

| | | |
|------|---|-----|
| 5.10 | Influence de l'angle de contact liquide/solide sur le taux de mouillage pour un taux d'arrosage de $10 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$: 1° (haut gauche), 15° (haut centre), 30° (haut droite), 35° (bas gauche), 40° (bas centre) et 45° (bas droite) - liquide en noir et surface en gris | 124 |
| 5.11 | Tracé des courbes du mouillage en fonction du taux d'arrosage pour des angles de contact de 30° , 35° , 40° et 45° | 125 |
| 5.12 | Rapport de l'aire interfaciale a/a_0 en fonction du taux d'arrosage et des valeurs de l'angle de contact | 127 |
| 5.13 | Distribution des vitesses superficielles du liquide en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 15° | 128 |
| 5.14 | Distribution des vitesses superficielles du liquide en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 30° | 129 |
| 5.15 | Distribution des vitesses superficielles du liquide en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 35° | 129 |
| 5.16 | Distribution des vitesses superficielles du liquide en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 40° | 130 |
| 5.17 | Distribution des vitesses superficielles du liquide en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 45° | 130 |
| 5.18 | Profils de vitesse en fonction de la nature de l'écoulement le long de la paroi : lentille d'eau, film liquide et recirculation en haut d'une perforation | 132 |
| 5.19 | Décomposition du profil de vitesse en fonction de l'épaisseur du film dans le cas d'un film ruisselant établi | 133 |
| 5.20 | Distribution des contraintes de cisaillement en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 15° | 134 |
| 5.21 | Distribution des contraintes de cisaillement en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 30° | 135 |
| 5.22 | Distribution des contraintes de cisaillement en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 35° | 135 |
| 5.23 | Distribution des contraintes de cisaillement en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 40° | 136 |
| 5.24 | Distribution des contraintes de cisaillement en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 45° | 136 |
| 5.25 | Épaisseur de film suivant la coupe centrale : évaluation du mouillage des perforations du garnissage pour différents taux d'arrosage de $7,5$; 10 et $11,5 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ et un angle de contact de 15° | 138 |
| 5.26 | Distribution des épaisseurs de films en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 15° | 139 |
| 5.27 | Distribution des épaisseurs de films en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 30° | 141 |
| 5.28 | Distribution des épaisseurs de films en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 35° | 141 |
| 5.29 | Distribution des épaisseurs de films en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 40° | 142 |
| 5.30 | Distribution des épaisseurs de films en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 45° | 142 |
| 5.31 | Courbes des moyennes des distributions des épaisseurs de film liquide en fonction du taux d'arrosage pour les valeurs d'angles de contact considérées | 143 |
| 6.1 | Géométrie du bassin froid | 146 |
| 6.2 | Champ de vitesse dans le bassin froid : superposition à la géométrie (haut) et représentation des vecteurs vitesse sur une coupe horizontale à 50 cm de profondeur (bas) | 149 |
| 6.3 | Champ de vitesse dans la zone de très faibles vitesses pour une profondeur de $0,5 \text{ m}$ ($t = 1900 \text{ s}$) - Coupe dans le plan xy (haut) et coupe verticale selon l'axe prédéfini (bas) | 150 |

| | | |
|------|---|-----|
| 6.4 | Courbe DTS obtenue par MFN : fonction $E(t)$ en fonction du temps écoulé depuis l'injection du traceur | 151 |
| 6.5 | Cartographie des valeurs de la contrainte de cisaillement en paroi dans le bassin froid (haut) et distribution statistique des valeurs de la contrainte de cisaillement dans le bassin froid (échelle logarithmique) (bas) | 153 |
| 6.6 | Contrainte de cisaillement en paroi en fonction de la rugosité pour un tube de condenseur et une conduite béton (température 20°C) | 156 |
| 6.7 | Profil de vitesse dans un demi tube de condenseur (gauche) et dans une demi conduite (droite) | 156 |
| 6.8 | Évolution de la contrainte de cisaillement en fonction de la position dans la conduite pour un écoulement initialisé avec une vitesse uniforme ou par un coude de 120° après un écoulement turbulent établi - profils du côté de l'intrados et de l'extrados du coude (rugosité de 500 μm , température de 20°C) | 158 |
| 6.9 | Tracé des valeurs de l'aire interfaciale a/a_0 simulées par rapport aux valeurs obtenues par la corrélation proposée et représentation de l'intervalle de confiance à 95 % | 163 |
| 6.10 | Exemple de visualisation des écoulements pour le garnissage hybride - Goutte dans la phase dispersée, film ruisselant sur le garnissage et détachement d'une goutte (temps entre les images : 2,5 ms) | 164 |
| 6.11 | Exemple de visualisation des écoulements pour le garnissage grille - Détachement d'un bloc de fluide du garnissage au centre de la maille (temps entre les images : 2,5 ms) | 166 |
| 7.1 | Influence de la température sur la vitesse de croissance spécifique - Comparaison du modèle d'Eyring proposé avec les données expérimentales de Mohr et Krawiec (1980) | 186 |
| 7.2 | Représentation de la masse finale de biofilm en fonction de la contrainte de cisaillement pour les différents cas de la littérature | 195 |
| 7.3 | Représentation du temps de demi-croissance du biofilm en fonction de la contrainte de cisaillement pour les différents cas de la littérature | 196 |
| 7.4 | Modèle et tendances du modèle proposés pour prédire la masse de biofilm en fonction du temps et comparaison avec les données expérimentales pour les cas N° 1 et 2 (Garcia et Trueba, 2018) | 199 |
| 7.5 | Modèle et tendances du modèle proposés pour prédire la masse de biofilm en fonction du temps et comparaison avec les données expérimentales pour les cas N° 3 et 4 (Garcia et Trueba, 2018) | 200 |
| 7.6 | Modèle et tendances du modèle proposés pour prédire la masse de biofilm en fonction du temps et comparaison avec les données expérimentales pour les cas N° 5 et 6 (Trueba <i>et al.</i> , 2015) | 200 |
| 7.7 | Modèle et tendances du modèle proposés pour prédire la masse de biofilm en fonction du temps et comparaison avec les données expérimentales pour les cas N° 7 et 8 (Trueba <i>et al.</i> , 2015) | 201 |
| 7.8 | Modèle et tendances du modèle proposés pour prédire la masse de biofilm en fonction du temps et comparaison avec les données expérimentales pour les cas N° 9 et 12 (Lopez-Galindo <i>et al.</i> , 2012; Nebot <i>et al.</i> , 2007) | 201 |
| 7.9 | Modèle proposé et comparaison avec les données expérimentales pour les cas N° 13 et 14 (Nebot <i>et al.</i> , 2007, 2006) | 202 |
| 7.10 | Influence de la température (gauche) et de la quantité de substrat (droite) sur la masse finale de biofilm | 203 |
| 7.11 | Influence de la valeur du nombre de Damköhler dans le biofilm (gauche) et du nombre de Damköhler externe (droite) sur la masse finale de biofilm | 204 |
| 7.12 | Représentation du temps de demi-croissance du biofilm en fonction de la contrainte de cisaillement pour les différents cas de la littérature | 204 |
| 7.13 | Exemple de la possibilité de l'équation à convenir à la modélisation de tous les cas de la littérature : modèle général et tendances (gauche) et modèle calé pour le cas N°7 (droite) (Trueba <i>et al.</i> , 2015) | 205 |

| | | |
|------|---|-----|
| 8.1 | Représentation du modèle compartimental pour une conduite cylindrique en charge - Pour les conduites en béton : $n = 250$ pour la conduite froide et $n = 495$ pour la conduite chaude ; pour un tube de condenseur : $n = 936$ | 211 |
| 8.2 | Température de l'air (en °C) pour deux sections avant et après le garnissage dans la tour aéroréfrigérante (Blain <i>et al.</i> , 2016) | 213 |
| 8.3 | Représentation du modèle compartimental pour un bloc de garnissage | 214 |
| 8.4 | Division du bassin en zones selon la valeur de la vitesse à $t=1900$ s, $z=0,5$ m | 215 |
| 8.5 | Schéma du modèle compartimental du bassin froid : chaque zone est divisée en compartiments (cascade de RPA en série avec recirculation) | 216 |
| 8.6 | Comparaison de la courbe de la fonction $E(t)$ obtenue par DTS numérique avec la courbe obtenue par le modèle compartimental proposé | 218 |
| 8.7 | Représentation du modèle compartimental pour le bassin froid : dessin du bassin froid réalisé par ordinateur (haut) et modèle compartimental correspondant (bas) | 219 |
| 8.8 | Répartition géométrique des différents éléments du modèle compartimental du circuit de refroidissement complet | 220 |
| 8.9 | Évolution de la masse de biofilm moyenne par unité de surface en fonction du temps pour les différentes parties du circuit de refroidissement (température et qualité d'eau constantes dans le temps) | 223 |
| 8.10 | Masse finale de biofilm par unité de surface en fonction de l'épaisseur du film liquide (gauche) et de la vitesse superficielle (droite) pour cinq profils de températures différents (température chaude fixée et cinq valeurs de température froide pour cinq différences de température) | 226 |
| 8.11 | Masse finale de biofilm par unité de surface en fonction de la contrainte de cisaillement pour cinq profils de températures | 227 |
| 8.12 | Masse finale de biofilm par unité de surface en fonction de la contrainte de cisaillement (gauche) et de la vitesse du fluide (droite) pour les quatre zones du bassin : zone de faible vitesse (haut), zone centrale ainsi que zone latérale et fond (milieu) et zone de la sortie du bassin (bas) | 230 |
| 8.13 | Masse finale de biofilm par unité de surface en fonction de l'initialisation de l'écoulement dans la conduite chaude (haut) et la conduite froide (bas) | 233 |
| 8.14 | Hypothèse de variation de la température de purge du circuit de refroidissement sur un an | 235 |
| 8.15 | Évolution de la masse de biofilm établi par unité de surface dans les différentes parties du circuit de refroidissement pendant un an en tenant compte des variations de température saisonnières | 236 |
| 8.16 | Évolution de la masse finale de biofilm par unité de surface dans les différentes parties du circuit de refroidissement pour différentes qualités d'eau | 238 |
| 8.17 | Cartographie des conditions hydrodynamiques et de la quantité de biofilm obtenue par le modèle compartimental pour les différentes parties du circuit (Température Froide = 23 °C, Température Chaude = 33 °C et $DBO = 1,0 \cdot 10^{-3}$ kg/m ³) | 244 |

Liste des tableaux

| | | |
|-----|---|-----|
| 1.1 | Description des étapes de développement des trois types d'encrassement | 17 |
| 1.2 | Caractéristiques hydrodynamiques du circuit de refroidissement : données connues et calculées grâce à la géométrie et grandeurs estimées grâce à des systèmes similaires de la littérature | 20 |
| 3.1 | Caractéristiques du bassin froid | 52 |
| 3.2 | Grandeurs caractéristiques de l'écoulement en conduite dans les circuits de refroidissement pour 4 températures de fonctionnement | 58 |
| 3.3 | Caractéristiques géométriques du garnissage feuille | 60 |
| 3.4 | Tableau de synthèse des simulations de MFN des films ruisselants dans la littérature | 70 |
| 4.1 | Synthèse et comparaison des différentes approches de mesures des épaisseurs de film ruisselant (adapté de Tibirica <i>et al.</i> , 2010) | 87 |
| 4.2 | Paramètres (en mm) des distributions des épaisseurs de film en fonction du taux d'arrosage (vitesse d'air fixée à 1,88 m/s) | 100 |
| 4.3 | Paramètres (en mm) des distributions des épaisseurs de film en fonction des vitesses de gaz (taux d'arrosage fixé à $10 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$) | 103 |
| 4.4 | Paramètres (en %) des distributions du taux de mouillage en fonction du taux d'arrosage (vitesse d'air fixée à 1,88 m/s) | 105 |
| 4.5 | Paramètres (en %) des distributions du taux de mouillage en fonction du taux d'arrosage | 107 |
| 5.1 | Caractéristiques des différents maillages testés | 116 |
| 5.2 | Résumé des types de conditions aux limites pour les simulations de MFN | 120 |
| 5.3 | Valeurs mesurées des angles de contact sur du garnissage feuille | 121 |
| 5.4 | Taux de mouillage (en %) en fonction du débit et du taux d'arrosage | 125 |
| 5.5 | Rétention liquide (en m^3/m^3) en fonction du taux d'arrosage et de l'angle de contact | 126 |
| 5.6 | a/a_0 (en m^2/m^2) en fonction du taux d'arrosage et de l'angle de contact | 126 |
| 5.7 | Paramètres de la décomposition du profil de vitesse du film ruisselant | 131 |
| 5.8 | Moyenne des contraintes de cisaillement en paroi (en Pa) pour différents taux d'arrosages et différents angles de contact | 134 |
| 6.1 | Résumé des types de conditions limites pour les simulations de MFN | 147 |
| 6.2 | Grandeurs caractéristiques de l'écoulement en conduite dans les circuits de refroidissement pour 4 températures de fonctionnement | 154 |
| 6.3 | Grandeurs caractéristiques de l'écoulement en conduite dans les circuits de refroidissement pour 4 températures de fonctionnement | 155 |
| 6.4 | Résumé des données hydrodynamiques disponibles | 160 |
| 6.5 | Résumé des données hydrodynamiques disponibles | 162 |
| 6.6 | Gammes de valeurs des données hydrodynamiques disponibles pour les différentes parties du circuit | 169 |
| 7.1 | Résumé des valeurs des nombres de Damköhler pertinents dans le biofilm et dans chaque partie du circuit : $Da_{\text{convectif}}$ pour le bassin froid, les conduites, les tubes de condenseur et Da_{diffusif} à l'intérieur du biofilm et dans les films ruisselant dans les garnissages | 182 |
| 7.2 | Paramètres de l'équation d'Eyring pour une population de <i>Pseudomonas Aeruginosas</i> calées à partir de données expérimentales | 186 |

| | | |
|------|---|-----|
| 7.3 | Définition et expression des critères d'efficacité et des facteurs d'influence intervenant dans le terme de production du biofilm J_P | 189 |
| 7.4 | Identification des régimes prédominants de transfert, simplification de l'équation du modèle de biofilm en décollant et illustration de l'évolution du profil de concentration du réactif limitant C_S (hypothèse $f_T(T) = f_S(S) = 1$) | 191 |
| 7.5 | Paramètres et données disponibles dans la littérature sur la croissance des biofilms dans les tubes de condenseur | 194 |
| 7.6 | Paramètres des courbes de tendance de dépendance de la masse finale de biofilm (X_{max}) et du temps de demi-croissance ($t_{1/2}$) en fonction de la contrainte de cisaillement (τ) | 196 |
| 7.7 | Paramètres et données disponibles dans la littérature sur la croissance des biofilms dans les tubes de condenseur | 197 |
| 7.8 | Paramètres du modèle de croissance du biofilm pour les différents cas de calage et enveloppe des tendances des modèles | 199 |
| 8.1 | Débits d'entrée sous forme de pluie dans les différentes parties du bassin froid | 217 |
| 8.2 | Paramètres des réseaux de réacteurs pour chaque zone du bassin froid | 218 |
| 8.3 | Paramètres hydrodynamiques dans les garnissages et conditions environnementales choisies pour effectuer les simulations des parties du circuit de refroidissement | 222 |
| 8.4 | Caractéristiques des classes de valeurs pour les paramètres hydrodynamiques dans les garnissages : taux de mouillage, épaisseur de film liquide, vitesse superficielle et contrainte de cisaillement | 225 |
| 8.5 | Caractéristiques des classes de valeurs pour les paramètres hydrodynamiques dans le bassin froid : vitesse du fluide et contrainte de cisaillement | 228 |
| 8.6 | Conditions environnementales choisies pour effectuer les simulations des conduites chaude et froide en béton | 231 |
| 8.7 | Conditions environnementales choisies pour effectuer les simulations des parties du circuit de refroidissement sur un an avec variation saisonnière de température | 234 |
| 8.8 | Conditions environnementales choisies pour effectuer les simulations des parties du circuit de refroidissement avec différentes qualités d'eau | 237 |
| 8.9 | Liste des conditions expérimentales utilisées pour la caractérisation des films ruisselants par méthode par contraste | 263 |
| 8.10 | Liste des conditions expérimentales utilisées pour la caractérisation des taux de mouillage par visualisation par fluorescence | 264 |
| 8.11 | Liste des conditions expérimentales utilisées pour les simulations de MFN des écoulements sur les garnissages | 265 |

Nomenclature

Lettres romaines

| | |
|--------------|--|
| a | Aire interfaciale (m^2) |
| a_0 | Surface géométrique du garnissage (m^2) |
| C | Constante de l'équation de Shkadov (kg/m^3) |
| d | Diamètre (m) |
| D | Coefficient de diffusion (m^2/s) |
| D_τ | Paramètre du modèle du biofilm qui dépend de la contrainte de cisaillement |
| E | Fonction distribution des temps de séjour |
| Ea | Énergie d'activation de la réaction biologique (J/mol) |
| f | Facteur de friction (/) |
| g | Accélération gravitationnelle (m/s^2) |
| h_L | Taux de rétention liquide (m^3/m^3) |
| J_P | Terme de production du biofilm ($kg.m^{-2}.s^{-1}$) |
| J_{Pmax} | Production maximale du biofilm ($kg.m^{-2}.s^{-1}$) |
| J_R | Terme de perte du biofilm ($kg.m^{-2}.s^{-1}$) |
| k | Taux de conversion des réactifs ($kg.m^{-3}.s^{-1}$) |
| k_{app} | Constante apparente de croissance du biofilm (s^{-1}) |
| K | Coefficient de transfert de masse (m/s) |
| L, L_c | Longueur caractéristique (m) |
| n | Nombre de réacteurs (/) |
| p | Pression (Pa) |
| r | Composante radiale en coordonnées cylindriques (m) |
| R | Rayon (m) |
| R_f | Résistance au transfert thermique ($m^2.K^{-1}.W^{-1}$) |
| S, S_{ref} | Quantité de substrat (kg/m^3) |
| t | Temps (s) |
| T, T_{ref} | Température (K) |
| u | Vitesse (m/s) |
| x, y, z | Composantes spatiales (m) |
| X | Masse surfacique de biofilm (kg/m^2) |

Lettres grecques

| | |
|---------------|--|
| β | Angle d'inclinaison de la surface (°) |
| γ | Taux de cisaillement (s^{-1}) |
| Γ | Débit massique linéique ($kg \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$) |
| δ | Épaisseur (m) |
| ε | Rugosité (m) |
| η | Facteur d'efficacité (/) |
| θ | Angle de contact (°) |
| λ | Conductivité thermique ($W \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$) |
| μ | Viscosité dynamique (Pa.s) |
| μ_{app} | Taux de croissance apparent du biofilm (s^{-1}) |
| μ_{max} | Taux de croissance maximal du biofilm (s^{-1}) |
| ν | Viscosité cinématique ($m^2 \cdot s^{-1}$) |
| ρ | Masse volumique (kg/m^3) |
| σ | Tension de surface (N/m) |
| τ | Contrainte de cisaillement (Pa) |

Indices

| | |
|-----|---------------------------------|
| D | Darcy |
| e | établissement |
| ext | externe |
| f | encrassement (<i>fouling</i>) |
| F | Fanning |
| G | Gaz |
| int | interne |
| L | Liquide |
| lim | limite |
| max | maximale |
| moy | moyen |
| p | particulaire |
| S | Solide |
| ref | référence |
| w | à la paroi (<i>wall</i>) |

Nombres adimensionnels

| | |
|--------|-----------------------------|
| Da | Nombre de Damkohler |
| Fr | Nombre de Froude |
| Ka | Nombre de Kapitza |
| Me | Nombre de Merkel |
| Pe | Nombre de Peclet |
| Re | Nombre de Reynolds |
| Sc | Nombre de Schmidt |
| Sh | Nombre de Sherwood |
| St | Nombre de Stokes |
| Φ | Critère ou module de Thiele |
| We | Nombre de Weber |

Sigles

| | |
|-----------|---|
| DBO | Demande biologique en oxygène |
| DNS | Simulation Numérique Directe (<i>Direct Numerical Simulation</i>) |
| DTS | Distribution des temps de séjour |
| MES | Matières en suspension |
| MFN (CFD) | Mécanique des fluides numériques (<i>Computational Fluid Dynamics</i>) |
| PIV | Vélocimétrie laser (<i>Particle Image Velocimetry</i>) |
| PTV | Vélocimétrie par suivi de particules (<i>Particle Tracking Velocimetry</i>) |
| PVC | Polychlorure de vinyle |
| RANS | <i>Reynolds Averaged Navier-Stokes</i> |
| RPA | Réacteur Parfaitement Agité |
| VOF | <i>Volume of Fluid</i> |

PREMIÈRE PARTIE

**Objet de la thèse et approche
méthodologique**

Introduction générale : éléments bibliographiques sur l'encrassement des circuits de refroidissement et propos de la thèse

Afin de définir le sujet, ce Chapitre présente le fonctionnement des circuits de refroidissement industriels ainsi que les processus intervenants dans l'encrassement de tels circuits. Cette étude de place dans une démarche de compréhension, de caractérisation et de prévention de l'encrassement des circuits de refroidissement industriel. Ce travail de thèse a pour objectif d'étudier l'influence de l'hydrodynamique sur l'encrassement et de proposer un modèle.

1.1 Les circuits de refroidissement industriels

1.1.1 Description générale des circuits de refroidissement industriels

De nombreux procédés industriels nécessitent l'utilisation de circuits de refroidissement afin de réaliser des échanges thermiques en évacuant de la chaleur : raffineries, usines chimiques, usines métallurgiques, centrales thermiques de production d'électricité. Les centrales électriques thermiques produisent de l'électricité à partir d'une source de chaleur. Celle-ci provient généralement de la réaction de combustion de combustible fossile (e.g. charbon, gaz, fuel) ou de fission de noyaux d'isotopes radioactifs. Dans le monde, le total des ressources en énergie primaire (TPES) permet de connaître la part de chaque procédé de la production d'énergie dans le bouquet énergétique global. Le rapport de l'Agence Internationale de l'Énergie montre que pour l'année 2018, 32 % de l'énergie mondiale totale provient du pétrole, 27,1 % du charbon, 22,2 % du gaz naturel, 9,5 % des biocarburants, 4,9 % du nucléaire et 4,3 % des énergies renouvelables (IEA, 2018). Cela signifie que le besoin de circuits de refroidissement est au cœur de la production d'énergie d'aujourd'hui et de demain. Dans le monde la même année, 38 % de la production d'électricité provenait du charbon, 26 % des énergies renouvelables,

23 % du gaz naturel, 10,1 % du nucléaire et 2,9 % du pétrole (IEA, 2018). En France en 2019, 79 % de la production d'électricité provenait de centrales électriques thermiques (71 % de centrales nucléaires et 8 % de centrales thermiques à flamme) (RTE, 2019).

Il existe trois principaux types de circuits de refroidissement : les circuits fermés, les circuits semi-fermés et les circuits ouverts. Les circuits fermés, une fois chargés, utilisent un fluide caloporteur lui-même refroidi par un autre circuit où circule une autre source froide. Les circuits ouverts utilisent de l'eau directement prélevée dans des sources froides externes (e.g. eau de mer, eau de rivière) qui, après un passage unique dans le condenseur, est rejetée directement dans son milieu d'origine ; ces circuits sont utilisés lorsque la quantité d'eau disponible est très importante (mer ou fleuve à grand débit). Dans le cas des circuits semi-fermés, l'eau de refroidissement, une fois passée dans le condenseur et chauffée, est elle même refroidie dans une tour aéroréfrigérante afin d'être renvoyée dans le circuit pour circuler à nouveau dans le condenseur. Les schémas de fonctionnement des circuits de refroidissement ouverts et semi-fermés sont présentés sur la Figure 1.1.

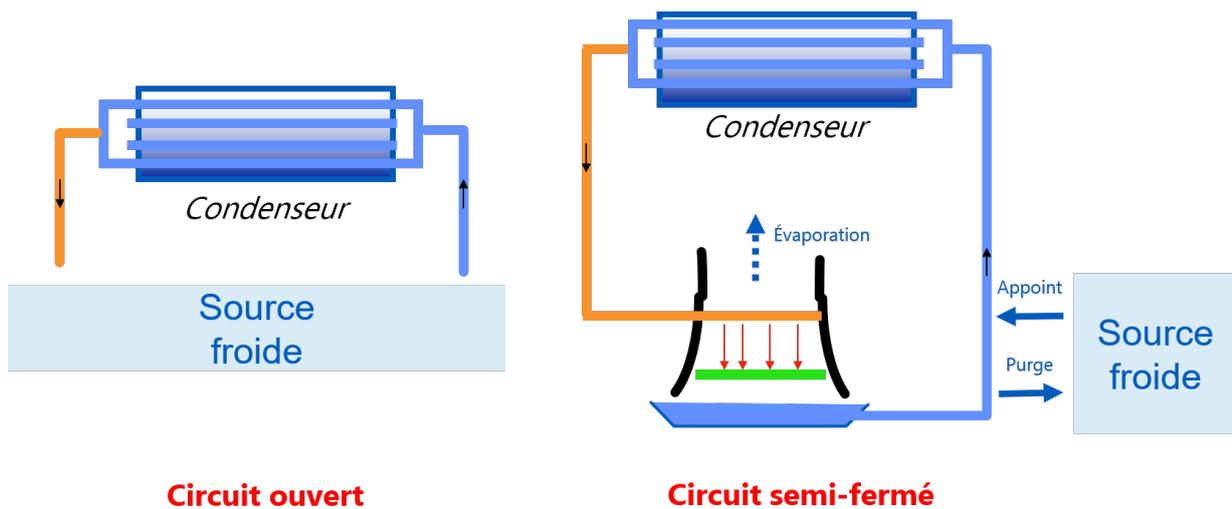


FIGURE 1.1 – Schéma de fonctionnement des circuits de refroidissement : circuit ouvert (à gauche) et circuit semi-fermé (à droite) (source : EDF)

À titre d'exemple, pour une production électrique de 1000 MWe, la puissance thermique à évacuer par la source froide peut aller de 1200 MW à 2100 MW suivant le type de centrale. L'échauffement de l'eau en passant dans les tubes est alors de 10 à 15 °C. Cela représente, par exemple, un débit de circulation dans les condenseurs de 30 à 50 m³/s (Hartmann *et al.*, 2014) pour un échauffement de 10°C, ce qui explique l'utilisation de circuits semi-fermés lorsque la ressource d'eau est limitée. En fonction de la température de la source froide variant en fonction de la météo, du cycle jour/nuit ainsi qu'en fonction des saisons, la température de l'eau de refroidissement est comprise entre 20 et 35 °C en entrée du condenseur et entre 35 et 45 °C en sortie (Hartmann *et al.*, 2014).

Dans la suite de ce document, nous allons nous intéresser exclusivement aux circuits de refroidissement semi-fermés comportant une tour aéroréfrigérante. Ce type de circuit peut être divisé en trois parties principales : le condenseur, la tour aéroréfrigérante ainsi que les conduites et pompes assurant la circulation du fluide entre les deux. Un schéma de circuit de refroidissement semi-fermé est montré à la Figure 1.2.

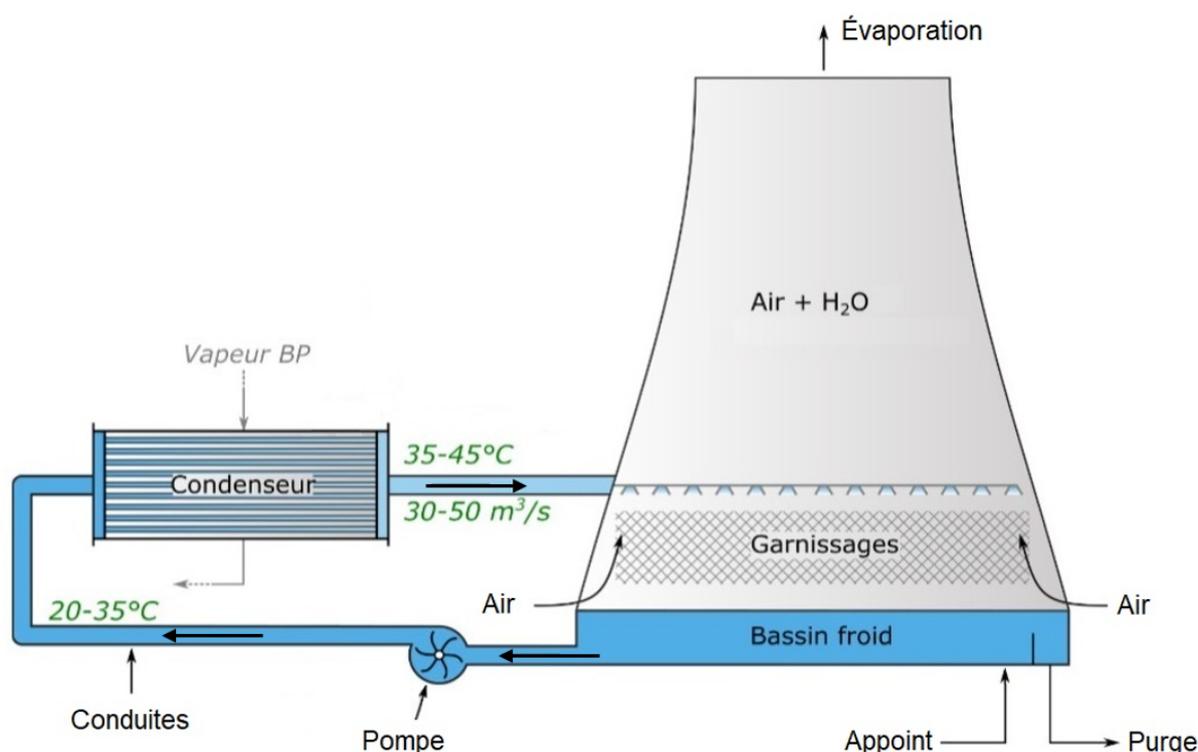


FIGURE 1.2 – Schéma d'un circuit de refroidissement semi-fermé (Neveux *et al.*, 2016)

Étant donné les débits d'eau nécessaires au refroidissement d'une centrale électrique, les conduites de circulation sont des canalisations cylindriques en béton de plusieurs mètres de diamètre. Le condenseur est un échangeur tubulaire où l'eau circule à l'intérieur des tubes (côté circuit de refroidissement) et la vapeur se condense côté calandre. Afin de maximiser la surface d'échange pour assurer un refroidissement efficace, les condenseurs peuvent, selon la taille de la centrale, compter de 30000 à plus de 100000 tubes d'un diamètre intérieur de l'ordre du centimètre. Concernant les tours aéroréfrigérantes, il existe plusieurs technologies selon le mode de contact entre les deux phases et le sens des écoulements. Le refroidissement peut être humide ou sec si l'eau est directement en contact ou non avec l'air. Dans le premier cas, le transfert thermique s'effectue par convection et évaporation alors que dans le second cas le transfert s'effectue par conduction et convection. Les deux phases peuvent circuler à contre-courant, à co-courant ou à courant croisé ; l'entraînement de l'air peut se faire de manière naturelle (tirage induit par le transfert thermique et l'évaporation de l'eau) ou forcée (utilisation de ventilateurs). Dans le cas

d'une tour aéroréfrigérante humide, une partie du débit d'eau est évaporée et rejetée dans l'atmosphère. Pour les centrales électriques, le débit évaporé correspond environ à $0,75 \text{ m}^3/\text{s}$ pour une puissance électrique de 1000 MWe (soit 2,5 % du débit pour un débit total de $30 \text{ m}^3/\text{s}$).

Une partie du circuit est purgée et rejetée dans le milieu pour éviter une surconcentration des espèces présentes dans l'eau naturelle. Pour compenser la quantité d'eau purgée et l'eau évaporée dans le cas d'un aéroréfrigérant humide, un prélèvement est effectué en continu dans le milieu naturel. Pour le cas d'une puissance électrique de 1000 MWe, la quantité d'eau purgée représente environ $1,25 \text{ m}^3/\text{s}$ (soit 4,2 % du débit) et la quantité d'eau d'appoint $2 \text{ m}^3/\text{s}$ (soit 6,7 % du débit) (Hartmann *et al.*, 2014).

1.1.2 Les tours aéroréfrigérantes

Principe de fonctionnement

Pour les centrales électriques en France, la majorité des tours aéroréfrigérantes sont des aéroréfrigérants humides, le contact est donc direct entre l'air et l'eau. Afin d'optimiser le transfert thermique, il est nécessaire de maximiser la surface d'échange entre les deux phases. L'eau est donc pulvérisée dans la tour sur un corps d'échange de type garnissage (contre-courant) ou de lattes (courant-croisé). Un schéma de fonctionnement d'une tour aéroréfrigérante humide à contre-courant est présenté à la Figure 1.3. Le refroidissement de l'eau dans une telle tour peut être divisé en quatre étapes : aspersion par les buses ou pluie chaude, ruissellement sur le garnissage, décrochement des gouttes en bas du garnissage et chute des gouttes d'eau aussi appelée pluie froide et enfin récupération de l'eau dans le bassin au pied de la tour appelé bassin froid. L'air circule à contre courant et un système de pare-goutte, ou dévésiculeur, est placé au dessus des buses afin de limiter l'entraînement de gouttelettes d'eau. Sur certaines tours, l'eau est récupérée directement en dessous du garnissage par un système de gouttières mais, d'un point de vue thermique, cette technologie ampute l'efficacité de la tour du transfert induit par la chute des gouttes de la pluie froide.

Dans les tours aéroréfrigérantes à contre-courant, le garnissage utilisé est un garnissage en plastique afin de réduire la masse totale et les coûts, en comparaison de garnissages métalliques généralement utilisés dans les colonnes industrielles (e.g. opérations unitaires de distillation, d'extraction ou d'absorption). Il existe plusieurs géométries de garnissages utilisées dans les aéroréfrigérants ; ces géométries peuvent être regroupées en trois grandes catégories : les garnissages feuille, les garnissages hybride et les garnissages grille (Figure 1.4). Le garnissage feuille est composé de feuilles de plastique thermoformées et collées entre elles créant des canaux verticaux pour le passage de l'air. Les feuilles peuvent être perforées mais la surface pleine reste très supérieure à la surface totale des perforations (Figure 1.4 gauche). Le garnissage hybride est, comme le garnissage feuille, composées de feuilles de

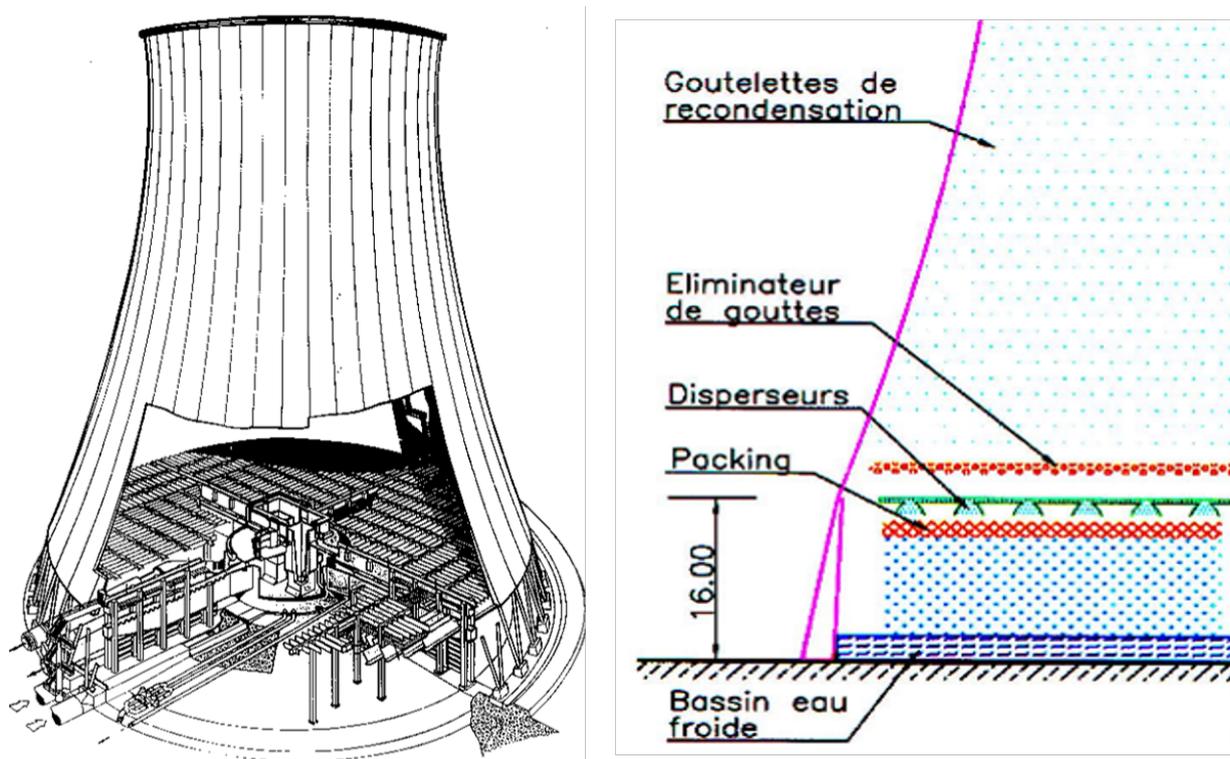


FIGURE 1.3 – Structure interne et externe (gauche) et dessin de coupe verticale en fonctionnement (droite) d'une tour aéroréfrigérante humide à contre-courant (source : EDF)

plastique thermoformages collées mais la surface des perforations est nettement supérieure à la surface de garnissage solide (Figure 1.4 centre). Enfin, le garnissage grille est composé de réseau de filaments en plastique collés entre eux créant un ensemble de mailles enchevêtrées (Figure 1.4 droite). Les trois types de garnissages sont conçus pour minimiser la perte de charge côté gaz afin de permettre le tirage naturel de l'air.

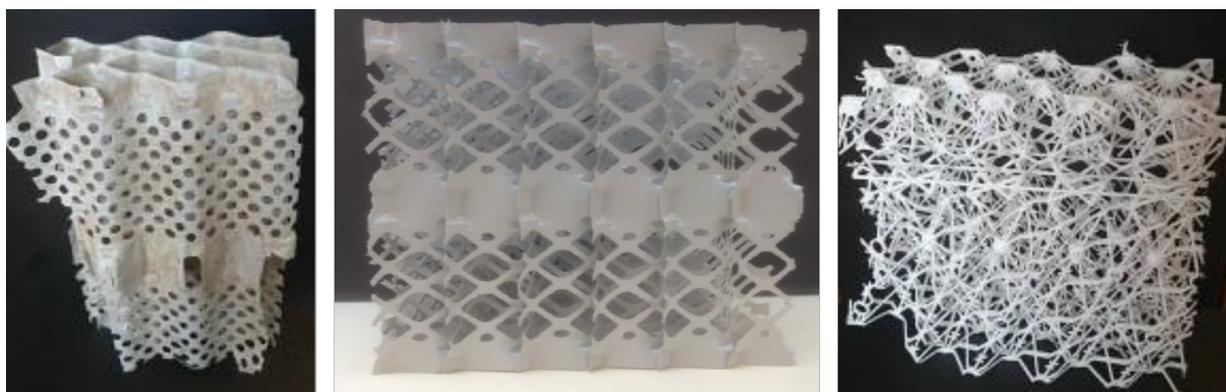


FIGURE 1.4 – Photos de garnissage de type feuille (gauche), hybride (centre) et grille (droite)

Dans la littérature

De nombreuses études portant sur les différents aspects des tours aéroréfrigérantes humides à contre courant ont été menées au cours des dernières décennies. Différentes informations sont disponibles dans la littérature. Le lecteur pourra consulter Kloppers et Kroger (2003) et Erens (2010) pour obtenir une vue complète des phénomènes intervenant dans le fonctionnement des garnissages industriels. Les travaux les plus récents et, de notre point de vue, les plus pertinents pour l'étude des garnissages des tours aéroréfrigérantes sont présentés ci-après.

McKelvey et Brooke (1959) présentaient dans leur ouvrage les principes fondamentaux du refroidissement industriel par tour aéroréfrigérante. Pour le design, le département de l'énergie des États-Unis a publié un rapport technique exposant les « règles du pouce » pour la conception des aéroréfrigérants humides (Leeper, 1981). De même, Opris *et al.* (2017) proposent des méthodologies pour dimensionner des tours aéroréfrigérantes humides à tirage naturel en divisant la tour en zones d'intérêt : la zone de spray et le garnissage, la pluie froide et la partie responsable du tirage naturel de l'air.

L'objectif des tours aéroréfrigérantes étant d'assurer un refroidissement efficace, la plupart des études se concentrent sur la caractérisation des performances de l'opération de refroidissement. Le transfert thermique entre la phase liquide et la phase gaz étant le phénomène principal d'intérêt, la compréhension, la modélisation et l'optimisation de ce phénomène sont donc primordiales. L'efficacité du transfert thermique dans les tours de refroidissement peut être quantifiée par le nombre de Merkel. Ce nombre exprime le rapport du gain d'enthalpie de l'air humide circulant dans les garnissages sur la variation de chaleur sensible de l'eau provoquée par la tour (Merkel, 1926). Khan *et al.* (2003) proposent un modèle basé sur des mesures expérimentales de la littérature antérieure pour quantifier la performance du transfert thermique dans les tours. Ils ont étudié la prédominance du transfert par évaporation par rapport au transfert thermique par convection ainsi que le lien indissociable entre transfert thermique et transfert de matière. Afin de se rapprocher le plus de la réalité industrielle, Khan et Zubair (2004) puis Qureshi et Zubair (2006) ont amélioré le modèle précédent en considérant l'encrassement dans les garnissages et son influence sur les performances. Reprenant le constat précédent, le modèle se focalise sur le transfert thermique par transfert de matière. Yilmaz (2010) a développé une méthode analytique pour quantifier les performances des tours aéroréfrigérantes. Contrairement aux modèles numériques évoqués précédemment, la méthode analytique proposée est présentée comme plus simple tout en ayant des résultats précis comparés à des cas expérimentaux de référence. Une fois les modèles développés, Singh et Das (2016) se sont attachés à proposer une méthode d'optimisation multi-critères afin de gagner en efficacité de transfert thermique. Pour cela, les auteurs

se sont intéressés à plusieurs critères : nature du garnissage, différence de température entrée-sortie, nombre de Merkel, efficacité du transfert thermique et taux d'évaporation. Une procédure est expliquée et un algorithme de décision permet d'identifier le couple de débits eau/air optimal pour satisfaire ces différents paramètres. Le code de calcul TEFERI développé par EDF permet d'effectuer ces calculs d'efficacité de transfert thermique dans les garnissages des tours aéroréfrigérantes (Bourillot, 1983).

Dans les tours aéroréfrigérantes, la perte de charge est un autre critère primordial influençant les phénomènes de transfert et donc l'efficacité du refroidissement. Goshayshi et Missenden (2000) ont étudié l'influence de la géométrie du garnissage sur la perte de charge et le transfert de matière. Ces travaux justifient la présence de corrugations sur les garnissages des tours aéroréfrigérantes et donnent des indications quant à la répartition optimale de ces corrugations pour maximiser le transfert de matière. Afin de mieux quantifier les pertes de charge, Kloppers et Kroger (2003) proposent une corrélation empirique en fonction des débits massiques d'eau et d'air. Les différents paramètres de la corrélation sont obtenus expérimentalement. En 2011, Lemouari *et al.* (2011) ont déterminé les régimes d'écoulement possibles dans les tours aéroréfrigérantes en se basant sur la perte de charge : le « Pellicular Regime », caractérisé par une faible perte de charge et le « Bubble and Dispersion Regime ». Pour chaque régime, des corrélations sont proposées pour évaluer le transport liquide en fonction de la perte de charge et de la hauteur du garnissage.

Afin d'étudier au mieux les phénomènes de transfert et la perte de charge, la mécanique des fluides dans les tours aéroréfrigérantes est un paramètre du premier ordre. Comme évoqué précédemment, Lemouari *et al.* (2011) ont défini deux régimes d'écoulements dans les tours en se basant sur la perte de charge induite par ces régimes hydrodynamiques. La répartition et la distribution des phases dans les aéroréfrigérants ont été analysées dans la littérature. Reuter *et al.* (2010) ont étudié la distribution des gouttes dans les zones des buses qui arrosent les garnissages. À l'aide d'un dispositif expérimental, les auteurs ont étudié l'influence du débit d'air, du débit d'eau, des paramètres géométriques des buses sur l'homogénéité de la distribution liquide. Les résultats expérimentaux ont été utilisés pour développer un modèle de distribution pour une et plusieurs buses. En parallèle, des simulations ont aussi été réalisées afin de proposer des corrélations pour le nombre de Merkel et la perte de charge liquide en fonction des débits. La distribution des tailles de gouttes a aussi été observée en dessous de plusieurs configurations de garnissages d'aéroréfrigérants pour différentes conditions par Terblanche *et al.* (2009). La pluie décrochée des garnissages, appelée pluie froide, étant responsable de 10 à 20% du transfert thermique, les tailles de gouttes sont des paramètres primordiaux pour optimiser le transfert thermique. L'article se propose de comparer plusieurs garnissages industriels et conclut en proposant le garnissage générant les gouttes avec le plus petit diamètre équivalent (appelé diamètre de Sauter). Concernant l'aérodynamique dans les tours, de nombreux travaux ont été réalisés. Des simulations numériques

ont été réalisées afin de prédire les champs de vitesse d'air dans les tours et l'influence des conditions météorologiques dans le tirage naturel pour le design et l'optimisation du transfert thermique (Blain *et al.*, 2016; Li *et al.*, 2019). Le tirage naturel provoque une inhomogénéité de la vitesse de l'air en fonction du rayon de la tour. Les conditions météorologiques, et notamment la vitesse du vent, peuvent accentuer cette inhomogénéité.

Pour obtenir ces résultats, certaines publications s'appuient sur des dispositifs expérimentaux de tours aéroréfrigérantes à échelle réduite : pour mesurer le transfert thermique (Smrekar *et al.*, 2006; Shahali *et al.*, 2016; Rahmati *et al.*, 2018), pour étudier le couplage entre transfert thermique et transfert de matière (Meneceur *et al.*, 2018; Kong *et al.*, 2018), les phénomènes de transfert couplés aux pertes de charge (Goshayshi et Missenden, 2000; Lemouari *et al.*, 2009, 2011) ou encore pour évaluer la corrosion et l'encrassement dans des garnissages métalliques (Chien *et al.*, 2012).

De nombreux phénomènes ont été étudiés dans la littérature (e.g. transfert thermique, évaporation, pertes de charge). Cependant, l'hydrodynamique dans les garnissages structurés de tours aéroréfrigérantes reste encore très méconnue, bien que les garnissages soient utilisés dans de nombreux domaines industriels dans diverses opérations unitaires du génie des procédés (e.g. extraction, absorption...). Même si ces garnissages diffèrent des garnissages de tours aéroréfrigérantes, de nombreux travaux menés afin de caractériser l'hydrodynamique peuvent en partie être intéressants pour la compréhension des écoulements dans ces garnissages. Une étude bibliographique spécifique sur l'hydrodynamique dans les garnissages sera présentée ultérieurement dans le Chapitre 3.

1.2 Encrassement des circuits de refroidissement

En raison des débits importants nécessaires pour le refroidissement des centrales, les circuits de refroidissement utilisent de l'eau brute provenant de l'environnement : eau de mer ou eau de rivière. Le prélèvement d'eau d'appoint des circuits semi-fermés est filtré mais l'eau n'est pas traitée en raison du débit trop important ($2 \text{ m}^3/\text{s}$). L'eau prélevée est donc chargée de matières en suspensions (e.g. sable, boue, matières organiques) ainsi que d'espèces chimiques et biologiques. L'eau brute et les gammes de températures de fonctionnement du circuit favorisent donc le développement de l'encrassement : encrassement physique (e.g. dépôt de matières en suspension sur les surfaces ou décantation), chimique (e.g. précipitation de carbonate de calcium ou tartre) ou biologique (e.g. développement de biofilm). Ces dépôts de différentes natures peuvent se superposer ou même se mélanger pour créer une matrice mixte sur les surfaces, par exemple dans les tubes de condenseur (Muller-Steinhagen, 2010). La Figure 1.5 présente deux exemples d'encrassement de circuits de refroidissement industriel : la précipitation de tartre du garnissage (Figure 1.5 gauche) et un dépôt mixte de biofilm et de matières en suspension de

type boues dans un tube de condenseur (Figure 1.5 droite).



FIGURE 1.5 – Exemples de surfaces encrassées : garnissage entartré (gauche) et dépôt de biofilm avec des matières en suspension dans un tube de condenseur (droite)

Quel que soit le type d'encrassement considéré, Muller-Steinhagen (2010) distingue quatre étapes conduisant au développement du dépôt :

- la période d'induction ou temps de retard : période suivant la mise en service du circuit, les surfaces sont propres mais aucun dépôt n'apparaît.
- le transfert de matière : l'apport de matière à la surface est nécessaire à l'apparition du dépôt, ce transport se fait dans la plupart des cas par diffusion ou par convection.
- la formation du dépôt : une fois la matière nécessaire au développement du dépôt présente à la paroi, le mécanisme de formation de l'encrassement à proprement parlé a lieu (e.g. réaction chimique ou biologique, adhésion de particules en paroi). La réaction se poursuit et provoque la croissance du dépôt tant que la matière nécessaire continue d'arriver en paroi et que les conditions opératoires sont favorables.
- l'arrachement ou l'autorégulation : en parallèle de la croissance du dépôt et en fonction de sa nature (e.g. biofilm, tartre, particules, matrice mixte) et des conditions du milieu (e.g. contraintes hydrodynamiques, température) une érosion ou une désintégration du dépôt peut se produire. C'est la compétition entre la croissance et la perte du dépôt qui détermine la vitesse de croissance ou de décroissance de ce dépôt.

1.2.1 Encrassement physique

Dans les circuits de refroidissement, l'encrassement physique peut être du à deux mécanismes majeurs : la décantation des matières en suspension ou l'agrégation sur les parois après impactions ou par diffusion. L'impaction et l'adhésion des particules sur les parois peuvent être dues à trois mécanismes différents : la diffusion des particules jusqu'à la paroi, l'interception des particules à proximité de la paroi et l'impaction des particules due à leur inertie.

Afin d'étudier le mouvement des particules dans le fluide et leur inertie, deux nombres adimensionnels sont définis : le nombre de Reynolds particulaire et le nombre de Stokes.

$$Re_p = \frac{u_p \rho_f d_p}{\mu} \quad (1.1)$$

avec u_p la vitesse relative de la particule dans le fluide en m/s, ρ_f la masse volumique du fluide en kg/m³, d_p le diamètre des particules en m et μ la viscosité dynamique en Pa.s.

Le nombre de Stokes (St) est défini comme le rapport du temps de relaxation de la particule et du temps caractéristique du fluide avec l'hypothèse de particules sphériques. Il représente donc le rapport entre l'énergie cinétique de la particule et l'énergie dissipée par frottement visqueux dans le fluide. Son expression est donnée à l'équation 1.2.

$$St = \frac{\rho_p d_p^2 u_p}{18 \mu L_c} \quad (1.2)$$

avec ρ_p la masse volumique de la particule en kg/m³, d_p le diamètre des particules en m, u_p la vitesse relative de la particule dans le fluide en m/s, μ la viscosité dynamique du fluide en Pa.s, L_c une longueur caractéristique de l'écoulement du fluide en m.

Le calcul du nombre de Stokes permet donc de savoir si la particule va suivre le fluide : si $St < 1$, le temps de réponse de la particule est inférieur au temps caractéristique du fluide donc la particule suivra le fluide ; au contraire si $St > 1$, la particule est emportée par son inertie et ne suit pas les mouvements du fluide. Quel que soit le phénomène physique, le dépôt va se produire dans des conditions hydrodynamiques où le nombre de Stokes sera supérieur à 1.

Pour la décantation, dans les cas les plus simples, il est possible de déterminer analytiquement une vitesse terminale de sédimentation lorsque le fluide est au repos (Blazy *et al.*, 1999) ou lorsque l'écoulement particulaire est en régime de Stokes (Hallermeier, 1981; Dietrich, 1982). Dans les cas plus généraux, la publication de Zhiyao *et al.* (2008) fait la synthèse des différents travaux précédents qui ont été effectués sur la vitesse terminale de chute des particules sphériques. Pour les écoulements particuliers hors régime de Stokes, Wang et Maxey (1993) ont observé le mouvement des particules dans

des écoulements turbulents. Toutes ces études théoriques portent sur des particules idéales sphériques mais d'autres études empiriques se sont intéressées à la sédimentation des particules dans les cours d'eau (Hjulstrom (1935); Shields *et al.* (1936); Buffington (1999)). Hjulstrom (1935) propose notamment un diagramme empirique pour déterminer la nature du mouvement d'une particule dans une rivière en fonction de son diamètre et de la vitesse du courant (Figure 1.6).

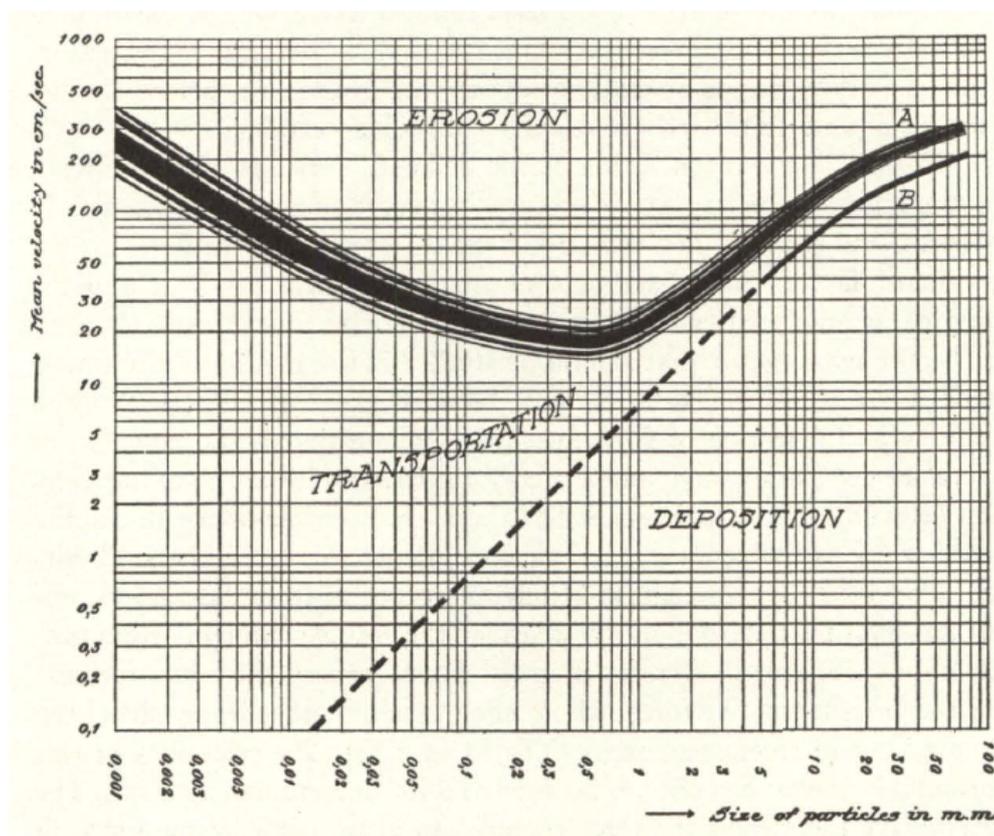


FIGURE 1.6 – Diagramme de Hjulstrom - Régimes de sédimentation en fonction de la taille des particules et de la vitesse du fluide (Hjulstrom, 1935)

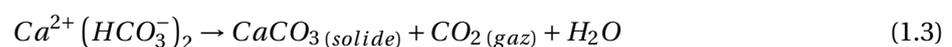
Le diagramme est divisé en trois zones : la zone d'érosion dans laquelle la forte vitesse du courant permet d'arracher la particule au lit de la rivière, le régime de transport pour lequel la particule suit le mouvement du fluide et la partie sédimentation qui correspond au dépôt de la particule sur le fond du lit du cours d'eau. En addition, les travaux de Shields *et al.* (1936) montrent qu'il existe une zone de mouvement de transition entre le régime de transport de la particule et le régime de dépôt. En effet, la nature du fond du cours d'eau et la contrainte exercée par celui-ci sur la particule dans une vitesse de fluide intermédiaire provoquent un mouvement de saut de la particule sur le fond du lit. La particule est donc transportée mais à une vitesse beaucoup plus faible que celle du régime de transport.

Pour le phénomène d'agrégation des matières en suspension sur les parois, le problème peut se décomposer en deux parties : une partie pour étudier l'influence de l'écoulement sur les particules donc

les cas de contact avec la paroi et une partie pour étudier l'interaction entre les particules et la paroi. Le transport des particules est un phénomène connu de la littérature et des modèles de couche limite sont généralement considérés pour prédire l'approche des particules de la paroi (Fan et Ahmadi, 1995). Pour la partie du contact et de l'adhésion des particules en paroi, des travaux ont été effectués pour analyser les différents mécanismes de dépôts (Dupuy *et al.*, 2016) et développer des modèles stochastiques pour le dépôt de particules en paroi (Guingo et Minier, 2008; Caruyer *et al.*, 2015). Le cas particulier de ce type d'encrassement dans des géométries très proches de celle des tubes de condenseur des circuits de refroidissement a été traité par Kim et Webb (1991).

1.2.2 Encrassement chimique

L'eau brute naturelle est chargée en sels et en minéraux. La présence de calcium en particulier dans l'eau prélevée des cours d'eau contribue à la formation de dépôts de carbonate de calcium (CaCO_3 appelé généralement calcaire ou tartre) sur les surfaces des différents éléments du circuit de refroidissement. La qualité d'eau et sa concentration en calcium et en carbonates (dureté de l'eau) est le facteur principal influant sur la quantité de tartre : plus la concentration est élevée, plus l'eau est entartrante pour une valeur de pH donnée. La précipitation de carbonate de calcium est aussi fortement favorisée par les élévations de température dans le circuit : la cinétique de précipitation du tartre est favorisée par l'augmentation de température. L'augmentation de la température provoque aussi l'élimination de CO_2 sous forme de gaz et donc déplace l'équilibre du pH qui augmente. L'augmentation de pH conduit à une accélération de la cinétique de précipitation du tartre. De plus, l'évaporation de l'eau dans les tours aéroréfrigérantes a pour effet de concentrer localement les espèces chimiques dans l'eau et favorise encore plus la réaction de précipitation. Les zones propices à la formation des dépôts de tartre sont donc les tubes de condenseur, les conduites en béton de circulation de l'eau en aval du condenseur et les garnissages des tours aéroréfrigérantes (Nordmann, 2008; Hartmann *et al.*, 2014). Le bilan des réactions chimiques de précipitation du tartre est présenté à l'Équation 1.3 :



Des modèles cinétiques spécifiques ont été développés dans la littérature pour caractériser les différentes phases de la réaction de précipitation du carbonate de calcium (Chien *et al.*, 2007; Segev *et al.*, 2012). La problématique de la précipitation du tartre dans le contexte industriel, particulièrement pour les échangeurs de chaleur utilisant de l'eau, est elle aussi très bien documentée dans la littérature (Zubair *et al.*, 1997; Li *et al.*, 2016; Neveux *et al.*, 2016).

Une revue bibliographique proposée par Shen *et al.* (2015) détaille les travaux réalisés sur

l'encrassement de tubes de condenseurs et particulièrement l'encrassement de géométries de tubes conçues pour limiter cet encrassement afin d'évaluer l'efficacité de telles géométries.

1.2.3 Encrassement biologique

Les circuits de refroidissement qui utilisent de l'eau naturelle sont aussi très propices au développement d'encrassement biologique. L'eau est chargée en microorganismes ainsi qu'en nutriments naturellement présents dans les fleuves et les rivières. De plus, les températures de circulation de l'eau dans le circuit de refroidissement ont tendance à favoriser le développement biologique de même que l'évaporation dans les tours provoque une concentration des nutriments dans l'eau accélérant les cinétiques de croissance. Dans les circuits, la majorité de l'activité biologique impactant le fonctionnement thermique se situe sur les surfaces d'échanges sous forme de biofilm. Un biofilm est une matrice de micro-organismes adhérant à une surface et maintenus par une sécrétion adhésive et protectrice composée majoritairement d'eau et d'exopolysaccharides sécrétés par les cellules microbiennes (Sutherland, 2001).

Les biofilms ont été étudiés dans la littérature (Horn et Lackner, 2014; Azeredo *et al.*, 2017) et plusieurs modèles ont été conçus afin de prédire leur développement (Rittmann et McCarty, 1980; Wanner *et al.*, 2006; Wang et Zhang, 2010). Tous ces modèles s'accordent, en régime permanent, pour diviser l'analyse du biofilm en deux parties : la production et la croissance de biofilm d'une part et l'arrachement et la mort naturelle du biofilm d'autre part. Un schéma de développement de biofilm est présenté à la Figure 1.7.

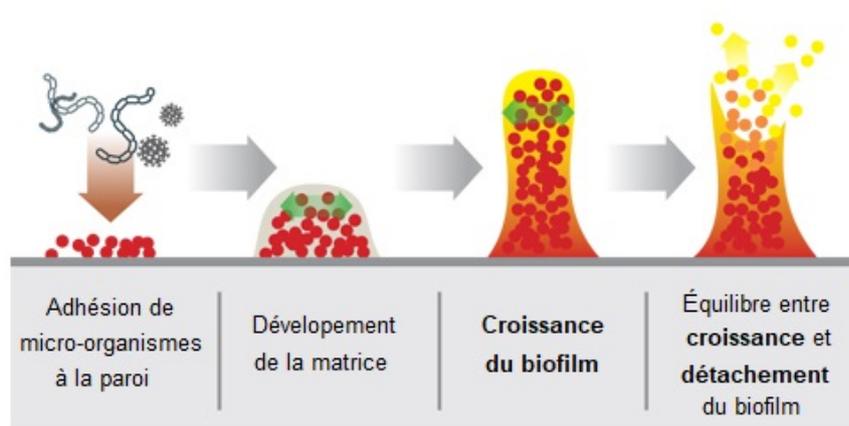


FIGURE 1.7 – Schéma des étapes de développement d'un biofilm sur une paroi (adapté de Aqua-free Journal)

L'équilibre des biofilms est complexe et dépend de nombreux paramètres (Wanner *et al.*, 2006) : disponibilité des nutriments, présence ou non d'oxygène dans le milieu, présence ou non de substances

biocides, température et contraintes hydrodynamiques. Le développement du biofilm obéit à une cinétique de croissance dépendant du type de micro-organismes mais aussi de la concentration des différentes espèces présentes dans l'environnement du biofilm (e.g. substrat, oxygène). L'apport de ces espèces jusqu'au biofilm va dépendre de phénomènes de transfert physico-chimiques tels que la diffusion dans le milieu ou le transport convectif. Tous ces phénomènes influençant la croissance du biofilm ont des temps caractéristiques très variés, un exemple de calcul de ces temps caractéristiques a été réalisé par Picioreanu *et al.* (2000) et les résultats sont présentées Figure 1.8.

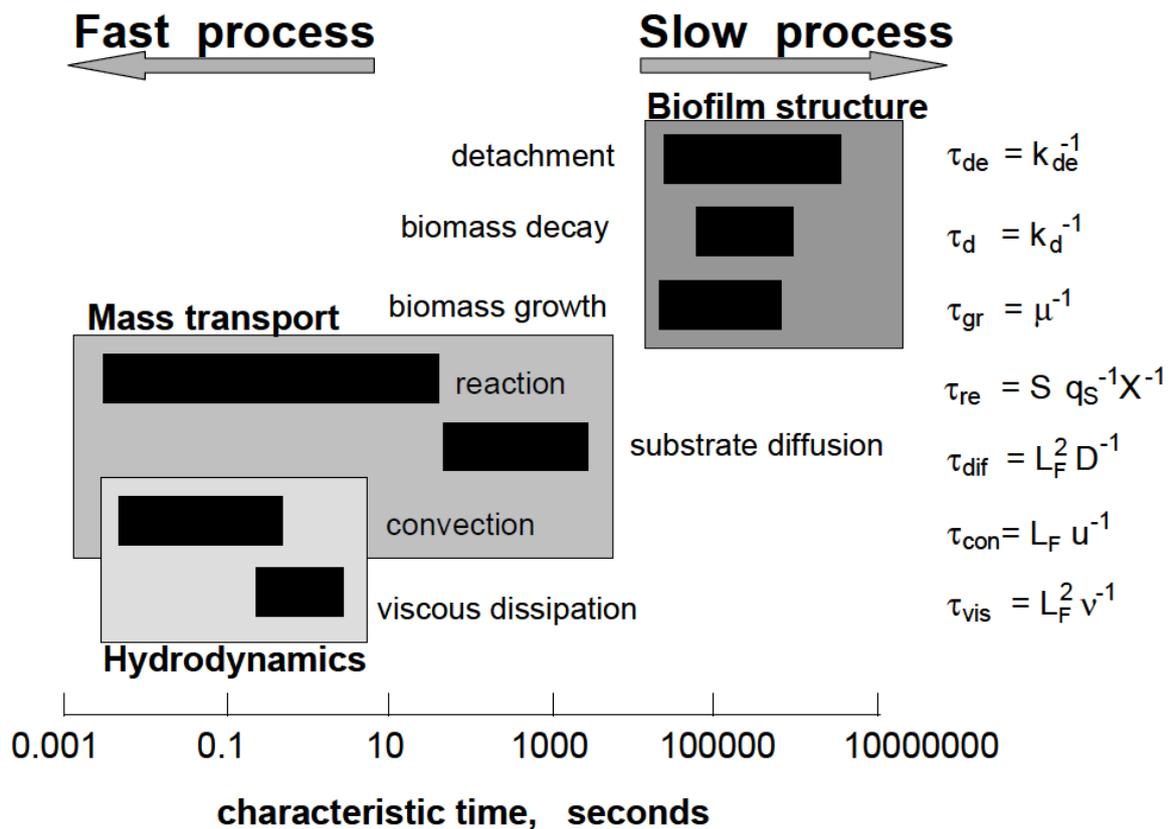


FIGURE 1.8 – Représentation de temps caractéristiques des différents phénomènes intervenant dans l'équilibre des biofilms [D'après Picioreanu *et al.* (2000)]

Il est ainsi possible d'estimer que la cinétique du biofilm (croissance et décroissance naturelle) est un processus lent comparé aux phénomènes de transfert de masse par diffusion et très lent en comparaison des phénomènes hydrodynamiques.

De manière qualitative, une augmentation de la quantité de nutriments va favoriser la croissance du biofilm. De même, pour des organismes aérobies, l'augmentation de la quantité de dioxygène favorise la production de biofilm. La température va également favoriser le développement du biofilm dans une gamme précise dépendant de la nature des micro-organismes présents. L'influence des conditions hydrodynamiques sur le développement de biofilm a été étudiée dans la littérature afin d'identifier les

paramètres d'influence les plus pertinents comme la contrainte de cisaillement en paroi (Rittmann, 1982; Peyton, 1996) ou la vitesse dans un écoulement turbulent (Melo et Viera, 1999). Les simulations de mécanique des fluides numériques (CFD) sont aussi souvent utilisées pour caractériser l'influence des écoulements sur les biofilms (Prades *et al.*, 2017; Morchain *et al.*, 2014). L'encrassement biologique étant un enjeu majeur pour le refroidissement industriel, de nombreux travaux se sont intéressés au cas de tubes de condenseurs de circuits de refroidissement en eau de mer et à l'influence de l'hydrodynamique sur les biofilms (Nebot *et al.*, 2007; Trueba *et al.*, 2015; Souza *et al.*, 2020) en fonction des matériaux utilisés pour les tubes.

1.2.4 Problématique de l'encrassement d'un point de vue industriel

Les circuits de refroidissement industriels sont donc fortement soumis à l'encrassement par la formation de dépôts de nature variée. Le Tableau 1.1 présente la synthèse des phénomènes d'encrassements majeurs se produisant dans les circuits semi-fermés avec tour aéroréfrigérante humide. Il présente les différentes phases de développement pour les trois types d'encrassement considérés (physique, chimique et biologique).

TABLE 1.1 – Description des étapes de développement des trois types d'encrassement

| Étape | Physique <i>Matières en suspension</i> | Chimique <i>Précipitation du tartre</i> | Biologique <i>Développement de biofilm</i> |
|--------------------------------------|--|---|---|
| Induction / Retard | NON | Induction (formation des nucléis) | Retard (formation du biofilm) |
| Transfert de matière | Apport des particules vers la paroi | Apport des espèces chimiques vers le dépôt | Apport des nutriments et du O ₂ vers la biomasse |
| Formation du dépôt | Adhésion | Précipitation (cinétique chimique) | Croissance (cinétique biologique) |
| Arrachement ou autorégulation | Arrachement et remise en suspension | Négligeable | Arrachement et diminution de la vitesse de réaction |

La compréhension et la maîtrise de l'encrassement sont des enjeux majeurs pour l'exploitation des circuits de refroidissement car les différentes couches de dépôts réduisent fortement l'efficacité de ces circuits. En effet, dans le condenseur, les couches de dépôts créent une résistance thermique supplémentaire réduisant l'efficacité du transfert thermique entre la vapeur et l'eau de refroidissement. Dans les garnissages, l'encrassement qui va se fixer à la paroi, va obstruer les corrugations et boucher

les perforations réduisant ainsi la surface spécifique du garnissage et donc la surface d'échange entre l'eau et l'air. De plus, les dépôts dans les conduites, les pompes ou les répartiteurs de flux avant les condenseurs peuvent affecter l'hydrodynamique (réduction de section, mauvaise répartition du fluide dans les tubes de condenseur) et donc aussi affecter l'efficacité du circuit. Si le dépôt n'est pas traité, le développement de l'encrassement peut même conduire, dans des cas extrêmes, à l'obstruction de tubes ou de canaux de garnissage affectant de manière encore plus importante l'efficacité des installations. En plus de l'effet direct de l'encrassement sur le refroidissement, les zones de dépôt et notamment les biofilms, s'ils ne sont pas traités en conséquence, peuvent servir de lieu de prolifération de microorganismes non désirés dans le circuit et les rejets.

C'est pourquoi des traitements sont mis en place pour lutter contre les trois types d'encrassements possibles. Des traitements chimiques dont l'objectif est d'abaisser le pH de l'eau sont ajoutés pour éviter la formation de tartre et attaquer les dépôts (Nordmann, 2008). Des anti-tartres organiques sous forme de polymères solubles sont aussi utilisés afin de prévenir la formation du tartre en agissant en tant qu'inhibiteurs des nucléis en paroi (Neveux *et al.*, 2016; Chhim *et al.*, 2017). Pour les biofilms, des traitements biocides sont injectés pour éliminer les dépôts biologiques (Hartmann *et al.*, 2014; Nordmann, 2008). Des traitements mécaniques sont aussi mis en place pour lutter plus généralement contre toutes les formes de dépôts : un nettoyage mécanique des tubes de condenseurs est assuré par des boules abrasives en mousse. Parfois, quels que soient les traitements mis en place pendant le fonctionnement du circuit, un nettoyage complet peut être effectué lors des mises à l'arrêt. De plus, l'encrassement est un processus de plus en plus pris en compte lors du design des circuits de refroidissement. Des travaux de recherche et de développement sont menés sur des revêtements anti-adhésifs pour les différentes parties du circuit (Lopez-Galindo *et al.*, 2012) et des géométries favorisant la turbulence sont envisagées pour favoriser localement le décrochement du dépôt Shen *et al.* (2015).

L'encrassement et sa gestion à travers l'utilisation de moyens de régulations engendrent donc des problématiques multiples pour les exploitants. L'encrassement et la perte d'efficacité thermique provoquent une baisse de production des centrales électriques et donc un manque à gagner pour l'exploitant dont l'objectif est de produire de l'énergie. De même, les traitements mis en place pour lutter contre l'encrassement limitent les coûts de perte de production mais ont eux-même un coût d'achat et d'utilisation. L'enjeu principal est donc économique. L'utilisation de traitement induit aussi une meilleure gestion des rejets dans l'environnement, les enjeux écologiques et sanitaires rejoignent donc l'enjeu économique pour l'exploitant.

1.3 Positionnement de la thèse et verrou scientifique

1.3.1 Rôle de l'hydrodynamique dans le développement de l'encrassement

La compréhension, l'étude et la gestion de l'encrassement sont des enjeux majeurs pour l'exploitation des circuits de refroidissement. Afin de mieux prévenir et réduire l'encrassement et ainsi limiter l'impact en termes de coûts et d'impact environnemental, la compréhension et l'analyse des différents mécanismes sont primordiales. La synthèse bibliographique des trois types majeurs d'encrassement met en lumière l'influence de l'hydrodynamique dans le développement des dépôts. Les caractéristiques des écoulements sont les paramètres très impactants dans toutes les étapes de l'encrassement : transport des matières nécessaires vers les surfaces (nutriments pour les biofilms, sels pour le tartre), apport de l'énergie nécessaire à l'impact des particules sur les parois (transport particulaire) et contraintes pour le détachement (frottement du fluide qui provoque l'arrachement du biofilm ou la remise en suspension des particules). La connaissance des conditions hydrodynamiques en tout point du circuit est donc un prérequis nécessaire à la compréhension et à la modélisation de l'encrassement dans les circuits. Si les performances thermiques des condenseurs et des tours aéroréfrigérantes sont bien connues, les conditions hydrodynamiques restent mal comprises, particulièrement dans les garnissages des tours. De plus, la grande diversité des conditions hydrodynamiques en fonction des parties du circuit rend la modélisation de l'encrassement difficile à mettre en place de manière homogène. Dans les tubes de condenseur et les conduites, les écoulements en charge circulent à une vitesse de l'ordre de 1,8 m/s; dans le bassin, il existe des zones où la vitesse est quasi nulle; dans les garnissages une vitesse estimée en regardant des systèmes similaires dans la littérature est de l'ordre du centimètre par seconde à quelques dizaines de centimètres par seconde. Les ordres de grandeur des conditions hydrodynamiques connues ou estimées sont rassemblées dans le Tableau 1.2 pour montrer la diversité des écoulements et la nécessité de caractérisation de hydrodynamique.

TABLE 1.2 – Caractéristiques hydrodynamiques du circuit de refroidissement : données connues et calculées grâce à la géométrie et grandeurs estimées grâce à des systèmes similaires de la littérature

| | Garnissages | Bassin froid | Conduites en béton | Tubes de condenseur |
|--|--|------------------------------|---------------------------|----------------------------|
| Longueur caractéristique hydrodynamique (m) | 0,0001 - 0,002* (épaisseur de film liquide) | 1 (profondeur) | 2,8 (diamètre) | 0,015 (diamètre) |
| Tailles complémentaires (m) | 1 - 1,5 (hauteur de garnissage) | 52,55 (diamètre) | 200 - 400 (longueur) | 10 - 15 (longueur) |
| Nature des écoulements | Diphasique stratifié (film liquide) | Monophasique à surface libre | Monophasique en charge | Monophasique en charge |
| Vitesse du fluide (m/s) | 0,01 - 0,2* | 0 - 1* | 1,8 | 1,8 |
| Régime d'écoulement du liquide | Laminaire* | Laminaire et turbulent* | Turbulent | Turbulent |

* : ordres de grandeur estimés

1.3.2 Objet de la thèse

L'objectif de ce travail est donc de caractériser pleinement l'hydrodynamique et tous les paramètres pertinents de l'écoulement dans les différentes parties du circuit : conduites en béton, tubes du condenseur, garnissages de la tour aéroréfrigérante et bassin froid. Pour chaque partie, la nature de l'écoulement (e.g. écoulement en charge dans un tube, ruissèlement, écoulement à surface libre) et les grandeurs caractéristiques (vitesse, position de l'interface en cas d'écoulement diphasique, frottement induit sur les parois) devront être déterminées. Ces paramètres pourront ainsi servir à la conception d'un modèle complet de prédiction de l'encrassement dans le circuit de refroidissement : les paramètres hydrodynamiques sont indispensables comme données d'entrée des modèles physiques, chimiques et biologiques d'encrassement.

Le but de la thèse est de fournir un modèle permettant de simuler les conditions hydrodynamiques influant l'encrassement. Le modèle général construit est illustré avec un modèle d'encrassement biologique spécialement développé dans cette thèse à partir de données de la littérature afin de montrer la capacité de l'approche de modélisation et de faire la démonstration de sa fonctionnalité. Le choix s'est porté sur la modélisation de l'encrassement biologique parce que les autres types d'encrassement

sont plus connus et documentés dans la littérature. L'approche compartimentale développée étant générique, elle pourra être alimentée ultérieurement par d'autres modèles d'encrassement (e.g. autres types d'encrassement, modèles plus spécifiques à certaines régions).

1.3.3 Articulation de la thèse

Il était tout d'abord nécessaire de sélectionner l'approche de modélisation adaptée à l'étude des circuits de refroidissement prenant en compte l'hydrodynamique et permettant d'intégrer l'ensemble des modèles d'encrassement. Une recherche bibliographique et une synthèse des approches de modélisation des systèmes en Génie Chimique ont donc été effectuées. Cette revue bibliographique a permis de choisir l'approche compartimentale comme étant la plus pertinente pour les circuits de refroidissement de grande taille intégrant une grande diversité de procédés. Ces travaux sont présentés au Chapitre 2.

Dans la deuxième partie, les conditions hydrodynamiques des différentes parties du circuit ont été caractérisées. Une étude bibliographique ciblée a été réalisée afin de rassembler les informations disponibles dans la littérature pour les différentes natures d'écoulements; ce travail de synthèse bibliographique est détaillé au Chapitre 3. Cette analyse a permis de choisir les outils pour caractériser les écoulements dans les différentes parties du circuit : corrélations de la littérature pour les écoulements établis en conduites, simulations numériques de mécanique des fluides (CFD) pour le bassin froid. L'analyse a aussi exposé la nécessité d'un travail complet de caractérisation des écoulements dans les garnissages dont très peu d'informations étaient disponibles dans la littérature.

Une caractérisation expérimentale à l'aide d'un dispositif d'une tour aéroréfrigérante à échelle pilote a donc été menée au LRGP pour observer et mesurer les grandeurs des écoulements ruisselants dans les garnissages telles que l'épaisseur ou le taux de mouillage. Le Chapitre 4 expose les résultats de l'exploitation du dispositif. En complément, les écoulements sur les garnissages ont aussi été caractérisés à l'aide de simulations de mécanique des fluides et sont présentés au Chapitre 5. Les résultats obtenus (épaisseurs de films liquides et taux de mouillage) ont pu être comparés aux résultats expérimentaux. Les simulations ont aussi permis l'obtention des grandeurs de l'écoulement non accessibles expérimentalement (vitesses et profils de vitesses dans les films ruisselants, rétention liquide).

Le Chapitre 6 synthétise de la caractérisation hydrodynamique dans toutes les parties du circuit. Les grandeurs caractéristiques des écoulements qui ont été calculées avec les corrélations de la littérature ou obtenues par un travail de caractérisation propre sont présentées et discutées.

Dans une troisième partie, le Chapitre 7 présente la construction du modèle d'encrassement pour le biofilm. Le modèle construit se base sur de nombreuses données de la littérature appliquées aux circuits de refroidissement utilisant de l'eau brute.

Enfin, le Chapitre 8 présente le modèle compartimental permettant de prendre en compte tous les paramètres hydrodynamiques afin de prédire le développement de l'encrassement et ses caractéristiques dans les différentes parties du circuit de refroidissement.

Choix de l'approche de modélisation

Afin de choisir la méthodologie de modélisation la plus adéquate au système étudié, différentes approches de modélisation utilisées dans la littérature ont été étudiées.

2.1 Approches de modélisations en Génie Chimique

En Génie Chimique, deux approches complémentaires sont généralement utilisées à différentes échelles pour caractériser les écoulements dans les réacteurs : l'approche système et l'approche locale. La première considère le système étudié dans son ensemble et cherche à caractériser les écoulements à l'aide de méthodes globales (e.g. bilans de matière et bilans thermiques entrée/sortie du système, traçage) pour obtenir des grandeurs globales (e.g. conversions chimiques, coefficients de transfert globaux, distribution des temps de séjour) afin de proposer un modèle théorique de l'ensemble du réacteur (e.g. réacteur idéal ou réseau de réacteurs idéaux). La base de l'approche systémique réside dans la modélisation simple de briques élémentaires que sont les réacteurs idéaux. L'hypothèse principale est que tout système complexe peut être approché par une configuration de cas ou de réacteurs de références dont le comportement hydrodynamique global est connu. Cette configuration n'a aucune réalité physique ni spatiale et repose uniquement sur le comportement système du réacteur : seules les données d'entrée et de sortie du réacteur sont considérées sans connaissance du fonctionnement interne du réacteur.

L'approche locale utilise des outils d'acquisition expérimentaux (e.g. sondes de mesures expérimentales locales, PIV) pour obtenir les grandeurs locales caractéristiques des écoulements (e.g. concentrations locales, champs de vitesses) et utiliser ou développer des modèles locaux (e.g. modèles de mécanique des fluides numérique). L'approche locale permet une cartographie représentative de la géométrie du réacteur et permet d'identifier la localisation des différents types d'écoulements modélisés (e.g. zones de faible vitesses, trainées derrière des obstacles, court-circuits hydrodynamiques). Les résultats obtenus à l'échelle locale peuvent aussi permettre de remonter à ces mêmes grandeurs globales mais en

ajoutant une vision spatiale en plus de la vision fonctionnelle prise en compte par l'approche système.

Ces deux méthodes sont très complémentaires et possèdent de nombreux avantages. L'approche systémique nécessite peu de paramètres ce qui les rend faciles à résoudre pour de nombreux systèmes ; elle est utilisée depuis des décennies en Génie Chimique et est très bien documentée dans la littérature (Danckwerts, 1953; Villiermaux, 1993; Levenspiel, 1998). En contrepartie, ces approches systèmes caractérisent le système dans son ensemble sans beaucoup de détail et le modèle théorique proposé n'est pas forcément représentatif de la géométrie réelle du système. De manière complémentaire, les approches locales et notamment les modèles de mécanique des fluides numérique, permettent une caractérisation hydrodynamique plus précise et tiennent compte des spécificités géométriques des systèmes. Ainsi il est possible de décomposer chaque système et d'étudier particulièrement chacune de ses parties. L'obtention de ces grandeurs locales dépend tout de même du raffinement du modèle (taille des mailles du maillage en MFN) et de la complexité des phénomènes physiques, biologiques ou chimiques. Plus la résolution du modèle est importante, plus la précision des résultats est grande mais plus le coût de calcul est élevé.

Une méthode hybride, appelée Modélisation Compartimentale, combine l'approche locale et l'approche système (Le Moullec *et al.*, 2011). En utilisant des données hydrodynamiques provenant des deux échelles de caractérisation, elle permet une modélisation complète du système étudié adaptée à l'objectif de modélisation. L'approche compartimentale se base sur la division du système en compartiments spatialement représentatifs de l'hydrodynamique du système, chaque compartiment pouvant être considéré comme un réacteur idéal ou un réseau de réacteurs idéaux. Dans la plupart des cas, des simulations de MFN préliminaires sans couplage ou avec seulement les phénomènes bio-physico-chimiques prépondérants sont réalisées. Le découpage des compartiments se fait à partir des résultats de ces simulations grâce à un ensemble de critères pertinents définis par une étude préliminaire du système et des objectifs du modèle. Les échanges entre les compartiments sont calculés grâce à la MFN et aux bilans de matières effectués dans le réseau de compartiments créé. *In fine*, dans chaque compartiment, les modèles physiques, biologiques ou chimiques peuvent être résolus plus facilement. La méthodologie compartimentale présente l'avantage principal de rassembler des informations provenant des différentes échelles du système en étant moins consommatrice de temps de calcul que des simulations de MFN avec couplage complet des phénomènes. La difficulté principale de la méthode réside dans l'étude préliminaire et la détermination des critères de sélection des compartiments, particulièrement dans le cas des systèmes où les phénomènes étudiés ont une forte influence sur l'hydrodynamique.

Un article de présentation et de synthèse bibliographique sur les approches compartimentales dans la littérature a été rédigé pendant la thèse avec l'aide et l'expertise de différents co-auteurs :

Thibaut Neveux, Olivier Potier, Mohamed Kanniche, Jim Wicks, Ingmar Nopens, Usman Rehman et Yann Le Moullec (Jourdan *et al.*, 2019). Le travail réalisé a pour but d'aider à la compréhension des approches de modélisation en génie chimique, d'expliquer au lecteur les avantages de l'approche compartimentale, de présenter la diversité des applications, de lui donner un mode d'emploi pour l'utilisation de cette approche de modélisation et des pistes de réflexion et des perspectives.

Cet article présente une analyse de l'utilisation des approches compartimentales dans la littérature appliquées à des systèmes variés en Génie Chimique. Étant donné la variété des approches compartimentales disponibles, après analyse de ces différents cas de la littérature, des avantages et des inconvénients de chaque approche, il a été possible de proposer une définition unifiée pour la modélisation compartimentale ainsi qu'une méthodologie de construction d'un modèle compartimental. Cette définition unifiée présentée dans la section 4.4.1 de l'article permet d'identifier les critères nécessaires à l'application de la modélisation compartimentale et de proposer un cadre commun pour les futures utilisations. Dans le même objectif, une méthodologie de construction a été créée et proposée (section 4.4.2 et Fig. 9 de l'article) pour aider les potentiels utilisateurs dans le développement de leur modèle compartimental. Enfin, une réflexion a été menée afin d'identifier les limitations des approches compartimentales et l'article présente donc de nombreuses perspectives et enjeux pour l'amélioration des futures approches compartimentales afin de les rendre applicables à d'autres systèmes plus grands ou plus complexes et ainsi élargir les applications potentielles des approches compartimentales.

2.2 Compartmental Modelling in chemical engineering : A critical review



Contents lists available at ScienceDirect

Chemical Engineering Science

journal homepage: www.elsevier.com/locate/ces

Review

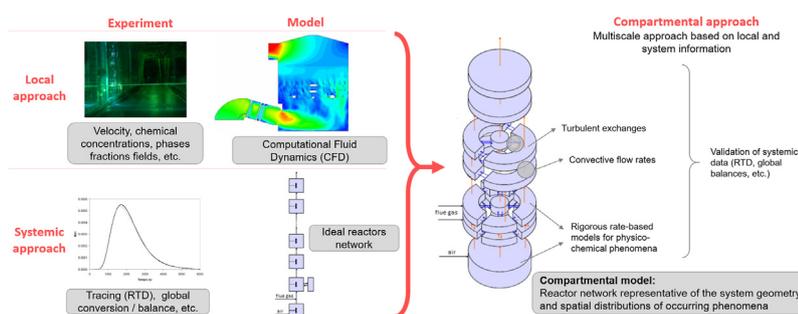
Compartmental Modelling in chemical engineering: A critical review

Nicolas Jourdan^{a,b}, Thibaut Neveux^b, Olivier Potier^{a,*}, Mohamed Kanniche^b, Jim Wicks^c, Ingmar Nopend^d, Usman Rehman^e, Yann Le Moulec^f^a Laboratoire Réactions et Génie des Procédés (LRGP), UMR 7274, CNRS, Université de Lorraine, Nancy F-54001, France^b EDF R&D, EDF Lab Chatou, 6 quai Watier, 78401 Chatou Cedex, France^c The Fluid Group, The Magdalen Centre, Robert Robinson Avenue, The Oxford Science Park, Oxford OX4 4GA, UK^d BIOMATH, Department of Data Analysis and Mathematical Modelling, Ghent University, Coupure Links 653, 9000 Gent, Belgium^e AM-TEAM, Oktrooiplein 1 - Box 601, 9000 Gent, Belgium^f EDF China R&D Center, EDF China, Beijing 100005, PR China

HIGHLIGHTS

- Compartmental modelling, a suitable method to simulate and model complex systems in chemical engineering.
- More precise than systemic models and less time consuming than fully reactive CFD.
- Synthesis and analysis of the different approaches used in compartmental modelling.
- Proposition of a unifying definition and step-by-step construction method.
- Exploration of perspectives and future challenges of compartmental modelling.

GRAPHICAL ABSTRACT



ARTICLE INFO

Article history:

Received 22 March 2019
 Received in revised form 27 July 2019
 Accepted 31 August 2019
 Available online 3 September 2019

Keywords:

Compartmental Modelling
 Hydrodynamics
 Multi-scale
 CFD
 Systemic model

ABSTRACT

Compartmental modelling is a hybrid way to model complex systems in Chemical Engineering. This modelling approach offers numerous advantages because it aggregates information from both local and system scale models. Compartmental models allow multi-scale modelling with low computational time compared to a full coupled model (e.g. reactive numerical simulations). Thanks to these main characteristics, compartmental models are able to model complex full-size industrial systems.

For the last decades, various approaches of compartmental models were developed for different applications. In this article, a critical review and analyses are carried out to classify these different approaches. A unified definition is proposed, and important guidelines are pointed out to assist with constructing a Compartmental Model.

Finally, some perspectives for the future of Compartmental Modelling are identified and discussed: compartmental modelling for larger and more complex systems, the inclusion of new phenomena modelling and automation of compartmental models with the improvement of numerical methods.

© 2019 Elsevier Ltd. All rights reserved.

* Corresponding author.

E-mail address: olivier.potier@univ-lorraine.fr (O. Potier).

Contents

| | | |
|--------|--|----|
| 1. | Introduction | 2 |
| 2. | Process modelling in chemical engineering | 3 |
| 2.1. | Systemic approach | 3 |
| 2.2. | Local approach | 4 |
| 2.3. | Limitations of traditional approaches and compartmental modelling approach | 4 |
| 3. | Review of compartmental approaches | 4 |
| 3.1. | Empirical approach for compartment construction | 5 |
| 3.2. | Compartments construction based on fields calculated by CFD | 6 |
| 3.3. | Rationalisation of compartments construction | 7 |
| 3.4. | Compartmental modelling of complex systems: hydrodynamics influenced by fast reactions | 8 |
| 3.5. | Compartmental vs CFD and Systemic approach | 9 |
| 3.6. | Compartmental model limitations | 10 |
| 3.7. | Synthesis of the review | 10 |
| 4. | Analyses | 12 |
| 4.1. | Model construction: construction criteria and fluxes calculation | 12 |
| 4.2. | Compartmental Models validation | 13 |
| 4.3. | Advantages of Compartmental Modelling | 13 |
| 4.4. | Proposition of a unified definition of compartmental modelling | 14 |
| 4.4.1. | Unified definition of compartmental modelling | 15 |
| 4.4.2. | Construction methodology for compartmental models | 15 |
| 5. | Critical reflections and future challenges | 15 |
| 5.1. | Improvement in compartmental network generation | 16 |
| 5.1.1. | Automation of compartmental network generation | 16 |
| 5.1.2. | Self-adapting dynamic compartmental network | 17 |
| 5.2. | New application fields for compartmental modelling | 17 |
| 5.2.1. | Compartmental modelling for large systems | 17 |
| 5.2.2. | Compartmental modelling for more complex systems | 17 |
| 5.2.3. | New applications of compartmental modelling with new objectives | 18 |
| 6. | Conclusion | 18 |
| | Declaration of Competing Interest | 18 |
| | Acknowledgments | 19 |
| | References | 19 |

1. Introduction

In chemical engineering the modelling of all the relevant phenomena, at appropriate scale, in industrial systems is a scientific challenge. Developing accurate models of multi-phenomenon systems, which typically exhibit nonlinear behaviour, requires an important amount of data and faces the capacity limits of available technologies and measurement techniques. Different modelling approaches are used depending on the purpose of the study and the objectives of the constructed model. The hybrid method called compartmental approach is gaining popularity. For twenty years, the number of industrial applications using compartmental model approaches continues to increase (e.g. bioreactors (Pigou and Morchain, 2015), water treatment (Rehman et al., 2017), crystallization (Oner et al., 2018), CO₂ valorisation (Zhao et al., 2017), gas turbine modelling (Fichet et al., 2010). . .). The purpose of this work is to make an inventory of the different compartmental modelling approaches developed in the literature so far and to analyze the different models in order to propose a definition for compartmental modelling in chemical engineering.

Depending on the modelling objectives, models should be able to describe, explain or predict a system behaviour, it generally consists of a set of equations representing the key aspect of the system of interest, and the relevant boundary conditions, aiming to take into account all the important phenomena occurring in the system and their dependencies (transfer, transport, reactions, phase transition) at local or global scale (Potier et al., 2015). A model can never be complete but must offer a good balance between complexity and accuracy therefore relevant simplification is almost always needed. Designing a model will be guided by the specific

system studied and scale, the study objectives, the available information and theoretical knowledge as well as the capability to process this information (i.e. the need or not of special competencies, powerful computer, etc.).

In systems, within chemical engineering field of study, one the most important phenomena is the system dynamics, which often induces the overall model structure. Most phenomena studied are partially, or fully, linked to fluid dynamics behaviour of the system as a consequence, numerous studies focus on fluid dynamics models of unit operation (Dudukovic, 2010). Developing a model could be a very complex operation, two approaches are commonly used to model fluid dynamics industrial systems: the systems approach and the local approach that refers to a Cartesian approach in epistemology (de Rosnay, 1979).

Modelling approaches use information from studies at system (global) scale or local scale or both. The system scale considers the whole system as an undivided fashion. The system characterisation is done by using inlet and outlet data (tracing, Residence Time Distribution...), calculating global quantities (e.g. global transfer performance, residence time, conversion, mass balance, etc.). In contrast, the local scale tries to characterize occurring phenomena; it is commonly set in opposition to the system scale. The local scale allows the calculation of quantities such as species concentration, fluid velocity and turbulence fields, local transfer constants, etc., distributed within the studied system. Computational Fluid Dynamics (CFD) uses the local approach to model the whole system, a reactor for example. That is why, the local scale can be different depending on occurring phenomena. In the following chemical engineering studies, the local scale is often set as the fluid dynamics resolution in the system study.

This work aims to present the history of Compartmental Modelling approach development through the critical review of compartmental models developed in the literature during the past decades. Based on this review, a critical analysis of the diversity of compartmental approaches is done focusing on construction specificity. Thanks to the analysis of literature, a unified definition and a general construction methodology are developed and proposed. Finally, some considerations and perspectives for compartmental modelling futures are discussed and shared.

2. Process modelling in chemical engineering

In this part, the different modelling approaches in chemical engineering are introduced and described. The systemic and local approaches are explained to point out the necessity to develop a new complementary modelling approach.

2.1. Systemic approach

The systemic approach originally considered the system as a black box, in which progressively information and models are added as the tools and the needs progress. In our domain, the system is the whole reactor, column or volume of interest. This fruitful approach came out in chemical engineering from the use of hydrodynamic analysis method: tracing that is based on information from input and output (Danckwerts, 1953). Rapidly, successful methods were proposed to model the global fluid dynamics of a complex reactor with combinations of a few "virtual" ideal reactors: Continuous Stirred-Tank Reactors (CSTRs) and Plug Flow Reactors. In their respective reference works concerning modelling in chemical engineering, Villiermaux (1984, 1993) and Levenspiel (1998) explain and illustrate this approach. The determination of the overall hydrodynamics is done by the study of input and output data resulting in the calculation of system conversion and global balances. Obviously, the main tool for reactor networks determination is fluid tracing. A known tracer distribution is injected in input and measurements of the output give the Resi-

dence Time Distribution (RTD) functions as explained in Danckwerts (1953). The analysis of RTD functions gives a possible network of "virtual" ideal reactors that is representative of the global fluid dynamics system (see Fig. 1 left) (Hocine et al., 2008; Laquerbe et al., 2001). The representative structure is not necessarily unique and could be improved by getting information such as geometry (reactor shape, size) or mixing device position and energy provided to the fluid. Once the network of ideal reactor is determined, other phenomena can be added in the network. The resulting model is representative of the influence of hydrodynamics on the other phenomena; this representation is rigorously true for linear phenomena only but experience shows that appropriate representation of almost all system can be appropriately described by this approach. It has been commonly used in all fields of chemical engineering such as: water treatment (Laurent et al., 2015; Potier et al., 2005; Stropky et al., 2007), combustion (Faravelli et al., 2001), polymerisation (Vivaldo-Lima et al., 1998), multi-stage contactors (Zhang et al., 2007) or multiphase flow systems (Simcik et al., 2012). The systemic approach with reactors networks are generally used in process modelling, process development, and scale-up, in order to scan all the combination scenarios and rapidly obtain a first design with sufficient precise results of a new process or before an improvement of an existing one. At the beginning, the systemic approach was often called "compartment model or modelling" (Levenspiel, 1998). Progressively, the comparison with other sciences such as cybernetics, general system theory, automation, epistemology (von Bertalanffy, 1968; de Rosnay, 1979; Villiermaux, 1984, 1993; Morin, 1990) induced a change in the terminology ensuring consistency with them. It is important to note that this older naming (compartment modelling) is quite different from the compartmental modelling that is the subject of this article. In the post WW2 era, the emergence of the systemic approach helped the fruitful development of Chemical Reaction Engineering (CRE) as a new discipline (Dudukovic, 2010). Afterwards, they evolved concomitantly. Using mainly the systemic approach during decades, CRE helped with high efficiency to design and optimize processes.

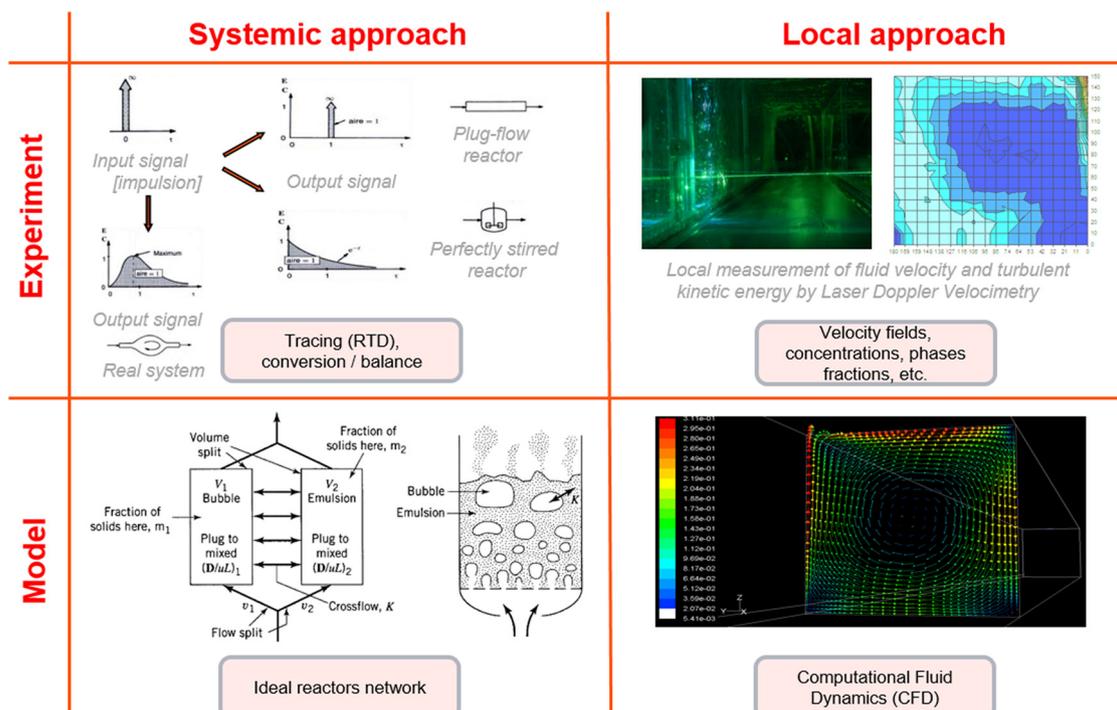


Fig. 1. Comparison between systemic and local approaches (images adapted from Levenspiel (1998) and Le Mouleuc (2008)).

CRE mainly combines kinetics, thermodynamics, transfer and hydrodynamics that are modelled with the systemic approach. However, CRE evolved with time and now it also uses other approaches such as local approach, CFD with reactions for example.

2.2. Local approach

Complementary to system scale information, it could be important to also get local information. At local scale, two main methods are used to characterize the fluid dynamics behaviour: local experimental measurements or numerical simulations (see Fig. 1 right). The two approaches can be complementary, they can be used both at the same time or successively; for instance, local measurements give information for the model building and are also used to validate the model. A significant number of data acquisition methods can be used depending on the flow pattern such as interface characteristics (Takagaki and Komori, 2014), disperse and continuous phase characteristics (Lee, 2002; Tibirica et al., 2010), chemical data (Dani et al., 2007), fluid transport properties and thermohydraulics properties (Goldstein, 1996). Another way to get some data on fluid dynamics is local simulation of fluid dynamics fields by solving the equations of fluid mechanics (Versteeg and Malalasekera, 2007).

CFD development is benefiting for many years from continuous increase in computer capacity and applications. They can therefore provide more and more accurate data on more and more complex flows and geometries. The simulation accuracy depends on the system discretisation (or meshing) and on the approach taken for solving Navier-Stokes equations and other scalar variables: solving these equations can provide more accurate simulations of the main fluid dynamics quantities of interest such as velocity, pressure, temperature, passive scalars, such as species concentration, or turbulence. The most common CFD approaches are not an exact representation of the system because they rely on a chosen set of hypothesis and on turbulence models for some approaches. For multiphase flows, different simulation methods can be used such as two-fluids Euler-Euler, Volume of Fluid (VOF), level set or Lattice Boltzmann. . .

For most of complex flow occurring in complex geometry, only a statistical average form of CFD equations can be solved, which provides mean values of variables. With this approach, the geometry does not need a very fine discretisation, which enables to reduce the calculation capacity demand. When averaging Navier-Stokes equations, non-linear terms appear as mean turbulence correlations that are solved using turbulence modelling: linear eddy viscosity models (Chen and Xu, 1998; Menter, 1994; Scott-Pomerantz, 2004), non-linear eddy viscosity models (Laurence et al., 2005; Wizman et al., 1996) and Reynolds Stress Models (Launder et al., 1975; Wizman et al., 1996). Non-statistical approaches such as Direct Numerical Simulation (DNS) directly solve Navier-Stokes equations without any statistical operation nor turbulence model (Moin and Mahesh, 1998). Much finer meshes are therefore needed in order to catch the energy dissipation at smallest scales (Kolmogorov micro-scales). This exact DNS approach is still too time consuming to be applied to large and complex flows occurring in complex geometries. To reduce computational cost of DNS the Large Eddy Simulation (LES) method was developed in the seventies. The small scales of Navier-Stokes equations are ignored to only solved larger scales.. The LES approach is nowadays applied to very complex flows occurring in complex geometries such as turbulent combustion (Pitsch, 2006) but is still time consuming and difficult to apply to multi-phase flows.

CFD simulations can be a useful tool for many flows simulations in many scientific domains: examples of the use of CFD simulations in various domains are listed in Angermann (2010).

2.3. Limitations of traditional approaches and compartmental modelling approach

The two previous modelling approaches have both advantages and drawbacks. They are highly complementary for system studies or reactors design.

Systemic approaches are studied for decades and rely on ideal reactors whose fluid dynamics equations are easy to solve. These equations only take into account a few global parameters (e.g. inlet and outlet flow rates, reactor volume, residence time, number of "virtual" ideal reactor). The solution difficulty can increase with the complexity of ideal reactor network, but a global fluid dynamics model can always be obtained. Moreover, the systemic approach usually does not depend on the system size and can be used for both lab scale or industrial scale systems with the same procedure and calculation time. However, systemic approaches only give global information and are often insufficient to fully understand a system or a phenomenon. Due to the multiplicity of RTD functions and the various possible reactor networks, systemic models are not representative in detail of the actual geometry of the system because occurring phenomena are not spatially defined.

Local measurements and simulations of fluid dynamics provide data for various parameters of the flow pattern (e.g. local velocities, viscosity, phase fractions, temperature, etc.). These local data characterize the system geometry, operating conditions and provide the actual mapping of the system. For complex systems and geometries, local approaches could remain costly: to obtain a complete experimental characterisation, an important experimental setup is needed to get enough experimental values for a consistent mapping. Moreover, invasive probes can perturb the fluid dynamics behaviour of the system. Local characterisation and particularly CFD simulations remain complicated to perform and sometimes, just unfeasible. If all the coupled phenomena are taken into account in complex systems (e.g. complex reactive systems, quick combustion reactions, strongly coupled phenomena), the number of solved equations explodes. The increase of calculation capacity will certainly improve the scope of CFD simulation but the gap remains huge enough to reach the full modelling of an industrial scale complex system. For now, some physical phenomena are impossible to fully comprehend at local scale such as particle deposition or heterogeneous systems (when a same system combines different unit operation within a same location, it often happens in process intensification). To overcome the historical modelling approaches limitations, the compartmental approach was developed in the last twenty years to combine the advantages of both local and systemic approaches.

A lot of compartmental models were developed for various study cases using different construction methods but the same philosophy of construction remains. Previous works already pointed out the particularities of compartmental modelling in comparison with systemic modelling (Haag et al., 2018). This work addresses a detailed analysis of compartmental model evolution and proposes a first specific definition of this approach.

The next section reviews compartmental modelling approaches described in the literature; afterward, the justification of compartmental approaches use is explained.

3. Review of compartmental approaches

All the compartmental approaches have a common theory of model construction, but also significant differences in the choice of compartment definition criteria. The construction methods have been adapted to the studied systems. The main compartmental approaches developed in the literature are listed and detailed in

Table 1, focusing on industrial applications, phenomena of interest and goals of the model development.

The goal of Section 3 is to present a description of compartmental models as complete as possible.

3.1. Empirical approach for compartment construction

The origins of compartmental models go back to the 70s (Patterson, 1981), but until the middle of the nineties, the name “compartment models” was used to describe a network of ideal reactors. In most cases, compartment models referred to systemic models (Cui et al., 1996; Mayr et al., 1993; Reuss and Jenne, 1993). Vrabel et al. (1999, 2000, 2001) used the same empirical construction method to model a multi impeller stirred tank. The compartment definition was empirically based on reactor geometry and

local hydrodynamics knowledge from previous studies: each impeller zone is divided in a network of ideal reactors. This study points out the importance of exchange fluxes calculation that will be a key aspect in designing compartment networks.

The first compartmental approaches were developed in the late nineties to get some complete models of reactors in spite of the low capacity of CFD simulations. Despite the use of CFD in the model construction process, these models were mainly empirically based: the compartments were designed with available knowledge about studied reactor hydrodynamics. To control the process of Czochralski crystallization, Irizarry-Rivera and Seider (1997a,b) and Irizarry-Rivera (2012) developed a first type of compartmental model. The objective was to model the convection in the crystallizers and its influence on crystal growth. Local information about hydrodynamics came from the available models such as the

Table 1
Examples of compartmental approaches.

| Author | Industrial technology | Industrial application | Phenomena of interest | Studied parameters |
|---|---------------------------|---|--|--|
| Irizarry-Rivera and Seider (1997a,b, 2012) | Crystallizer | Control of czochralski crystallization process | Control of crystal growth | solid particle distribution, crystal size |
| Birmingham et al. (1998, 1999) | Crystallizer | Design of crystallizer | Control of crystal growth | supersaturation, energy dissipation, crystal size |
| Vrabel et al. (1999, 2000, 2001) | Stirred tank | Study of mixing for fermentation | Mixing quality | gas fraction, gas velocity, mixing time |
| Bauer and Eigenberger (1999, 2001) | Bubble column reactor | Modelling of bubble column | Mass transfer | gas fraction, bubble size, fluid velocity |
| Alex et al. (1999, 2002) | Canal reactor | Aerated sludge wastewater treatment | Biokinetics | fluid velocity, age of fluid particles, species concentrations |
| Bezzo et al. (2000, 2003); Bezzo and Macchietto (2004a,b) | Batch aerobic bioreactor | Modelling of bioreactors | Biokinetics and mass transfer | fluid properties, fluid velocity, species concentration |
| Alexopoulos et al. (2002) | Stirred tank | Modelling of mixing vessels | Mixing quality and turbulence | fluid velocity, energy dissipation, |
| Rigopoulos and Jones (2003) | Bubble column reactor | Study of CO ₂ absorption | CO ₂ kinetics and mass transfer | gas fraction, fluid velocity, species concentration |
| Wells and Ray (2005) | Stirred autoclave reactor | Production of Low Density Polyethylene | Mixing, kinetics | Polymer concentration, temperature, reaction rates |
| Kougoulos et al. (2005) | Crystallizer | Modelling of batch cooling crystallizers | Mixing and heat transfer | fluid velocity, solid particle distribution, energy dissipation, temperature |
| Guha et al. (2006) | Stirred tank | Modelling of mixing vessels | Mixing and kinetics | fluid velocity, mixing time, chemical conversion |
| Laakkonen et al. (2006b,a, 2007) | Stirred tank | Modelling of aerobic fermentation | Fermentation reaction and mass transfer | gas fraction, bubble size, fluid velocity, species concentrations |
| Iliuta et al. (2004, 2007) | Bubble column | Study of Ficher-Tropch process | Kinetics and thermodynamics | gas fraction, bubble size, species concentrations, temperature |
| Le Moullec et al. (2010, 2011) | Aerated canal reactor | Study of aerated wastewater treatment | Biokinetics | gas fraction, fluid properties, fluid velocity, species concentration |
| Gresch et al. (2009) | Canal reactor | Study of ozonation wastewater treatment | Biokinetics | fluid properties, fluid velocity, species concentration |
| Fichet et al. (2010) | Tube of gas turbine | Prediction of NOx production | Combustion reaction and NOx production | fluid properties, fluid velocity, species concentration, temperature |
| Delafosse et al. (2010, 2014) | Stirred tank | Study of mixing in bioreactor | Mixing | fluid velocity, species concentration, mixing time |
| Alvarado et al. (2012) | Stabilisation pond | Modelling of hydrodynamics in wastewater treatment | Biokinetics and mixing | fluid properties, fluid velocity, species concentration |
| Nauha and Alopaeus (2013, 2015); Nauha et al. (2018) | Bubble column reactor | Study of algal growth | Algal concentration, mixing | fluid velocity, species concentrations, light intensity |
| Bashiri et al. (2014, 2016) | Stirred tank | Modelling for stirred-tank scale-up | Hydrodynamics and turbulence | fluid properties, fluid velocity, energy dissipation |
| Pigou and Morchain (2015) | Stirred tank | Study of bioreactors | Mixing and biokinetics | solid particle distribution, cell size, species concentrations |
| Du et al. (2015) | Fluidized bed reactor | Modelling of riser in FCC process | Kinetics | gas fraction, fluid properties, fluid velocity, species concentration |
| Rehman (2016) | Circular aerated reactor | Modelling of wastewater treatment | Biokinetics | fluid velocity, oxygen concentration |
| Zhao et al. (2017) | Gas-liquid stirred tank | CO ₂ valorisation by calcium carbonate precipitation | Mixing and crystal growth | energy dissipation, gas fraction, crystal size, species concentrations, pH |
| Yu et al. (2017) | Stirred tank | Modelling of high shear wet granulation | Kinetics and population balance | fluid velocity, solid particle distribution, crystal size, species concentration |
| Oner et al. (2018); Norregaard et al. (2019) | Crystallizer | Modelling for pharmaceutical crystallizer scale-up | Crystal growth | fluid velocity, supersaturation, crystal size distribution, crystal growth rate |
| Tajsoleiman et al. (2019) | Stirred tank | Study of mixing in bioreactor | Mixing | fluid velocity, mixing time |

boundary layer model and empirical flow field predictions. Then, the bulk part of the reactor was divided in a Continuous Stirred Tank Reactor network.

In 1999, [Bauer and Eigenberger \(1999, 2001\)](#) developed a 'multi-scale zone model', precursor of the idea of compartmental modelling. The multi-scale approach gathers information from simulated hydrodynamics, mass transfer models and global balances. The detailed fluid dynamics allows the division of the reactor in 'zones' to get a simplified hydrodynamic model. This simplified model was very simple and the reactor network was not complex. Population balance, mass transfer and reaction models were added on this simplified reactor model to get the complete bubble column model. The Bauer model was an iterative process with the defined compartment structure: CFD simulations provides exchange fluxes and the multi-zonal model provide the two phases interaction characteristics as an input for the CFD simulations ([Fig. 2](#)).

Using the same construction scheme to study mixing quality and turbulence in stirred tanks, [Alexopoulos et al. \(2002\)](#), [Maggioris et al. \(1998, 2002\)](#) developed a simple two-compartment model based on the reactor geometry: one compartment for the impeller zone and the other representing the remaining volume. A complete CFD simulation of flow fields and turbulence were not used in the compartment definition but its results has been added to the empirical two-compartment model to enhance the reactor description. Each compartment is independent and includes its own turbulence parameters from CFD. [Bashiri et al. \(2014, 2016\)](#) used the same empirical division of a stirred tank in two compartments to study the sensibility of the model for reactor scale-up. The boundaries of the two compartments were determined thanks to the investigation of turbulent energy dissipation which is representative of the mixing: an empirical value of energy dissipation rate is set as the cut-off value for the boundary determination. The compartmental model was enhanced with different CFD simulation results from three geometrical similar reactors with different volumes from 7 to 465 l.

3.2. Compartments construction based on fields calculated by CFD

With the improvement of computer simulation power, the first CFD based compartmental models were established. [Bermingham](#)

[et al. \(1998, 1999\)](#) developed a compartmental model to design a crystallizer. They identified the parameters that influences the crystallization mechanisms (supersaturation, energy dissipation and crystal size) and ran CFD simulation of hydrodynamics. They selected the compartments using the flow pattern and the energy dissipation field of simulations results. The created compartments were then checked for the homogeneity of the two other criteria conditions: supersaturation gradient and crystal size distribution.

[Kougoulos et al. \(2005\)](#) use the same construction method as [Bermingham](#) and coworkers for the same industrial system to study mixing and heat transfer. They completed the [Bermingham](#) approach including the temperature as compartment definition criteria. The compartmental model remains based on simplified hydrodynamic simulations. A complete model of particle conservation and crystallization kinetics is implemented in the compartments considered as perfectly Stirred Tanks.

To study aerobic xanthan fermentation in a stirred tank, [Laakkonen et al. \(2006a, 2006b, 2007\)](#) also used an empirical way to define compartments: relative parameters homogeneity within a compartment and constant parameter gradient along compartment frontiers. Empirically, [Laakkonen](#) also minimise the number of compartments within a flow direction to obtain a suitable model for different xanthan concentrations.

[Alex et al. \(1999, 2002\)](#) built a CFD based compartmental model considering a 'decomposition property' simulated by CFD. This criterion allows the division of the reactor into compartments and exchanges flows are calculated by mass balance. In this example of a water treatment canal reactor, the decomposition criterion is the homogeneity of fluid particles age within a compartment. Finally, each compartment is considered as a Continuous Stirred Tank Reactor.

The objective of [Bezzo et al. \(2003, 2004a\)](#) was to model bioreactors. It was the first study developing a cell aggregation method. The first step is to construct a simple multi-zonal model corresponding to a spatial division of the reactor into compartments: the division is based on the homogeneity of global parameters. Then, the hybrid multizonal/CFD model is built adding the results of CFD simulations to get the non-homogeneous flow parameters. The two models are coupled with an iterative process: the simulation results provide flow parameters to aggregate the cells corresponding to an empirical zone and the multi-zonal model

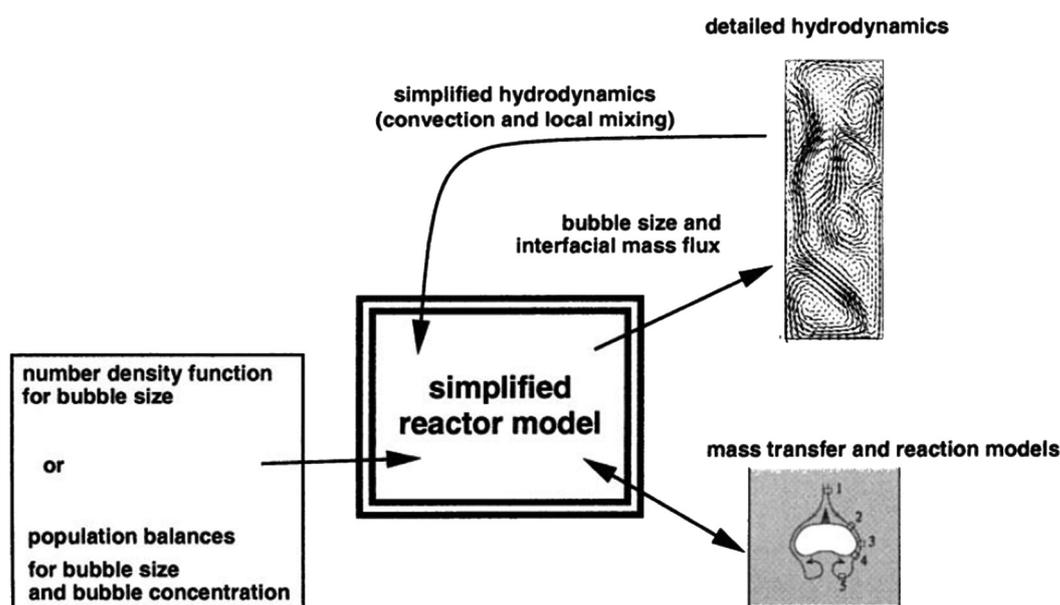


Fig. 2. Multi-scale model of [Bauer and Eigenberger \(1999\)](#).

provides physical properties parameters. The next study of [Bezzo and Macchietto \(2004b\)](#) explains how to optimise the compartment definition with a practical algorithm and how to reduce the final number of zones to simplify the model.

The [Delafosse et al. \(2010, 2014\)](#) method is based on the Bezzo and coworkers approach. The modelling of a two impeller bioreactor is done by using a first spatial compartment definition. The chosen number of compartments is important to accurately model the recirculation loops that impact the studied mixing time. This study aimed to improve the compartment construction from CFD results comparing several cell aggregation methods: the cell-by-cell method also used by Bezzo and the layer-by-layer method. This study also pointed out the importance of mean and turbulent flow-rates between the compartments. [Oner et al. \(2018\)](#) and [Norregaard et al. \(2019\)](#) used the same compartment construction method to study scale-up modelling for pharmaceutical crystallization process and analyse mixing in bioreactors.

[Pigou and Morchain \(2015\)](#) developed a model to represent biological population balance. The hydrodynamic behaviour of the reactor is based on the [Vrabel et al. \(1999, 2000, 2001\)](#) study but the constructed compartmental model was then completed with a population balance model for the population dynamics and a metabolic model for bioreactions representation.

A compartmental population balance model was developed by [Yu et al. \(2017\)](#) for a High Shear Granulation process. The heuristic construction of the compartmental model is based on the previous approaches for crystallizers. The compartment definition is done analyzing flow patterns, solid particle velocity and solid concentrations obtained by CFD simulations. Each compartment is considered as a Continuous Stirred Tank Reactor and the model is used to run a distributed macroscopic model.

3.3. Rationalisation of compartments construction

After introducing newly (at this time) CFD results in compartmental model design, the next key step in Compartmental Models development has been the rationalisation of compartments construction. The number of compartments is no longer chosen by the study author (based on previous similar studies or chosen after an iterative process of model construction), but it relies on set values of the construction criteria within the definition algorithm. The rationalisation of compartments construction allows a better adaptability of the built model, but is more complex to implement.

The [Rigopoulos and Jones \(2003\)](#) construction method follows the same scheme as the previous ones. The compartments are established in order to respect hydrodynamics conditions. A simplified CFD simulation was run and the compartments were defined following two criteria: the flow must be unidirectional along the compartments frontiers and the flow age must be homogeneous within a compartment. Then, each compartment with important dispersed phase fractions must be divided in two interconnected sub-compartments: one sub-compartment for highly dispersed phase fractions and one for the low fraction. This approach is the first one focusing on the exchange fluxes between compartments. The convective exchanges are calculated with mass balance between compartments and transfer phenomena are represented by exchange fluxes between the sub-compartments. To validate the model, a numerical RTD is simulated with the compartmental model and compared to experimental data. If the results do not match, the precision of the compartment definition must be improved.

The [Guha et al. \(2006\)](#) approach is close to the Rigopoulos and coworkers approach: simplified CFD simulations are used as bases for the compartments determination with more accurate definition criterion. The compartment definition is done investigating the velocity fields and studying the respective phenomena time scales.

If the reaction time scale is significantly higher than the convection time scale, then hydrodynamic behaviour can be considered as independent from reactions. The residence time of the liquid in a compartment must be shorter than the characteristic reaction time scale in order to avoid the creation of a concentration gradient due to chemical reactions. The convective fluxes are calculated solving mass balance equations and the turbulent fluxes are calculated using the results of turbulence fields simulations.

[Wells and Ray \(2005\)](#) used a compartmental approach to study mixing effects in complex polymerisation reactors. They first ran a simplified CFD simulation with the reaction of the autoclave reactor; they wanted a model to obtain temperature and concentration fields. The reactive simulation was run with 100,000 cells and with a strong rotational hypothesis concerning turbulent flow quantities to save computational time. The compartments were built splitting successively the initial reactor into compartments until a preset number of compartments is obtained. The compartments are divided to reduce the internal variation of temperature and the discrepancy between a compartment volume summed kinetic rate and the rate that would occur on average conditions. The reaction rates are calculated thanks to the simulated temperature and concentration fields. The construction method is applied to obtain a 100 compartment model for a stirred autoclave reactor of low-density polyethylene.

[Le Moullec et al. \(2010, 2011\)](#) used the same general scheme of compartmental model construction using CFD simulations and system partition criteria. These criteria are not based on exchange fluxes like the Rigopoulos method nor on time scales like the Guha and coworkers approach but they are based on the system physical-chemical properties such as gas fractions, turbulence dissipation (mixing intensity) and velocity fields. The empirical analysis of these properties induce the radial partition of the canal reactor in compartments. Then, the axial partition is done using results of global RTD experiments and simulations. Exchanged convective fluxes are calculated integrating simulated velocity fields and turbulent fluxes are determined analysing compartments by pairs. Finally, the Activated Sludge Model 1 model for the chemical and biological reactions of water treatment was added to the model to obtain the functional compartmental model ([Fig. 3](#)).

[Iliuta et al. \(2004, 2007\)](#) developed a compartmental approach to model bubble columns. Because of the difficulty of multiphases and multi-component problems, Iliuta used a local hydrodynamic model developed for slurry bubble column to identify the compartments. A mathematical condition is set to the obtained velocity fields and bubble distribution profiles: homogeneity of fluid velocity and gas fraction within a compartment. The compartmental model is completed with thermodynamic and kinetic models linked to the Fischer-Tropsch process.

[Gresch et al. \(2009\)](#) focuses on the turbulent exchanges in the compartmental approaches with an application to wastewater canal reactors. A first simulation of steady state hydrodynamics is run with a transport model of reactive species. The CFD cells are aggregated to obtain compartments following iso-concentration zones and homogeneous flow directions. Then, convective fluxes are calculated integrating velocity fields at the compartments frontiers. Gresch considers that the compartment model already includes inner turbulence. Then turbulent fluxes are calculated with CFD turbulent fields with a turbulence coefficient adaptation.

The [Alvarado et al. \(2012\)](#) approach is close to the Le Moullec approach: it is based on hydrodynamics simulations and numerical RTD. Moreover, the two methods are designed to model water pond reactors. The construction method can be divided into four steps: division of the system in zones, calculation of the zones volumes, division of the zones into compartments and finally calculation of the exchanges fluxes. The system division is based on the

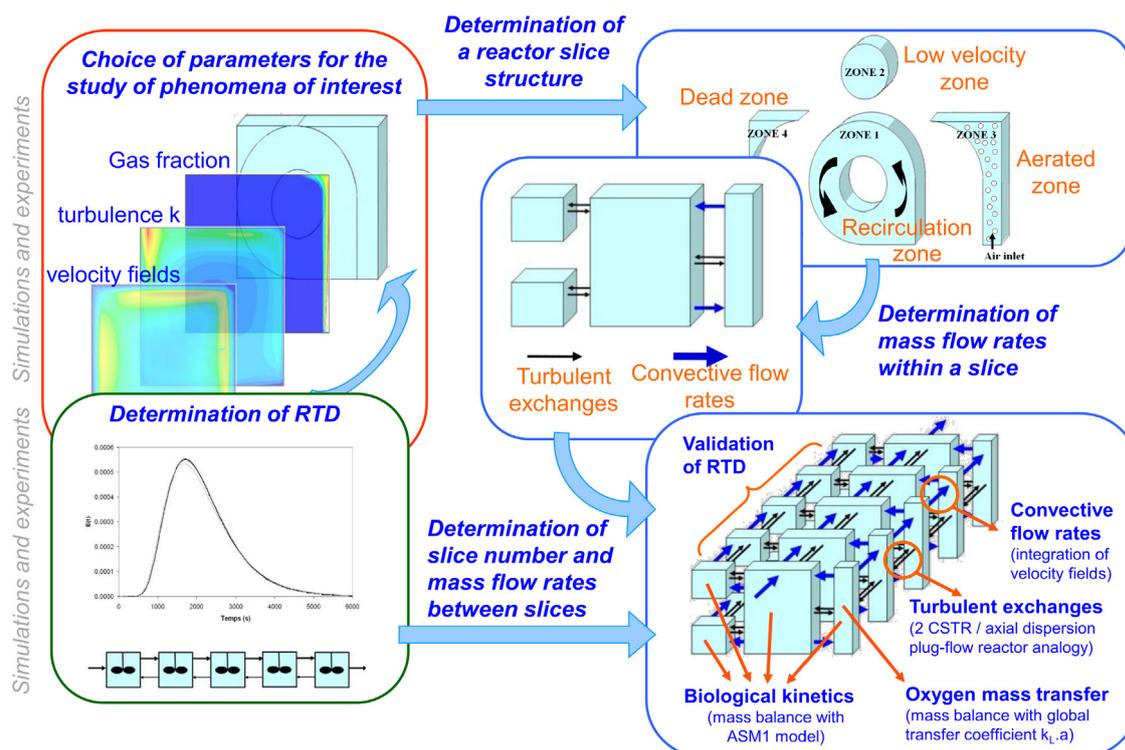


Fig. 3. Construction procedure of Le Moullec (2010) compartmental model (Le Moullec, 2008).

analysis of velocity fields obtained by CFD simulations results. The reactor is divided in three zones: the first zone is based on the dominant direction of the flow (inlet to outlet), the second zone is based on the opposite direction of the main direction (backflow) and the third zone corresponds to the low velocity recirculation loop in the centre of the reactor. The volume of each zone and its division into compartments are determined thanks to the analysis of RTD curves. The created compartments can be considered as Continuous Stirred Tank Reactors or plug flow reactors with axial dispersion depending on the nature of the RTD curves. Convective fluxes are calculated with the velocity vectors and turbulent fluxes are calculated with the turbulence characteristics of the flow.

The Laakkonen and coworkers approach was used by Alopaeus et al. (2009), Seppala et al. (2008) to model the turbulence parameters of mixing in stirred tanks. This approach was improved afterwards by Nauha and Alopaeus (2013, 2015), Nauha et al. (2018) to model algal growth in bubble column reactors. Zhao et al. (2017) formulated a compartmental model based on the Alopaeus and coworkers approach to study the gas-liquid precipitation of $\text{CO}_2 - \text{Ca}(\text{OH})_2$ system in an multiphase stirred crystallizer. The ultimate objective of this model development is to control processes for CO_2 recovery and valorisation. The model was built obtaining energy dissipation rate with CFD simulation. Different zones of the reactor were empirically identified and then divided in a chosen number of compartments. Different model refinements were tested to find the best compartment number/size ratio to ensure calculation convergence independence.

For the study of wastewater treatment plants again, Rehman (2016), Rehman et al. (2015, 2017) developed and compared different modelling ways. In this study, a full reactive CFD-biokinetics model is created to simulate the reagents and products concentration profiles in the system. The results of the simulations provide the local concentration values and allowed the calculation of the Cumulative Species Distributions representative of the reactor homogeneity also referred to as "Rehman-Nopens curves". To com-

plete the study of the WWTP reactor, a compartmental approach is introduced. The general structure is determined by following the operational characteristics of the studied reactor: aerated or not, anoxic, aerobic or anaerobic. The compartments are determined using the Oxygen concentration fields from CFD-biokinetics simulations and the Cumulative Species Distributions fields are plotted to identify the different inhomogeneous zones that needed more refinement (steep Rehman-Nopens curves indicate homogeneous zones, less steep ones indicate higher degree of heterogeneity). These construction steps are used for longitudinal and axial compartmentalisation. Finally, the convective and exchange fluxes between the compartments are calculated using CFD simulation results.

Tajsoleiman et al. (2019) developed an automatic method for compartmental model creation. They created a zoning algorithm based on the sensibility of a defined "target variable" similar to a compartment definition criterion. Threshold values are set and the algorithm creates a zone mapping of the considered system by aggregating elementary cells from preliminary CFD studies. In the paper, the method is tested with a 700 L bioreactor with an impeller. The exchanged fluxes are calculated from CFD solving mass balance equations between the different compartments.

3.4. Compartmental modelling of complex systems: hydrodynamics influenced by fast reactions

One of the most important conditions in the classical way of compartmental models construction is the independence of the fluid dynamics from the phenomena of interest. However, complex systems can be modelled by compartmental approaches even if the fluid dynamics behaviour of the system strongly depends on the kinetics, but this need to be treated carefully. In most of the cases, the compartmental approach is built using CFD simulations including a simplified kinetic model.

Due to the specificity of combustion systems, [Fichet et al. \(2010\)](#) developed a different kind of compartmental approach to model the NO_x production in gas turbines. The construction was based on the simulation of fluid dynamics coupled with a simplified kinetic model. Two criteria were used to define the compartments: chemical criteria following the concentration of NO_x production reagents and physical criteria depending on the flow pattern. Each created compartment is considered as a Continuous Stirred Tank Reactor so that complete OD Kinetic Model can be solved independently in each compartment. This method is valid as long as the NO_x formation reaction has no influence on the fluid dynamics behaviour: despite the combustion kinetics can strongly influence hydrodynamics, in this study, produced NO_x (a few ppm) did not affect the hydrodynamics. For complex system wherein physics/chemistry/biology influence hydrodynamics, the choice of compartment construction criteria is crucial.

The compartmental approach of [Du et al. \(2015\)](#) was developed to model the riser reactor of an FCC unit. First, the compartment network structure is determined based on the analysis of the flow fields directions generated by CFD simulations: 4 zones for the axial division and 3 zones for the radial division. Then, the compartment volumes and the exchange fluxes could be calculated. Subsequently, a numerical RTD simulation was run to determine the ideal reactor corresponding to each compartment. Finally, the FCC kinetic equations were added to the compartments. This work can be related with the model developed by [Kaur et al. \(2018\)](#).

3.5. Compartmental vs CFD and Systemic approach

To assess the benefits of compartmental approaches in comparison with the historical modelling approaches, several developed compartmental approaches have been compared with both full systemic and full CFD modelling of the considered systems. The comparison to experimental data or other model results can be

both useful to fit the compartmental model and validate it. Moreover, it can justify the choice of compartmental modelling approach over systemic and CFD modelling approaches.

The final compartmental model developed by [Rigopoulos](#) is validated comparing the dimensionless concentration obtained by CFD simulations to the compartment network for the studied bubble column reactor. Thanks to the fine-tuning between the compartmental model and the CFD simulations, the final difference of the concentration values is lower than 4% ([Rigopoulos and Jones, 2003](#)).

The compartmental model built in the study of [Gresch et al. \(2009\)](#) was validated by modelling a wastewater treatment pilot reactor with ozonation process. RTD in the pilot reactor ([Fig. 4 left](#)) was simulated using the compartmental model. The compartmental RTD curves were compared with RTD simulated with the full CFD model. The curves are shown in [Fig. 4 \(right\)](#). The simulated RTD curves were also compared with experimental RTD curves obtained from measurements of a tracer concentration in the pilot reactor. The curves of compartmental RTD and experimental RTD are compared in [Fig. 4 \(centre\)](#). It is possible to observe that the compartmental model curve fits with the experimental curve so it shows the validity of the compartmental approach to model reactor hydrodynamics. This comparison validates the use of compartmental modelling approach in this particular case of continuous wastewater treatment reactors with driving baffles.

In the study of [Le Moullec et al. \(2010\)](#), the compartmental model is compared both to a systemic model (ideal reactor network) and a full-CFD model ([Le Moullec et al., 2009](#)). The three approaches have an important influence on the way to model the hydrodynamic behaviour of the reactor but they are completed with the same coupled biokinetics model. The different approaches are used to model a wastewater treatment biological reactor. [Le Moullec](#) and coworkers conclude that they obtained the same information and the predictability as the CFD model with the

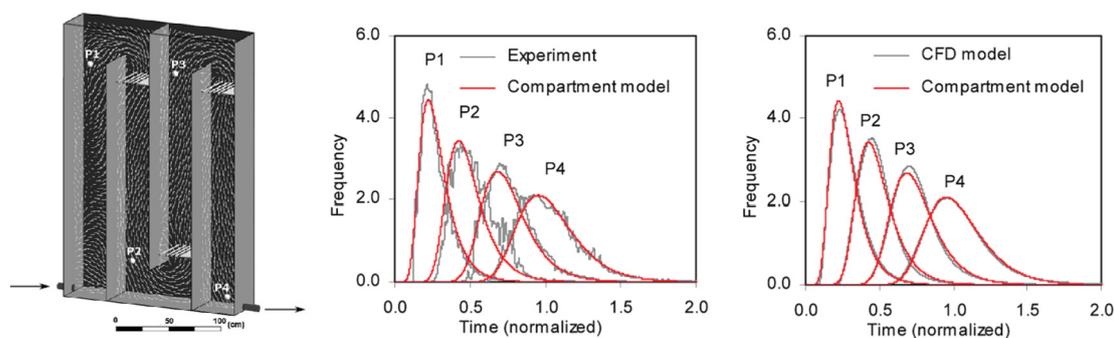


Fig. 4. RTD curves at four sampling locations in the pilot reactor. These curves are normalised based on RTD curves at the outlet ([Gresch et al., 2009](#)).

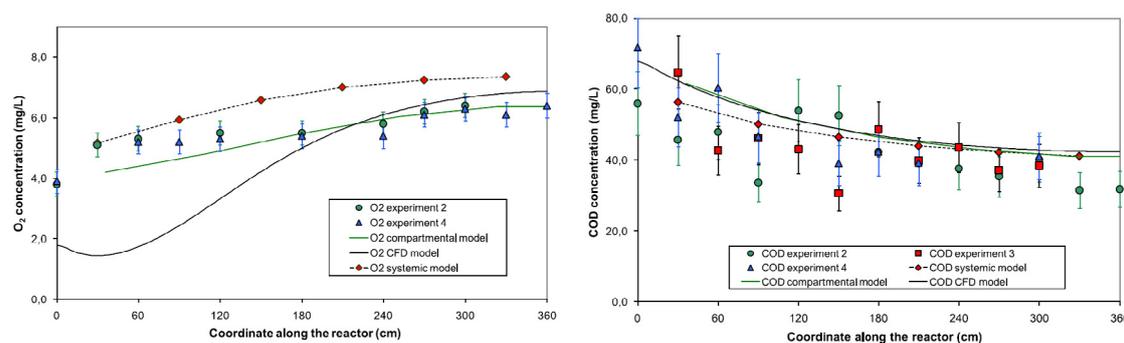


Fig. 5. Comparison of Oxygen concentrations (left) and Chemical Oxygen Demand concentrations (right) for the three modelling approaches with experimental data ([Le Moullec et al., 2011](#)).

compartmental model which is faster and simpler to develop. In a second study (Le Moulllec et al., 2011), the three different modelling approaches have been compared with experimental data and measurements (Fig. 5). The concentrations of the different species involving in the biological reactions were plotted: oxygen, COD, nitrate and ammonium concentrations. The compartmental model gives the best predictions for oxygen concentration in all the experimental phases (Fig. 5 left). The compartmental approach and the full CFD approach results are close for the prediction of COD and Nitrate concentrations. The three models are well representative of the COD concentration. CFD and Compartmental approaches has a tendency to under predict Nitrate concentrations up to 20% while the systemic approach have a tendency to over predict it up to 30%. All the models failed to represent the ammonium concentration because of the sensitivity of the biokinetic model used in the different modelling approaches. In conclusion, the compartmental approach is a good solution to model the reactor hydrodynamics but it could be enhanced with a better parameter fitting in the kinetic model.

In the Delafosse study, the developed compartmental approach is directly compared with experimental data from pilot scale reactor experiments (Delafosse et al., 2014). The experimental data are also compared with both systemic and CFD approaches modelling results. The comparison is made by plotting mixing time and tracer concentration. The conclusion is the compartmental approach is quite easier to use and less time consuming than CFD with a better prediction of concentration fields and mixing time than systemic approach: the prediction of turbulent flows is too simplified with the systemic approach.

The compartmental approach built by Alvarado et al. (2012) was developed in order to model a wastewater stabilisation pond. The results of the compartmental model were compared with a CFD simulation of the pond, three systemic models and experimental data from a full-scale pond. The systemic models consist of a network of CSTRs in series without recirculation or back-mixing flow, a network of CSTR with recirculation without back mixing flow and a CSTR network with recirculation and back mixing flow. The comparison was made by plotting the RTD curves obtained with the different models (Fig. 6) and calculating the relative error between the hydraulic models and the experimental data. The different Tank In Series models were unable to model the RTD whereas the CFD approach and the compartmental model can predict the RTD curves: the Sum of Squares Error are respectively 2.5 and 2.8 in comparison with more than 4 concerning the systemic models. The conclusion of the study is that the compartmental model can predict the hydrodynamics accurately at low computational cost which is the easiest way to include some additional models such as biokinetic models.

In the study of Du et al. (2015), the constructed compartmental model called Equivalent Reactor Network model (ERN) was challenged with a simple plug flow model and a full-CFD model. The product distribution of the cracking reaction was modelled inside

the FCC riser reactor with the three modelling approaches. The model results were compared with experimental data from a previous study. The CFD model and the ERN model predicts the mass fraction of the products well: the averaged relative error are respectively 3.2% and 4.79% and the values for each component stay below 6.09% and 6.24% respectively. In contrast, the average relative error for the piston model is 12.69% and the relative error reaches 20.73% for the gasoline mass fraction prediction. The ERN model prediction is better than the plug flow model prediction and it is pretty close to the CFD prediction with a significantly shorter computational time (more than 6 days for the CFD model and 5 seconds for the ERN model).

3.6. Compartmental model limitations

Compartmental modelling approach is suitable for the study of many complex systems with several objectives (system modelling, process control, scale-up...). However, the construction of compartmental models requires a complete study of the considered system. A large amount of information is needed to build an optimal model. Consequently, compartmental model construction of complex systems could require a strong knowledge of the related methodology.

As mentioned in the previous sections, compartmental modelling approaches are very often used when the phenomena of interest have no influence on the hydrodynamic behaviour of the system. If it is not the case, the choice of the definition criterion has to be carefully chosen, as illustrated in Section 3.4.

Moreover, as demonstrated before, some applications of compartmental models such as scale-up are possible but sometimes, the compartment structure needs to be adapted (for example for dispersed bubble flows).

3.7. Synthesis of the review

Through the review performed in the previous parts, the compartmental approaches have been inventoried. The distinction between the different approaches has been made following the evolution of the compartment definition (empirical, semi-automatic, fully automatic) and the fluid dynamics dependence on the phenomena of interest. This discrimination often follows increased model complexity as well as the chronological evolution of the compartmental models development. Some approaches result from the improvement of previous studies and express the logical evolution of models (Delafosse et al., 2014; Pigou and Morchain, 2015), some are the adaptation of previous studies to a different application (Nauha and Alopaeus, 2015), some respond to a need in some particular application (Du et al., 2015; Fichet et al., 2010).

Nevertheless, it is quite impossible to directly compare the different compartmental approaches because of the diversity of industrial applications and modelling objectives (Table 1). The next

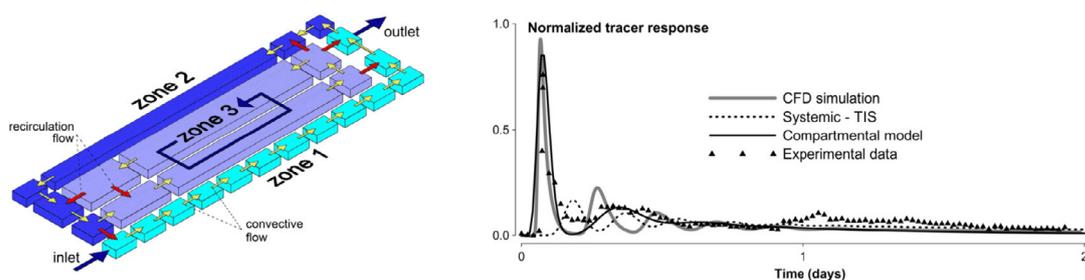


Fig. 6. Representation of the compartmental model in the (Alvarado et al., 2012) study (left) and comparison of the RTD prediction with different models (right).

Table 2
Compartment construction criteria.

| Author | Physico-chemical quantity for compartment definition | Criteria for compartment design | | | Hydrodynamic model within a compartment | | Exchanges between compartments | | Model solved within compartment |
|---|---|---------------------------------|-------------------------|---|---|-----------------|--------------------------------|-----------|--|
| | | Empirical definition | Mathematical definition | Definition method | CSTR | Reactor network | Convective (CFD) | Turbulent | |
| Irizarry-Rivera and Seider (1997a, b, 2012) | Velocity fields | X | | Chosen number of compartments | X | | X | | Crystal growth model |
| Birmingham et al. (1998) | Supersaturation, Energy dissipation rate, Crystal size distribution | | X | Negligible gradient within a compartment | X | | X | | Kinetic model of crystallization |
| Vrabel et al. (1999, 2000, 2001) | Velocity fields and gas fraction | X | | Chosen number of compartments | X | | X | | Multi impeller mixing model |
| Bauer and Eigenberger (1999, 2001) | Velocity fields | X | | Observation of flow fields | X | | X | | Liquid gas mass transfer model |
| Alex et al. (1999, 2002) | Particle age | | X | Homogeneous particle age within a compartment | X | | X | | activated sludge reactor kinetic model |
| Bezzo et al. (2000, 2003); Bezzo and Macchietto (2004a,b) | / | X | | Chosen number of compartments | X | | X | | xanthan kinetic model and mass transfer |
| Alexopoulos et al. (2002) | / | X | | Chosen number of compartments | X | | X | | Liquid/gas mass transfer |
| Rigopoulos and Jones (2003) | Velocity fields | | X | Constant flow direction and homogeneous velocity intensity | X | | X | X | parallel-consecutive CO ₂ kinetic model and mass transfer |
| Wells and Ray (2005) | Temperature, kinetic rate | | X | Reduction of criteria variation within a compartment, reduction of kinetic rate discrepancy | X | | X | | kinetic of homopolymerisation of Ethylene |
| Kougoules et al. (2005) | Velocity fields, turbulence, temperature | | X | Negligible gradient within a compartment | X | | X | | Crystallization kinetic model and heat transfer |
| Guha et al. (2006) | Residence time, reaction time | | X | Residence time inferior to characteristic reaction time within a compartment | X | | X | X | First and second order kinetic |
| Laakkonen et al. (2006b,a, 2007) | Velocity fields | | X | Same flow direction | X | | X | X | xanthan kinetic model |
| Iliuta et al. (2004, 2007) | gas fraction, bubble size, gas velocity vector | | X | Homogeneous gas velocity and gas fraction | X | | X | | Thermodynamic model and Fisher-Tropsch kinetics |
| Le Moullec et al. (2008, 2009, 2010, 2011); Le Moullec (2008) | gas fraction, Turbulence fields, Velocity fields, RTD | X | | Visual observation of criteria homogeneity, RTD analysis for axial division | X | | X | X | ASM1 model |
| Gresch et al. (2009) | Tracer concentration, Velocity fields | X | | Chosen number of compartments, homogeneity of criteria within each compartment | X | | X | X | Ozonation process kinetics |
| Fichet et al. (2010) | Velocity fields, concentrations | | X | Homogeneity of criteria in each compartment | X | | X | | complete LWP kinetic model |
| Delafosse et al. (2010, 2014) | / | X | | Chosen number of compartments | X | | X | X | Inert tracer |
| Alvarado et al. (2012) | Velocity fields, RTD | X | | Visual observation of criteria homogeneity | | X | X | X | ASM1 model |
| Nauha and Alopaeus (2013, 2015) | turbulent intensity, pressure, light intensity | X | | Chosen number of compartments | X | | X | X | Photosynthetic Factory model |
| Bashiri et al. (2014, 2016) | Velocity fields, turbulence | X | | Chosen number of compartments | X | | X | X | / |
| Pigou and Morchain (2015) | Velocity fields, turbulence | X | | Chosen number of compartments | X | | X | | biokinetics model and population balance |
| Du et al. (2015) | Velocity fields, volume fraction | | X | Homogeneity of criteria in each compartment | | X | X | | Complete FCC kinetic model |
| Rehman (2016) | Velocity fields, Cumulative Species Distributions, oxygen concentration | X | | Visual observation of criteria homogeneity | X | | X | | ASM1 model |

(continued on next page)

Table 2 (continued)

| Author | Physico-chemical quantity for compartment definition | Criteria for compartment design | | | Hydrodynamic model within a compartment | | Exchanges between compartments | | Model solved within compartment |
|--|--|---------------------------------|-------------------------|---|---|-----------------|--------------------------------|-----------|---|
| | | Empirical definition | Mathematical definition | Definition method | CSTR | Reactor network | Convective (CFD) | Turbulent | |
| Zhao et al. (2017) | energy dissipation | X | | Chosen number of compartments | X | | X | | precipitation kinetics, population balance models |
| Yu et al. (2017) | Velocity fields | X | | Chosen number of compartments | X | | X | | Population balance model |
| Oner et al. (2018), Norregaard et al. (2019) | Velocity fields | | X | Homogeneity of criteria in each compartment | X | | X | | Batch cooling crystallization model |
| Tajsoleiman et al. (2019) | Velocity fields | | X | Homogeneity of criteria in each compartment | X | | X | | / |

part analyses the different procedures for compartmental models construction, their validation and justifications compared to the existing approaches and the perspectives for the future of compartmental models development.

4. Analyses

In reviewed studies, the developed compartmental approaches were validated in different ways and compared with other modelling approaches. Furthermore, all the compartmental approaches have their own specificity particularly concerning the compartment construction criteria. Even though, it could be possible to propose a unified definition for compartmental modelling in Chemical Engineering by comparing the compartmental approaches with other modelling approaches and analyzing the compartmental approaches with one another.

4.1. Model construction: construction criteria and fluxes calculation

Each compartmental model relies on a common general pattern, but has its own construction schemes concerning the definition criteria. The compartment construction methods for each compartmental approach are detailed in Table 2.

Most compartmental approaches use the velocity fields as the main criterion for the compartments definition. As a consequence, validated CFD models are the cornerstone of a modern, compartmental modelling strategy in order to have the best hydrodynamic representativeness. Compartments are built around homogeneous velocity zone and an abrupt change in the gradient of the velocity field is the primary basis for determining the boundary between compartments.

However, the velocity fields study is often coupled with another parameter for the compartment definition. This second parameter must represent the phenomena of interest in the study. For example, with two-phase flow gas-liquid systems, the compartment definition is based on the dispersed phase fraction (Du et al., 2015; Iliuta et al., 2004; Le Moullec et al., 2010; Vrabel et al., 1999); for crystallization compartmental models, the construction parameter is based on the crystal size distribution (directly or indirectly linked with shear-stress that impacts coalescence and breakage) (Irizarry-Rivera and Seider, 1997a,b). The study of characteristic times can be an important preliminary work to determine the most pertinent criteria for the compartment definition. For example, Guha et al. (2006) compared the hydrodynamic time scale with the chemical phenomena time scale through the comparison between residence time and reaction time to justify the independence of the studied chemical phenomena from the hydrodynamic behaviour. The compartments were built small enough to ensure the residence time remains shorter than the chemical reaction

time. For reactive systems, the concentration of the species can be chosen as compartments definition criteria (Fichet et al., 2010; Rehman et al., 2015). The criterion must be the concentration of the reagent or the product of the fastest reaction influencing the chemical reaction of interest (Rehman et al., 2017; Reuss and Jenne, 1993). The choice of concentration as the definition parameter can be a problem in some complex cases because the initial CFD simulation must include a complete or a simplified kinetic model.

Complexity of the geometry meshing and CFD models are different according to the various approaches. CFD simulations can be run on unsteady or steady state regime depending on the wanted complexity. The flow can be simulated with all the coupled physico-chemical phenomena (Du et al., 2015; Laakkonen et al., 2006b; Rehman et al., 2015), with simplified kinetic model (Delafosse et al., 2010; Fichet et al., 2010; Gresch et al., 2009; Pigou and Morchain, 2015) or only with the fluid mechanic equations without any coupled phenomenon (Alexopoulos et al., 2002; Bauer and Eigenberger, 2001; Bermingham et al., 1998; Guha et al., 2006; Le Moullec et al., 2010). The choice of the complexity level of the CFD is driven by the system characteristics, by the influence of the phenomena on the hydrodynamics and foremost by the goal of the study. If the independence between kinetics and hydrodynamics is demonstrated, the hydrodynamic CFD simulations can be run without coupling models; if the studied phenomenon has an influence on hydrodynamic parameters, this phenomenon must be taken into account for the hydrodynamic characterisation of the model. The preliminary CFD simulations can also be run in steady or unsteady state depending on the purpose of the model (investigation on the transient mode or on the common operation state) and the system behaviour over time (important variations that need process control). If too heavy, one can also run multiple steady states and then interpolate between compartments' volumes and exchange rates (De Mulder et al., 2018), building a so-called surrogate model. Anyway, the complexity of the model needed to define the compartmental model should be properly assessed, in the end the purpose of compartment modelling is to produce accurate model of complex system with less computational requirement but with good representation of important phenomena linked to the model objectives. Some systems with too close coupling between phenomena of interest and hydrodynamics could be difficult to model with today's compartmental approaches. By the way, the compartmental models of these complex systems have to rely on strong CFD coupled simulations and the gain of compartmental modelling is potentially smaller. The choice of the modelling way could depend on this.

The approaches can be divided into two groups based on their compartment definition methods: an empirical definition or a mathematical definition. For the empirical definition, the number

of compartments is chosen by observing the system geometry and the CFD results. The construction parameters are simulated and the compartments are visually defined by studying the obtained state variables fields. The refinement of the model is chosen beforehand. The mathematical definition is also based on the CFD results and the post processing is done with an algorithm that divides the system volume following given conditions on the construction criteria. For a given construction criterion, the mathematical conditions can be the homogeneity of the value within a compartment (e.g. concentrations, turbulence dissipation...), a negligible internal gradient, constant flow direction along a compartment frontier or a comparison between characteristic times. The refinement of the model is chosen by setting the cut values in the construction scheme or algorithm.

The defined construction criterion and the compartment construction method (empirical or mathematical) allow the determination of the compartments frontiers and volume. The gathering of the local information corresponding to CFD mesh cell values to obtain unified information within a compartment can be done by two different methods (Haag et al., 2018): the method of successive volume division or the method of CFD cells aggregation (Bezzo and Macchietto, 2004a,b; Delafosse et al., 2010; Du et al., 2015). The first one is the most used in the compartment approaches, the division can be empirical or numerical. The second one consists in identifying the cells corresponding to the centres of the future compartments and aggregate all the adjacent cells as long as the compartments construction conditions are checked. Given the important number of CFD cells, the aggregating cells method is always automated with a construction algorithm; various cell-aggregating algorithms are used and compared in Delafosse et al. (2010).

In most of the cases, the compartments are considered as Continuous Stirred-Tank Reactor and their hydrodynamics behaviour is perfectly mixed. Only the approaches developed by Alvarado et al. (2012) and Du et al. (2015) model each compartment as a cascade reactor network based on the construction criterion. Also, compartments could be considered as plug flow reactors for example if there are some by-pass flows in the system.

To complete the compartmental model construction, the fluxes between the compartments are calculated. The exchange fluxes can be divided into two fluxes with different nature: the convective fluxes that represent the mean fluid flow circulation and the turbulent fluxes generated by the turbulent structures within the fluid (Haag et al., 2018). The calculation of the convective fluxes is essential in all the compartmental models and it is done by integrating the flow field from CFD simulations results on the surface between two adjacent compartments. The calculation of the turbulent fluxes is much more complicated. Some compartmental approaches do not take the turbulent flux generations between the compartments into account, they only consider the convective flow as the modelling of all the fluid exchanges between the compartments. Guha et al. (2006) was the first to introduce the turbulent flow calculation by considering a turbulent diffusion coefficient calculated from the turbulence parameters simulated by CFD. The turbulent diffusion coefficient method was then used in numerous compartmental approaches (Alvarado et al., 2012; Bashiri et al., 2014; Gresch et al., 2009; Pigou and Morchain, 2015). Le Moullec et al. (2010) used another method to calculate turbulent flows, he considered an analogy between plug flow reactor with axial dispersion (Schmidt number calculation) and CSTR in series with back mixing flows (Potier et al., 2005).

4.2. Compartmental Models validation

All the developed models must be validated in order to be effective. As demonstrated before, compartmental models development

involve different modelling ways to construct the model structure. All the tools and methods used for compartmental model construction have to be validated too. In most of the cases, the system division into compartments is based on complete or simplified CFD simulations (following the construction criterion). The CFD simulations must be validated first for the compartmental model structure to be correct. The models validation needs complementary sets of data from other approaches (for example, experimental measurements can validate CFD simulations) or literature validated models from previous studies in similar cases. However, some elementary models are already verified and don't need further validation (e.g. well known velocity profiles in particular geometries); they can be used for compartmental models construction without intermediate validation.

In the most part of the cases shown in the review section, the compartmental models results are validated with proper experimental sets of data (Alvarado et al., 2012; Delafosse et al., 2010; Gresch et al., 2009; Kagoshima and Mann, 2006; Lainez-Aguirre et al., 2017; Le Moullec et al., 2011; Vrabel et al., 2000; Yu et al., 2017; Zhao et al., 2017). Sometimes, the results are compared with previous studies on similar systems (Nauha and Alopaeus, 2013, 2015).

4.3. Advantages of Compartmental Modelling

Local measurements and simulations of fluid dynamics provide data for various parameters of the flow pattern (e.g. local velocities, viscosity, phase fractions, temperature, etc.). These local data characterize the system geometry, operating conditions and provide the actual mapping of the system. Local characterisation from CFD simulations or experiments are necessary to build the compartmental models structure. But experimental local approaches on industrial systems remains costly: to obtain a complete experimental characterisation, an important experimental setup is needed to get enough experimental values for a consistent mapping. Moreover, invasive probes can perturb the fluid dynamics behaviour of the system. In the same way, complete CFD simulations (hydrodynamics coupled with all the phenomena of interest and their dependencies) demand an important calculation time especially when all the coupling phenomena are simulated or when the system size becomes too important. In addition, local CFD simulations require a strong knowledge of the considered equations and models to obtain a meaningful result. In addition, compartmental models allow the implementation of more accurate physical models: for example, CFD multiphase simulations often assume incompressible gas phases whereas incompressible gas models can be patched in compartmental models.

That's why, in most cases, a simplified previous simulation of uncoupled fluid dynamics is done and the compartment network is designed analysing fluid property fields. Thus, the compartmental approaches gather information from simulated fluid dynamics, mass transfer models and global balances (see Fig. 7)). Then, connections and exchanges between the compartments within the network are calculated with simulation results and experimental data. Finally, each compartment is a fully independent zone with its proper model depending on the phenomena of interests. The aggregation of systemic and local data provides a complete model of a multi-phenomenon system with much shorter calculation time than a complete CFD simulation (Le Moullec et al., 2010). The compartmental approach is thus easier to implement for full-scale reactors (Alvarado et al., 2012) and the system model is fully predictable for example to reactor design (Birmingham et al., 1998, 1999) or scale-up (Bashiri et al., 2014; Oner et al., 2018). Compartmental models could be performed in operating plants as process control tools (Irizarry-Rivera and Seider, 1997a, b), flowsheet simulations or parameter fitting: the repetition of

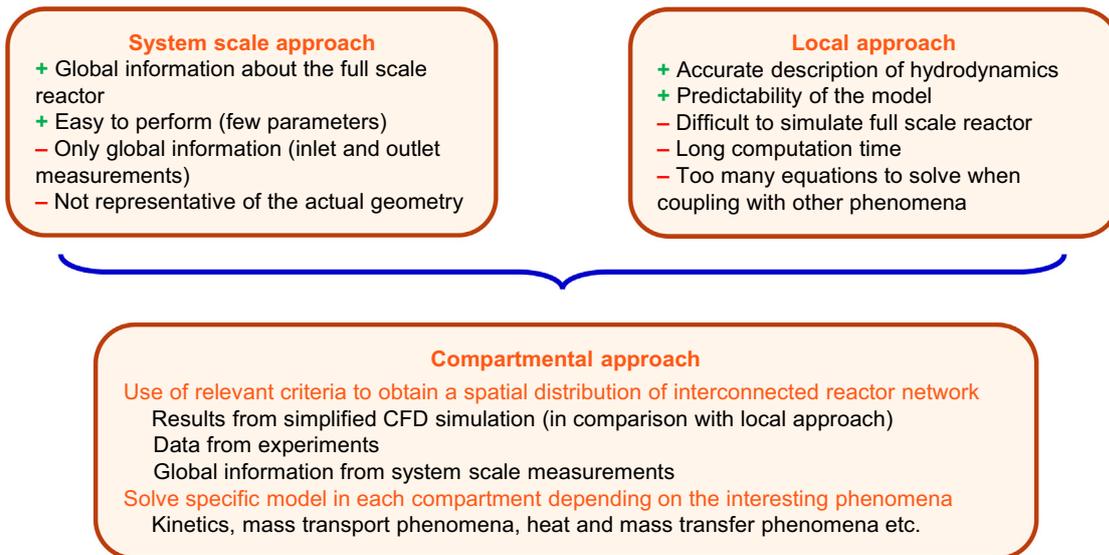


Fig. 7. Benefits of compartmental approach.

model calculation in these cases makes CFD simulations hardly operative.

Compartment approaches allow the separation of phenomena modelling: the fluid dynamics behaviour of the system is simulated and a previous model is used to build the compartment structure and models of other phenomena are added thereupon. That is why compartmental approach simulation is much easier to perform than a coupled CFD simulation. The decoupling approach implies that phenomena of interest must not have influence on the system fluid dynamics. The more coupled the fluid dynamics are with studied phenomena, the more complex is the model construction; for example in fermentation processes, rheology is changing when biomass grows modifying the fluid hydrodynamic behaviour (Nunez-Ramirez et al., 2012). An overview of the different modelling approaches for a Flue Gas Desulfurisation unit is shown in Fig. 8.

Compartmental models result to be good modelling approaches for many objectives (e.g. calibration, sensitivity analysis, scenario analysis, scale-up...) but for now, compartmental approaches development could remain insufficient to understand complex processes and perform reactor advanced design.

4.4. Proposition of a unified definition of compartmental modelling

Historically, names and definitions of both systemic and compartment model are strongly linked. At the beginning of systemic approaches in Chemical Engineering, Ideal Reactor Network models were often called Compartment Network Model (Levenspiel, 1998) meanwhile Compartmental Models were often called network-of-zones models (Kagoshima and Mann, 2006) or multi-block models (Seppala et al., 2008). Also, various works tried to simplify existing models dividing the studied system in several

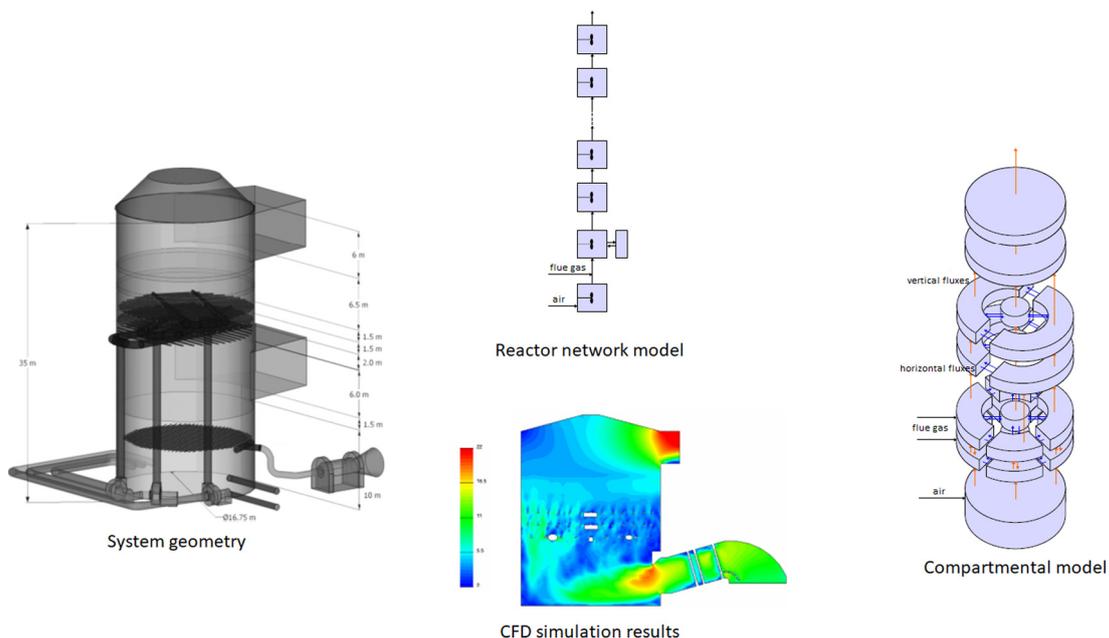


Fig. 8. Examples of different modelling approaches applied to a Flue Gas Desulfurisation unit (adapted from (Neveux and Le Moullec, 2011)).

zones called compartments: for separation column processes, the dynamic low order models can be reduced by gathering several elements with the same behaviour into one “compartment” to reduce the number of differential equations (Benallou et al., 1986; Khowinij et al., 2005; Peng et al., 2012). The created “compartments” only have a functional coherence considering the initial model. These dynamic compartmental models are mostly similar to systemic models. In the pharmaceutical field, compartmental pharmacokinetic models can be used to model and predict drug transit and absorption inside the human body (Lainez-Aguirre et al., 2017; Pavarula and Achenie, 2013; Yu and Amidon, 1999). Again, the compartments used in these models are functional compartments considering the drug absorption model it is based on.

On the other hand, compartmental models are often named “reactors model” or “multi-zonal model”. Nowadays, the distinction between Ideal Reactor Network models and Compartmental models is clear. In our case, the differences have been explained in the previous sections and that is why it seems important to propose a unified definition of what a compartmental model actually is.

4.4.1. Unified definition of compartmental modelling

Compartmental modelling approaches are often mistaken for systemic approaches due to their reactor network structure. But, the systemic reactor network construction is solely based on global information whereas the compartment network definition is based both on local and system scale information.

A compartmental model is a representation of a complex system based on the division of this system in functional compartments. It is based on a multi-scale description of the system fluid dynamics behaviour defining the system as a network of compartments (often CSTR, plug flow, reactor networks...). This compartment network is representative of the system geometry and spatial distributions of occurring phenomena: fluid dynamics, chemical reactions, biological reactions, transport phenomena, transfer phenomena, shear-induced physical processes (e.g. agglomeration, breakage and coalescence), etc. The compartment boundaries definition is based on the homogeneity of selected state variables set as construction criteria. The choice of these criteria depends on studied phenomena: homogeneity of reagent concentration to study (bio) chemical reactions, homogeneity for turbulence intensity to study mixing quality, the same flow rate direction to study transport phenomena, etc.

Compartment aggregate local information about fluid dynamics from CFD simulations and local measurements. They also use data from system scale calculation and system scale experimental characterisations. Convection and turbulent exchange fluxes between compartments are calculated for the complete network structures. Each compartment can be implemented with a complementary model according to their specificity within the studied system (e.g. ASM1 for water treatment, gas-liquid transfer and algal development model). For each compartment, a dedicated set of sub-model representing physical phenomena taking place in this compartment can be selected. This set of sub-model can be different from one compartment to the other.

4.4.2. Construction methodology for compartmental models

Based on the review and the analysis of the different compartmental approaches, it is possible to propose a general scheme of compartmental models construction (Fig. 9).

This scheme can be divided in 6 main steps: the context of the study and the gathering of the system information, the preliminary study of the system, tools and methods available for the model construction, the compartment definition, the flux calculations and the model validation.

- Problem definition.

The definition of the context of the study and the gathering of the system information are the first steps to identify the purpose of the model construction and the expected results. The modelling objectives influence the construction of the model: reactor design, process control, systems scale-up or better prediction for an existing process (increased model predictive power and reduced uncertainty for better decisions). Simultaneously, it is necessary to collect all the information concerning the system geometry and the process operation: local geometry, system parts and components, volume or occurring phenomena.

- Preliminary study.

Then, the determination of the compartment construction criterion ensue from the first step. The determination takes into account phenomena of interest, the influence of the fluid dynamics on this phenomenon, the comparison of the different time scales and the available information about the system. The construction criterion can be merely fluid mechanic and transport phenomena related (e.g. velocity vectors, turbulence intensity, phase fraction...) or it can take into account hydrodynamics with coupled phenomena such as (bio) chemical reactions (e.g. reactant or product concentration, crystal size in crystallization processes, reaction time...).

- Tools and methods.

Once the choice has been made, different studies of the system are carried to obtain the most complete characterisation of the system fluid dynamics. CFD simulations remain the most precise tool to get some local information (with reaction, most of the time without), but it can be complemented with experimental local experiments. The system scale information comes from the system balances calculation or experimental data (e.g. RTD tracer, global transfer measurements, etc.). More complex CFD simulations can be considered depending on the chosen compartment construction criterion. CFD simulations must be validated on their own to provide robust information to compartmental model construction.

- Model construction and flux calculation.

All the obtained local information is compiled and analysed to get an empirical definition of the compartments or an algorithm with given construction criterion values is used to divide the system into a compartment reactor network. The calculation of the exchanged fluxes is generally done by integrating the flow field from CFD simulations results on the surface between two adjacent compartments. The system scale data are used to complete the fluxes calculation and add system scale information to the model. This fluid dynamics model can be enhanced with all the other models to complete the system definition (e.g. heat or mass transfer model, kinetic model, bio-kinetic model).

- Compartmental model validation.

The designed model could be validated with other data from previous study concerning the same kind of system, from another set of experimental data or from another set of full coupled CFD simulations results. If the validation tests fail, the compartment definition could be reconsidered, the correction can be minor concerning the refinement of the model or the cut value of the construction criterion. If the correction is more important, the determination criteria itself can be challenged.

5. Critical reflections and future challenges

Compartmental modelling approaches have, among others, emerged in order to tackle new problems and will continue to evolve, keeping its core principles as described in precedent section, to handle new challenges. This section highlights these main foreseen evolution pathways.

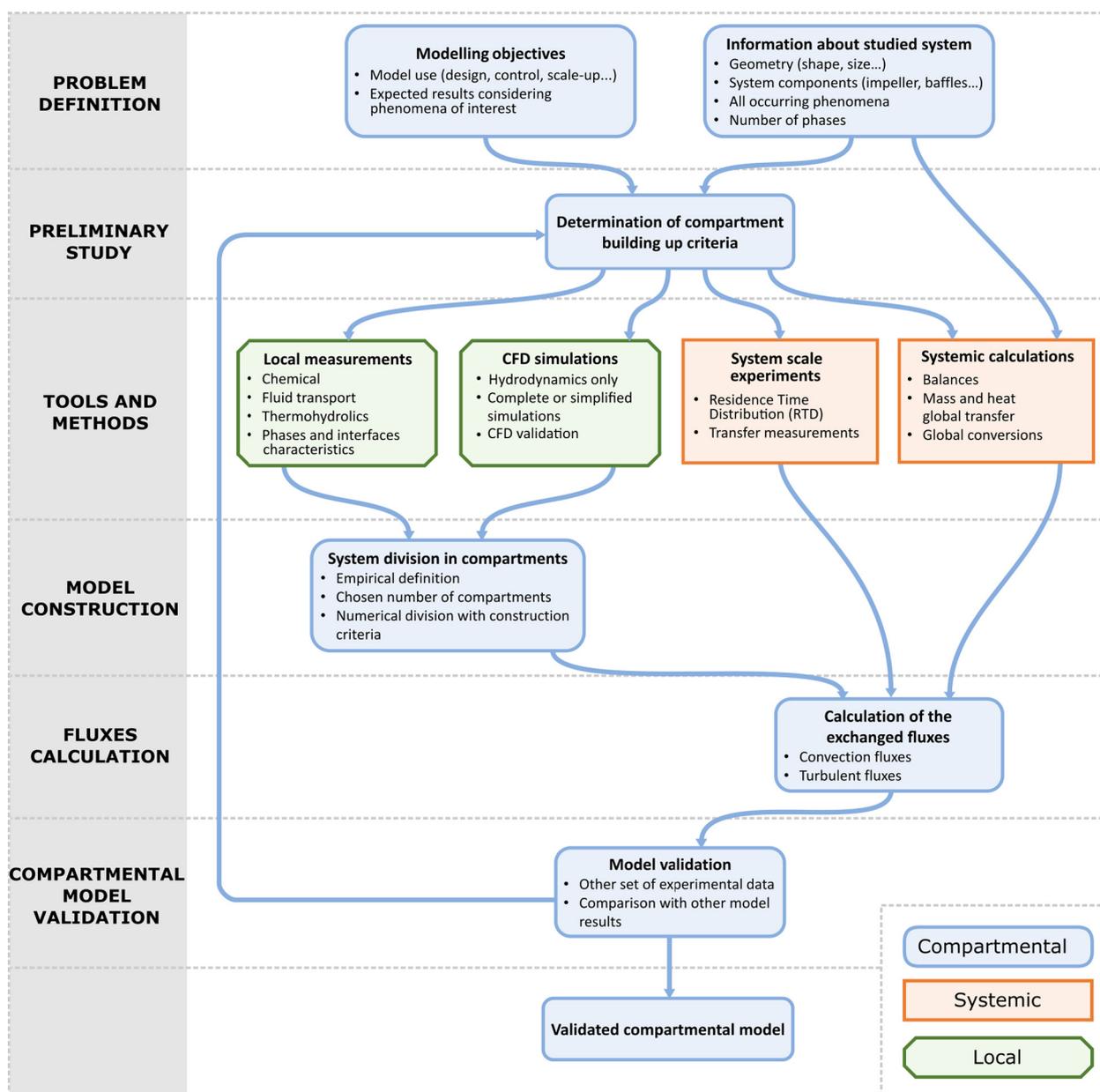


Fig. 9. Proposed methodology for compartmental models construction.

5.1. Improvement in compartmental network generation

5.1.1. Automation of compartmental network generation

As seen in the evolution of compartmental model in the literature, there is a clear trend to reduce the arbitrary during compartment network generation. Efforts has been put to define quantified compartment boundary selection criteria that could be used automatically or semi-automatically to define compartment network structure. Often these approaches generate models with very high number of compartments with very uneven volume distribution, this limiting the practicability of such approaches.

To solve this issue, compartmental network automation needs to come with mathematical techniques to adjust the compartmental network and/or exchange fluxes in order to produce efficient models that reach the main objectives of the study. To that extent, development of compartmental modelling could benefit from expe-

rience from other fields such as Process Intensification (PI) of Process Systems Engineering (PSE), where advanced optimisation techniques are employed to design a process – e.g. choose a set of operations (transformations of mass and energy), interconnected in a network (flowsheet) together with design and operating parameters (Preisig, 2010). For instance, Baur et al. (2001) used a generic non-equilibrium cell (functional model) that can be assembled to simulate a whole reactive distillation tray column. In process intensification, Demirel et al. (2017) and Li et al. (2018) used a generic block superstructure in which each block can implement various phenomena, leading to a panel of process configurations depending on the design problem and authorized connections between neighboring blocks. The automation criteria must take into account threshold values with a physical meaning according to the phenomena of interest. The number of compartments must be high enough to ensure the model precision but have to be

balanced considering the calculation time of the model. A wise choice of compartment number ensures saving calculation time for example when a matrix-based resolution method is used.

As previously mentioned in Section 3.3, [Tajsoleiman et al. \(2019\)](#), proposed an automatic method for compartmental model construction. In the initialization step, criteria of model construction and the tolerance for each criterion are chosen. Then, the zoning algorithm aggregates cells from the CFD mesh according to the preset parameters. The compartments are determined by gathering the different zone maps established for the different criteria. Finally, the flows between compartments are identified and calculated.

The main difference with compartmental modelling is that networks and exchanged information are mainly based on functional objectives instead of spatial distribution, employed mathematical techniques could nevertheless be transposed for compartment modelling. Notwithstanding the potential hazards, the conceivable advantages are significant. As well as simulating new phenomena from first principles in a practical time-frame, a compartmental model can also be used as the precursor to a more advanced modelling framework. Knowledge of the system can be gained rapidly with a well-designed compartmental model, and this can feed forward into higher resolution modelling, safe in the knowledge that the extra investment in computational resources is likely to be worth it.

Another new theoretical approach, based on classical approaches in chemical engineering, can be also envisaged to help to automate compartmental model generation by calculation of local non-dimensional numbers. For example, the Reynolds number to locally quantify turbulence and mixing level, the Peclet number to quantify a number of compartments in series, the Hatta modulus to identify the type of compartments in polyphasic reactors (Hatta modulus gives information about the location of the reaction: in the liquid bulk, or at the interface, or both). The use of local non-dimensional numbers would be a keystone for the construction of self-adaptive compartmental models, described in the following section. An automatic calculation of such numbers would allow to determine the relative influence of phenomena and adapt the compartments structure with the fluctuation of operating conditions, such as hydrodynamics. For example, the Thiele Modulus characterizes the relative importance of catalytic reaction rate against diffusion rate. In compartmental models for porous catalyst, the Thiele Modulus calculation allows the identification of the catalyst regime (reaction regime or diffusion regime) and could influence the compartment construction automation.

5.1.2. Self-adapting dynamic compartmental network

In compartment model construction, a key assumption regarding the compartment boundary selection is implicitly that it does not affect nor be affected by any physical or chemical disturbance (e.g. modification of system conditions, system geometry or fluid properties). Nevertheless, when modelling long-term dynamic effects that could induce a change in the flow field over time, the system could not always be accurately simulated by a static distribution of compartment. Compartment boundaries evolution are difficult to know conclusively in advance, as a consequence, more complex dynamic definition of boundaries could be considered, such as:

- Using variable compartmental boundary locations within a long-term simulation, based on information derived from several, discrete velocity fields generated by a series of steady-state CFD models. This approach needs a fully automatized compartment boundaries definition, that could be based on analysis of local non-dimensional numbers, as well as specific rule to decide to update the compartmental network.

- Using an adaptive flow rate between collateral compartments in a compartment network that envelop the highest number of compartment required: increasing the flow rate between them will increase the mixing rate. At a sufficient high flow rate, the two compartments will work as a single CSTR. This method was used by [Potier et al. \(2005\)](#) with a model of cascade of CSTRs with back-mixing; its global hydrodynamics depends on the back-mixing flow rate between CSTRs.

Finally, for both discussed proposition and as stated in the section 5.1.1., both automating the compartmental boundary selection criteria and substantially increasing the number of compartments that would be acceptable in a compartmental model (e.g. into the hundreds), reduces the probability that a poorly chosen compartment selection process would affect the potential accuracy of any future model. This approach is a middle ground between a too simple network that gives poor representation and a too compartment heavy network that cripples the advantage of compartmental model over fully local approaches.

5.2. New application fields for compartmental modelling

Compartmental modelling is suitable to handle complex modelling scenarios while requiring low computing power. Thanks to this ability, compartmental modelling is a solution to model and simulate systems that have at least one these three characteristics: very large, high complexity, or if a rapid solution is mandatory while using limited computation power. Then, three kinds of new applications can be envisaged: study of new large systems, study of more complex phenomena and application with new objectives.

5.2.1. Compartmental modelling for large systems

The future of compartmental modelling approach lies in new phenomena studies and new applications for classical industrial processes. Moreover, compartmental approaches are strong multi-scale modelling tools so these approaches can be adapted to the largest industrial processes and huge natural milieus. Compartmental modelling with its low computing power is suitable to simulate very large processes and systems design by humans, such as power plants (e.g. cooling circuits [Jourdan et al. \(2017\)](#)), constructed wetlands ([Alvarado et al., 2012](#)), hydroelectric dams, fish ladders, cities heat networks, air circulation in cities, etc.

By extension, compartmental modelling could be used to simulate natural milieus: rivers (e.g. self-purification processes, aeration ([Khdhiri et al., 2014](#))), lakes (e.g. lack of dissolve oxygen, lake turnover), oceans (e.g. evolution of carbon dioxide dissolution and distribution, thermohaline circulation), atmosphere (e.g. evolution of pollution, pollutant plums, atmospheric circulation), hyporheic zones (e.g. modelling of pollutant removal in biofilm), estuaries (e.g. nitrogen pollution, sediment), planets (e.g. simple models to study evolution over very long time), catchment basins, etc. For such systems, information from several methods are available, as in chemical engineering field. For instance, pollutant dispersion can be modelled using data from full-scale experiments, physical models of CFD ([Lateb et al., 2016](#)). The compartmental approach can therefore be well-suited to aggregate various experimental and numerical information without tedious computational effort. In the same way, compartmental model could be the perfect approach to model overall biochemical processes such as those happening in the body.

5.2.2. Compartmental modelling for more complex systems

This article already pointed out that compartmental approaches can be suitable for numerous phenomena. However, some complex

phenomena have not yet been studied and compartmental modelling could be an effective modelling approach for these new, often tricky, cases. The following new applications could be considered as especially promising:

- A particular stake in compartmental modelling is the development of new approach allowing simulating processes where the transformation (reaction) has an influence on hydrodynamics: volume expansion, viscosity change, transient state, etc. The difficulty is the change in the structure of the compartment network. Envisaged solutions were presented in the previous Section 5.1. Compartmental modelling could then be used for example in agro-food process, polymer production, polymerisation (injection moulding), combustion in transient state, safety studies (explosion), 3D printing, etc.
- Compartmental modelling can be also suitable for multi-scale phenomena simulations (Li et al., 1988; Villermaux, 1993, 1995; Sapre and Katzer, 1995); the particular advantage being the possibility to group in only one compartment model (then one software) all the phenomena based not only on space distribution but also scale (Ge et al., 2007; Dudukovic, 2010; Li et al., 2010). It appears a new approach: multi scale-compartmental modelling. It was mentioned by Bauer and Eigenberger (1999, 2001) as "multi scale zone model" but it remains a full perspective for achieved compartmental model. Most of chemical engineering processes could be concerned. For example, in wastewater treatment, reactions coupled with diffusion in flocs or biofilms could be simulated at the same time with other phenomena at the reactor scale.

At the root of compartmental modelling is the study of mixing in reaction vessel, introduction of multi-scale compartmental modelling could also open possible ways for better integration of macro- and micro-mixing in modelling and simulation. Also, the scope of phenomenon could be expanded with, for example, reactions at solid surfaces or interfaces that have, today, not been integrated in compartmental modelling. New development using these approaches would allow treating complex polyphasic and catalytic reactions; most probably in a multi-scale approach.

5.2.3. New applications of compartmental modelling with new objectives

Compartmental approaches have been used in numerous applications in Chemical Engineering. In the light of this experience, compartmental modelling range can be extended to more and more domains and objectives:

- Scale up/process design. There is compatibility between compartmental modelling and some new approaches of process design (Bashiri et al., 2016; Oner et al., 2018). Then, using Compartmental modelling would favor fast exploration of different scenarios and help to rapidly make choice for process design. In the future, for given processes, we can envisage to propose pre-studied configurations with suitable compartmental modelling models; during the process design we should only have to adjust some parameters.
- Data acquisition system design: not only for reactors conception but also for process monitoring design or data acquisition optimisation. For example, compartmental approaches can help to rapidly find suitable locations for sensors in complex inhomogeneous reactors. As it was first broached by Rehman et al. (2015) to study the effect of oxygen sensors location in biological wastewater treatment plant reactors (De Mulder et al., 2018).
- Process control of large-scale systems, such as wastewater treatment plants, power plants, chemical plants, etc. Then the

control process could use much better information than the ones used by PID control or from systems based on systemic model, and much faster than information from CFD that is impossible to directly use for control.

6. Conclusion

A thorough review of evolution of compartmental modelling approaches has been carried out. During the last thirty years, model development has shifted from observation based construction to computational fluid dynamic (CFD) calculation derived approaches and from empirical compartmental definition to systematic calculation of boundaries. Based on this review and associated observation a definition of compartmental models has been proposed:

A compartmental model is a representation of a system based on its division in functional zones called compartments. The compartmental model is representative of the system geometry and spatial distributions of occurring phenomena.

Compartmental model approach, in its modern development, can be seen as an advanced post processing step of CFD tools but is not a degraded CFD model. The key behaviour of flow and turbulence have the same representativeness with respect to the phenomena of interest. Today, compartmental model approach is mostly used to represent system in which the motion of fluid is not affected by other phenomena but new development begin to emerge to handle this retroaction in an efficient way.

Moreover, compared to new trends in complex system modelling, often centered on black box model build through statistical regression of large amount of data, compartmental model is a very interesting tool for knowledge development as the overall resulting model is fully explicit and impact of new condition can be studied in every compartment (i.e. location). It can also be more easily debugged, challenged and modified. Constituting sub-model can also be validated and then applied to other systems.

The key advantages of this approach are:

1. An effective compartment model could handle multiple, multi-physics phenomenological models (detailed kinetic reaction scheme, complex heat and mass transfer model, population balance, etc.) that could not be included in CFD analysis.
2. Observed deviation between fully detailed CFD model and compartment model show very small results deviation despite of very significant reduction in calculation time (3 orders of magnitude (Le Moullec et al., 2010)) that open the door for simulating very large systems and perform real-time simulation.
3. Compared to more classic systemic models, a significantly better representation of local phenomena, mixing and turbulence for instance, allowing significantly more predictive results as well as a spatialisation of phenomena allowing new potential (sensor integration decision, geometry optimisation, etc.)

Based on the framework described in this work, numerous developments can be foreseen for the compartmental modelling approach. In the near future, it should be possible to offer a new solution to deliver high fidelity, easy to use, models for new systems integrating complex phenomena and/or need for real time simulation.

Declaration of Competing Interest

There are no conflict of interest in this work.

Acknowledgments

We would like to thank EDF and the ANRT association (Association Nationale de la Recherche et de la Technologie) for their support.

References

- Alex, J., Kolisch, G., Krause, K., 2002. Model structure identification for wastewater treatment simulation based on computational fluid dynamics. *Water Sci. Technol.* 45 (4–5), 325–334.
- Alex, J., Tschepetzki, R., Jumar, U., Obenaus, F., Rosenwinkel, K.-H., 1999. Analysis and design of suitable model structures for activated sludge tanks with circulating flow. *Water Sci. Technol.* 39 (4), 55–60.
- Alexopoulos, A.H., Maggioris, D., Kiparissides, C., 2002. CFD analysis of turbulence non-homogeneity in mixing vessels: a two-compartment model. *Chem. Eng. Sci.* 57 (10), 1735–1752.
- Alopaeus, V., Moilanen, P., Laakkonen, M., 2009. Analysis of stirred tanks with two-zone models. *AIChE J.* 55 (10), 2545–2552.
- Alvarado, A., Vedantam, S., Goethals, P., Nopens, I., 2012. A compartmental model to describe hydraulics in a full-scale waste stabilization pond. *Water Res.* 46 (2), 521–530.
- Angermann, L., 2010. Numerical simulations - examples and applications in computational fluid dynamics. InTechOpen. ISBN 978-953-307-153-4.
- Bashiri, H., Bertrand, F., Chaouki, J., 2016. Development of a multiscale model for the design and scale-up of gas/liquid stirred tank reactors. *Chem. Eng. J.* 297, 277–294.
- Bashiri, H., Heniche, M., Bertrand, F., Chaouki, J., 2014. Compartmental modelling of turbulent fluid flow for the scale-up of stirred tanks. *Canad. J. Chem. Eng.* 92 (6), 1070–1081.
- Bauer, M., Eigenberger, G., 1999. A concept for multi-scale modeling of bubble columns and loop reactors. *Chem. Eng. Sci.* 54 (21).
- Bauer, M., Eigenberger, G., 2001. Multiscale modeling of hydrodynamics, mass transfer and reaction in bubble column reactors. *Chem. Eng. Sci.* 56 (3), 1067–1074.
- Baur, R., Taylor, R., Krishna, R., 2001. Dynamic behaviour of reactive distillation tray columns described with a non-equilibrium cell model. *Chem. Eng. Sci.* 56 (4), 1721–1729.
- Benallou, A., Seborg, D.E., Mellichamp, D.A., 1986. Dynamic compartmental models for separation processes. *AIChE J.* 32 (7), 1067–1078.
- Birmingham, S.K., Kramer, H.J.M., Neumann, A.M., Verheijen, P.J.T., 1999. Measuring and modelling the classification and dissolution of fine crystals in a DTB crystalliser. In: Proceedings of the 14th International Symposium on Industrial Crystallisation.
- Birmingham, S.K., Kramer, H.J.M., van Rosmalen, G.M., 1998. Towards on-scale crystalliser design using compartmental models. *Comput. Chem. Eng.* 22, 355–362.
- Bezzo, F., Macchietto, S., 2004a. A general methodology for hybrid multizonal-cfd models: Part I. Theoretical framework. *Comput. Chem. Eng.* 28 (4), 501–511.
- Bezzo, F., Macchietto, S., 2004b. A general methodology for hybrid multizonal-cfd models: Part II. Automatic zoning. *Comput. Chem. Eng.* 28 (4), 513–525.
- Bezzo, F., Macchietto, S., Pantelides, C.C., 2000. A general framework for the integration of computational fluid dynamics and process simulation. *Comput. Chem. Eng.* 24 (2), 653–658.
- Bezzo, F., Macchietto, S., Pantelides, C.C., 2003. General hybrid multizonal-cfd approach for bioreactor modeling. *AIChE J.* 49 (8), 2133–2148.
- Chen, Q., Xu, W., 1998. A zero-equation turbulence model for indoor airflow simulation. *Energy Build.* 28, 137–144.
- Cui, Y.Q., Van Der Lans, R.G.J.M., Noorman, H.J., Luyben, K.Ch.A.M., 1996. Compartment mixing model for stirred reactors with multiple impellers. *Chem. Eng. Res. Des.* 74 (2), 261–271.
- Danckwerts, P.V., 1953. Continuous flow systems. distribution of residence times. *Chem. Eng. Sci.* 2 (1), 1–13.
- Dani, A., Guiraud, P., Cockx, A., 2007. Local measurement of oxygen transfer around a single bubble by planar laser-induced fluorescence. *Chem. Eng. Sci.* 62 (24), 7245–7252.
- De Mulder, C., Rehman, U., Flameling, T., Weijers, S., Amerlinck, Y., Nopens, I., 2018. Compartmental Modelling in a Plant-wide Context: Exploration and Potential. WRRmod Seminar.
- de Rosnay, J., 1979. The Macroscopic: A New World Scientific System. Harper Collins Publisher. ISBN 0-0601-1029-5.
- Delafosse, A., Collignon, M.-L., Calvo, S., Delvigne, F., Crine, M., Thonart, P., Toye, D., 2014. Cfd-based compartment model for description of mixing in bioreactors. *Chem. Eng. Sci.* 106, 76–85.
- Delafosse, A., Delvigne, F., Collignon, M.-L., Crine, M., Thonart, P., Toye, D., 2010. Development of a compartment model based on cfd simulations for description of mixing in bioreactors. *Biotechnol., Agron., Socitet Environ.* 14, 517.
- Demirel, S.E., Li, J., Hasan, M.M.F., 2017. Systematic process intensification using building blocks. *Comput. Chem. Eng.* 105, 2–38.
- Du, Y., Zhao, H., Ma, A., Yang, C., 2015. Equivalent reactor network model for the modeling of fluid catalytic cracking riser reactor. *Industr. Eng. Chem. Res.* 54 (35), 8732–8742.
- Dudukovic, M.P., 2010. Reaction engineering: status and future challenges. *Chem. Eng. Sci.* 65, 3–11.
- Faravelli, T., Bua, L., Frassoldati, A., Antifora, A., Tognotti, L., Ranzi, E., 2001. A new procedure for predicting nox emissions from furnaces. *Comput. Chem. Eng.* 25 (4), 613–618.
- Fichet, V., Kanniche, M., Plion, P., Gicquel, O., 2010. A reactor network model for predicting nox emissions in gas turbines. *Fuel* 89 (9), 2202–2210.
- Ge, W., Chen, F., Gao, J., Gao, S., Huang, J., Kiu, X., Ren, Y., Sun, Q., Wang, L., Wang, W., Yang, N., Zhang, J., Zhao, H., Zhou, G., Li, J., 2007. Analytical multi-scale method for multi-phase complex systems in process engineering-bridging reductionism and holism. *Chem. Eng. Sci.* 62, 3346–3377.
- Goldstein, R.J., 1996. Fluid Mechanics Measurements. CRC Press. ISBN 978-156-032-306-8.
- Gresch, M., Brugger, R., Meyer, A., Gujer, W., 2009. Compartmental models for continuous flow reactors derived from CFD simulations. *Environ. Sci. Technol.* 43 (7), 2381–2387.
- Guha, D., Dudukovic, M.P., Ramachandran, P.A., Mehta, S., Alvare, J., 2006. Cfd-based compartmental modeling of single phase stirred-tank reactors. *AIChE J.* 52 (5), 1836–1846.
- Haag, J., Genric, C., Lemaitre, C., Leclerc, J.P., 2018. Modelling of chemical reactors: from systemic approach to compartmental modelling. *Int. J. Chem. React. Eng.*
- Hocine, S., Pibouleau, L., Azzaro-Pantel, C., Domenech, S., 2008. Modelling systems defined by rtd curves. *Comput. Chem. Eng.* 32, 3112–3120.
- Iliuta, I., Larachi, F., Anfray, J., Dromard, N., Schweich, D., 2007. Multicomponent multicompartement model for Fischer-Tropsch scbr. *AIChE J.* 53 (8), 2062–2083.
- Iliuta, I., Petre, C.F., Larachi, F., 2004. Hydrodynamic continuum model for two-phase flow structured-packing-containing columns. *Chem. Eng. Sci.* 59 (4), 879–888.
- Irizarry-Rivera, R., 2012. Fast compartmental monte carlo simulation of population balance models: application to nanoparticle formation in nonhomogeneous conditions. *Industr. Eng. Chem. Res.* 51 (47), 15484–15496.
- Irizarry-Rivera, R., Seider, W.D., 1997a. Model-predictive control of the czochralski crystallization process. Part I. Conduction-dominated melt. *J. Cryst. Growth* 178 (4).
- Irizarry-Rivera, R., Seider, W.D., 1997b. Model-predictive control of the czochralski crystallization process. Part II. Reduced-order convection model. *J. Cryst. Growth* 178 (4), 612–633.
- Jourdan, N., Kanniche, M., Neveux, T., Potier, O., 2017. Compartmental modeling of particle settling in water basin. In: Proceedings of SFGP 2017 conference, pp. 467–468.
- Kagoshima, M., Mann, R., 2006. Development of a network-of-zones fluid mixing model for an unbaffled stirred vessel used for precipitation. *Chem. Eng. Sci.* 61, 2852–2863.
- Kaur, G., Singh, M., Kumar, J., De Beer, T., Nopens, I., 2018. Mathematical modelling and simulation of a spray fluidized bed granulator. *Processes* 6, 195–208.
- Khdhiri, H., Potier, O., Leclerc, J.P., 2014. Aeration efficiency over stepped cascades: Better predictions from flow regimes. *Water Res.* 55, 194–202.
- Khowinij, S., Henson, M.A., Belanger, P., Megan, L., 2005. Dynamic compartmental modeling of nitrogen purification columns. *Sep. Purif. Technol.* 46, 95–109.
- Kougoulos, E., Jones, A.G., Wood-Kaczmar, M., 2005. Cfd modelling of mixing and heat transfer in batch cooling crystallizers. *Chem. Eng. Res. Des.* 83 (1), 30–39.
- Laakkonen, M., Alopaeus, V., Aittamaa, J., 2006a. Validation of bubble breakage, coalescence and mass transfer models for gas-liquid dispersion in agitated vessel. *Chem. Eng. Sci.* 61 (1), 218–228.
- Laakkonen, M., Moilanen, P., Alopaeus, V., Aittamaa, J., 2006b. Dynamic modeling of local reaction conditions in an agitated aerobic fermenter. *AIChE J.* 52 (5), 1673–1689.
- Laakkonen, M., Moilanen, P., Alopaeus, V., Aittamaa, J., 2007. Modelling local bubble size distributions in agitated vessels. *Chem. Eng. Sci.* 62 (3), 721–740.
- Lainez-Aguirre, J., Blau, G., Puigjaner, L., 2017. Building pharmacokinetic compartmental model using a superstructure approach. *Comput. Chem. Eng.* 107, 92–99.
- Laquerbe, C., Laborde, J.C., Soares, S., Ricciardi, L., Floquet, P., Pibouleau, L., Domenech, S., 2001. Computer aided synthesis of rtd models to simulate the air flow distribution in ventilated rooms. *Chem. Eng. Sci.* 56, 5727–5738.
- Lateb, M., Meroney, R.N., Yataghene, M., Fellouah, H., Saleh, F., Boufadel, M.C., 2016. On the use of numerical modelling for near-field pollutant dispersion in urban environments - a review. *Environ. Pollut.* 208, 271–283.
- Laurent, B.E., Reece, G.J., Rodi, W., 1975. Progress in the development of a reynolds-stress turbulence closure. *J. Fluid Mech.* 68, 537–566.
- Laurence, D., Uribe, J.C., Utyuzhnikov, S.V., 2005. A robust formulation of the v2-f model. *Flow, Turbul. Combust.* 73, 169–185.
- Laurent, J., Bois, P., Nuel, M., Wanko, A., 2015. Systemic models of full-scale surface flow treatment wetlands: determination by application of fluorescent tracers. *Chem. Eng. J.* 264, 389–398.
- Le Moulec, Y., 2008. Comparaison des approches systmique, mcannique des fluides numrique et compartmentale pour la modlisation des racteurs: application un racteur canal boues actives PhD thesis Institut National Polytechnique de Lorraine.
- Le Moulec, Y., Genric, C., Potier, O., Leclerc, J.P., 2010. Comparison of systemic, compartmental and cfd modelling approaches: application to the simulation of a biological reactor of wastewater treatment. *Chem. Eng. Sci.* 65 (1), 343–350.
- Le Moulec, Y., Potier, O., Genric, C., Leclerc, J.P., 2008. Flow field and residence time distribution simulation of a cross-flow gas-liquid wastewater treatment reactor using CFD. *Chem. Eng. Sci.* 63 (9), 2436–2449.
- Le Moulec, Y., Potier, O., Genric, C., Leclerc, J.P., 2009. CFD simulation of the hydrodynamics and reactions in an activated sludge channel reactor of wastewater treatment. *Chem. Eng. Sci.* 65 (1), 492–498.

- Le Moulec, Y., Potier, O., Genric, C., Leclerc, J.P., 2011. Activated sludge pilot plant: comparison between experimental and predicted concentration profiles using three different modelling approaches. *Water Res.* 45 (10), 3085–3097.
- Lee, E.R., 2002. *Microdrop Generation*. CRC Press. ISBN 978-084-931-559-6.
- Levenspiel, O., 1998. *Chemical Reaction Engineering*. Wiley. ISBN 978-0-471-25424-9.
- Li, J., Demirel, S.E., Hasan, M.M.F., 2018. Process synthesis using block superstructure with automated flowsheet generation and optimisation. *AIChE J.* 64 (8), 3082–3100.
- Li, J., Ge, W., Wang, W., Yang, N., 2010. Focusing on the meso-scales of multi-scale phenomena - in search for a new paradigm in chemical engineering. *Particology* 8, 634–639.
- Li, J., Tung, Y., Kwauk, M., 1988. Multi-scale modeling and method of energy minimization in particle-fluid two-phase flow. In: Basu, P., Large, J.F. (Eds.), *Circulating Fluidized Bed Technology II*. Pergamon press, pp. 89–103.
- Maggiolis, D., Goulas, A., Alexopoulos, A.H., Chatzi, E.G., Kiparissides, C., 1998. Use of cfd in prediction of particle size distribution in suspension polymer reactors. *Comput. Chem. Eng.* 22 (Supplement 1), S315–S322.
- Maggiolis, D., Goulas, A., Alexopoulos, A.H., Chatzi, E.G., Kiparissides, C., 2000. Prediction of particle size distribution in suspension polymerization reactors: effect of turbulence nonhomogeneity. *Chem. Eng. Sci.* 55 (20), 4611–4627.
- Mayr, B., Horvat, P., Nagy, E., Moser, A., 1993. Mixing-models applied to industrial batch bioreactors. *Bioprocess. Eng.* 9 (1), 1–12.
- Menter, F.R., 1994. Two-equation eddy viscosity turbulence models for engineering applications. *AIAA J.* 32, 1598–1605.
- Moin, P., Mahesh, K., 1998. Direct numerical simulation: a tool in turbulence research. *Annu. Rev. Fluid Mech.* 30, 539–578.
- Morin, E., 1990. *On Complexity*. Hampton Press. ISBN 1-5727-3801-4.
- Nauha, E.K., Alopaeus, V., 2013. Modeling method for combining fluid dynamics and algal growth in a bubble column photobioreactor. *Chem. Eng. J.* 229, 559–568.
- Nauha, E.K., Alopaeus, V., 2015. Modeling outdoors algal cultivation with compartmental approach. *Chem. Eng. J.* 259, 945–960.
- Nauha, E.K., Kalal, Z., Ali, J.M., Alopaeus, V., 2018. Compartmental modeling of large stirred tank bioreactors with high gas volume fraction. *Chem. Eng. J.* 334, 2319–2334.
- Neveux, T., Le Moulec, Y., 2011. Wet industrial flue gas desulfurization unit: model development and validation on industrial data. *Industr. Eng. Chem. Res.* 50 (12), 7579–7592.
- Norregaard, A., Bach, C., Kruhne, U., Borgbjerg, U., Gernaey, V., 2019. Hypothesis-driven compartment model for stirred bioreactors utilizing computational fluid dynamics and multiple ph sensors. *Chem. Eng. J.* 356, 161–169.
- Nunez-Ramirez, D.M., Medina-Torres, L., Valencia-Lopez, J.J., Calderas, F., Lopez Miranda, J., Medrano-Roldan, H., Solis-Soto, A., 2012. Study of the rheological properties of a fermentation broth of the fungus *beauveria bassiana* in a bioreactor under different hydrodynamic conditions. *J. Microbiol. Biotechnol.* 22 (11), 1494–1500.
- Oner, M., Bach, C., Tajssoleiman, T., Molla, G.S., Freitag, M.F., Stocks, S.M., Abildskov, J., Kruhne, U., Sin, G., 2018. Scale-up modelling of a pharmaceutical crystallization process via compartmentalization approach. *Comput. Aided Chem. Eng.* 44, 181–186.
- Patterson, G.K., 1981. Application of turbulence fundamentals to reactor modelling and scale-up. *Chem. Eng. Commun.* 8, 25–52.
- Pavarula, N., Achenie, L.K., 2013. A mechanistic approach for modeling oral drug delivery. *Comput. Chem. Eng.* 57, 196–206.
- Peng, X., Liu, Z., Tan, J., Bu, W., 2012. Compartmental modeling and solving of large-scale distillation columns under variable operating conditions. *Sep. Purif. Technol.* 98, 280–289.
- Pigou, M., Morchain, J., 2015. Investigating the interactions between physical and biological heterogeneities in bioreactors using compartment, population balance and metabolic models. *Chem. Eng. Sci.* 126, 267–282.
- Pitsch, H., 2006. Large eddy simulation of turbulent combustion. *Annu. Rev. Fluid Mech.* 38, 453–482.
- Potier, O., Brun, J., Le Masson, P., Weil, B., 2015. How innovative design can contribute to chemical and process engineering development? Opening a new innovation path by applying the C-K method. *Chem. Eng. Res. Des.* 103, 108–122.
- Potier, O., Leclerc, J.P., Pons, M.N., 2005. Influence of geometrical and operational parameters on the axial dispersion in an aerated channel reactor. *Water Res.* 39 (18), 4454–4462.
- Preisig, H.A., 2010. Constructing and maintaining proper process model. *Comput. Chem. Eng.* 34, 1543–1555.
- Rehman, U., 2016. *Next generation bioreactor models for wastewater treatment systems by means of detailed combined modelling of mixing and biokinetics* PhD thesis. Ghent University, Belgium.
- Rehman, U., Audenaert, W., Amerlinck, Y., Maere, T., Arnaldos, M., Nopens, I., 2017. How well-mixed is well mixed? Hydrodynamic-biokinetic model integration in an aerated tank of a full-scale water resource recovery facility. *Water Sci. Technol.* 76 (8), 1950–1965.
- Rehman, U., Vesvikar, M., Maere, T., Guo, L., Vanrolleghem, P.A., Nopens, I., 2015. Effect of sensor location on controller performance in a wastewater treatment plant. *Water Sci. Technol.* 71 (5), 700–708.
- Reuss, M., Jenne, M., 1993. *Compartmental model. conf. on Bioreactor Performance*. Helsingør, Denmark, pages 63–75.
- Rigopoulos, S., Jones, A.G., 2003. A hybrid CFD-reaction engineering framework for multiphase reactor modelling: basic concept and application to bubble column reactors. *Chem. Eng. Sci.* 58 (14), 3077–3089.
- Sapre, A.V., Katzner, J.R., 1995. Core of chemical reaction engineering: one industrial view. *Ind. Eng. Chem. Res.* 34 (7), 2202–2225.
- Scott-Pomerantz, C.D., 2004. *The k-epsilon model in the theory of turbulence* PhD thesis. University of Pittsburgh.
- Seppala, M., Laakkonen, M., Manninen, M., Alopaeus, V., Aittamaa, J., 2008. Development of automatic algorithm for combining cfd and multiblock modelling and application to flotation cell. In: 6th international conference on Computational Fluid Dynamics in the Oil and Gas, Metallurgical and Process industries, (Trondheim, Norway).
- Simcik, M., Ruzicka, M.C., Mota, A., Teixeira, J.A., 2012. Smart rtd for multiphase flow systems. *Chem. Eng. Res. Des.* 90, 1739–1749.
- Stropky, D., Pougatch, K., Nowak, P., Salscudean, M., Pagoria, P., Gartshore, I., Yuan, J., 2007. RTD (residence time distribution) predictions in large mechanically aerated lagoons. *Water Sci. Technol.* 55 (11), 29–36.
- Tajssoleiman, T., Spann, R., Bash, C., Gernaey, K.V., Huusom, J.K., Kruhne, U., 2019. A CFD based automatic method for compartmental model development. *Comput. Chem. Eng.* 123, 236–245.
- Takagaki, N., Komori, S., 2014. Air-water mass transfer mechanism due to the impingement of a single liquid drop on the air-water interface. *Int. J. Multiph. Flow* 60, 30–39.
- Tibirica, C., do Nascimento, F.J., Ribatski, G., 2010. Film thickness measurement techniques applied to micro-scale two-phase flow systems. *Exp. Therm. Fluid Sci.* 34 (4), 463–473.
- Versteeg, H.K., Malalasekera, W., 2007. *An introduction to Computational Fluid Dynamics - The Finite Volume Method*. Pearson. ISBN 978-013-127-498-3.
- Villiermaux, J., 1984. Did you say process engineering? *Chem. Eng. Process.* 18 (3), 123–127.
- Villiermaux, J., 1993. Future challenges for basic research in chemical engineering. *Chem. Eng. Sci.* 48 (14), 2525–2535.
- Villiermaux, J., 1995. Future challenges in chemical engineering research. *Chem. Eng. Res. Des.* 73, 105–109.
- Vivaldo-Lima, E., Wood, P.E., Hamielec, A.E., Penlidis, A., 1998. Calculation of the particle size distribution in suspension polymerization using a compartment-mixing model. *Canad. J. Chem. Eng.* 76 (3), 495–505.
- von Bertalanffy, L., 1968. *General System Theory. Foundations, Development, Applications*. George Braziller, New York. ISBN 0-8076-0453-4.
- Vrabel, P., Rob van der Lans, G., Karel Luyben, C., Boon, L., Nienow, A., 2000. Mixing in large-scale vessels stirred with multiple radial or radial and axial up-pumping impellers: modelling and measurements. *Chem. Eng. Sci.* 55 (23), 5881–5896.
- Vrabel, P., van der Lans, G., van der Schot, F., Karel Luyben, C., Xu, B., Enfors, S., 2001. CMA: integration of fluid dynamics and microbial kinetics in modelling of large-scale fermentations. *Chem. Eng. J.* 84 (3), 463–474.
- Vrabel, P., Van der Lans, R., Cui, Y.Q., Luyben, K., 1999. Compartment model approach: mixing in large scale aerated reactors with multiple impellers. *Chem. Eng. Res. Des.* 77 (4), 291–302.
- Wells, G.J., Ray, W.H., 2005. Methodology for modeling detailed imperfect mixing effects in complex reactors. *AIChE J.* 51 (5), 1508–1520.
- Wizman, V., Laurence, D., Kanne, M., Durbin, P., Demuren, A., 1996. Modelling near-wall effects in second-moment closures by elliptic relaxation. *Int. J. Heat Fluid Flow* 17, 255–266.
- Yu, L.X., Amidon, G.L., 1999. A compartmental absorption and transit model for estimating oral drug absorption. *Int. J. Pharm.* 186 (2), 119–125.
- Yu, X., Hounslow, M.J., Reynolds, G.K., Rasmuson, A., Bjorn, I.N., Abrahamsson, P.J., 2017. A compartmental CFD - PBM model of high shear wet granulation. *AIChE J.* 63 (2), 438–458.
- Zhang, L., Pan, Q., Rempel, G.L., 2007. Residence time distribution in a multistage agitated reactor with newtonian fluids: CFD prediction and experimental validation. *Industr. Eng. Chem. Res.* 46 (11), 3538–3546.
- Zhao, W., Buffo, A., Alopaeus, V., Han, B., Louhi-Kultanen, M., 2017. Application of the compartmental model to the gas liquid-precipitation of CO₂-Ca(OH)₂ aqueous system in a stirred tank. *AIChE J.* 63 (1), 378–386.

2.3 Choix de l'approche compartimentale pour le circuit de refroidissement

L'objectif principal de la thèse étant de créer un modèle pour le développement de biofilm dans l'ensemble des parties du circuit de refroidissement, la sélection de l'approche de modélisation la plus adaptée est primordiale. La présentation des différents éléments au chapitre précédent a montré la grande diversité des géométries et donc de nature des écoulements : des parois verticales pour les garnissages, des tubes de quelques centimètres de diamètre dans le condenseur, un bassin de plusieurs milliers de mètres cubes d'eau et des conduites de plusieurs mètres de diamètre entre les éléments. De plus, les écoulements peuvent aussi être très différents au sein même du même élément de circuit : dans le bassin froid, certaines zones sont observées quasi stagnantes alors qu'à l'endroit du pompage, la vitesse du fluide est de l'ordre de quelques mètres par seconde comme dans les conduites en béton. Cette grande diversité de géométries nécessite l'utilisation d'un modèle adaptable et représentatif de la répartition spatiale des écoulements. En effet, afin de prédire l'encrassement, il est nécessaire de connaître la localisation du dépôt. Un modèle système du bassin par exemple permettrait de connaître une quantité totale de dépôt dans l'ensemble du bassin et d'identifier les écoulements propices au dépôt, mais pas d'identifier les lieux précis correspondants. La modélisation compartimentale étant spatialement représentative des écoulements est donc plus précise. La caractérisation hydrodynamique réalisée dans la Partie II va permettre de découper chaque partie du circuit en compartiments hydrodynamiques représentatifs en choisissant les critères hydrodynamiques pertinents par rapport au modèle du biofilm.

La grande taille de certaines parties du système (e.g. diamètre des tours aéroréfrigérantes de plus de 50 m) en comparaison des grandeurs caractéristiques des phénomènes étudiés (e.g. épaisseurs de biofilms de l'ordre du millimètre) empêche une résolution des modèles biologiques directement dans les simulations de MFN. Capturer le biofilm nécessiterait un raffinement de maillage beaucoup trop important pour la résolution des équations des modèles d'encrassement couplées à l'hydrodynamique. L'approche compartimentale résout ce problème, elle ne nécessite que la résolution de l'hydrodynamique par MFN, ceci étant réalisable aux petites échelles considérées.

De plus, l'approche compartimentale est une approche multi-échelle capable de prendre en compte de nombreux types d'écoulements et des informations de caractérisation provenant de l'échelle locale et système (Fig. 7. de l'article). Cette approche est donc applicable indépendamment à chaque partie du circuit et permet une caractérisation plus complète que les approches locales et systèmes prisent indépendamment. Le caractère multi-échelle de l'approche compartimentale en fait, par sa méthode

de construction, une approche modulable. Le réseau de réacteur peut être facilement modifié (e.g. flux échangés, volume des compartiments) pour réaliser des études de sensibilité, tester de nouveau design ou des nouvelles conditions opératoires pour les différents éléments. Un modèle compartimental est donc un outil adapté pour des utilisations d'exploitation et de suivi des performances mais aussi un outil adapté pour la recherche, l'innovation et le développement.

Enfin, le découplage total ou partiel des phénomènes d'intérêt de l'hydrodynamique permet de garder la même structure de modèle compartimental et d'y appliquer des modèles bio-physico-chimiques très différents. Cela permet, par exemple, d'adapter le modèle compartimental aux progrès de modélisation réalisés dans les études en microbiologie. Les nouveaux modèles de développement de biofilms peuvent ainsi être mis à jour et résolus dans la structure précédemment définie avec de moindres modifications.

Bien que la modélisation compartimentale semble adaptée à tous les éléments du circuit, il est raisonnable de se demander si le modèle compartimental n'est pas trop complexe pour certains écoulements bien connus. En effet, dans les tubes de condenseurs les écoulements en conduite cylindriques sont parfaitement connus et des corrélations existent. Dans ces cas, si la caractérisation hydrodynamique met en lumière des écoulements modélisables de manière simple (e.g. écoulement idéal bien connu en Génie Chimique), le modèle compartimental peut être simplifié. Par exemple, le modèle peut être réduit à une seule dimension et le nombre de compartiments peut être réduit. Pour les tubes de condenseur, il est ainsi possible d'envisager que les caractéristiques hydrodynamiques (e.g. vitesse, contrainte de cisaillement) soient connues pour chaque position le long du tube, que l'écoulement turbulent soit établi et que la symétrie de la géométrie cylindrique permette donc de limiter le modèle à une seule dimension suivant la longueur du tube. L'utilisation du modèle compartimental simplifié par rapport à un modèle système seul, peut permettre cependant de revenir à un modèle plus complexe si cela est nécessaire lorsque des phénomènes supplémentaires sont susceptibles d'être pris en compte.

La construction du modèle compartimental final est donc basée sur le mode opératoire proposé dans l'article (section 4.4.2 et Fig. 9). L'identification de la problématique et des phénomènes d'intérêt que sont l'hydrodynamique et les phénomènes d'encrassement (et plus particulièrement le choix de l'encrassement biologique pour le cas d'étude de cette thèse) présentée au Chapitre 1 correspond à la définition du problème et à l'étude préliminaire. De même, le choix de l'approche compartimentale peut être inclus comme une conclusion tirée de ces deux premières étapes. La Partie II du manuscrit consacrée à la caractérisation des écoulements correspond à l'étape d'utilisation des outils et méthodes à disposition pour obtenir les données nécessaires à la construction du modèle compartimental. Des méthodes à la fois expérimentales (Chapitre 4) et numériques (Chapitre 5) ont été utilisées afin d'obtenir ces données à l'échelle système et à l'échelle locale nécessaires et qui sont présentées dans le

Chapitre 6. Une fois le modèle de développement de biofilm développé et présenté dans le chapitre 7, la construction des compartiments, le calcul des flux et la validation du modèle sont présentés dans le Chapitre 8.

En résumé, une approche de modélisation hybride adaptée des approches compartimentale a été identifiée comme la plus adaptée aux circuits de refroidissement. Ce modèle multi-échelle, nécessite des données hydrodynamiques provenant de l'échelle globale et de l'échelle locale des écoulements mais aussi des données complémentaires provenant de simulations numériques aussi bien que de campagnes expérimentales. La caractérisation de l'hydrodynamique nécessaire pour les différentes parties du circuit est présentée dans la Partie II du manuscrit. Le modèle compartimental final et sa construction sont présentés dans la Partie III.

DEUXIÈME PARTIE

Caractérisation hydrodynamique

Vue d'ensemble des conditions hydrodynamiques dans le circuit et démarche de caractérisation

Les circuits de refroidissement industriels présentent une grande variété d'éléments et donc d'écoulements. Ces écoulements peuvent être divisés en trois groupes : les écoulements en conduite forcée dans les tubes de condenseur et les conduites en béton, les écoulements dans le bassin froid à la base de la tour aéroréfrigérante et les écoulements sur les garnissages de la tour. Si l'on dispose des informations théoriques nécessaires pour décrire ou simuler les écoulements en conduites ou dans le bassin, la nature même des écoulements dans les garnissages des tours aéroréfrigérantes reste très méconnue et peu de travaux de la littérature s'y sont intéressés. Ce chapitre a pour objectif de faire l'inventaire des travaux disponibles dans la littérature, des outils utilisables et des informations nécessaires pour caractériser les écoulements dans les parties du circuit afin de mettre en place une stratégie d'étude pour compléter les informations manquantes. La stratégie et les outils mis en place pour la caractérisation des écoulements sont présentés en fin de chapitre. La caractérisation des écoulements dans les garnissages sera présentée aux Chapitres 4 et 5 et la synthèse des données hydrodynamiques pour l'ensemble du circuit de refroidissement sera présentée dans le Chapitre 6.

3.1 Écoulements dans les bassins froids

3.1.1 Géométrie et nature des écoulements dans les bassins froids

Le bassin froid au pied de la tour aéroréfrigérante est de forme circulaire, d'un diamètre pouvant aller d'une cinquantaine de mètres à plus d'une centaine de mètres et comporte de nombreux obstacles pour l'écoulement. Afin de soutenir le garnissage, des piliers sont uniformément répartis sur toute la surface du bassin. Le tuyau d'arrivée en eau chaude provenant du condenseur est partiellement immergé avant d'être amené à hauteur de pulvérisation dans le château d'eau central. Un plan incliné menant au bassin est prévu pour les opérations de maintenances et d'arrêt de tranche. Dans le fond du bassin, une rigole

est creusée afin d'aider à la vidange du bassin lors des arrêts. L'arrivée de l'eau dans le bassin se fait sous forme de pluie tombant du garnissage situé à une dizaine de mètres au-dessus de la surface du bassin. Du fait de la géométrie hyperbolique des tours, l'arrivée d'eau sous forme de pluie ne se fait que sur les 75% de la surface centrale du bassin. L'eau froide renvoyée vers le condenseur est évacuée par pompage dans une conduite submergée. La partie de l'eau des purges qui va être rejetée vers le milieu extérieur est prélevée sur un côté à la surface du bassin.

Afin de construire le modèle compartimental, il est nécessaire de sélectionner un cas d'étude. Les données géométriques et les grandeurs caractéristiques du cas d'étude considéré ici sont données dans le Tableau 3.1.

Grâce à toutes ces caractéristiques géométriques, il est possible de calculer des grandeurs hydrodynamiques caractéristiques afin d'avoir une idée des régimes d'écoulement dans le bassin. Un premier indicateur est le temps de passage moyen dans le bassin calculé à partir du volume du bassin et des débits entrants et sortants en régime permanent. Dans le bassin, le temps de passage moyen est de 8,2 minutes. Cette grandeur reste très théorique puisque l'entrée de l'eau s'effectuant sur toute la surface du bassin et la prise d'eau pompée étant ponctuelle, le temps de séjour et les vitesses du fluide dans le bassin dépendent très fortement de la position dans le bassin. À la sortie du bassin, il est possible de calculer une vitesse moyenne pour la section du canal rectangulaire de pompage, la vitesse moyenne est de 1,05 m/s.

TABLE 3.1 – Caractéristiques du bassin froid

| | |
|------------------------------------|------------------------|
| Diamètre | 52,55 m |
| Volume utile en service | 8 450 m ³ |
| Hauteur d'eau | 1 m |
| Débit de purge | 0,75 m ³ /s |
| Débit de sortie vers le condenseur | 16,0 m ³ /s |
| Temps de passage moyen | 8,2 mn |

3.1.2 Aperçu des méthodes de caractérisation de l'hydrodynamique des bassins

L'étude de l'hydrodynamique dans les bassins peut être rapportée à l'étude d'un réacteur ou, en raison de la diversité des régimes d'écoulement, à l'étude d'un ensemble de réacteurs. Pour étudier ce comportement d'ensemble, la méthode systémique s'appuie notamment sur la distribution des temps de séjours (DTS). La distribution des temps de séjours permet donc la caractérisation de l'écoulement global au sein du réacteur. Le temps de séjour est le temps passé par un élément fluide dans le réacteur. Le principe de base de la DTS est donc l'étude statistique à la sortie du réacteur de la réponse à une

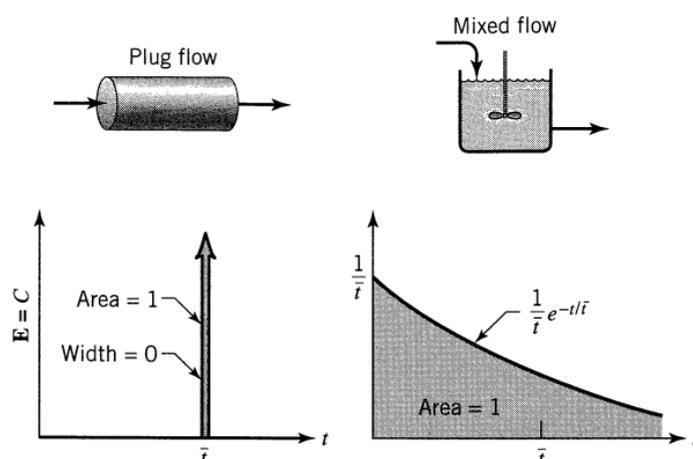


FIGURE 3.1 – Courbes de la fonction $E(t)$ pour des réacteurs idéaux, réponse à une impulsion : réacteur piston (à gauche) et réacteur parfaitement agité (à droite) (Levenspiel, 1998)

injection en entrée du réacteur. La fonction distribution des temps de séjour $E(t)$ est définie telle que $E(t).dt$ est la fraction du débit de sortie qui est restée dans le réacteur un temps compris entre t et $t + dt$. (Danckwerts, 1953).

Les réacteurs idéaux continus sont soit de type réacteur parfaitement agité (RPA) soit de type réacteur piston. Dans le modèle du RPA, la concentration dans le réacteur est considérée homogène et égale à la concentration de sortie. Pour l'écoulement piston, le fluide avance à la même vitesse dans le réacteur et la concentration est homogène pour chaque tranche élémentaire. Pour les DTS, la Figure 3.1 représente les courbes de la fonction $E(t)$ en réponse à un signal de type impulsion pour un réacteur piston et un réacteur parfaitement agité (RPA).

Cependant, un réacteur idéal ne prédit que très rarement le comportement hydrodynamique d'un système réel. Un autre modèle de réacteur très couramment utilisé est le réacteur piston avec dispersion axiale : il correspond au réacteur piston idéal auquel est ajouté un terme dispersif obéissant à la loi de Fick. Ces réacteurs idéaux ou dérivés des réacteurs idéaux sont utilisés dans des réseaux de réacteurs. L'un des réseaux le plus souvent utilisé est le réseau RPA en série avec ou sans recirculation (Potier *et al.*, 2005). Il existe une relation d'équivalence approchée entre le modèle piston dispersion et le modèle des RPA en série. Cette équivalence se traduit par l'équation 3.1 faisant intervenir pour le modèle réacteur piston-dispersion le nombre de Peclet Pe traduisant le transfert convectif par rapport au transfert diffusif et le nombre de réacteurs dans le modèle RPA en série J (Villermaux, 1993).

$$Pe = \frac{uL}{D} = 2(J - 1) \quad (3.1)$$

avec u une vitesse caractéristique de l'écoulement, L une longueur caractéristique et D le coefficient

de diffusion ou de dispersion selon les cas.

Les approches système sont utilisées pour la modélisation de systèmes de grandes tailles proches des bassins des tours aéroréfrigérantes comme des réacteurs de stations de traitement des eaux (Potier *et al.*, 2005; Le Moullec *et al.*, 2008; Laurent *et al.*, 2015), des lagunes aérées (Stropky *et al.*, 2007) ou des canaux de dépollution des eaux minières (Marais *et al.*, 2020).

En complément de la caractérisation des réacteurs à l'échelle système, la mécanique des fluides numérique est devenue un moyen privilégié de modélisation des écoulements grâce à l'augmentation de la capacité de calcul des ordinateurs. Les simulations numériques de mécanique des fluides (ou simulations de MFN) sont des outils très utilisés afin de prédire les écoulements complexes. Ils permettent de simuler le comportement hydrodynamique local par résolution des équations de Navier-Stokes : équation de continuité, bilan de quantité de mouvement et bilan énergétique. La difficulté de mise en place d'une méthode de MFN réside dans la réalisation du maillage et dans le choix des différentes implémentations pour la discrétisation, le choix du modèle de turbulence ou encore la caractérisation des équations de modélisation des réactions chimiques ou biologiques.

La méthode de discrétisation la plus utilisée dans les codes de calculs de MFN est la méthode des volumes finis. Pour la prise en compte de la turbulence, la simulation directe (DNS, Direct Numerical Simulation) visant à capturer les plus petites échelles de turbulence demande un grand nombre de mailles et est donc très gourmande en temps de calcul. La DNS est limitée aux faibles nombres de Reynolds et aux géométries de petites tailles et peu complexes. C'est pourquoi, dans la plupart des modélisations des écoulements, on s'intéresse aux grandeurs moyennes : la méthode RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes) consiste à appliquer l'opérateur de moyenne aux équations instantanées et à utiliser la décomposition de Reynolds¹.

En régime permanent, pour un fluide incompressible, l'équation de bilan de quantité de mouvement de Navier-Stokes moyennée avec décomposition de Reynolds est explicitée dans l'équation 3.2 ci-dessous (Reynolds, 1895).

$$\rho \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = \rho \bar{f}_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[-\bar{p} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \rho \overline{u'_i u'_j} \right] \quad (3.2)$$

avec \bar{u}_i , \bar{u}_j les composantes moyennées de la vitesse, \bar{f}_i la moyenne de la résultante des forces extérieures, ρ la masse volumique, \bar{p} la pression moyenne, $\delta_{i,j}$ le symbole de Kronecker, μ la viscosité dynamique, x_i , x_j les composantes spatiales et $\overline{u'_i u'_j}$ la moyenne du produit des composantes des fluctuations de la vitesse.

1. La décomposition de Reynolds considère chaque grandeur quelconque x comme pouvant être décomposée en une composante moyenne \bar{x} et une composante fluctuante $x' \quad x = \bar{x} + x'$ avec par définition $\overline{x'} = 0$

Les simulations de MFN RANS monophasiques sont utilisées dans de nombreux cas d'applications (Angermann, 2010) et particulièrement pour des simulations de systèmes de grande taille, par exemple la rupture d'un barrage (Ozmen-Cagatay et Kocaman, 2011) ou la simulation des réacteurs de traitement des eaux (Climent *et al.*, 2018). Or, comme évoqué précédemment, l'étude du bassin froid aéroréfrigérant s'apparente à d'autres études de grands systèmes ayant pour fluide de l'eau dans d'autres contextes industriels (e.g. canaux d'irrigation, bassins de stockage, stations de traitement d'eau). Une synthèse des bonnes pratiques de modélisation par de MFN des réacteurs dans le cas du traitement des eaux, a été proposée par Wicklein *et al.* (2016) et peut donc s'appliquer à la simulation du bassin froid.

3.1.3 Informations disponibles et stratégie de caractérisation des écoulements

Afin d'étudier les écoulements dans le bassin froid, le choix s'est porté sur des études via la MFN monophasique. En effet, la grande taille du bassin et sa situation au pied de la tour de refroidissement rendent les mesures expérimentales et les observations en fonctionnement très difficiles. Les simulations de MFN permettent d'obtenir les caractéristiques locales de l'écoulement dans le bassin et notamment le champ de vitesse. De plus, la réalisation d'une étude par des simulations de MFN peut aussi permettre de remonter à une caractérisation à l'échelle système du bassin. En effet, il est possible d'ajouter un traceur virtuel à l'écoulement dans la résolution des équations afin d'effectuer une DTS.

Les simulations de MFN des écoulements dans le bassin froid ont été réalisées avec adjonction d'un traceur passif pour effectuer une DTS numérique ; les résultats sont présentés dans le Chapitre 6.

3.2 Écoulements en conduite

3.2.1 Géométrie et nature des écoulements dans les conduites

De nombreuses parties du circuit de refroidissement sont composées de conduites de diamètres très différents. Entre les différents éléments, le fluide circule dans les conduites en béton de plusieurs mètres de diamètre alors qu'ensuite elle passe dans les condenseurs composés de centaines de milliers de tubes d'un diamètre de quelques centimètres. Malgré le rapport très élevé entre leurs dimensions (environ 100), les écoulements dans ces différentes conduites sont similaires : écoulement turbulent dans une conduite cylindrique en charge. En effet, un calcul d'ordre de grandeur nous permet de calculer le nombre de Reynolds dans le cas des deux conduites. Un exemple représentatif des deux types de conduites utilisées (tube du condenseur et conduite béton) est résumé dans le Tableau 6.2. Les deux régimes sont nettement turbulents avec $Re \sim 10^4$ pour les tubes de condenseur et $Re \sim 10^6$ à 10^7 pour les conduites en béton.

Pour les écoulements turbulents, dans les conduites, il est possible de distinguer deux régimes en fonction de la position dans le tube : le régime transitoire et le régime dit d'écoulement développé. Proche de l'entrée de la conduite, l'écoulement est en développement près de la paroi à cause du changement de géométrie (e.g. obstacle, changement de section). En conséquence le gradient de pression dans la région de transition est plus grand par rapport à celui de l'écoulement développé et donc le profil et les caractéristiques de l'écoulement évoluent le long du tube. Lorsque le fluide a parcouru une distance suffisante appelée longueur d'établissement de l'écoulement (L_e), le gradient de pression s'homogénéise, l'écoulement est établi et la turbulence est considérée comme pleinement développée. Le profil et les caractéristiques de l'écoulement n'évoluent plus le long du tube. Un schéma des différents profils de vitesse en fonction des régimes d'écoulement (régime non établi ou régime turbulent établi) est présenté à la Figure 3.2.

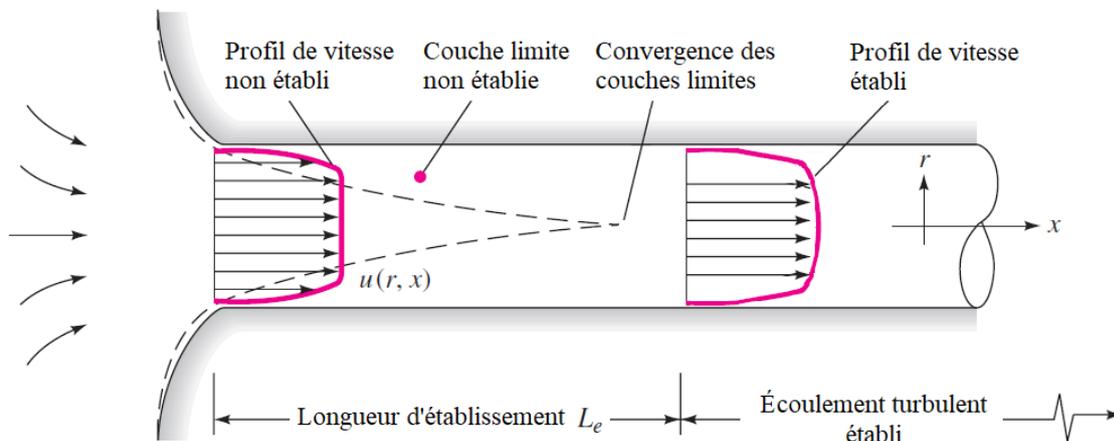


FIGURE 3.2 – Profils de vitesse dans une conduite cylindrique en fonction du régime d'écoulement turbulent (adapté de White (2011))

La longueur d'établissement dépend de la nature turbulente de l'écoulement représentée par le nombre de Reynolds et du diamètre de la conduite. Il existe plusieurs corrélations pour calculer cette longueur d'établissement : deux des principales corrélations disponibles dans la littérature sont présentées par White (2011). Ces deux corrélations et leurs courbes présentant le rapport de la longueur d'établissement sur le diamètre de la conduite en fonction du nombre de Reynolds sont présentées à la Figure 3.3. Les courbes montrent que les deux corrélations valables pour des nombres de Reynolds compris entre 10^4 et 10^7 convergent pour une valeur de $Re = 2.10^5$. En deçà de cette valeur, la corrélation en $Re^{1/6}$ prédit une longueur d'établissement plus importante que la corrélation en $Re^{1/4}$; au-delà c'est l'inverse.

Les longueurs calculées pour les deux corrélations sont disponibles dans le Tableau 6.2. Pour les tubes de condenseur, cette longueur est de l'ordre de quelques dizaines de centimètres ce qui représente à

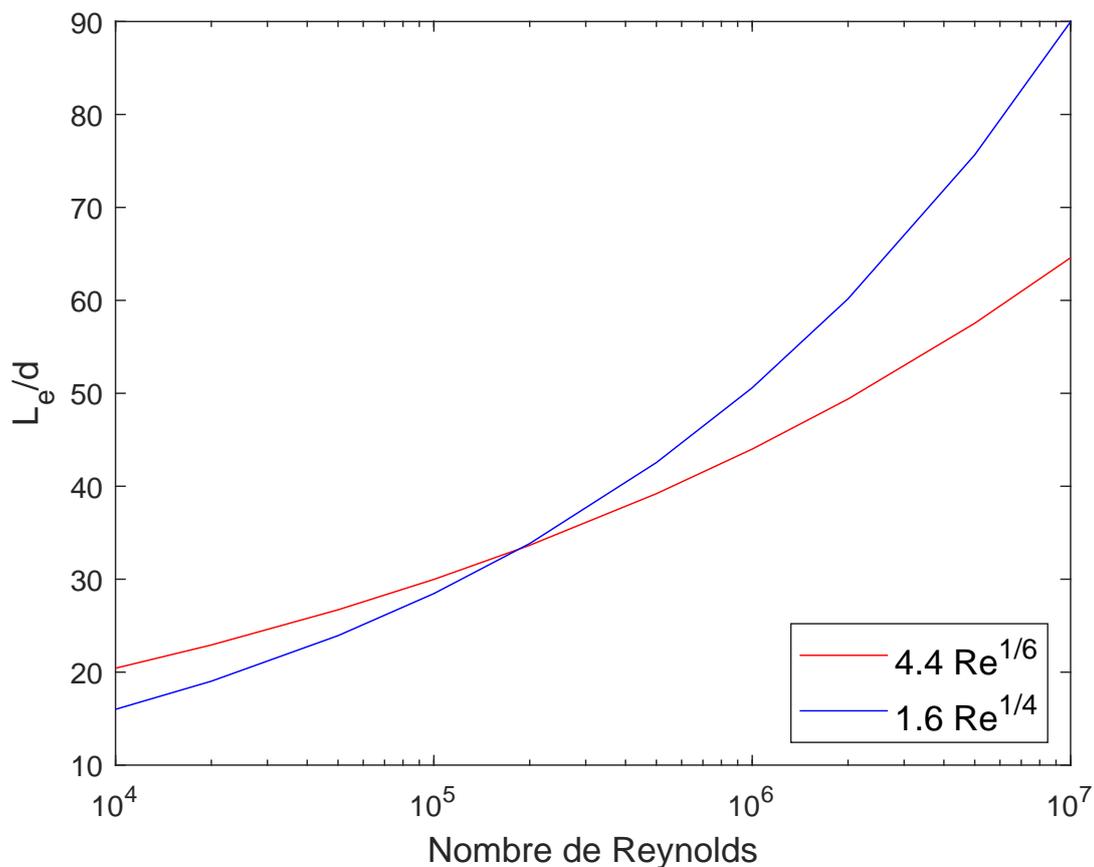


FIGURE 3.3 – Tracé des deux corrélations donnant le rapport de la longueur d'établissement L_e sur le diamètre d de la conduite en fonction du nombre de Reynolds

peine 2 à 3 % de la longueur des tubes de 11 m. En revanche, pour les conduites en béton, la longueur d'établissement est de l'ordre de plusieurs centaines de mètres ce qui est généralement supérieur à la longueur de ces conduites. Dans ce second cas, l'écoulement turbulent n'est donc presque jamais parfaitement établi et les grandeurs de l'écoulement (e.g. profil de vitesse, taille de couche limite, cisaillement) varient le long de la conduite.

3.2.2 Caractérisation des écoulements établis

Pour le régime turbulent établi, il est possible de caractériser l'écoulement de manière analytique. Lorsque le profil turbulent est établi, le profil de vitesse dans la conduite est obtenu grâce à la loi puissance de l'Équation 3.3 (Afzal *et al.*, 2007).

$$\frac{u}{u_{lim}} = \left(\frac{r}{R}\right)^{1/n} \quad (3.3)$$

avec u la vitesse (en m/s) au rayon r de la canalisation (en m), u_{lim} la vitesse maximale en profil établi

TABLE 3.2 – Grandeurs caractéristiques de l'écoulement en conduite dans les circuits de refroidissement pour 4 températures de fonctionnement

| | T (°C) | Débit (m ³ /s) | Diamètre (m) | u _{moy} (m/s) | Re | L _e (m) |
|---|--------|---------------------------|--------------|------------------------|----------------------|--------------------|
| Tube condenseur Conduite béton | 10°C | 3,19.10 ⁻⁴ | 0,015 | 1,81 | 1,78.10 ⁴ | 0,34 - 0,28 |
| | | 17,25 | 2,8 | 2,80 | 5,15.10 ⁶ | 162 - 213 |
| Tube condenseur Conduite béton | 20°C | 3,19.10 ⁻⁴ | 0,015 | 1,81 | 2,69.10 ⁴ | 0,36 - 0,31 |
| | | 17,25 | 2,8 | 2,80 | 7,78.10 ⁶ | 173 - 237 |
| Tube condenseur Conduite béton | 30°C | 3,19.10 ⁻⁴ | 0,015 | 1,81 | 3,37.10 ⁴ | 0,38 - 0,33 |
| | | 17,25 | 2,8 | 2,80 | 9,76.10 ⁶ | 180 - 250 |
| Tube condenseur Conduite béton | 40°C | 3,19.10 ⁻⁴ | 0,015 | 1,81 | 4,12.10 ⁴ | 0,39 - 0,34 |
| | | 17,25 | 2,8 | 2,80 | 1,19.10 ⁷ | 186 - 263 |

(en m/s), R le rayon maximal et n le paramètre de la loi puissance qui dépend du nombre de Reynolds selon l'Équation 3.4 :

$$n = 0,915 \ln(Re) - 3,8 \quad (3.4)$$

La connaissance de profil dans les conduites permet de déterminer la vitesse en tout point mais aussi la vitesse limite puisque la seule vitesse connue est la vitesse moyenne calculée par bilan matière. Le rapport de la vitesse moyenne par rapport à la vitesse limite est obtenu en intégrant le profil de vitesse entre la paroi ($r = 0$) et le centre de la canalisation ($r = R$). Il vient donc la relation présentée par l'Équation 3.5.

$$\frac{u_{moy}}{u_{lim}} = \frac{n}{n+1} \quad (3.5)$$

En fonction de la nature du matériau de la conduite, la valeur de la rugosité ϵ (en m) entre en jeu et impacte fortement le facteur de friction de Darcy (f_D). La notion de rugosité est souvent exprimée par l'expression ϵ/d qui correspond à la taille des rugosités par rapport au diamètre de la conduite. Par l'expression de Colebrook (1939) et la résolution analytique de Haaland (1983), on obtient une expression analytique du facteur de friction en fonction de la rugosité et du nombre de Reynolds (Équation 3.6).

$$\frac{1}{f_D^{1/2}} = -1,8 \log_{10} \left[\frac{6,9}{Re} + \left(\frac{\epsilon/d}{3,7} \right)^{1,11} \right] \quad (3.6)$$

Une fois le profil de vitesse connu et le facteur de friction obtenu, il est possible de calculer la valeur

de la contrainte de cisaillement en paroi par l'Équation 3.7 obtenue à partir de l'équation de Darcy-Weisbach (White, 2011).

$$\tau_w = \frac{1}{4} f_D \frac{\rho u_{lim}^2}{2} \quad (3.7)$$

Grâce aux données de fonctionnement disponibles et aux différents modèles présentés, il est donc possible de caractériser les écoulements dans les conduites circulaires en charge et de calculer les différents paramètres nécessaires pour les modèles d'encrassement tels que les profils de vitesse ou les taux de cisaillement. Cependant, ces calculs ne sont valables que lorsque l'écoulement turbulent est établi or dans le cas des conduites béton, la plupart de la longueur des conduites dans les circuits de refroidissement se trouvent en régime turbulent non établi.

3.2.3 Cas des écoulements non établis

La longueur d'établissement pour les tubes de condenseurs étant très petite devant la longueur des tubes, il est donc possible d'utiliser les expressions analytiques définies précédemment. Pour les conduites en béton, il est nécessaire d'utiliser d'autres outils. Les simulations de MFN sur des géométries comme les conduites cylindriques sont prédictives pour caractériser les écoulements. Des simulations turbulentes en monophasique ont donc été réalisées pour obtenir les grandeurs caractéristiques de l'écoulement en fonction de la position dans le tube en régime non établi. Les résultats sont présentés dans le Chapitre 6.

3.3 Écoulements dans les garnissages industriels

3.3.1 Géométrie et nature des écoulements dans les garnissages

Comme présenté dans le Chapitre 1, il existe différentes géométries de garnissages utilisés dans les tours aéroréfrigérantes. Ils sont répartis en trois familles : les garnissages feuilles, les garnissages grilles et les garnissages hybrides.

Les garnissages feuilles qui correspondent à l'objectif principal de cette étude, sont composés de différentes feuilles de PVC thermoformées d'épaisseur de 0,6 mm suivant un motif sinusoïdal d'une période de 5 cm et d'une amplitude de 1,7 cm (Figure 3.4).

Les différentes feuilles sont collées entre elles en opposition de phase et sont perforées de trous circulaires sur la plupart de leur surface (exception faite des zones de collage). Les perforations sont d'un diamètre de 0,3 cm séparées les unes des autres de 1,25 cm. Le collage des feuilles en opposition de phase crée des canaux d'une largeur de 2,5 cm. Les caractéristiques géométriques du garnissage feuille

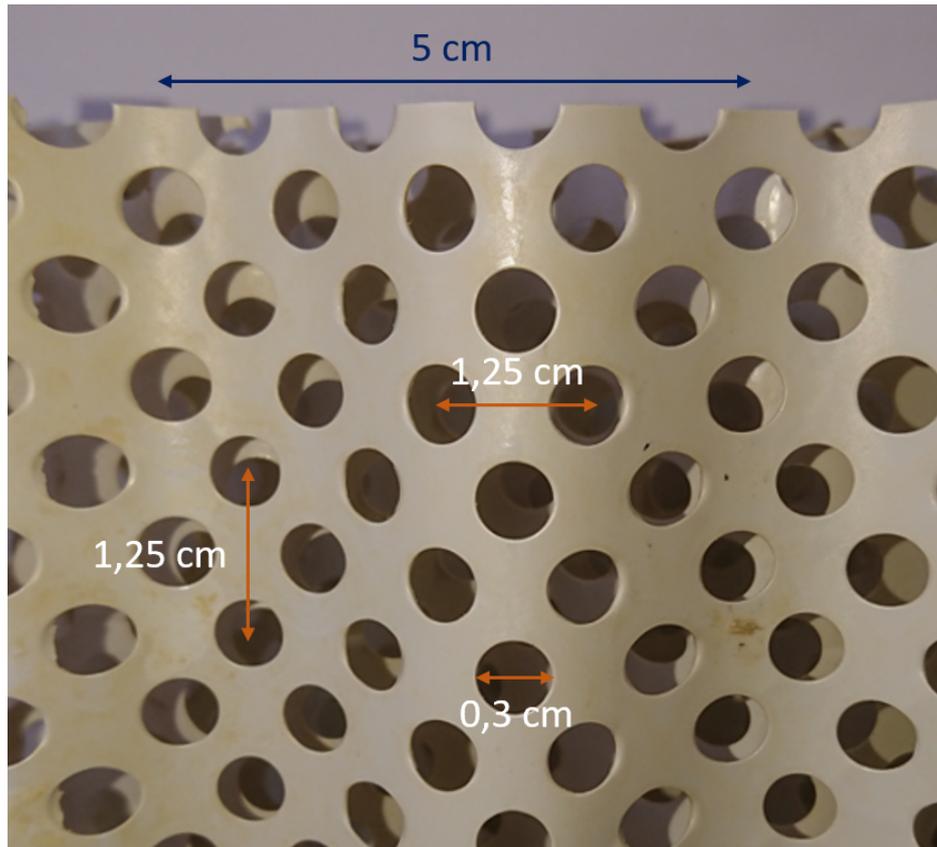


FIGURE 3.4 – Dimensions du garnissage feuille

sont résumées dans le Tableau 3.3.

TABLE 3.3 – Caractéristiques géométriques du garnissage feuille

| | |
|----------------------------|---------|
| Épaisseur feuille | 0,06 cm |
| Période | 5 cm |
| Amplitude | 1,7 cm |
| Longueur d'une période | 6,2 cm |
| <u>Perforations</u> | |
| Espacement | 1,25 cm |
| Diamètre | 0,3 cm |

Phénomènes en jeu et nombres adimensionnels

Dans le cas d'une paroi verticale de garnissage, quatre phénomènes physiques sont à prendre en compte pour comprendre la dynamique du film liquide ruisselant : l'inertie du fluide, la force gravitationnelle, les effets visqueux et la tension de surface. Les différentes forces résultantes n'ont pas la même intensité donc les mêmes effets sur le fluide. Afin de comparer les influences relatives de ces phénomènes, il est possible d'utiliser trois nombres adimensionnels : le nombre de Reynolds, le nombre

de Froude et le nombre de Weber.

Le nombre de Reynolds permet de quantifier les effets relatifs de l'inertie du fluide par rapport aux effets visqueux. Un nombre de Reynolds multiplié par 4 est souvent utilisé dans la littérature pour estimer l'équivalence en diamètre hydraulique d'une plaque plane infinie. Cependant, ce choix n'apporte aucun avantage particulier (Fulford, 1964) et a tendance à surestimer le rapport de ces forces. Nous avons donc choisi de garder le nombre de Reynolds dans sa définition originale (Équation 3.8). Cependant une étude plus approfondie de l'influence des phénomènes visqueux sera effectuée pour la couche limite visqueuse dans le film liquide. Le nombre de Froude (Équation 3.9) compare l'inertie à la force de la gravité. Le nombre de Weber (Équation 3.10) compare les effets de l'inertie à la tension de surface.

$$Re = \frac{\rho u \delta}{\mu} \quad (3.8)$$

$$Fr = \frac{u}{\sqrt{g\delta}} \quad (3.9)$$

$$We = \frac{\rho u^2 \delta}{\sigma} \quad (3.10)$$

avec ρ la masse volumique du liquide (kg/m^3), u la vitesse du liquide (m/s), δ l'épaisseur du film liquide (m), μ la viscosité dynamique du liquide ($\text{Pa}\cdot\text{s}$), g l'accélération gravitationnelle (m/s^2) et σ la tension de surface liquide/gaz (N/m).

Afin d'identifier les régimes de prédominance des forces par rapport aux autres, il est possible de tracer la valeur des nombres adimensionnels en fonction de la vitesse du fluide et de l'épaisseur du film. La Figure 3.5 représente cette comparaison dans le cas d'un liquide ayant les propriétés de l'eau ($\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$, $\mu = 1.10^{-3} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ et $\sigma = 0.0728 \text{ N/m}$ pour une température de 20°C et une pression de 1,013 bar). Les courbes pleines correspondent aux valeurs égales à 1 respectivement pour les nombres de Reynolds, de Weber et de Froude, c'est-à-dire à une égale influence des forces qu'ils représentent. De chaque côté, les surfaces colorées correspondent aux zones où les nombres adimensionnels évoluent entre des valeurs de 0,5 à 2. Par exemple, la zone rose est délimitée par des valeurs de Reynolds de 0,5 et 2, ce qui correspond respectivement à des forces de viscosité deux fois plus grandes que les forces d'inertie, et des forces d'inertie deux fois plus grandes que les forces de viscosité.

Grâce aux calculs d'ordres de grandeur réalisés, il est possible de délimiter la zone correspondant au régime d'écoulement dans les tours aéroréfrigérantes. Le graphique comparatif de l'importance relative des forces dans l'écoulement est présenté à la Figure 3.6.

Le domaine d'intérêt peut être divisé en quatre zones suivant l'influence relative de chaque force :

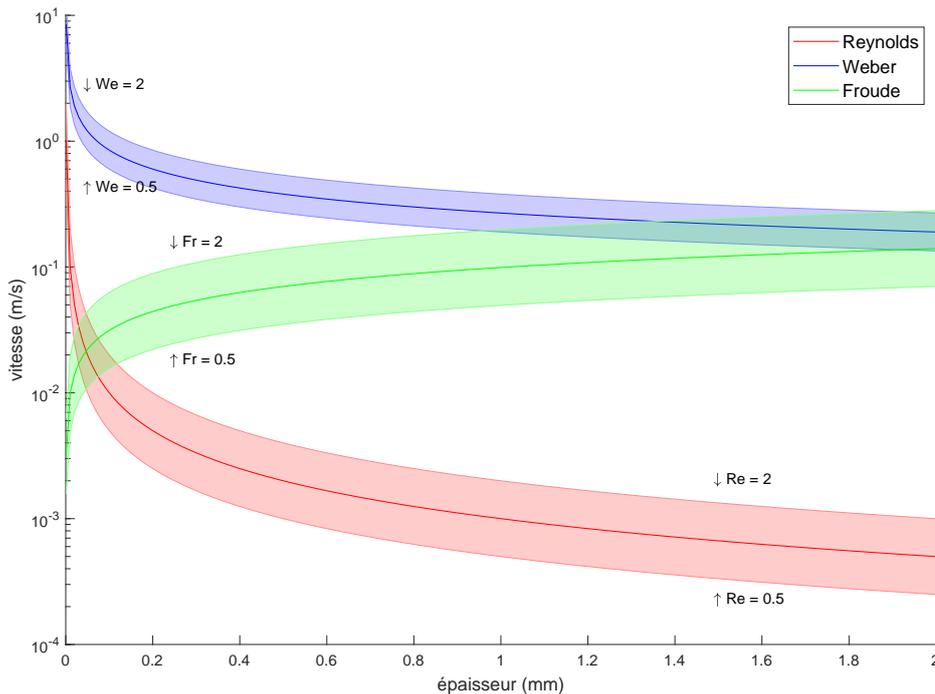


FIGURE 3.5 – Valeurs des nombres adimensionnels en fonction de la vitesse du liquide et de l'épaisseur de film pour de l'eau à 20°C

- Zone 1 : $F_{viscosité} < F_{gravité} < F_{tension\ de\ surface} < F_{inertie}$
- Zone 2 : $F_{viscosité} < F_{gravité} < F_{inertie} < F_{tension\ de\ surface}$
- Zone 3 : $F_{gravité} < F_{inertie} < F_{viscosité} < F_{tension\ de\ surface}$
- Zone 4 : $F_{viscosité} < F_{inertie} < F_{gravité} < F_{tension\ de\ surface}$

Dans le cas du garnissage des tours aéroréfrigérantes, les forces à prendre en compte en priorité sont donc la tension de surface et l'inertie du fluide, viennent ensuite la force due à la gravité et dans le cas d'une vitesse très faible, les effets de la viscosité. Un calcul d'ordre de grandeur réalisé pour de l'eau à 20°C avec une épaisseur de film de 500 μm et une vitesse de 15 cm/s (Zone 2) donne $Re = 75$; $Fr = 2,14$ et $We = 0,16$. Cela nous permet de déterminer un ordre de grandeur du ratio des forces prépondérantes dans le cas d'un tel film ruisselant sur une paroi verticale : l'inertie est 75 fois plus importante que la viscosité, 2 fois plus importante que la gravité et plus de 6 fois moins importante que la tension de surface.

$$F_{viscosité} \underset{\times 37,5}{<} F_{gravité} \underset{\times 2}{<} F_{inertie} \underset{\times 6}{<} F_{tension\ de\ surface}$$

C'est pourquoi il sera nécessaire d'accorder une attention particulière à la prise en compte et à la modélisation des phénomènes de tension de surface aussi bien à l'interface liquide/gaz qu'à l'interface

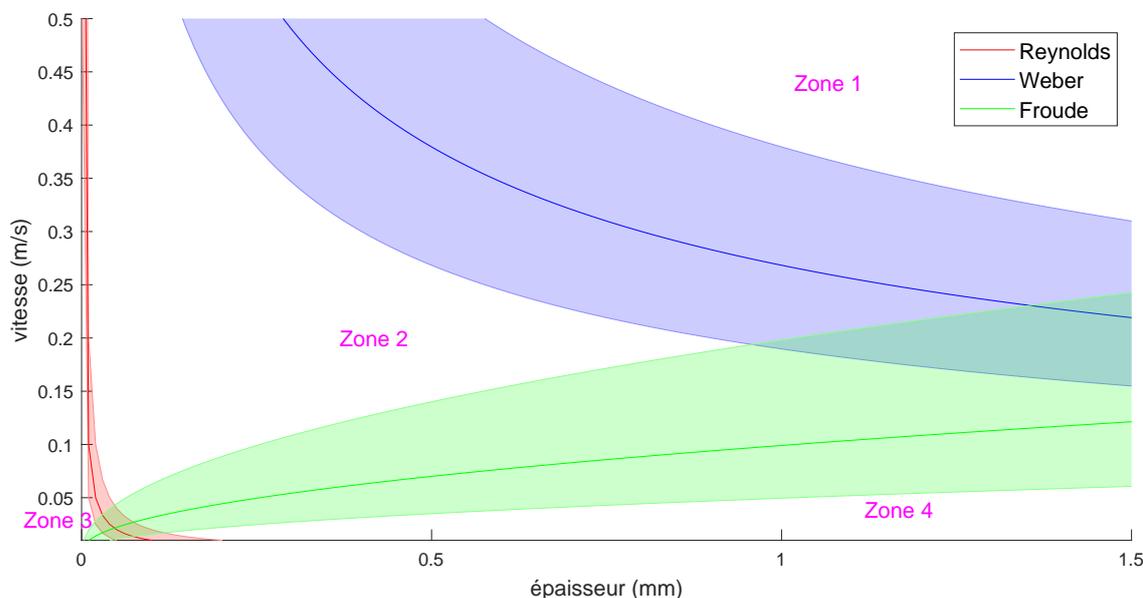


FIGURE 3.6 – Valeurs des nombres adimensionnels en fonction de la vitesse du liquide et de l'épaisseur de film pour de l'eau à 20°C - Focalisation sur les conditions de fonctionnement des tours aéroréfrigérantes et détermination des zones d'application des forces

liquide/solide.

3.3.2 Hydrodynamique à l'échelle système dans les garnissages industriels

Les garnissages structurés sont utilisés dans de nombreuses applications industrielles autres que les tours de refroidissement. Ces garnissages peuvent être composés de divers matériaux et les géométries peuvent être très différentes en fonction des applications. Il est possible de trouver dans la littérature, des informations concernant l'hydrodynamique et les régimes d'écoulements dans ces garnissages ainsi que de nombreuses études de performances. Même si ces garnissages industriels sont généralement différents des garnissages des tours aéroréfrigérantes, des techniques d'étude ainsi que certains résultats de ces travaux peuvent être transposés au cas particulier des garnissages de tours aéroréfrigérantes.

L'hydrodynamique est un phénomène primordial pour l'efficacité des opérations unitaires en Génie Chimique. Les phénomènes de transfert et l'influence de l'hydrodynamique ont été documentés par Danckwerts (2016). Rocha *et al.* (1993) ont proposé un modèle de l'hydrodynamique pour la conception des colonnes à distiller et évaluer les paramètres principaux pour plusieurs garnissages : la perte de charge, la rétention liquide, le mouillage et les coefficients de transfert de matière. D'autres auteurs comme Billet et Schultes (1999) ont proposé des corrélations en fonction des nombres adimensionnels

Re, Fr et We pour prédire l'aire interfaciale pour l'efficacité du transfert de matière.

Pour les applications du captage de CO₂, de nombreuses études pour caractériser l'hydrodynamique dans des garnissages ont été menées par notamment l'IFP Énergies Nouvelles. Plusieurs méthodologies expérimentales et numériques ont été appliquées dans les cas des colonnes à garnissages structurés. Fourati (2012) a caractérisé la dispersion liquide dans les garnissages structurés et vracs² en fonction des conditions opératoires. Lassauce *et al.* (2014) ont travaillé sur la perte de charge et le transfert de matière en s'intéressant à l'aire interfaciale dans différents garnissages. Solomenko (2016) s'est intéressé aux paramètres hydrodynamiques locaux tels que l'épaisseur et les angles de contact. Il a développé des méthodes expérimentales pour caractériser les écoulements dans le cas de garnissages structurés de type Mellapak et ainsi améliorer la prédiction de codes de simulations numériques.

Pavlenko *et al.* (2009) ont étudié les films ruisselants de liquide cryogénique sur une surface complexe perforée pouvant se rapprocher d'un garnissage industriel (type Sulzer 500Y). Les auteurs concluent notamment que les perforations ont une grande importance pour la bonne répartition du liquide et pour le transfert thermique.

Ces études réalisées avec des garnissages industriels nous permettent d'identifier des méthodes transposables aux cas particuliers des garnissages feuille, hybride et grille des tours aéroréfrigérantes. Dans tous les garnissages structurés, il a été observé qu'une grande partie des écoulements se fait sous forme de films liquides ruisselants sur les parois du garnissages. Des méthodes ont été développées dans la littérature pour caractériser expérimentalement ces films ruisselants.

3.3.3 Hydrodynamique locale dans les garnissages

De nombreux types d'écoulements peuvent être observés au sein d'une même structure. Charpentier *et al.* (1968) ont identifié et quantifié trois régimes principaux : les films ruisselants, les filets et les gouttes.

Théories de l'étude des films ruisselants

L'étude de la bibliographie sur les films ruisselants dans diverses configurations permet d'identifier des méthodes de caractérisation des phases dispersées qui peuvent être adaptées à l'étude des garnissages des tours aéroréfrigérantes.

L'hydrodynamique des films ruisselants sur des plans inclinés a été étudiée par Kapitza (1949), qui a défini des régimes hydrodynamiques. L'objectif de Kapitza était de définir un nombre de Reynolds critique à partir duquel le film ruisselant devenait instable et des perturbations sous forme de vaguelettes apparaissaient. Pour Kapitza, le nombre de Reynolds Re pour un fluide ruisselant dans un garnissage est

2. Le garnissage vrac correspond à un empilement de petits éléments de forme particulière remplissant le réacteur (e.g. colonne de distillation). Ce type de garnissage ne sera pas abordé dans cette thèse.

défini par l'Équation 3.11.

$$Re_K = \frac{4\Gamma}{\rho \cdot \nu} \quad (3.11)$$

avec Γ le débit massique linéique de liquide ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$) qui correspond au débit massique rapporté à la longueur de garnissage, ρ la masse volumique du liquide (kg/m^3) et ν la viscosité cinématique du liquide ($\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$).

Afin de définir les régimes d'écoulement des films, le nombre adimensionnel de Kapitza (Équation 3.12) a été défini comme le rapport de la longueur capillaire et de la longueur visco-gravitaire. La longueur capillaire prend en compte les effets de la tension de surface liquide/gaz par rapport à la gravité et la longueur visco-gravitaire les effets de la viscosité par rapport à la gravité. Le nombre de Kapitza permet donc de caractériser la stabilité de l'écoulement d'un film ruisselant (i.e. sa tendance à former des vaguelettes) et à prédire la nature de ces instabilités en identifiant le phénomène physique qui en est responsable. Cependant, le nombre de Kapitza n'est utilisable qu'avec une inclinaison non nulle.

$$Ka = \frac{\sigma}{\rho (g \cdot \sin \beta)^{1/3} \nu^{4/3}} \quad (3.12)$$

avec σ la tension de surface (N/m), g l'accélération gravitationnelle (m/s^2), et β l'angle d'inclinaison de la surface (rad).

Selon Shkadov (1967), si le nombre de Reynolds est inférieur à 100, alors un système analytique peut être utilisé afin d'estimer les caractéristiques de l'écoulement film (Équations 3.13 et 3.14). L'Équation 3.13 est le résultat du bilan des forces pour la chute d'un paquet de fluide soumis à la gravité et l'Équation 3.14 utilise l'hypothèse d'un mouillage total de la surface de la paroi pour lier débit et épaisseur par conservation de la masse.

$$\delta = \left(C \frac{\nu \cdot \Gamma}{g \cdot \rho} \right)^{1/3} \quad (3.13)$$

$$u = \frac{\Gamma}{\delta \cdot \rho} \quad (3.14)$$

avec δ l'épaisseur du film (m), a le paramètre de calage (kg/m^3) et u la vitesse moyenne du fluide dans le film (m/s). Pour l'Équation 3.13, la constante C est estimée égale à 0,75 (kg/m^3) par Sinkunas (2005).

Au-delà des surfaces verticales et des plans inclinés, de nombreuses études ont porté sur des films ruisselants sur des fils verticaux. Les paramètres de caractérisation des écoulements et les phénomènes observés restent très proches du cas d'étude des films ruisselants sur les parois verticales des garnissages.

L'étude de Duprat (2009) a permis la caractérisation des instabilités (épaisseur du film, fréquence des instabilités, étude de la réponse du film à une perturbation...) en faisant varier la viscosité du fluide.

En 2018, Xie *et al.* (2018) se sont intéressés à l'influence sur les écoulements ruisselants de perforations sur les plaques verticales. Plusieurs formes (rectangles, demi-lunes, cercles) et tailles de fenêtres ont été expérimentalement testées afin de caractériser les régimes d'écoulement. La publication met en évidence les valeurs de nombre de Reynolds minimales pour la formation d'un film dans la perforation.

Généralisation aux écoulements laminaires

Pour la détermination des contraintes de cisaillement, il est possible d'utiliser les corrélations de la littérature comme dans le cas des conduites expliqué précédemment. La formule de calcul de la contrainte de cisaillement reste la même (Équation 3.7) mais la détermination du facteur de friction est différente. En laminaire, ce coefficient est calculé par la loi de Hagen-Poiseuille (Équation 3.15).

$$f_D = \frac{64}{Re} \quad (3.15)$$

Cette relation s'applique aux écoulements laminaires en conduites cylindriques, mais elle permet d'avoir un ordre de grandeur des valeurs de coefficient de friction attendues et donc des contraintes de cisaillement.

3.3.4 Simulations de MFN dans les garnissages industriels

Un modèle de simulation des films verticaux ruisselants a été réalisé par Gao *et al.* (2003) en 2-dimensions. Les simulations utilisent les équations VOF (*Volume of Fluid*) pour prédire la position de l'interface liquide/gaz bien que les champs de vitesses du gaz ne soient pas pris en compte. Le modèle se concentre sur la perturbation de l'équilibre induite par la capillarité due aux forces de tension superficielles liquide/gaz pour simuler la position de l'interface et donc l'épaisseur lorsque le fluide est soumis à des perturbations imposées. Haroun *et al.* (2010; 2012) ont utilisé la même approche de simulation 2D en y ajoutant des équations de modélisation du transfert de matière pour un phénomène d'absorption gaz-liquide pour une étude de capture du CO₂. Avec le même type de modèles 2D, Zhu *et al.* (2010) et Hu *et al.* (2017) se sont intéressés aux cas des films ruisselants dits confinés : ces films sont d'abord supportés par une paroi verticale puis libre dans le vide comme dans le cas d'une perforation dans un garnissage industriel. Ce type de simulation permet de voir l'évolution de l'épaisseur lors de la formation d'une lentille d'eau dans une perforation du garnissage bien que la simulation 2D a tendance à forcer la formation de la lentille, ce qui revient à imposer un mouillage total même sans support.

Afin de s'affranchir du problème diphasique en 3D, certains modèles d'écoulements sur les

garnissages basés sur la MFN ont utilisé des simulations numériques monophasiques pour représenter la circulation de gaz dans des petits éléments périodiques représentatifs du garnissage (Petre *et al.*, 2003). La perte de charge ainsi calculée à sec est ensuite introduite dans le modèle diphasique (Iliuta *et al.*, 2004). Le modèle obtenu est capable de prédire la rétention liquide et le mouillage global³.

Les simulations du film liquide réalisées en 2D à l'échelle locale peuvent être utilisées dans un modèle multi-échelle avec les simulations 3D monophasiques du gaz. Raynal et Royon-Lebeaud (2007) ont utilisé les résultats de simulation de films en 2D à l'échelle de la corrugation (Raynal *et al.*, 2004) en association avec des simulations 3D des écoulements gaz à l'échelle de la maille du garnissage (élément représentatif du garnissage) pour prédire la perte de charge et ainsi obtenir un modèle de porosité pour le design à l'échelle de la colonne complète.

En 3-dimensions, Valluri *et al.* (2005) ont utilisé l'approche VOF pour simuler des épaisseurs de film liquide sur une surface sinusoïdale verticale. Pour ces simulations, le mouillage de la zone est supposé et fixé comme total. En VOF 3D, Xu *et al.* (2008) introduisent la notion de mouillage non total pour simuler les filets d'eau sur une plaque verticale et Ataki et Bart (2006) ont étudié les épaisseurs de film et le mouillage sur des structures élémentaires de garnissages en X. Ces trois études simulent l'épaisseur du film en se basant sur le modèle CFS (*Continuum Surface Force*) de Brackbill pour la tension de surface. Dans l'étude de Haroun *et al.* (2014), l'approche VOF avec modèle CFS se voit ajouter une prise en compte de l'angle de contact solide-liquide afin de pouvoir prédire le taux de mouillage sur la surface. Sur une plaque plane verticale comme cas test, ils ont montré que le mouillage augmente avec l'augmentation du nombre de Reynolds et du nombre de Weber comme présenté sur la Figure 3.7.

Cette même approche VOF a été utilisée par Sebastia-Saez *et al.* (2015) pour simuler les écoulements dans des géométries de garnissages industriels. Le développement du film ruisselant est simulé pour différents débits liquides, les résultats sont présentés à la Figure 3.8. Cela permet d'étudier l'influence du débit liquide sur le temps du régime transitoire et d'évaluer l'aire de l'interface gaz-liquide, paramètre primordial pour l'efficacité de l'absorption du CO₂.

Afin de simuler le plus fidèlement possible le mouillage d'un garnissage, Solomenko *et al.* (2017) ont utilisé une approche Level-Set pour caractériser l'interface liquide-gaz avec une prise en compte des lignes de contact dynamiques pour le ruissèlement liquide/solide.

Les principales caractéristiques des travaux présentés sont résumées dans le Tableau 3.4 regroupant : approches utilisées, simulations en 2D ou 3D, géométrie de travail et modèle de la tension de surface liquide/solide.

Cette synthèse des travaux de la littérature nous permet d'identifier l'approche VOF comme la méthode la plus utilisée. Cependant, quelle que soit l'approche choisie, une attention particulière doit

3. La simulation de MFN ne porte que sur les parties mouillées du garnissage, les parties sèches sont traitées à part

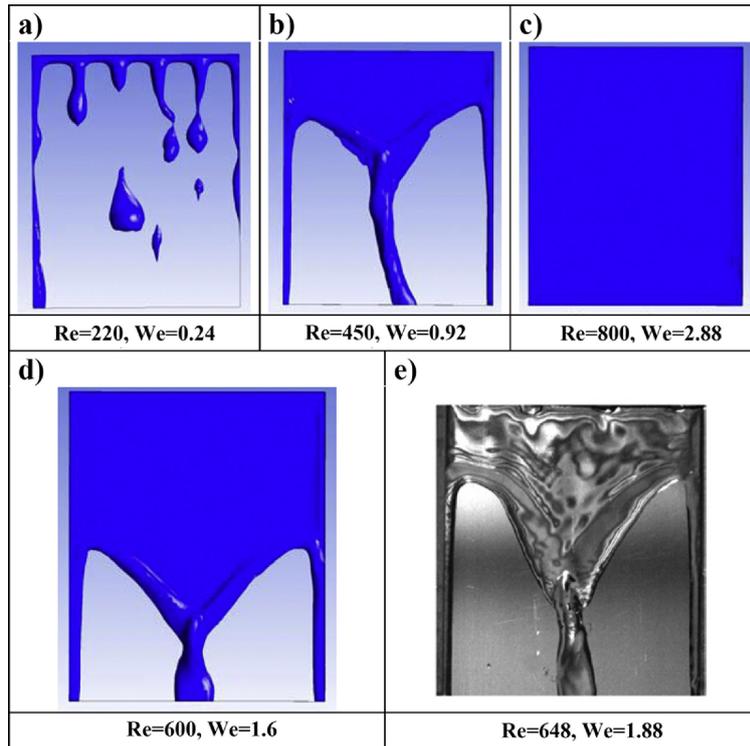


FIGURE 3.7 – Taux de mouillage apparent obtenu par simulations de MFN en fonction des nombres de Reynolds et de Weber comparé à un cas réel (Haroun *et al.*, 2014)

être portée à la manière de prendre en compte la tension de surface liquide/solide et au modèle choisi pour l'angle de contact par exemple.

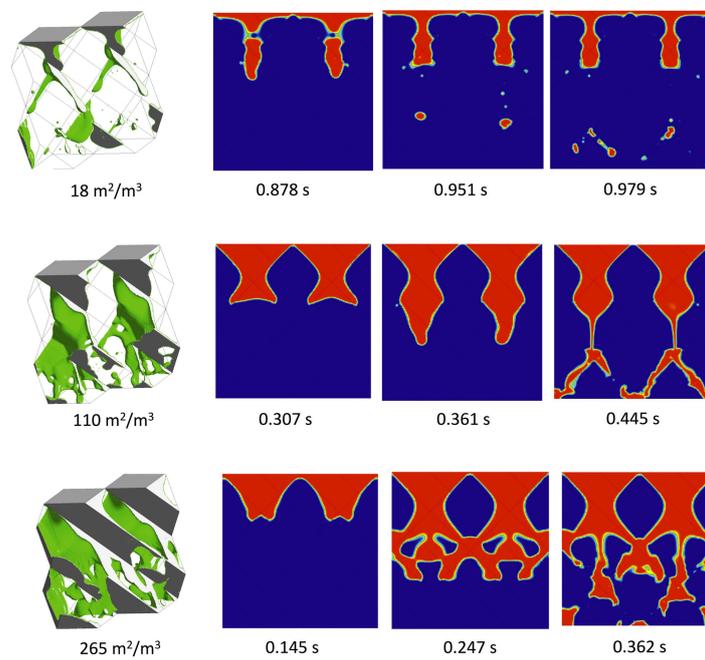
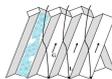
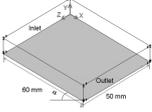
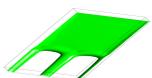


FIGURE 3.8 – Taux de mouillage apparent obtenu par simulations de MFN en fonction des débits liquides (Sebastia-Saez *et al.*, 2015)

TABLE 3.4 – Tableau de synthèse des simulations de MFN des films ruisselants dans la littérature

| Référence | VOF | Simulation liquide | | Modèle gaz/liquide | | Géométrie | Tension surface liquide/solide | |
|------------------------------------|-----|--------------------|----|--------------------|----|--|--------------------------------|-------------------|
| | | 2D | 3D | 2D | 3D | | Mouillage total | Angle de contact |
| Gao <i>et al.</i> (2003) | X | X | | X | |  | X | Pas de glissement |
| Haroun <i>et al.</i> (2010; 2012) | X | X | | X | |  | X | Pas de glissement |
| Zhu <i>et al.</i> (2010) | X | X | | X | |  | X | Pas de glissement |
| Hu <i>et al.</i> (2017) | X | X | | X | |  | X | Pas de glissement |
| Iliuta <i>et al.</i> (2004) | | X | | | X |  | X | / |
| Raynal <i>et al.</i> (2004; 2007) | X | X | | | X |  | X | Pas de glissement |
| Valluri <i>et al.</i> (2005) | X | X | | | X |  | X | Pas de glissement |
| Xu <i>et al.</i> (2008) | X | | X | | X |  | | Pas de glissement |
| Ataki <i>et Bart</i> (2006) | X | | X | | X |  | | Fixé, statique |
| Haroun <i>et al.</i> (2014) | X | | X | | X |  | | Fixé, statique |
| Sebastia-Saez <i>et al.</i> (2015) | X | | X | | X |  | | Fixé, statique |
| Solomenko <i>et al.</i> (2017) | X | | X | | X |  | | Modèle dynamique |

Du fait des fluides utilisés dans les applications industrielles évoquées précédemment et des régimes habituels d'alimentation des colonnes à garnissage, les simulations et les résultats disponibles dans la littérature ne sont pas directement transposables au cas des tours aéroréfrigérantes (Bravo *et al.*, 1985; Raynal *et al.*, 2004).

Pour les opérations unitaires classiques de Génie Chimique, la corrélation de Morris et Jackson (1953) (équation 3.16) permet d'évaluer le taux d'arrosage minimal jugé nécessaire pour avoir un taux de mouillage suffisant pour le bon fonctionnement des colonnes à garnissages. Inversement, au-delà d'une certaine vitesse liquide, une partie de l'écoulement ne ruissèle plus le long du garnissage et cela conduit à la réduction de l'efficacité des phénomènes de transfert (Trambouze *et al.*, 1984).

$$2,58.10^{-5} < \frac{Q}{a_0} < 1,94.10^{-4} \text{ m}^2/\text{s} \quad (3.16)$$

avec Q le taux d'arrosage ($\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$) et a_0 la surface spécifique du garnissage (m^2/m^3).

La valeur minimale recommandée est de $2,58 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ alors que pour les tours aéroréfrigérantes, la valeur calculée (pour un taux d'arrosage de $10 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$) est de l'ordre de $1,8 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$. Les systèmes des tours aéroréfrigérantes se situent donc en dessous de la limite inférieure du mouillage idéal et donc aussi très loin de l'engorgement (Eckert, 1970). Ces calculs d'ordres de grandeur ne remettent pas en cause la nature du refroidissement direct à contre-courant, mais permettent de confirmer la particularité des tours aéroréfrigérantes à garnissages comparé aux autres utilisations classiques en Génie Chimique qui servent de références méthodologiques. Ils permettent aussi de mettre en évidence le caractère chaotique des écoulements puisque le mouillage ne sera pas total (Charpentier, 1976). Comme expliqué précédemment, si la structure du garnissage feuille n'est pas optimale pour le mouillage c'est pour minimiser les pertes de charge et ainsi éviter le recours à des ventilateurs pour pousser l'air en bas des tours (tirage naturel).

En complément, il est possible de comparer les régimes de fonctionnement d'un garnissage de tour aéroréfrigérante avec des garnissages utilisés pour les opérations unitaires classiques de Génie Chimique. Pour cela, la représentation sous forme de diagramme de Wallis permet de tracer la racine carrée du facteur de capacité gaz C_G (Équation 3.17) en fonction de la racine carrée du facteur de capacité liquide C_L (Équation 3.18) (Wallis, 1969) pour la gamme d'opération des garnissages étudiés.

$$C_G = \frac{u_G}{\epsilon} \left(\frac{\rho_G}{\rho_L - \rho_G} \right)^{0,5} \quad (3.17)$$

$$C_L = \frac{u_L}{\epsilon} \left(\frac{\rho_L}{\rho_L - \rho_G} \right)^{0,5} \quad (3.18)$$

avec u_G la vitesse du gaz en fut vide (m/s), u_L la vitesse du liquide en fut vide (m/s), ϵ le taux de vide du garnissage, ρ_G la masse volumique du gaz (kg/m^3), ρ_L la masse volumique du liquide (kg/m^3).

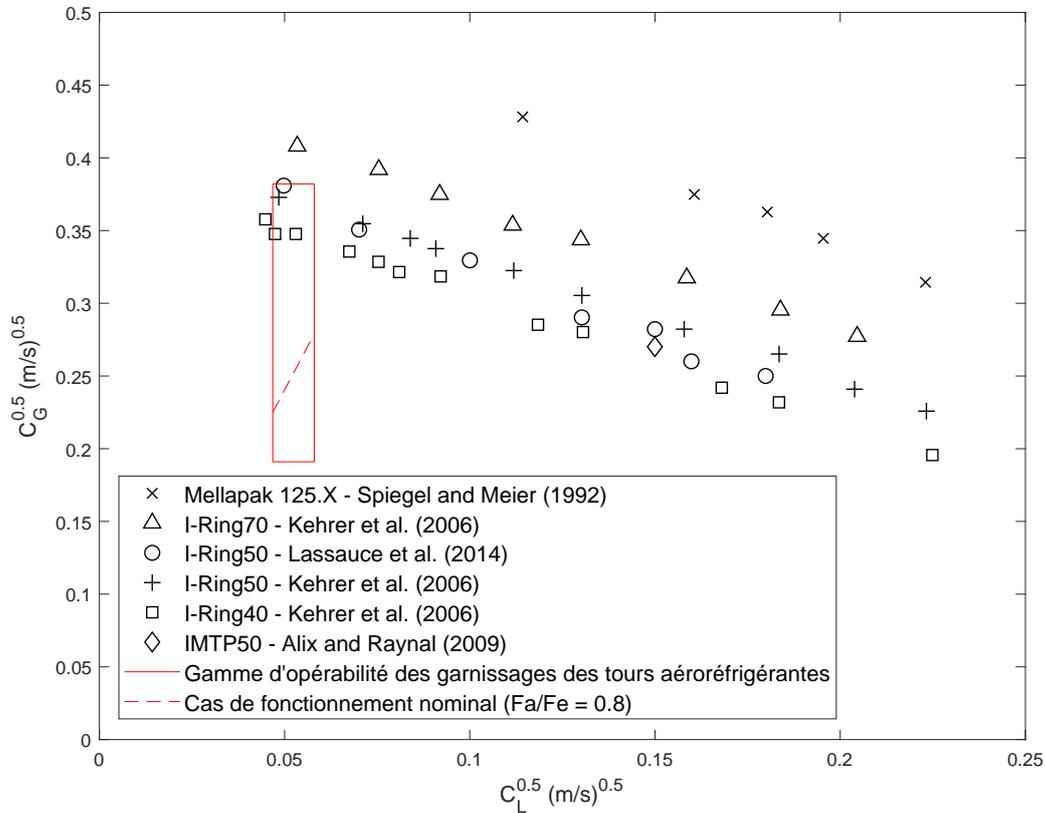


FIGURE 3.9 – Diagramme de Wallis permettant de comparer les gammes de fonctionnement du garnissage feuille avec différents garnissages industriels de surface spécifique similaire (adapté de Lassauce *et al.* (2014))

La Figure 3.9, adaptée de la publication de Lassauce *et al.* (2014), présente la comparaison de la gamme de fonctionnement du garnissage feuille avec différents garnissages industriels dont la surface spécifique est comprise entre 60 et 150 m^2/m^3 . Le cadre rouge sur la Figure 3.9 présente la gamme d'utilisation du garnissage feuille c'est-à-dire un taux d'arrosage compris entre 7,5 et 11,5 $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ et une vitesse d'air à contre courant comprise entre 1 et 4 m/s. La ligne en pointillés présente, dans cette gamme, le point de fonctionnement classique considéré pour une valeur constante du rapport du débit massique d'air sur le débit massique d'eau Fa/Fe égale à 0,8.

Ces comparaisons et ces différences majeures entre les garnissages des tours aéroréfrigérantes et d'autres garnissages industriels justifient d'avantage la nécessité d'une étude spécifique des garnissages des tours aéroréfrigérantes avec du matériel et des méthodes spécifiques.

3.3.5 Stratégie de caractérisation des écoulements dans les garnissages

Pour les garnissages des tours aéroréfrigérantes, la nature des écoulements est inconnue. La géométrie du garnissage feuille permet de faire l'hypothèse d'un écoulement majoritairement sous forme de film ruisselant et le reste sous forme de filets ou de gouttes. L'étude de la théorie des films ruisselants et le calcul des trois nombres adimensionnels pertinents (Re , Fr et We) permettent d'identifier le régime d'écoulement ainsi que les phénomènes physiques prédominants dans différentes conditions opératoires possibles. Même si l'hydrodynamique dans les garnissages des tours aéroréfrigérantes est très peu documentée dans la littérature, une étude bibliographique concernant les garnissages industriels pour des applications différentes a permis d'identifier des grandeurs d'études pertinentes et des méthodes de caractérisation de l'hydrodynamique aux échelles globales et locales.

Afin de pleinement caractériser les écoulements dans les garnissages des tours aéroréfrigérantes, un dispositif expérimental de tour aéroréfrigérante à échelle réduite a été conçu et exploité au LRGP afin d'observer ces écoulements et de mesurer les grandeurs physiques pertinentes (e.g. épaisseur de film, taux de mouillage...). La démarche de conception du dispositif expérimental et les résultats de la caractérisation sont présentés au Chapitre 4. En complément, l'outil de MFN a été choisi comme une bonne manière d'obtenir les informations non disponibles expérimentalement. Des simulations de MFN ont donc été réalisées afin de reproduire les écoulements ruisselants sur le garnissage feuille et d'obtenir les grandeurs hydrodynamiques voulues (e.g. vitesse, épaisseur de film, taux de rétention liquide...). Le détail des calculs réalisés et les résultats des simulations sont présentés au Chapitre 5. Enfin, le Chapitre 6 présentera la synthèse des conditions hydrodynamiques dans toutes les parties du circuit avec la synthèse des chapitres 4 et 5 sur les garnissages, mais aussi tous les résultats de la caractérisation hydrodynamique du bassin froid, des conduites en béton et des tubes de condenseur.

3.4 Conclusion

Ce chapitre a synthétisé les informations disponibles dans la littérature ainsi que les méthodes envisageables pour caractériser les écoulements dans les différentes parties du circuit de refroidissement.

Pour les bassins froids, la géométrie particulière, la grande taille du système et les temps de séjour supposés très variables rendent impossible la prédiction des écoulements a priori. Cependant, les outils de MFN sont parfaitement adaptés pour les simulations de ce type de problème. Ainsi, il est possible d'obtenir une description locale de l'hydrodynamique dans le bassin en utilisant les codes de calculs de MFN. Ces résultats sont présentés au Chapitre 6.

Pour les écoulements dans les conduites, de nombreuses données sont disponibles et des expressions analytiques existent pour calculer les différents paramètres d'intérêt dans les cas des régimes de

turbulence établis. Dans le cas des conduites en béton dans lesquelles la turbulence n'a pas le temps de s'établir pleinement, des simulations de MFN prédictives ont été réalisées et présentées au Chapitre 6.

Pour les écoulements dans les garnissages, les travaux dans la littérature portent sur des garnissages industriels et des conditions opératoires différents de ceux utilisés dans les tours de refroidissement. Il apparaît donc nécessaire de mener une étude approfondie afin de caractériser précisément les écoulements dans ces garnissages spécifiques. Cette étude préliminaire a permis de mettre en évidence l'importance des forces de tension de surface dans la formation des films et du taux de mouillage en général. Une attention particulière devra être apportée à la modélisation de ces forces. Pour cela, une étude expérimentale à l'aide d'un dispositif à échelle réduite d'une tour aéroréfrigérante et des simulations de MFN ont été réalisées et détaillées dans les chapitres ultérieurs.

Caractérisation expérimentale des écoulements dans les garnissages

L'étude bibliographique des écoulements dans les garnissages industriels a mis en évidence un manque de données concernant le cas particulier des garnissages des tours aéroréfrigérantes (e.g. vitesse du fluide, taux de mouillage, épaisseur du film). Il était donc nécessaire de caractériser les écoulements dans ces garnissages particuliers et de construire un dispositif expérimental spécifique. Une première étape vise à observer les écoulements dans un dispositif à l'échelle pilote dans des conditions hydrodynamiques réelles puis à mesurer les grandeurs caractéristiques importantes pour les futurs modèles. Dans un second temps, des simulations ont été réalisées afin de reproduire numériquement les écoulements dans les garnissages (Chapitre 5). La synthèse de tous les résultats obtenus sur la caractérisation hydrodynamique des garnissages est présentée dans le Chapitre 6.

4.1 Dispositif expérimental de caractérisation des écoulements

Afin de caractériser les écoulements tout en étant représentatif d'une tour aéroréfrigérante industrielle humide à contre-courant, un dispositif expérimental à l'échelle pilote a été conçu et construit par l'atelier du LRGP dans le but d'observer et de caractériser les écoulements en mesurant les paramètres hydrauliques. L'objectif est de visualiser les films liquides ruisselants sur les garnissages et la position de l'interface liquide/gaz pour ainsi mesurer l'épaisseur du film et le taux de mouillage. Ces grandeurs hydrodynamiques doivent pouvoir être étudiées en fonction de différents paramètres des écoulements : débit d'air et débit d'eau.

4.1.1 Objectif du dispositif et représentativité

L'objectif principal du dispositif expérimental est de pouvoir observer, caractériser et mesurer les paramètres des écoulements liquide-gaz d'une tour aéroréfrigérante industrielle.

Afin de pouvoir visualiser les écoulements et adapter diverses méthodes de mesure, le choix s'est porté sur la réalisation d'un pilote transparent modulaire : les différentes parties de la tour devaient pouvoir être observées et accessibles facilement au cours des campagnes expérimentales. Pour être représentatif des écoulements au sein du garnissage, la même hauteur de garnissage que dans une tour industrielle doit pouvoir être installée dans le dispositif (entre 1,20 m et 1,50 m). Une telle hauteur permet de s'affranchir du régime transitoire dû à l'aspersion (en haut du garnissage) ou à la répartition de l'air (en bas du garnissage). En raison des contraintes d'espace et de la volonté d'étudier une hauteur suffisante de garnissage, la hauteur du dispositif a été fixée à 3 m. Afin de s'affranchir des effets de bords, tout en gardant des débits d'air raisonnables pour les vitesses voulues (utilisation d'une soufflante industrielle), la taille du dispositif a été fixée à une section carrée de 20 cm de côté (échelle 1 :160000). La taille choisie permet d'observer une dizaine de canaux de garnissages.

Les débits surfaciques d'eau et d'air ont été conservés et l'ensemble des conditions opératoires ont été balayées. Sur une tour aéroréfrigérante, l'arrivée de l'eau se fait sous forme d'aspersion ; la quantité d'eau est alors exprimée à l'aide du taux d'arrosage qui correspond à un débit volumique de fluide par unité de surface. Le taux d'arrosage est exprimé en $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$. Pour pouvoir représenter les différentes tours, le taux d'arrosage doit pouvoir être ajusté autour de la valeur moyenne des aéroréfrigérants qui est de $10 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$.

Le dispositif expérimental doit être capable de reproduire les variations de débit d'air. En effet, le débit d'air circulant dans une tour est très dépendant des conditions météorologiques. De plus, le tirage naturel et le diamètre important de la tour provoquent une hétérogénéité au sein d'une même section horizontale de garnissage. Ainsi, localement les vitesses d'air peuvent être comprises entre 0,5 et 3 m/s (Tonello *et al.*, 2017). Pour assurer la précision des débits, des débitmètres asservis à des boucles de régulations ont été mis en place. De même, les cycles jour/nuit et les variations saisonnières provoquent une grande disparité des températures et du refroidissement, pour cela, la température a pu être ajustée sur une large gamme (20 à 32 °C) afin de balayer les configurations de refroidissement possibles. Il est important de noter que chaque tour aéroréfrigérante est unique et que chaque site industriel présente des spécificités de conception et d'opération. Le choix de l'utilisation de valeurs moyennes et la possibilité de faire varier chaque paramètre permettent de donner un caractère transposable au dispositif permettant de fonctionner dans la gamme des tours aéroréfrigérantes industrielles (Hartmann *et al.*, 2014).

Le dispositif expérimental doit aussi pouvoir être utilisé pour évaluer les phénomènes de transfert. Pour le transfert de masse, la mesure de l'évaporation avec des capteurs de température et d'humidité dans l'air en entrée et en sortie permet de déterminer la quantité d'eau évaporée par bilan de matière. Pour le transfert thermique, des sondes de température placées en entrée et en sortie dans le circuit

d'eau permettent d'évaluer le refroidissement par bilan thermique. Il est aussi possible de suivre le profil de température dans le garnissage en plaçant des capteurs de température à plusieurs niveaux dans la colonne.

Enfin, le dispositif devant être utilisé par un opérateur, des conditions de sécurité ont été respectées : plateforme de travail pour changer les modules en hauteur, traitement de l'eau du bac pour éviter tout développement microbien. L'installation a été contrôlée par le responsable sécurité d'EDF.

4.1.2 Présentation du dispositif expérimental

Le dispositif expérimental peut être divisé en trois parties principales : le circuit d'alimentation en eau, le circuit d'alimentation en air et la colonne d'acquisition. Le schéma des deux circuits et de la colonne est présenté à la Figure 4.1.

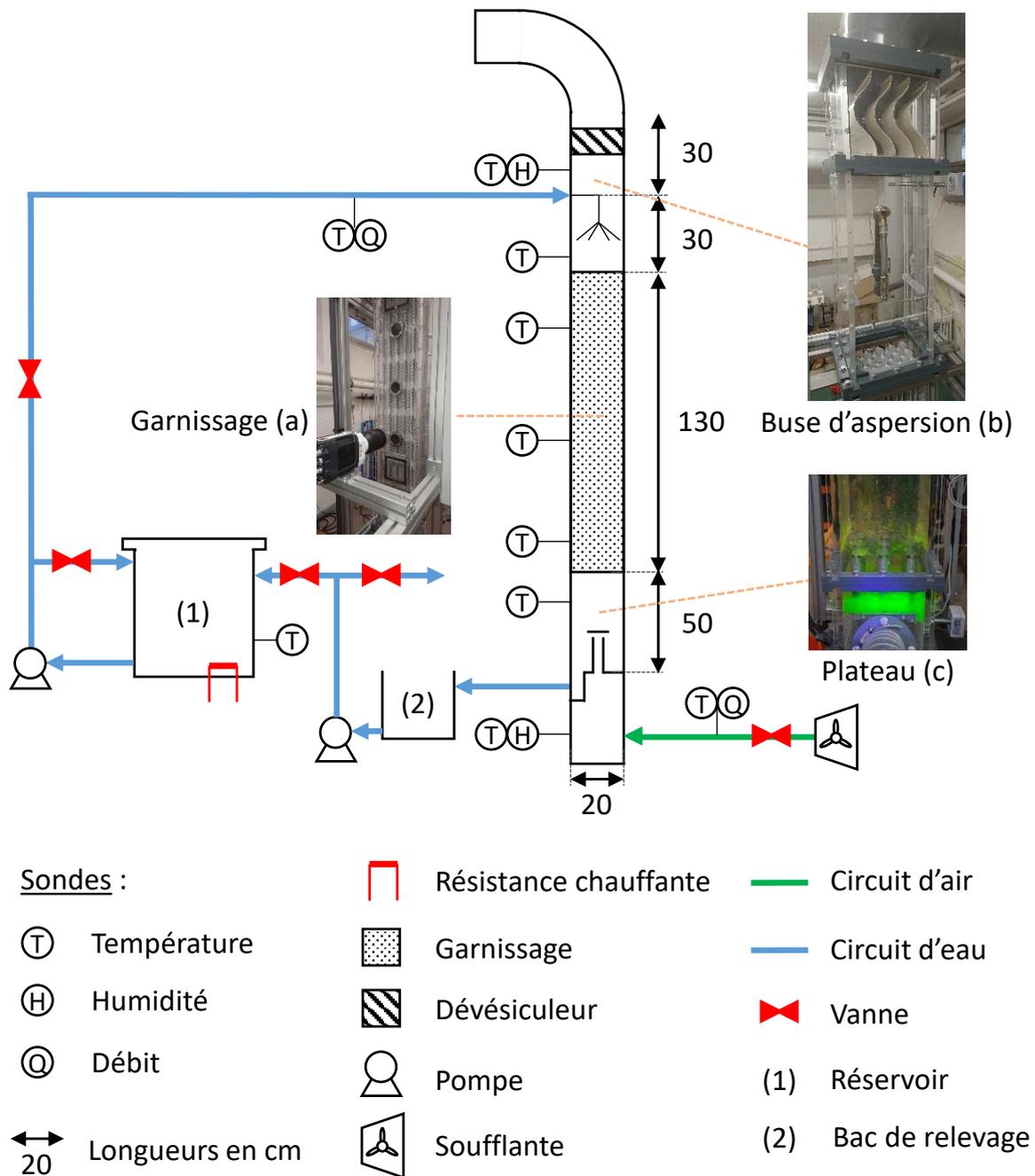


FIGURE 4.1 – Schéma de procédé du dispositif expérimental

Colonne d'acquisition et de visualisation La colonne d'acquisition est divisée en cinq modules de haut en bas sur la Figure 4.1 : le module d'évacuation de l'air, le module d'aspersion du liquide, le module du garnissage, le module de la pluie froide et le module de distribution du gaz et de récupération du liquide.

Le module d'évacuation de l'air contient un dévésiculateur et, dans un souci de représentativité, le

dévésiculeur utilisé est le même que celui utilisé sur les tours industrielles. Il est certifié conforme à la réglementation ICPE (rubrique 2921) qui certifie un débit liquide en sortie de dévésiculeur inférieur à 0,01% du débit liquide entraîné. Juste en dessous du dévésiculeur, un capteur d'humidité et température permet de caractériser l'air en sortie du dispositif.

Le module d'aspersion du liquide contient une buse de section carrée permettant l'arrosage uniforme de la section supérieure du garnissage (image (b) sur la Figure 4.1). L'eau chaude sortant de la buse et pulvérisée dans ce module est l'équivalent de la pluie chaude. Deux sondes de température sont placées sur le circuit d'eau : l'une juste avant la buse afin de mesurer la température d'entrée du liquide et l'autre dans la pluie chaude.

Le module contenant le garnissage est le corps de la colonne. Ce module de 1,30 m de hauteur est équipé de deux trappes d'accès et de trois ouvertures permettant le passage de la caméra endoscopique afin de permettre la visualisation des écoulements jusque dans le cœur du garnissage (image (a) sur la Figure 4.1). Trois sondes de températures sont disposées sur la hauteur du garnissage afin de pouvoir obtenir le profil de température au fur et à mesure du refroidissement.

Le module sous le garnissage permet d'observer le décrochement des gouttes du garnissage. L'eau tombant du garnissage dans ce module est l'équivalent de la pluie froide. Une sonde de température permet de suivre l'influence de cette pluie froide sur le transfert thermique.

Enfin, le module de distribution du gaz contient un plateau à cheminées : ce plateau permet à la fois la distribution homogène du gaz grâce à des cheminées à chapeaux et la récupération du liquide de la pluie froide qui coule entre les cheminées (image (c) sur la Figure 4.1). Sous le plateau, un capteur placé dans le bloc d'arrivée d'air permet de mesurer l'humidité et la température de l'air en entrée du dispositif. Une sonde de température mesure la température de sortie de l'eau après son passage dans le plateau récupérateur.

La colonne est soutenue par une structure métallique qui permet la fixation d'un support pour les outils de visualisation. Le support peut être déplacé selon les 3 directions pour faciliter la focalisation des caméras de visualisation.

Circuit d'alimentation en eau Le circuit d'alimentation d'eau (en bleu sur la Figure 4.1) est alimenté par un réservoir d'une capacité de 500 litres équipé d'une sonde de température et de deux résistances chauffantes de 5000 Watts afin de pouvoir mesurer et réguler la température de l'eau pour les besoins du plan d'expérience (élément (1) sur la Figure 4.1). Le réservoir est ensuite relié à la pompe principale permettant d'alimenter le haut de la colonne au niveau de la buse d'aspersion. Un débitmètre relié à une électrovanne assure le contrôle du débit, la pompe peut assurer un débit allant jusqu'à 460 l/h ce qui assure un taux d'arrosage maximal de $11,5 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$. Une fois que l'eau a ruisselé sur les garnissages et

est récupérée dans le plateau, elle coule ensuite hors de la colonne par gravité dans un bac intermédiaire appelé bac de relevage (élément (2) sur la Figure 4.1) permettant, à l'aide d'une pompe et d'un détecteur de niveau, de renvoyer l'eau vers le réservoir initial lorsque celui-ci est plein.

Circuit d'air Le circuit d'air (en vert sur la Figure 4.1) est alimenté par une soufflante industrielle permettant d'obtenir un débit d'air pouvant aller jusqu'à $390 \text{ Nm}^3/\text{h}$ ce qui correspond à des vitesses moyennes d'air en fût vide de l'ordre de $2,6 \text{ m/s}$ dans la colonne. Un débitmètre complète le circuit d'alimentation et un variateur de fréquence a été installé sur l'alimentation de la soufflante afin de réguler le débit. En haut de la colonne, un tuyau coudé permet la récupération de l'air passé par le dévésiculateur et le rejet dans l'atmosphère.

4.1.3 Conception et validation des éléments

La principale difficulté de conception résidait dans la nécessité d'avoir une répartition homogène des phases liquide et gaz : une vitesse d'air identique sur toute la section de colonne en entrant dans le bas du garnissage et un taux d'arrosage uniformément réparti sur la partie supérieure du garnissage. Pour la répartition du gaz, la technologie d'un plateau à cheminées avec chapeaux a été choisie. Ce système consiste en un plateau situé au-dessus du bloc d'arrivée d'air de la colonne et percé d'un nombre défini de cheminées avec chapeau afin de créer une perte de charge suffisante permettant une redistribution homogène de l'air. Le rétrécissement en entrée des cheminées, l'élargissement à la sortie et la présence des chapeaux assurent une perte de charge suffisante pour compenser la perte de pression due à l'élargissement lors de l'arrivée du tuyau d'alimentation dans la colonne. Le Perry's Chemical Engineers' Handbook (Green et Perry, 2007) permet de déterminer le nombre optimal de cheminées ainsi que leur diamètre afin de générer la perte de charge optimale : déterminer la valeur limite de la perte de charge pour obtenir une bonne répartition du gaz tout en minimisant la perte de charge totale dans tout le système. Les calculs ont permis de concevoir un plateau à neuf cheminées de diamètre interne de 20 mm . Le plan de conception est présenté sur la Figure 4.2.

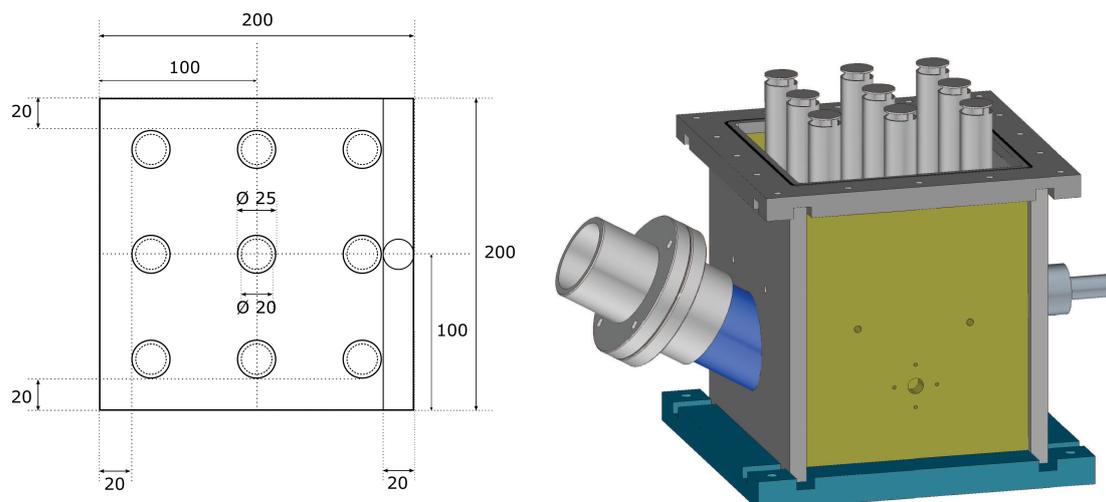


FIGURE 4.2 – Plan et dimension du plateau de distribution gaz (gauche) et schéma de conception 3D (droite)

La conception du dispositif de répartition du gaz a ensuite été validée par simulations de MFN. Un maillage de la conduite d'alimentation, du bloc d'arrivée d'air, du plateau à cheminées et de la colonne vide a été réalisé. À l'aide d'une approche monophasique en régime turbulent (modèle k-epsilon) sur CODE_SATURNE, des simulations ont été réalisées pour une colonne avec et sans le plateau distributeur de gaz. Deux cartographies des champs de vitesses du gaz sur des coupes horizontales effectuées 30 cm au-dessus des cheminées sont présentées à la Figure 4.3. On observe que dans le cas du plateau, la différence entre les débits extrêmes est divisée par 3 et que la répartition est plus homogène. En raison du rôle de récupérateur de pluie du plateau, il est important de noter qu'en plus du dispositif de répartition du gaz, lors du fonctionnement de la colonne, la pluie froide tombant du garnissage induit une perte de charge supplémentaire qui favorise l'homogénéisation des champs de vitesses du gaz dans le bas de la colonne.

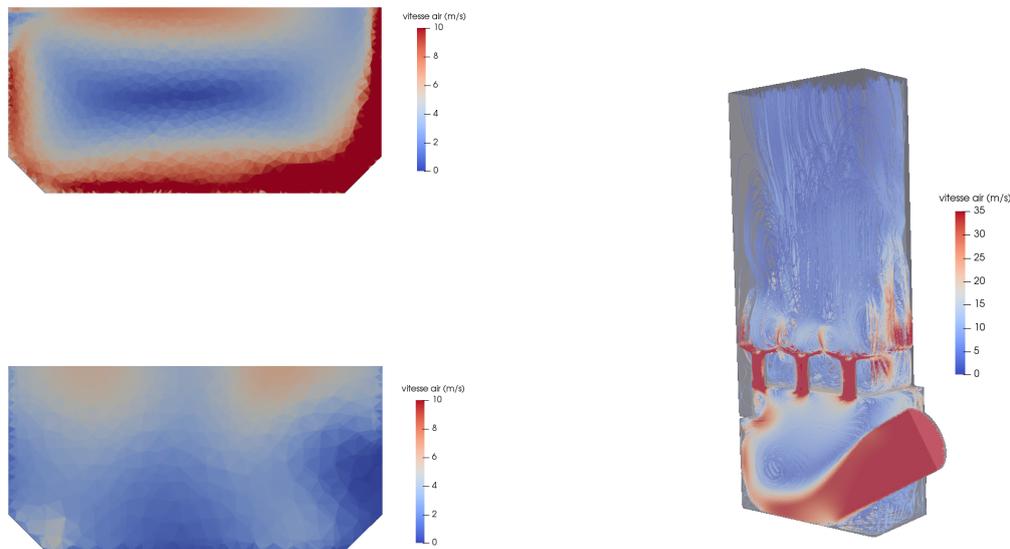


FIGURE 4.3 – Champs de vitesses d’air pour une coupe horizontale : sans plateau de distribution (gauche-haut) et avec plateau de distribution à cheminées (gauche-bas) - Lignes de courant et vitesses d’air obtenues par simulations de MFN (droite)

Concernant l’aspersion liquide, reproduire exactement l’aspersion des buses d’aéroréfrigérant est impossible car la distribution sur les vraies tours de refroidissement est effectuée par des buses à cônes creux qui s’intersectent. L’échelle laboratoire du dispositif empêche de reproduire cette technique d’aspersion. Un module de distribution liquide gravitaire par plateau troué a d’abord été imaginé afin de reproduire le débit mais aussi de fixer la taille des gouttes. Cependant, une telle géométrie de plateau induisait beaucoup trop de pertes de charge et nécessitait une pression très importante côté liquide. Le choix s’est donc ensuite orienté vers une technologie de buses à cône plein de sections carrées assurant un débit homogène sur l’ensemble de la surface du garnissage. Des mesures réalisées par empotage dans la colonne ont permis d’évaluer à 10% l’écart maximal d’arrosage entre le centre de la colonne et les parois avec ce type de buse.

4.2 Méthodes expérimentales

Une fois le dispositif réalisé, différentes techniques et méthodes expérimentales ont pu être utilisées afin d’obtenir les épaisseurs de films et les taux de mouillage sur les garnissages. Il est alors nécessaire de sélectionner la méthode adéquate au système et aux conditions étudiées.

4.2.1 Méthodes expérimentales de mesure et de caractérisation des films ruisselants

De nombreuses méthodes sont disponibles dans la littérature afin de caractériser expérimentalement les écoulements diphasiques. Nous allons nous intéresser particulièrement ici aux cas d'une phase liquide dispersée dans une phase gaz à contre-courant (gouttes d'eau dans l'air pour les aérorefrigérants) et des films et filets liquides avec du gaz à contre-courant (ruissèlement de l'eau le long du garnissage). Pour mesurer les épaisseurs de films liquides, diverses méthodes ont été détaillées dans la littérature. Un aperçu assez complet des diverses méthodes de mesure a été proposé par Tibirica *et al.* (2010). Ces méthodes peuvent être classées selon plusieurs critères : la technique de mesure utilisée, le caractère intrusif ou non de la mesure, la gamme d'épaisseur mesurée et l'application possible aux garnissages considérés dans cette thèse.

— Méthodes par ultrasons

Les méthodes acoustiques sont basées sur l'utilisation d'ondes ultra-sonores. L'onde est émise puis captée après réflexion sur l'interface gaz-liquide ce qui permet la mesure de l'épaisseur du film connaissant la vitesse de l'onde. Un schéma de la méthode est présenté Figure 4.4. Lu *et al.* (1993) ont mesuré l'épaisseur de films de condensation de fluides frigorigènes pouvant aller de 180 μm à 600 μm . Kamei et Serizawa (1998) ont mesuré des épaisseurs de film liquide avec une précision de 75 μm pour un film avec perturbations. Pour Pedersen *et al.* (2000), la précision de la mesure de films de condensation sous faible gravité est abaissée à 50 μm . Les techniques acoustiques présentent une bonne précision de mesure, mais restent difficiles à mettre en place car la propagation de l'onde doit se faire dans un fluide parfaitement pur (pas de gouttes ni de bulles). De plus, le film doit être parfaitement uniforme sur la surface (mouillage total).

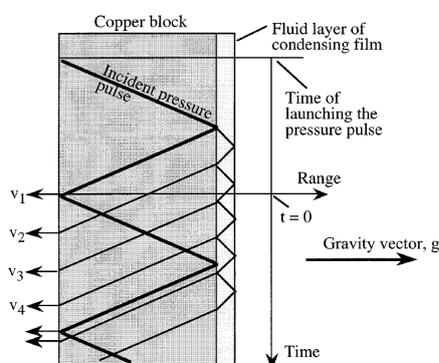


FIGURE 4.4 – Schéma du principe de mesure de l'épaisseur de film liquide par méthode ultrasonique (Pedersen *et al.*, 2000)

— Méthodes électriques

Une autre manière de mesurer l'épaisseur d'un film liquide est d'utiliser la propriété conductrice du fluide pour l'électricité. Cette technique utilise la conductivité du fluide entre deux électrodes, la conductance augmente avec l'épaisseur de fluide. Cette méthode utilisée par Lournat *et al.* (1984) et Fukano (1998) permet d'obtenir une précision de mesure de l'ordre de 50 μm , mais les électrodes sont difficiles à mettre en place sans perturber l'écoulement ou modifier les propriétés du solide sur lequel ruissèle le film.

— Méthodes optiques

Les méthodes optiques par traitement d'image sont les plus utilisées pour caractériser les films liquides et les tailles de gouttes. Ces méthodes consistent à filmer le fluide et à mesurer le film liquide ou les gouttes grâce à un logiciel de traitement d'image ; cette méthode est utilisée par Terblanche *et al.* (2009) pour obtenir les tailles de gouttes dans la pluie froide sous les garnissages. La précision de ces méthodes réside dans la résolution de la caméra utilisée et dans la qualité du post-traitement. Ces méthodes sont assez simples à mettre en œuvre et non intrusives même si elles nécessitent une attention particulière dans le post-traitement et qu'elles ne sont pas applicables lorsque le système est caché ou que les écoulements sont en conduites fermées opaques (placement de la caméra). La mesure par traitement optique a été utilisée avec des stroboscopes par Zhao et Cerro (1992) pour mesurer des instabilités temporelles de films liquides. Negny *et al.* (2001b) ont proposé de filmer le support à sec puis avec le film liquide afin d'obtenir le film liquide par soustraction d'image. La méthode de traitement d'image peut aussi être utilisée pour repérer et déterminer la position précise de l'interface gaz-liquide avec l'ajout d'une espèce fluorescente dans le fluide et son excitation par un laser (Gstoehl *et al.*, 2004).

La fluorescence peut aussi être utilisée comme méthode de mesure en fonction de l'intensité du signal émis par une espèce fluorescente. Smart, Ford et Foord (Smart et Ford, 1974; Ford et Foord, 1978) ont développé une technique basée sur l'addition d'une espèce fluorescente au fluide étudié. Le système est alors soumis à une excitation à une longueur d'onde donnée, le fluide fluorescent émet un rayonnement (à une autre longueur d'onde) proportionnel au volume de fluide exposé ce qui permet de calculer l'épaisseur de film. Le schéma d'un dispositif expérimental de méthode par fluorescence utilisé par Makarytchev *et al.* (2001) est présenté à la Figure 4.5. Les méthodes par fluorescence permettent une grande précision de mesure de l'ordre du micromètre (Makarytchev *et al.*, 2001), mais un étalonnage très précis et difficile est nécessaire. De plus, la substance fluorescente ajoutée au fluide étudié ne doit pas modifier ses propriétés physico-chimiques pour rester représentatif de l'écoulement. Morton *et al.* (2011) ont adapté la méthode en remplaçant une photodiode renvoyant un champ électrique par un

traitement optique du signal émis par la fluorescence.

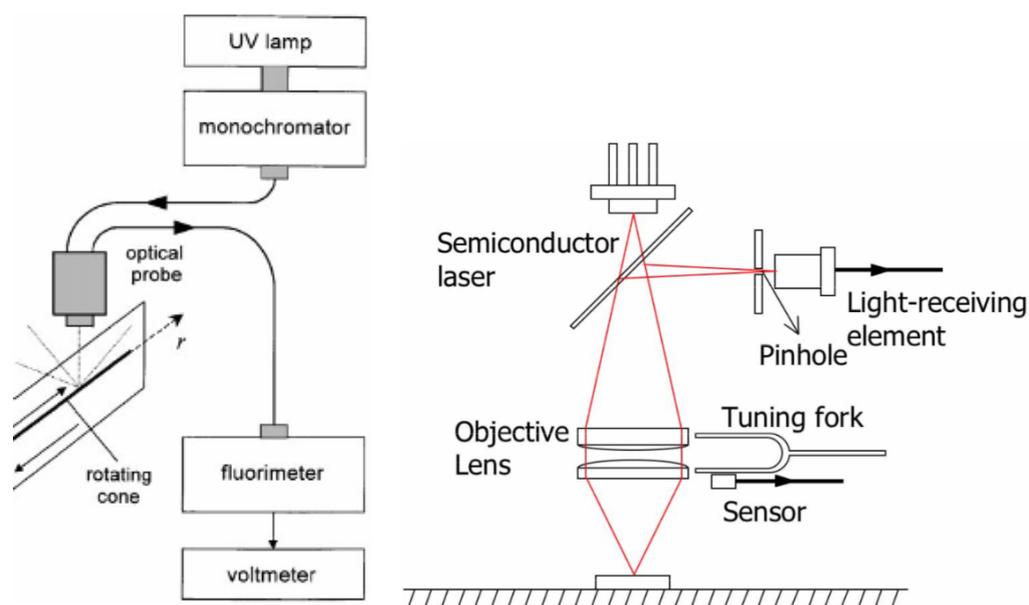


FIGURE 4.5 – Schéma de la méthode de mesure d'épaisseur de film par fluorescence (Makarytchev *et al.*, 2001) (gauche) et méthode de mesure par focalisation laser (Han et Shikazono, 2009) (droite)

En plus d'être utilisés à des longueurs d'onde précises pour exciter les espèces fluorescentes, les lasers peuvent aussi être utilisés comme méthode de mesure : le faisceau émis par le laser passe à travers un miroir à demi-réflexion et une lentille, puis est réfléchi par la surface. Le rayon réfléchi repasse à travers la lentille, puis est réfléchi par le miroir à demi-réflexion avant d'atteindre un capteur. Ce capteur est activé uniquement lorsque le faisceau laser est focalisé sur la cible. Cette technique permet de détecter la position de l'interface solide-liquide et de l'interface liquide-gaz. L'épaisseur du film est ensuite calculée par la différence de déplacement. Le principe de fonctionnement de cette méthode est illustré à la Figure 4.5 tirée des travaux de Han et Shikazono (2009). Cette méthode permet une précision de l'ordre de $10\ \mu\text{m}$, mais nécessite l'utilisation d'un laser et une grande précision de déplacement pour la focalisation.

D'autres méthodes optiques ont aussi été étudiées dans la littérature. La méthode dite par absorbance utilise la capacité d'un fluide à absorber la lumière. L'intensité absorbée est directement proportionnelle à l'épaisseur du fluide traversé, d'après la loi de Beer-Lambert. Cette technique nécessite un support transparent pour le fluide ainsi qu'un étalonnage précis comme pour les méthodes par fluorescence. Un colorant peut être ajouté pour augmenter l'absorbance comme le montrent les travaux de Mouza *et al.* (2000). On peut aussi mentionner les méthodes optiques par interférométrie qui utilisent les propriétés spectrales de la lumière (Ohyama *et al.* (1988))

— Méthodes nucléoniques

Les méthodes nucléoniques utilisent des rayonnements qui vont s'atténuer dans le fluide observé. L'atténuation permet de remonter à l'épaisseur et à la forme de la phase liquide. Cette technique peut être utilisée pour les mesures d'épaisseurs, mais aussi pour mesurer la rétention liquide dans un garnissage ou une densité de pluie. La méthode peut être appliquée à l'aide de rayons X (Tidwell et Glass (1994)) ou de rayons gamma (Stahl et von Rohr (2004); Fourati (2012)). Les rayons gamma présentent l'avantage d'être plus stables et plus précis que les rayons X. Cependant les rayons gamma provenant de la transition nucléaire sont beaucoup plus dangereux que les rayons X qui proviennent de la transition électronique.

4.2.2 Synthèse bibliographique et choix des méthodes de mesure

Une synthèse de l'étude bibliographique des méthodes de mesures des films ruisselants est proposée dans la Tableau 4.1. L'analyse des différentes approches permet respectivement l'élimination des méthodes par ultrasons et par atténuation de la lumière du fait que le garnissage est respectivement en plastique et opaque. De même, les méthodes électriques ne sont pas retenues à cause du caractère intrusif de la technique de mesure. La focalisation laser est elle aussi difficilement opérable et ne permet pas une détermination assez précise de l'épaisseur des films, puisque le garnissage se trouve dans une colonne dont les parois transparentes non spécifiques peuvent affecter la focalisation de la lumière différemment suivant la localisation. Les méthodes nucléoniques utilisées ne permettent pas une détermination assez précise de l'épaisseur des films et le matériel très spécifique nécessaire est de plus difficilement adaptable au dispositif. Les deux techniques retenues pour être testées et potentiellement installées sur le dispositif sont donc la détection d'interface par traitement d'image et la méthode par intensité de fluorescence.

TABLE 4.1 – Synthèse et comparaison des différentes approches de mesures des épaisseurs de film ruisselant (adapté de Tibirica *et al.*, 2010)

| Méthode | Références | Intrusive | Adaptable au dispositif | Gamme de mesure (film liquide) |
|----------------------------------|---|------------------|-------------------------------|--------------------------------|
| Ultrason | Lu <i>et al.</i> (1993) | Non | Non (garnissage plastique) | 50 - 600 μm |
| | Kamei et Serizawa (1998) Pedersen <i>et al.</i> (2000) | | | |
| Électrique | Laurnat <i>et al.</i> (1984) | Oui | Oui | 50 μm - 20 mm |
| | Fukano (1998) | | | |
| Détection d'interface | Terblanche <i>et al.</i> (2009) Zhao et Cerro (1992) Negny <i>et al.</i> (2001b) | Non | Oui | 10 μm - 3 mm |
| Atténuation de la lumière | Mouza <i>et al.</i> (2000) | Non | Non (garnissage opaque) | 3 μm - 3 mm |
| Optique | | | | |
| Focalisation laser | Han et Shikazono (2009) | Non | Non (présence de la colonne) | 10 μm - 10 mm |
| Intensité de fluorescence | Smart et Ford (1974) Makarytchev <i>et al.</i> (2001) Morton <i>et al.</i> (2011) | Oui ¹ | Oui | 5 μm - 2,5 mm |
| Nucléonique | Tidwell et Glass (1994) Stahl et von Rohr (2004) Fourati (2012) | Non | Oui | > 1 mm |

De nombreuses études de la littérature se sont intéressées aux écoulements dans les garnissages et aux régimes hydrauliques que l'on peut rencontrer. Ces études dans le cadre de multiples applications industrielles se sont focalisées sur la caractérisation expérimentale locale de ces écoulements. Cependant, l'hydrodynamique locale dans les cas des garnissages des tours aéroréfrigérantes reste méconnue du fait de la spécificité du système par rapport aux garnissages d'autres applications industrielles : garnissages à parois verticales et non inclinées, faible surface spécifique comparée aux garnissages structurés du Génie Chimique, matériau PVC plutôt que métalliques et conditions

opératoires très éloignées de celles des colonnes industrielles (régime de pleurage très loin de l'engorgement). C'est pour cela qu'il a été nécessaire de concevoir un dispositif expérimental spécifique au système étudié et de mettre en place des méthodologies de caractérisation de l'hydrodynamique particulières pour les écoulements sur les types de garnissages étudiés.

Concernant les méthodes de visualisation et de mesure des films liquides et gouttes, la nature des garnissages étudiés étant très variée, une première étape a consisté à visualiser les écoulements avec deux techniques de mesure optiques par traitement d'image et par intensité de fluorescence. Ces méthodes semblent plus simples à mettre en œuvre pour nos garnissages opaques et peuvent tenir compte de la grande variabilité des écoulements attendus tout en permettant une grande précision de mesure.

4.2.3 Matériel de visualisation

Afin de caractériser les écoulements, le choix s'est porté sur le matériel suivant nécessaire aux travaux de visualisation :

- Une caméra rapide à capteur noir et blanc MiroM110 pouvant atteindre une fréquence d'acquisition de 10 000 images par seconde utilisée avec un objectif Nikkor 24-85mm, 3.5-4.5G.
- Une caméra microscopique capteur couleur Bresser MikroCamII Full HD avec une fréquence d'acquisition pouvant monter jusqu'à 100 images par seconde
- Une caméra endoscopique HD

En fonction de la caméra utilisée, la fréquence d'acquisition, le nombre de points expérimentaux ainsi que la précision varient fortement. Dans les conditions opératoires du dispositif, la caméra rapide est utilisée à une fréquence de 400 images par seconde et une précision de l'ordre de 100 μm par pixel, alors que la caméra microscopique est utilisée à une fréquence d'une dizaine d'images par seconde pour une précision de 20 μm par pixel.

La caméra rapide est utilisée pour la visualisation qualitative des écoulements : cette première visualisation est nécessaire pour se rendre compte de la nature des écoulements dans les garnissages, avec une grande résolution temporelle notamment. La caméra microscopique est ensuite utilisée afin d'avoir une résolution spatiale plus importante (au détriment de la fréquence d'acquisition) afin de pouvoir obtenir les mesures les plus précises possible pour la qualification quantitative des différents paramètres étudiés (e.g. épaisseurs de film, taux de mouillage).

Un ordinateur permet l'utilisation des logiciels des caméras afin de visualiser les images en direct, de régler les paramètres d'acquisition (contraste, balances des blancs, luminosité, vitesse d'obturation) et d'enregistrer les vidéos filmées. Un projecteur de lumière blanche permet d'éclairer la zone observée ou de réaliser les essais par contraste. Un second projecteur, mais de lumière ultraviolette, est aussi utilisé

pour les acquisitions en présence de matière fluorescente dans le fluide.

4.2.4 Mesure des épaisseurs de film liquide

L'étude bibliographique a permis d'identifier deux méthodes adaptées à la fois au système étudié et au dispositif expérimental : la méthode par fluorescence (Makarytchev *et al.*, 2001) et la méthode optique par contraste (Negny *et al.*, 2001b).

La première méthode a fait l'objet de tests en laboratoires afin d'évaluer sa faisabilité sur le cas des films ruisselants. Des tests ont été réalisés avec de la rhodamine B. Une cuve contenant la solution fluorescente est placée face au laser et le capteur est positionné à 90° par rapport à la cuve. Un monochromateur a été placé entre la cuve et le capteur pour ne sélectionner que les longueurs d'onde émises par la fluorescence (Figure 4.6, gauche). Cette position permet ainsi de capter seulement la fluorescence produite et ainsi éviter les rayons du laser.

Afin de sélectionner la source laser adéquate, un spectre d'absorption de la rhodamine B a été tracé permettant d'identifier la longueur d'onde optimale absorbée (Figure 4.6, droite). Se placer à la longueur d'onde d'absorption optimale permet de maximiser l'intensité de rayonnement émis à la longueur d'onde d'émission qui sera mesurée par le capteur. La longueur d'onde d'absorption optimale est donc mesurée entre 545 et 555 nm pour une émission d'une longueur d'onde de 570 nm.

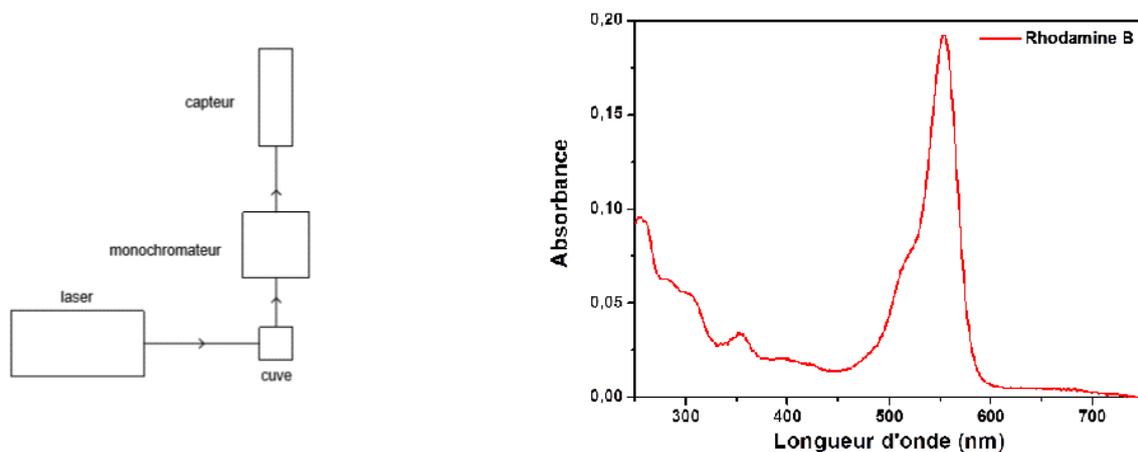


FIGURE 4.6 – Schéma du test en laboratoire pour la rhodamine B (gauche) et spectre d'absorption de la rhodamine B

Les résultats ont montré que l'intensité émise par le fluide dans la cuve de 1 cm de côté n'était pas suffisante pour mesurer précisément une épaisseur de film à cause de la perte de signal. Dans la littérature, afin d'éviter cette perte de signal, une fibre optique est utilisée pour capter le rayonnement du film. Cependant, cette solution n'est que très difficilement applicable au dispositif et perturberait

l'écoulement dans notre cas.

La méthode finalement retenue est celle de la mesure des épaisseurs par contraste inspirée des travaux de Negny *et al.* (2001b). Cette mesure se base sur l'obtention de l'image des films liquides par soustraction d'une image de la surface mouillée par une image de la surface sèche. La caméra utilisée est placée tangentielle à la surface du garnissage de manière à observer l'épaisseur du film. Le projecteur de lumière est placé de l'autre côté de la colonne, face à la caméra afin de créer un très fort contraste entre les zones transparentes (air) très lumineuses et les zones noires (garnissage + liquide). Un exemple de la méthode est illustré à la Figure 4.7 pour le cas d'un film ruisselant sur le garnissage feuille.

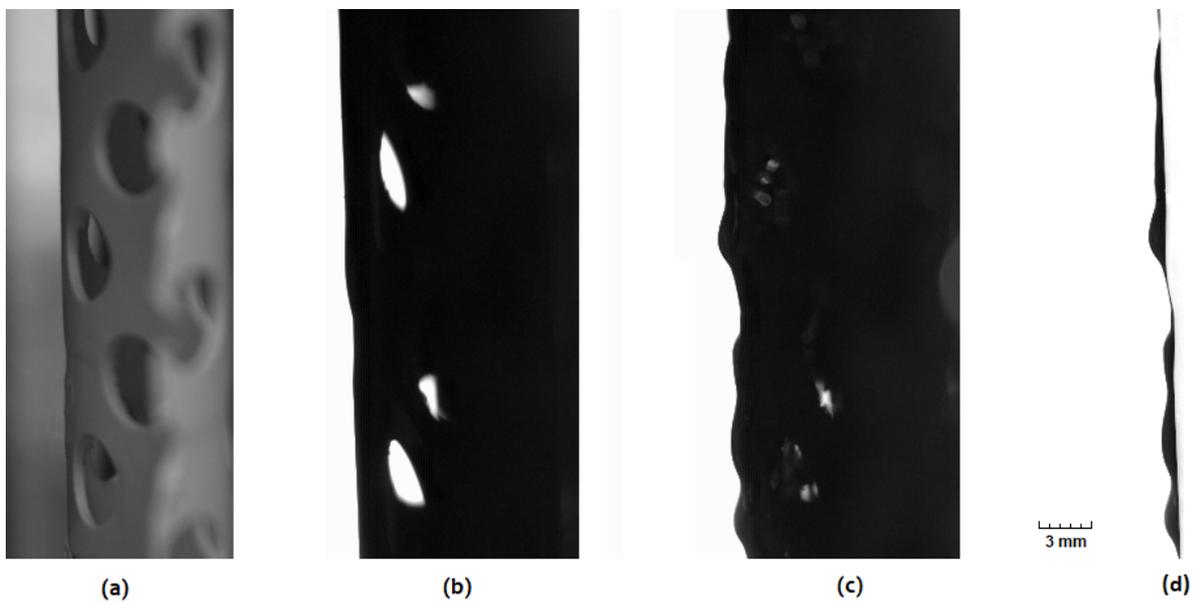


FIGURE 4.7 – (a) Photo du garnissage. (b) Image de référence à sec. (c) Image du garnissage mouillé. (d) Différence des images pour obtenir les images de film.

La méthode peut se diviser en 4 étapes principales :

- obtenir les images de référence à sec par contraste - 4.7 (b)
- obtenir les images de la vidéo de l'écoulement par contraste - 4.7 (c)
- soustraire par ordinateur les images de référence (à sec) aux images avec l'écoulement pour obtenir les images du film - 4.7 (d)
- effectuer le post-traitement pour obtenir l'épaisseur du film

La difficulté de la méthode réside dans le post-traitement. Pour chaque image, le blanc correspond théoriquement à la phase gaz et le noir à la phase liquide. Cependant, l'image du film obtenu par différence d'images contient différents niveaux de blanc ; c'est-à-dire différents niveaux de gris clair. La détection de la phase liquide dépend du seuil de niveau de gris choisi, ces niveaux de gris sont exprimés en pourcentage avec 0% pour un pixel noir et 100% pour un pixel blanc. Deux valeurs sont importantes :

celle du seuil du film liquide (elle est faible pour être sûr que le pixel se situe dans le film liquide) et celle du seuil de l'incertitude (à partir de laquelle un pixel n'est plus considéré comme sûr d'appartenir à la phase gaz). Afin de déterminer les bonnes valeurs de seuil, plusieurs cas ont été testés. Les résultats pour un cas exemple sont présentés sur la Figure 4.8, la valeur de l'incertitude étant fixée à 95% (zone grisée). La détermination de la valeur se fait de manière empirique en visionnant la vidéo du film liquide. On observe par exemple sur la Figure 4.8 qu'en dessous de 50%, le film liquide présente une discontinuité (à la position verticale de 20 mm, l'épaisseur est égale à 0) or l'image réelle du film n'en présente pas. De même, des mesures réalisées avec des logiciels de traitement d'image permettent de fixer la valeur du seuil à 60%.

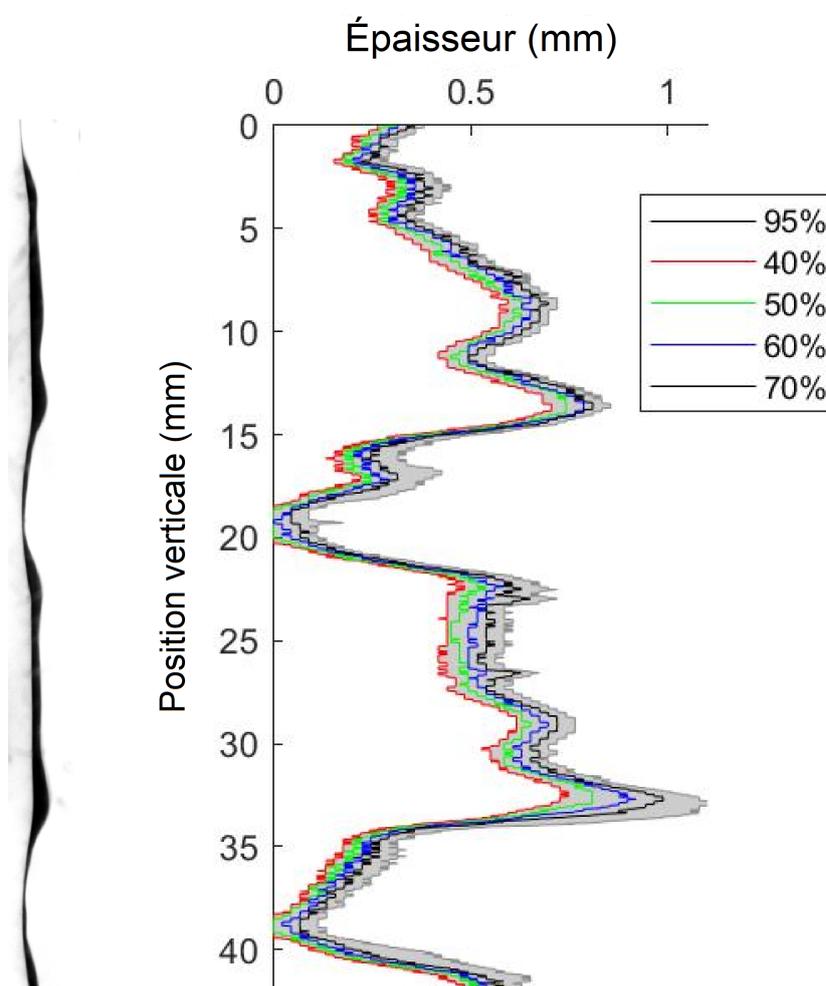


FIGURE 4.8 – Image du film ruisselant (gauche) et évolution de l'épaisseur du film liquide en fonction du seuil de niveau de gris choisi et présenté en légende (droite)

4.2.5 Mesure du taux de mouillage

Le taux de mouillage correspond au rapport de la surface mouillée de garnissage sur la surface totale de garnissage. Pour le calcul du taux de mouillage, seule la surface pleine de garnissage est considérée : elle ne tient pas compte des perforations.

Pour la mesure de ce taux de mouillage, une méthode optique a aussi été utilisée. L'objectif étant de repérer les zones mouillées et les zones sèches sur la surface du garnissage. La caméra est alors placée face au garnissage. De la fluorescéine est ajoutée en faible quantité à l'eau afin de ne pas modifier les propriétés physico-chimiques de l'eau (2 mg/L). Tous les essais sont réalisés sous exposition à de la lumière ultraviolette afin d'augmenter la visibilité du fluide. Sur les images, le fluide est alors visible en blanc et les zones sèches en bleu foncé comme on peut le voir sur la Figure 4.9 (gauche).

Le post-traitement consiste dans le comptage des pixels des zones mouillées et des zones sèches afin de calculer, pour la zone observée, le taux de mouillage (surface mouillée / surface totale de garnissage). Le post-traitement peut être divisé en 2 étapes :

- l'identification des trous du garnissage grâce à une routine de détection des formes,
- le comptage des pixels blancs pour obtenir le nombre de pixels mouillés sur la surface hors trous.

Comme pour le post-traitement pour les épaisseurs de films, la difficulté réside dans l'identification des valeurs de seuil de détection. Cependant, dans le cas du mouillage, l'utilisation d'une caméra couleur pour la fluorescence rend plus complexe l'identification d'un paramètre unique. Ainsi, la couleur de chaque pixel est identifiée par un triplet de valeurs allant de 0 à 255 selon le système de codage de couleurs RVB. Des triplets de valeurs seuil sont déterminés pour les différentes configurations. Ainsi, il est possible après post-traitement d'obtenir en noir et blanc une image binaire avec les zones mouillées en blanc et les zones sèches en noir comme représenté Figure 4.9 (droite). Sur le cas exemple la Figure 4.9, le mouillage est de 60,3%.



FIGURE 4.9 – Image du garnissage sous exposition à la lumière UV (gauche), identification des trous (centre) et taux de mouillage obtenu par analyse d'image (droite)

4.3 Résultats et discussions

4.3.1 Plan d'expérience et paramètres considérés

L'objectif de la caractérisation expérimentale des garnissages est d'obtenir des mesures de films liquides et de taux de mouillage en fonction des paramètres susceptibles d'influencer l'hydrodynamique : le débit d'air, le débit d'eau et la température de l'eau. Pour la conduite du plan d'expérience, c'est le rapport du débit massique d'air sur le débit massique d'eau F_a/F_e qui est considéré.

Pour les épaisseurs de film, deux plans d'expériences ont été menés de manières distinctes. Le premier a consisté à filmer avec la caméra rapide quatre localisations ou zones d'acquisition à plusieurs endroits du garnissage. Pour chaque localisation, quatre débits d'air (90, 190, 290 et 390 Nm³/h) correspondant à quatre vitesses d'air dans le garnissage (0,58 ; 1,23 ; 1,88 et 2,52 m/s) ont été imposés. Pour chaque couple de conditions expérimentales, trois vidéos ont été réalisées à quelques minutes d'intervalle. Pour tout le plan d'expérience, le débit liquide a été maintenu constant à 400 L/h soit le taux d'arrosage moyen des tours aéroréfrigérantes industrielles considérées (10 m³.m⁻².h⁻¹). Le second plan d'expérience a été réalisé à l'aide de la caméra microscopique pour l'étude de l'influence du débit liquide. Cinq localisations sur le garnissage ont été choisies et trois débits d'eau ont été testés : 300, 400 et 460 L/h soit des taux d'arrosage de 7,5 ; 10 et 11,5 m³.m⁻².h⁻¹, la vitesse d'air étant calculée pour maintenir un ratio F_a/F_e constant égal à 0,8. Trois vidéos ont aussi été réalisées pour chaque condition expérimentale.

Pour le taux de mouillage, le plan d'expérience considère cinq localisations sur le garnissage aux trois mêmes débits liquides que précédemment (300, 400 et 460 L/h) et avec le même ratio F_a/F_e constant.

Un exemple des localisations choisies pour les observations et les acquisitions sur le garnissage feuille est présenté à la Figure 4.10 à l'échelle réelle pour montrer la taille des zones considérées.

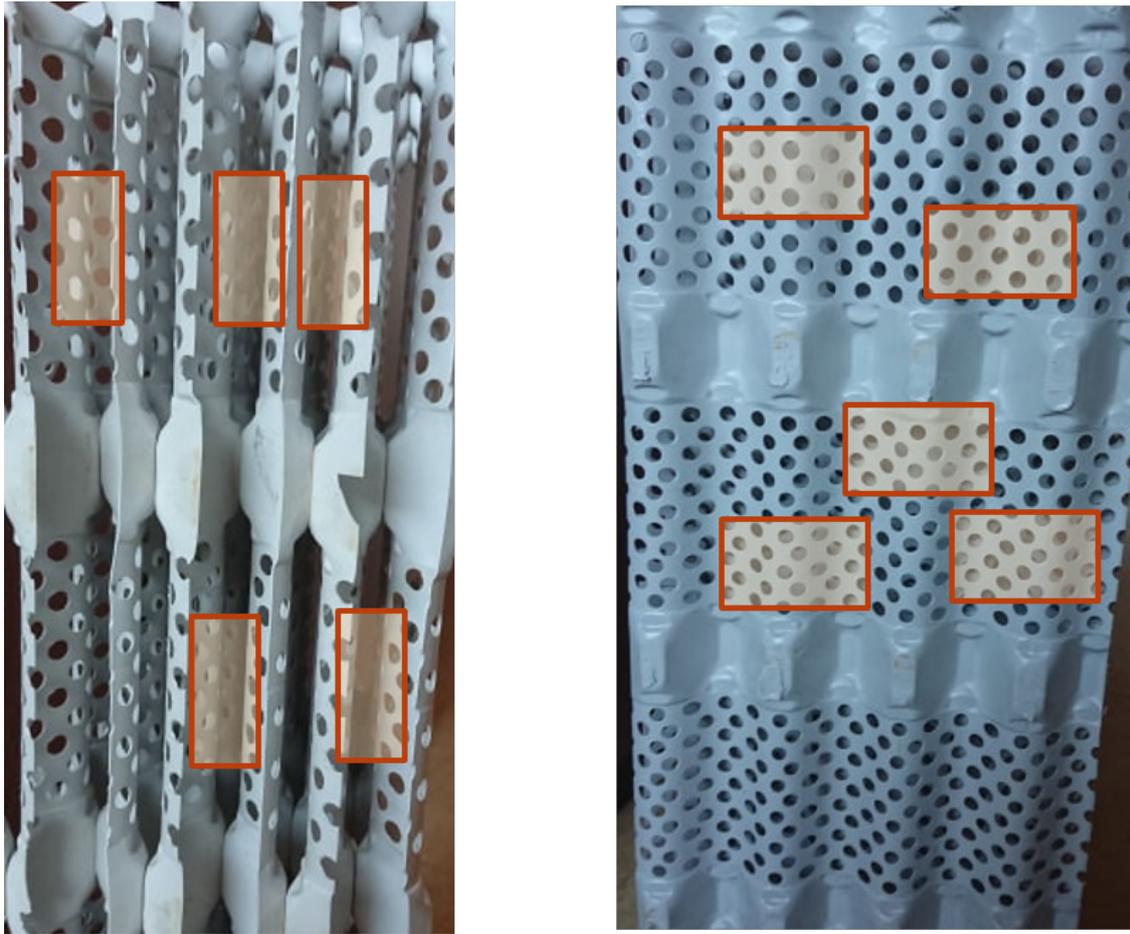


FIGURE 4.10 – Exemples des localisations choisies pour les points expérimentaux d’observation sur les garnissages : de côté pour les films ruisselants (gauche) et de face pour le taux de mouillage (droite)

4.3.2 Observations qualitatives des écoulements dans les garnissages

La première étape de caractérisation des écoulements dans les garnissages est l’observation des écoulements. En effet, la nature même de l’écoulement dans ces garnissages particuliers est une inconnue. La visualisation avec la caméra endoscopique montre que qualitativement, l’essentiel de l’écoulement se fait à la surface du garnissage sous forme de film liquide. De plus, il est possible d’observer qu’à certains endroits le fluide ne contourne pas les perforations du garnissage mais les recouvre, formant une lentille d’eau. Un exemple de lentille d’eau filmée est présenté à la Figure 4.11.



FIGURE 4.11 – Image obtenue avec la caméra endoscopique pour visualiser le film ruisselant et les lentilles d’eau formées dans les perforations

La formation de ces lentilles d’eau est un phénomène local puisque toutes les perforations ne sont pas recouvertes (Pavlenko *et al.*, 2009; Xie *et al.*, 2018). Même si l’observation des lentilles au cours du temps montre une instabilité puisque certaines lentilles se cassent ou se forment de manière aléatoire, il est possible de noter qualitativement que la majorité des lentilles d’eau se forment à la mise en route du dispositif et restent formées pendant la durée de l’expérience. Bien que la réalisation de plusieurs vidéos après arrêt et redémarrage du dispositif montre l’existence de certains chemins préférentiels au sein du garnissage liés à la géométrie (e.g. points de collage des feuilles), en général le caractère aléatoire de la formation des lentilles d’eau ne permet pas d’identifier de schéma particulier de leur formation.

4.3.3 Mesure des épaisseurs de film liquide

Grâce à la technique de post-traitement expliquée précédemment, il est possible d’obtenir pour chaque image l’épaisseur du film en fonction de la position verticale et du temps. La Figure 4.12 présente deux exemples pour deux zones d’observation sur le garnissage avec le même taux d’arrosage. La première zone montre un film liquide avec un comportement instable (Figure 4.12 gauche) : l’épaisseur du film liquide varie fortement au cours du temps. La seconde zone montre un film liquide plus stable (Figure 4.12 droite) : la valeur des épaisseurs du film en fonction de la position verticale est stable dans

le temps et les zones de forte épaisseur restent localisés aux mêmes endroits.

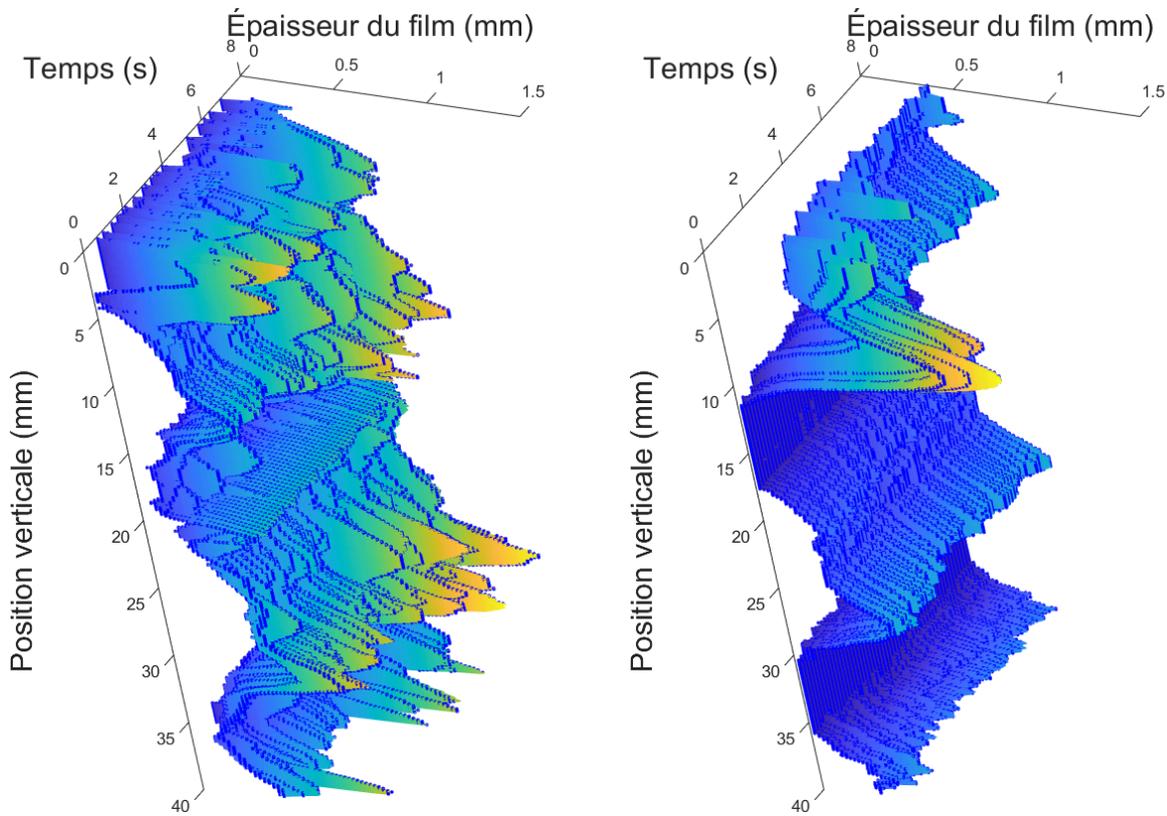


FIGURE 4.12 – Visualisation de l'évolution de l'épaisseur du film en fonction de la position verticale et du temps pour deux zones différentes (Taux d'arrosage de $10 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ et Fa/Fe constant à 0,8) : film liquide instable au cours du temps (gauche) et film liquide stable (droite)

Il est possible d'observer que la stabilité de l'épaisseur des films ruisselants dépend de la zone d'observation choisie sur le garnissage. Cela peut s'expliquer par la proximité d'une particularité géométrique comme jointure entre deux blocs de garnissage ou un point de collage entre les feuilles de garnissage. Par exemple, la jointure entre deux blocs n'est jamais exacte et les feuilles du garnissage ne sont pas exactement alignées ce qui provoque des détachements de gouttes, donc une variation locale du débit liquide, mais aussi une perturbation des écoulements (e.g. rupture de film, changement de direction de l'air). La littérature et les travaux de Kapitza (1949) ont démontré le caractère très instable des films ruisselants dans les conditions opératoires considérées dans le plan d'expérience. La Figure 4.13 montre que la variation d'épaisseur du film de la zone 1 (appelé film instable) est bien plus importante que la variation d'épaisseur du film obtenu dans les mêmes conditions sur la zone 2 (appelé film stable) avec respectivement une amplitude de variation de 726 et 294 μm pour deux moyennes temporelles très proches (respectivement 495 et 499 μm).

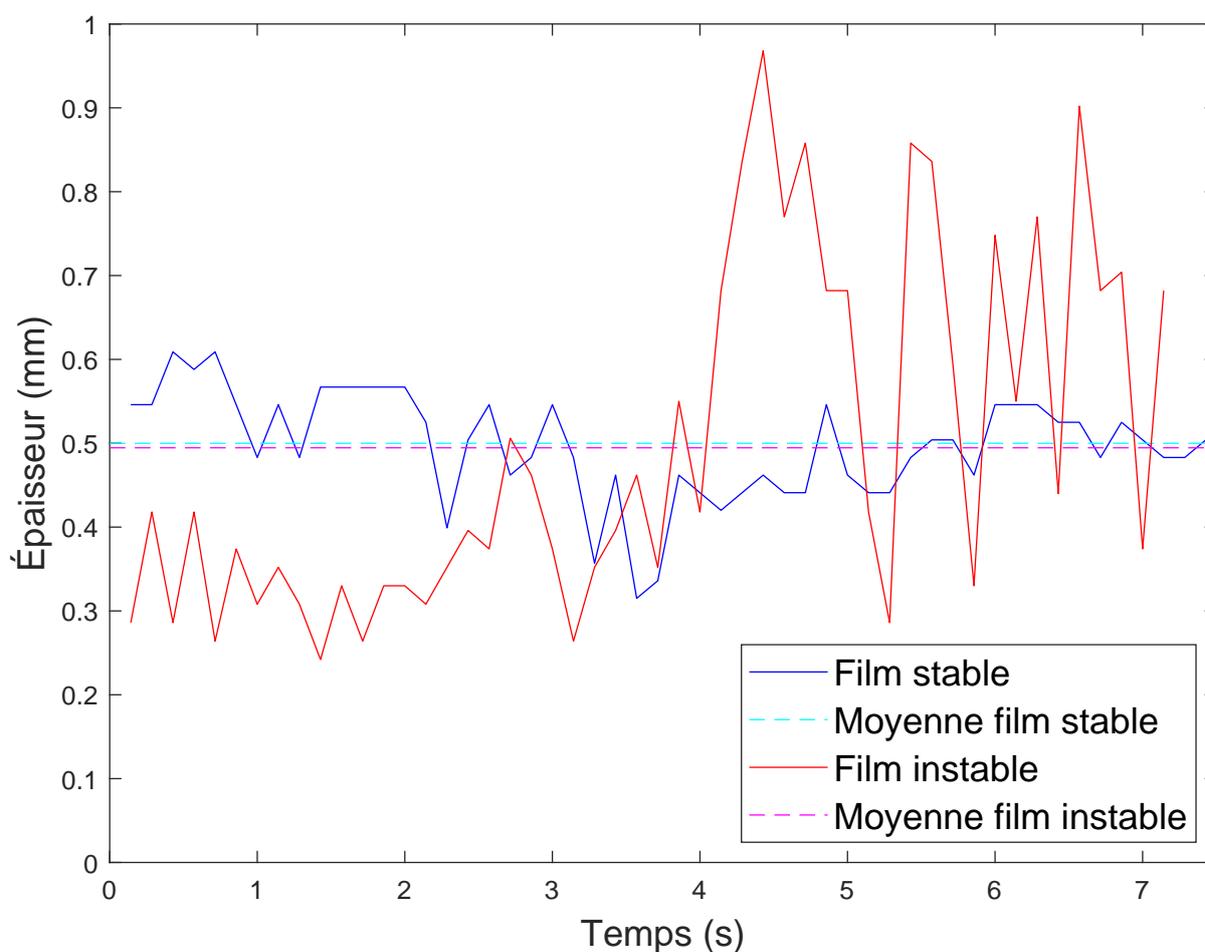


FIGURE 4.13 – Évolution de l'épaisseur du film liquide en fonction du temps en une position verticale donnée pour les deux films liquides étudiés à la Figure 4.12 : film liquide instable (Figure 4.12 gauche) et film liquide stable (Figure 4.12 droite)

Pour s'affranchir du caractère instable du film liquide à certaines zones, une grandeur représentative quelque soit la méthode d'acquisition est donc l'épaisseur moyennée dans le temps du film selon la position verticale. La moyenne temporelle est ainsi calculée avec l'ensemble des valeurs de l'essai. La Figure 4.14 présente quatre cas de films liquides obtenus avec la caméra microscopique (précision allant de 20 à 22 μm selon les points). La moyenne temporelle permet de mettre clairement en évidence la variation d'épaisseur de film lorsque celui-ci passe sur l'une des perforations du garnissage. Que ce soit sous forme de lentille d'eau, donc d'une épaisseur visible très faible, comme dans les exemples N°1 et 2 de la Figure 4.14, ou que le film contourne la perforation donnant une épaisseur apparente nulle comme dans les exemples N° 3 et 4 de la Figure 4.14. Pour chaque position verticale, la moyenne est calculée avec 155 points.

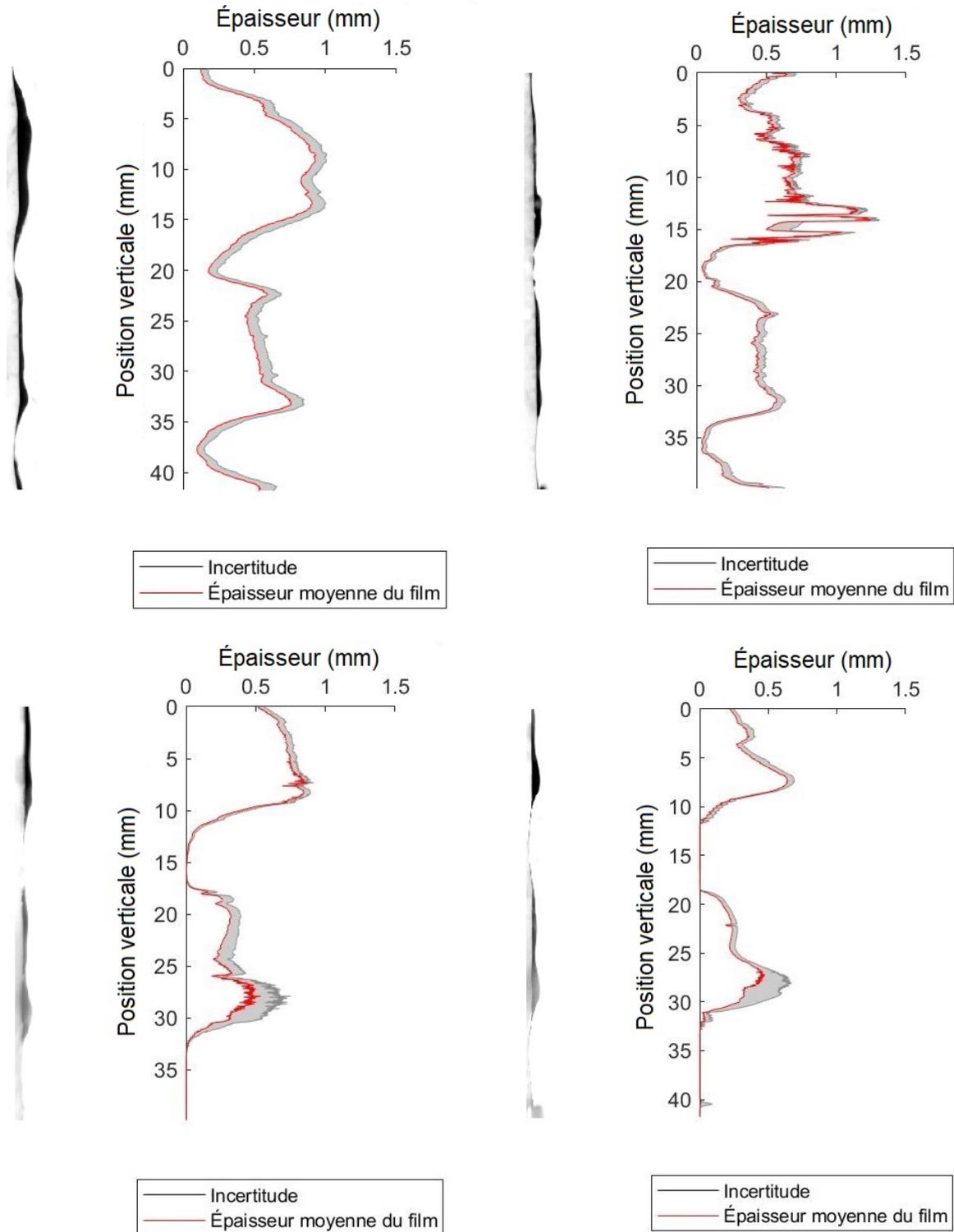


FIGURE 4.14 – Évolution de l'épaisseur moyenne temporelle du film avec incertitude du post-traitement pour quatre zones (Taux d'arrosage de $7,5 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ pour Fa/F_e constant à 0,8)

La Figure 4.15 montre un cas limite de l'automatisation du traitement d'image : de nombreuses gouttes ou de nombreux paquets de fluides peuvent passer entre le plan focal et l'objectif ou se coller

sur la paroi de la colonne. L'algorithme de post-traitement utilisé et notamment la valeur de seuil permet d'identifier le film par rapport aux gouttes lorsque ceux-ci sont clairement distincts. Cela peut en revanche augmenter l'incertitude de la mesure (zone grise plus importante sur les courbes). Cependant, comme sur l'exemple de la Figure 4.15, le pic observé à une position verticale de 23 mm est dû à la présence d'une goutte sur la paroi qui apparait confondue avec le film et que l'algorithme ne peut pas dissocier.

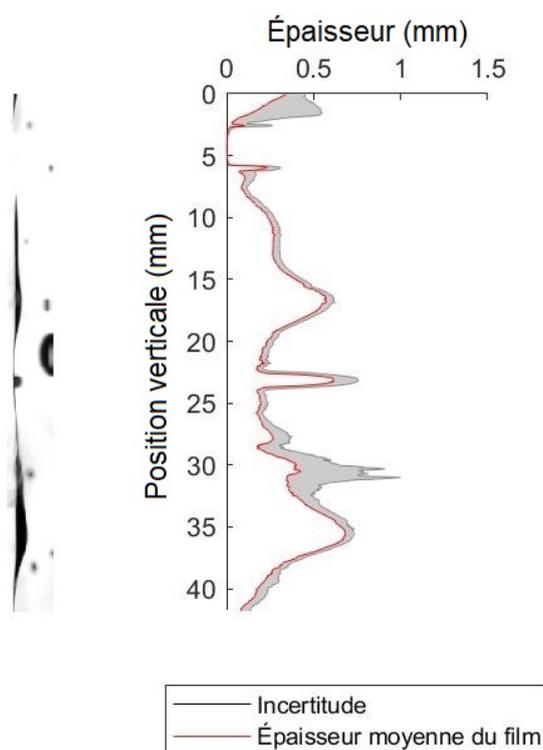


FIGURE 4.15 – Évolution de l'épaisseur moyenne temporelle du film avec incertitude du post-traitement
- Mise en avant des difficultés d'automatisation de l'analyse d'images (Taux d'arrosage de $7,5 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ pour Fa/F_e constant à 0,8)

L'étude des moyennes temporelles des épaisseurs permet de s'affranchir des variations temporelles des films liquides. Ces données peuvent être utiles pour caractériser le film liquide de manière globale sans tenir compte de son instabilité. Cela peut servir notamment pour les phénomènes influencés par l'hydrodynamique dont les temps caractéristiques sont très grands devant la durée des instabilités observées.

Influence du taux d'arrosage

Dans l'objectif d'étudier l'influence du débit liquide sur les épaisseurs de film et compte tenu du nombre de points disponibles et de la grande variabilité des épaisseurs selon la localisation, les résultats sont présentés sous forme de distributions des épaisseurs de film. Ce mode de représentation

permet d'obtenir des indicateurs statistiques précis (moyenne, médiane, écart type, mode selon les classes choisies, centiles) tout en minimisant l'influence des points considérés statistiquement non pertinents ; par exemple, ceux dus aux aléas de la méthode de mesure ou à un phénomène extérieur non représentatif. Cette représentation utilise l'ensemble des points du garnissage et des zones d'acquisition pour les conditions opératoires données.

La Figure 4.16 présente les distributions des épaisseurs sous forme d'histogramme. Deux tailles de classes ont été présentées (0,1 mm et 0,2 mm sachant que la précision de la caméra est de 0,02 mm) afin d'étudier l'influence de la taille de classe sur la représentation des distributions.

Les paramètres des distributions sont présentés dans le Tableau 4.2. On peut voir que le taux d'arrosage ne présente pas une influence claire sur les épaisseurs de film. En effet, on observe une légère diminution de l'épaisseur de film (moyenne, médiane et centiles) lors de l'augmentation du taux d'arrosage de 7,5 à $10 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ puis une légère augmentation de l'épaisseur lors du passage de 10 à $11,5 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$. Il est tout de même possible de tirer du mode de tous les essais une gamme d'épaisseur statistique qui permet de caractériser le garnissage : la plus forte probabilité d'épaisseur se situe entre 0,2 et 0,4 mm.

TABLE 4.2 – Paramètres (en mm) des distributions des épaisseurs de film en fonction du taux d'arrosage (vitesse d'air fixée à 1,88 m/s)

| Taux d'arrosage ($\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$) | 7,5 | 10 | 11,5 |
|--|-------------|-------------|-------------|
| Moyenne | 0,454 | 0,381 | 0,519 |
| Médiane | 0,418 | 0,352 | 0,418 |
| Écart type | 0,281 | 0,215 | 0,380 |
| Mode (classes de 0,1 mm) | 0,2 - 0,3 | 0,3 - 0,4 | 0,3 - 0,4 |
| Mode (classes de 0,2 mm) | 0,2 - 0,4 | 0,2 - 0,4 | 0,2 - 0,4 |
| 5ème centile (5%) | 0,088 | 0,084 | 0,063 |
| 25ème centile (25%) | 0,242 | 0,252 | 0,264 |
| 75ème centile (75%) | 0,616 | 0,484 | 0,693 |
| 95ème centile (95%) | 0,946 | 0,770 | 1,386 |
| Nombre de points | 5074 | 5235 | 4409 |

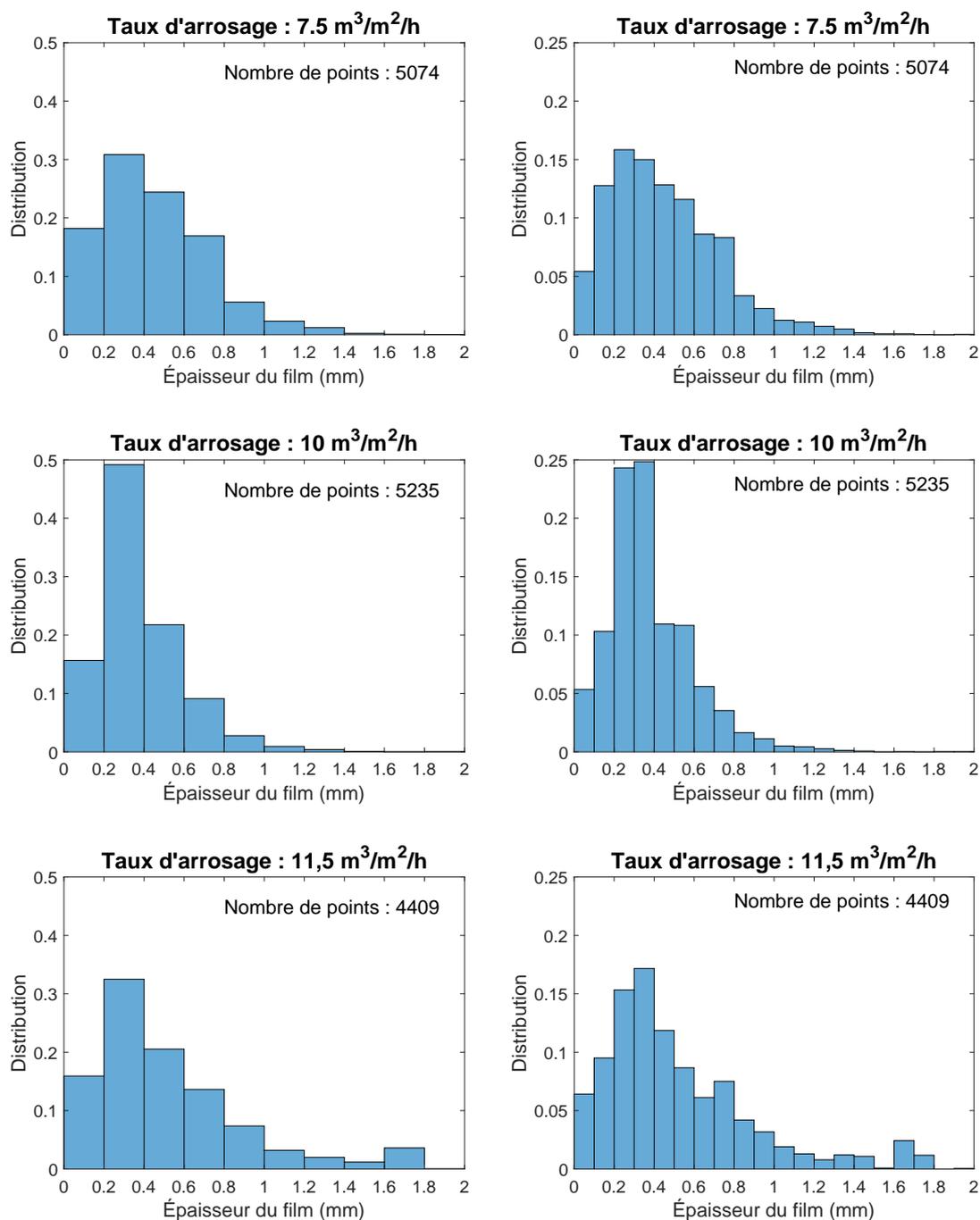


FIGURE 4.16 – Distribution des épaisseurs de films pour les trois taux d'arrosage (vitesse d'air fixée à 1,88 m/s) - Deux tailles de classes ont été utilisées : 0,2 mm (gauche) et 0,1 mm (droite)

Influence de la vitesse d'air

De même que pour le débit liquide, les distributions des épaisseurs sont présentées à la Figure 4.17 pour quatre débits d'air. Les essais ayant été réalisés avec la caméra rapide la précision d'environ $90\ \mu\text{m}$ est moins grande, donc la largeur des classes a été choisie égale à $0,2\ \text{mm}$ afin d'inclure deux fois la précision.

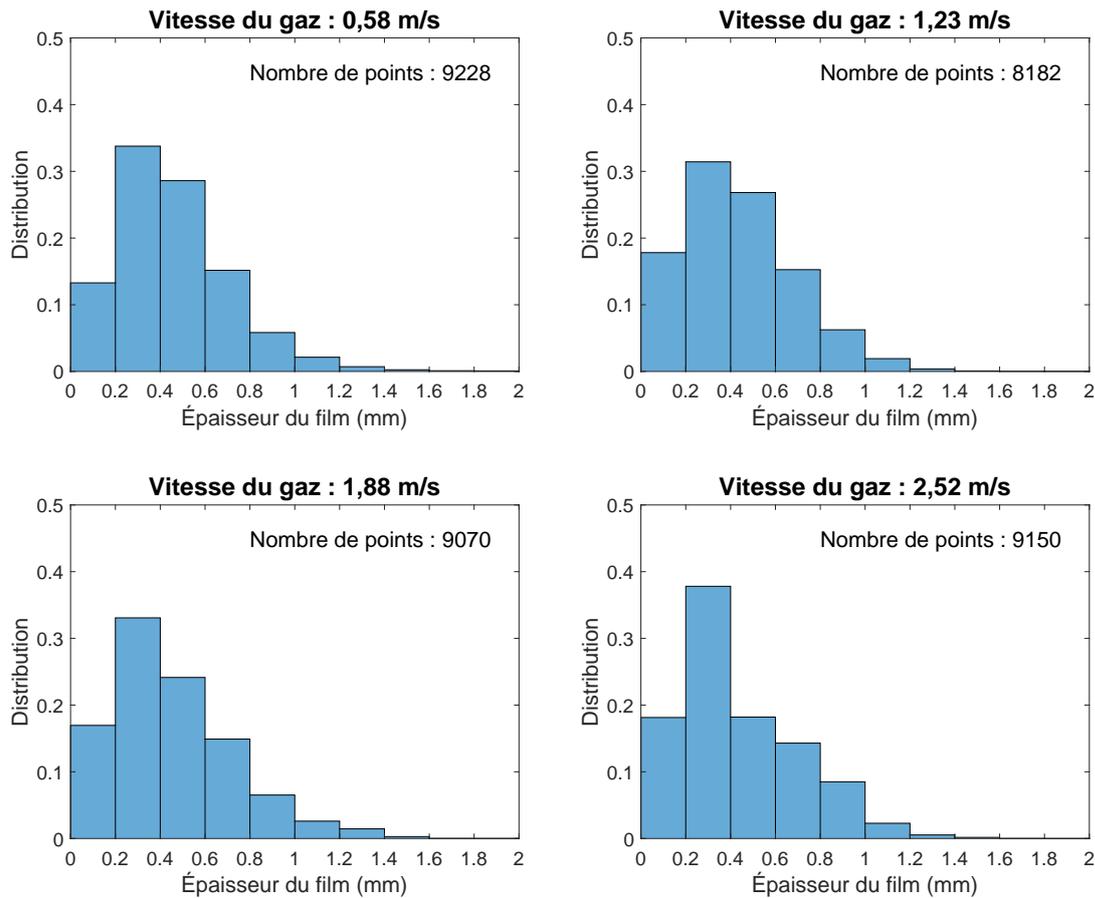


FIGURE 4.17 – Distribution des épaisseurs de films pour les quatre vitesses de gaz (taux d'arrosage fixé à $10\ \text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$)

Les paramètres statistiques des distributions sont présentés dans le Tableau 4.3. Il est là encore difficile de donner une tendance de l'évolution des épaisseurs de film en fonction de la vitesse de gaz, mais la valeur du mode statistique ($0,2 - 0,4\ \text{mm}$) présentée pour les résultats précédents est confirmée avec ces nouveaux essais.

TABLE 4.3 – Paramètres (en mm) des distributions des épaisseurs de film en fonction des vitesses de gaz (taux d'arrosage fixé à $10 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$)

| Vitesse de gaz (m/s) | 0,58 | 1,23 | 1,88 | 2,52 |
|-----------------------------|---------------|---------------|---------------|---------------|
| Moyenne | 0,488 | 0,495 | 0,439 | 0,526 |
| Médiane | 0,421 | 0,400 | 0,400 | 0,435 |
| Écart type | 0,319 | 0,368 | 0,272 | 0,387 |
| Mode (classes de 0,2 mm) | 0,2 - 0,4 | 0,2 - 0,4 | 0,2 - 0,4 | 0,2 - 0,4 |
| 5ème centile (5%) | 0,105 | 0,100 | 0,105 | 0,100 |
| 1er quartile (25%) | 0,270 | 0,210 | 0,240 | 0,435 |
| 3ème quartile (75%) | 0,630 | 0,696 | 0,600 | 0,700 |
| 95ème centile (95%) | 1,092 | 1,200 | 0,950 | 1,200 |
| Nombre de points | 360212 | 365632 | 341090 | 347344 |

En rassemblant l'ensemble des données, il est donc possible de dresser le portrait robot global de l'épaisseur de film la plus statistiquement probable sur le garnissage de type feuille : sa moyenne se situe entre 0,35 et 0,55 mm avec une probabilité la plus importante d'appartenir à l'intervalle 0,2 à 0,4 mm

4.3.4 Mesure du taux de mouillage

Le taux de mouillage est le deuxième paramètre primordial afin de caractériser les écoulements dans les garnissages.

De même que pour les épaisseurs de film, les résultats sont présentés sous forme de distributions statistiques avec les taux de mouillage exprimés en pourcentages. Les distributions sont réalisées avec un ensemble de points regroupant diverses localisations sur le garnissage.

L'influence du débit liquide sur la distribution est étudiée. Les distributions sont présentées à la Figure 4.18.

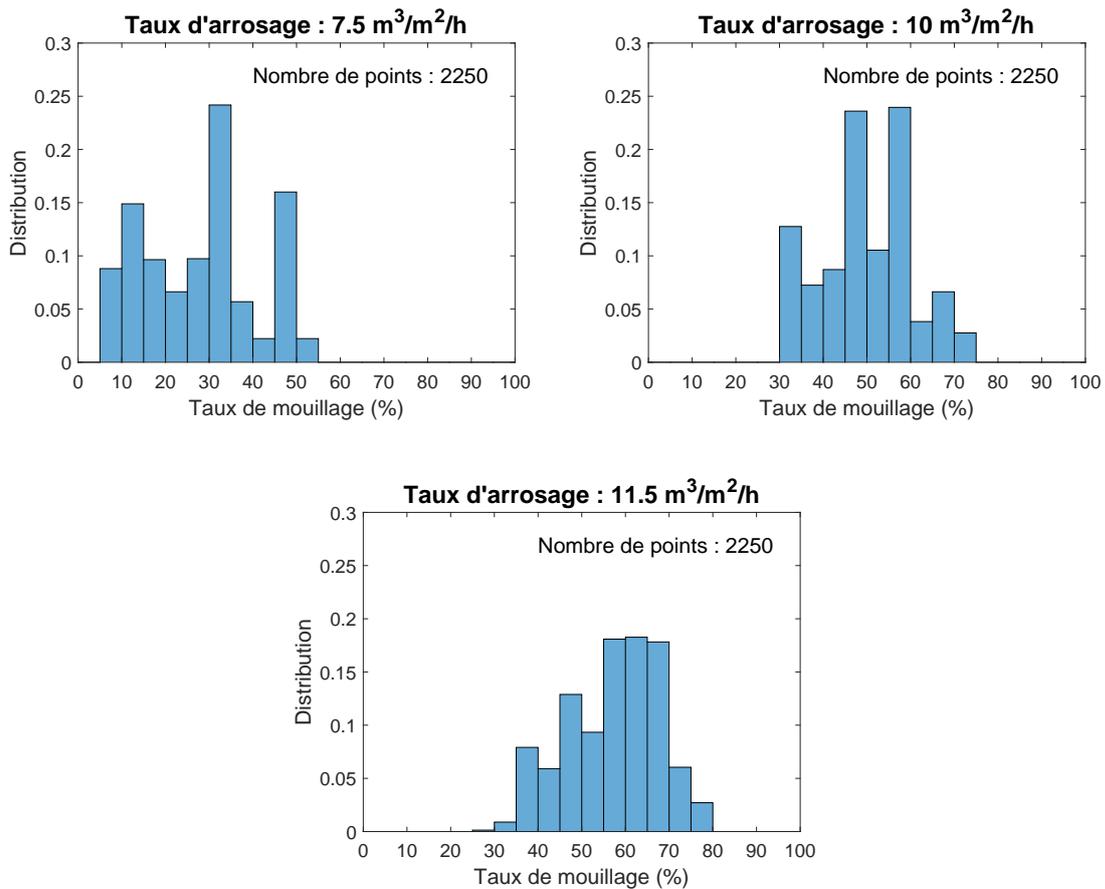


FIGURE 4.18 – Distribution des taux de mouillage pour les trois taux d'arrosage considérés (vitesse d'air fixée à 1,88 m/s)

On peut observer sur les graphiques que le mode des distributions semble augmenter avec l'augmentation du débit liquide. Les paramètres des distributions sont présentés dans le Tableau 4.4. En effet, la moyenne du taux de mouillage augmente en fonction du débit liquide : 25% pour un taux d'arrosage de 7,5 m³.m⁻².h⁻¹, 50% pour 10 m³.m⁻².h⁻¹ et 57% pour 11,5 m³.m⁻².h⁻¹. De même que la médiane (30%, 49% et 59%) et les modes des classes. Tous les indicateurs statistiques augmentent en fonction du débit liquide pour un écart type quasiment constant (13%, 10% et 11%).

TABLE 4.4 – Paramètres (en %) des distributions du taux de mouillage en fonction du taux d'arrosage (vitesse d'air fixée à 1,88 m/s)

| Taux d'arrosage $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ | 7,5 | 10 | 11,5 |
|--|---------|---------|---------|
| Moyenne | 28 | 50 | 57 |
| Médiane | 30 | 49 | 59 |
| Écart type | 13 | 10 | 11 |
| Mode (classes de 5%) | 30 - 35 | 55 - 60 | 60 - 65 |
| Mode (classes de 10%) | 30 - 40 | 50 - 60 | 60 - 70 |
| 5ème centile (5%) | 8 | 34 | 37 |
| 1er quartile (25%) | 15 | 44 | 49 |
| 3ème quartile (75%) | 35 | 57 | 66 |
| 95ème centile (95%) | 49 | 69 | 74 |
| Nombre de points | 2250 | 2250 | 2250 |

Afin d'essayer de mieux caractériser cette dépendance du taux de mouillage au débit liquide, les distributions des taux de mouillage ont été représentées en séparant les différentes localisations dans le garnissage. La Figure 4.19 présente les distributions des valeurs du taux de mouillage en fonction des valeurs du taux d'arrosage avec la représentation des paramètres statistiques.

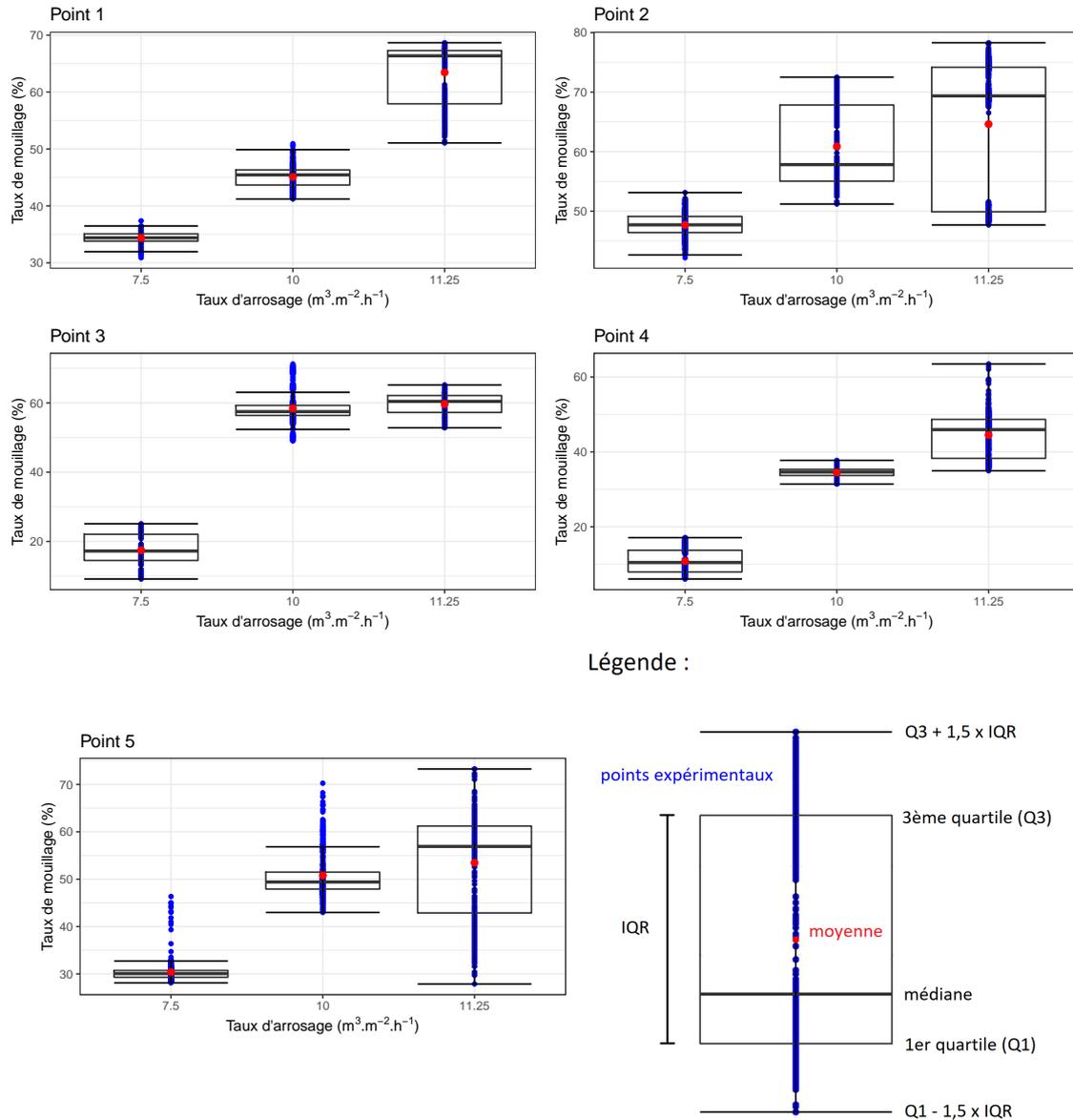


FIGURE 4.19 – Distributions des valeurs du taux de mouillage en fonction du taux d’arrosage en cinq localisations du garnissage : représentation des paramètres statistiques (moyenne, médiane, quartiles)

Pour les cinq localisations sur le garnissage, la tendance est identique avec une augmentation des principaux indicateurs statistiques avec l’augmentation du débit liquide. Cependant, le taux de mouillage dépendant fortement de la structure du garnissage, les différents points fournissent une disparité de gammes de taux de mouillage. En exprimant les moyennes et les médianes du taux de mouillage en fonction du taux d’arrosage, il est possible d’effectuer une régression linéaire et ainsi d’obtenir les coefficients de régression et le coefficient de détermination R^2 . Les résultats sont présentés dans le Tableau 4.5.

TABLE 4.5 – Paramètres (en %) des distributions du taux de mouillage en fonction du taux d'arrosage

| | Arrosage ($\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$) | Point 1 | Point 2 | Point 3 | Point 4 | Point 5 |
|-----------------------|---|---------|---------|---------|---------|---------|
| Moyenne | 7,5 | 34,5 | 47,5 | 18 | 11 | 30 |
| | 10 | 45 | 61 | 58 | 34 | 51 |
| | 11 | 63,5 | 64,5 | 59 | 45 | 54 |
| Coefficient directeur | | 6,9 | 4,4 | 10,8 | 8,6 | 6,2 |
| R ² | | 0,91 | 0,97 | 0,88 | 0,99 | 0,93 |
| Médiane | 7,5 | 34 | 48 | 18 | 10 | 30 |
| | 10 | 45 | 58 | 58 | 34 | 49 |
| | 11 | 67 | 69 | 60 | 48 | 57 |
| Coefficient directeur | | 7,9 | 5,1 | 11,1 | 9,5 | 6,83 |
| R ² | | 0,89 | 0,97 | 0,89 | 0,99 | 0,99 |

Le tracé des courbes de tendance permet de valider la tendance observée d'augmentation du taux de mouillage en fonction de l'augmentation du taux d'arrosage. Les paramètres des courbes de tendance donnent une quantification de cet accroissement du taux de mouillage. Ces données permettent aussi d'interpoler les résultats expérimentaux entre les valeurs du plan d'expérience, par exemple, pour des taux de mouillage compris entre 7,5 et 11,5 $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$. Avec beaucoup plus de précautions, ces courbes peuvent aussi permettre d'extrapoler les valeurs du taux de mouillage pour des valeurs de taux d'arrosage inférieures à 7,5 $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ et supérieures à 11,5 $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$, avec une incertitude croissante en s'éloignant de ces deux valeurs limites.

4.3.5 Conclusion et discussion sur les résultats

Les résultats obtenus pour les épaisseurs de film et les taux de mouillage doivent être considérés vis-à-vis du régime d'écoulement. Comme expliqué précédemment, le fonctionnement nominal des tours aéroréfrigérantes peut être comparé au fonctionnement des systèmes de colonnes en Génie des Procédés avec un régime très éloigné de l'engorgement. Cela explique notamment le mouillage non total du garnissage contrairement aux garnissages d'autres applications industrielles et la nature chaotique de l'écoulement ainsi que la difficulté d'observation de tendances sur l'évolution des paramètres hydrodynamiques.

Les résultats permettent de conclure que l'augmentation du débit d'eau a tendance à augmenter le mouillage de la surface en gardant une épaisseur moyenne du même ordre de grandeur.

De plus, comme expliqué dans la description des écoulements sur les garnissages au Chapitre 3, en régime permanent, pour un débit de liquide donné, le taux de mouillage et l'épaisseur de film sont deux grandeurs liées par la quantité de liquide présente sur le garnissage et la vitesse du fluide. Il est donc nécessaire de compléter l'étude et la caractérisation des écoulements dans les garnissages par

l'obtention d'un profil de vitesse dans les films ruisselants.

4.4 Conclusion

Dans ce chapitre, en raison du constat du manque de données sur l'hydrodynamique dans les tours de refroidissement industrielles dans la littérature, un dispositif expérimental de caractérisation des écoulements dans les garnissages de ces tours a été conçu et construit. Différentes méthodes de visualisation des écoulements diphasiques dispersés, inspirées de la littérature, ont été développées et mises en place sur le dispositif expérimental. Ces méthodes ont permis la mesure de grandeurs nécessaires à la caractérisation des écoulements en régime de films ruisselants sur les garnissages industriels à savoir l'épaisseur et le taux de mouillage. Une campagne expérimentale a été menée afin d'obtenir des valeurs de ces paramètres en fonction de paramètres de fonctionnement comme le débit d'eau ou la vitesse d'air. Les résultats de la campagne expérimentale pour le garnissage feuille ont montré que la vitesse d'air n'a pas d'influence homogène sur les grandeurs hydrodynamiques du film ruisselant, alors que le débit liquide influence fortement le taux de mouillage en gardant une épaisseur de film sensiblement constante. Pour les autres garnissages, les observations ont permis de caractériser de manière qualitative la nature des écoulements.

Ceci ne fait pas partie de cette étude, mais il serait aussi envisageable d'effectuer les mêmes études sur les garnissages hybrides et grille afin de caractériser l'ensemble des types de garnissages utilisés dans les tours de refroidissement de manière quantitative et notamment la proportion d'écoulement sous forme de film et la proportion d'écoulement dispersé. La mesure de taille de goutte pourrait aussi être envisagée pour ces types de garnissages.

D'autre part, le taux de mouillage et l'épaisseur du film ne sont pas des paramètres indépendants : ils sont reliés par la vitesse d'écoulement (bilan de matière). Une piste envisagée serait de caractériser la vitesse superficielle de l'écoulement et d'obtenir des champs de vitesses expérimentalement avec des techniques de PIV ou PTV par exemple. Cependant ces méthodes restent difficiles à mettre en place dans les écoulements chaotiques comme celui des garnissages.

Enfin, le dispositif expérimental construit pourrait servir à étudier le transfert thermique dans les garnissages. La présente étude se focalisant sur les aspects hydrodynamiques, les coefficients de transfert thermique n'ont pas été évalués, mais une fois déterminés ils pourraient être comparés aux données disponibles dans la littérature afin de caractériser thermiquement les garnissages.

Afin de compléter les données obtenues par les campagnes expérimentales, les outils de Mécanique des Fluides Numérique (MFN) ont été utilisés afin d'essayer de reproduire par simulations les écoulements dans les garnissages. Ces simulations ont pour objectif de fournir les données

complémentaires comme les champs de vitesses superficielles ou les profils de vitesse à l'intérieur des films liquides. À terme, les données provenant de campagnes expérimentales et des simulations de MFN ont pour objectif de se compléter pour mener à une caractérisation complète des écoulements dans les garnissages.

Caractérisation numérique des écoulements dans les garnissages

Dans le Chapitre précédent, a été possible de mesurer les épaisseurs de film et les taux de mouillage dans des conditions industrielles grâce à la mise en place du dispositif expérimental représentatif. Cependant, afin de compléter la caractérisation des écoulements dans les garnissages, il manque des informations importantes de l'hydrodynamique locale, telle que la vitesse, la contrainte de cisaillement ou de l'hydrodynamique à l'échelle système tel que le taux de rétention liquide ou l'aire interfaciale. Pour cela, il est possible d'utiliser les outils de simulations de mécanique des fluides numérique (MFN) pour simuler les écoulements diphasiques locaux dans les garnissages et aussi de remonter à des grandeurs hydrodynamiques à l'échelle système.

5.1 Choix d'une approche de simulation

Pour simuler au mieux un film ruisselant sur une surface verticale complexe, l'approche de simulation VOF conseillée dans la littérature (cf Chapitre 3) est comparée avec l'approche bi-fluide Euler-Euler généralement utilisée pour la simulation des phases dispersées.

5.1.1 Présentation des deux approches testées

Pour simuler les films ruisselants sur le garnissage feuille, deux approches différentes de simulations de MFN diphasiques en 3D ont été comparées : une approche Euler-Euler avec recompression d'interface et une approche VOF. Ces deux approches sont basées sur la résolution de la formulation eulerienne des trois équations de Navier-Stokes : l'équation de continuité ou bilan de masse, l'équation de bilan de quantité de mouvement et l'équation de bilan d'énergie (respectivement équations 5.1, 5.2 et 5.3).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot \mathbf{F}_\sigma \quad (5.2)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u}) = -\nabla \cdot ((\boldsymbol{\tau} - p) \cdot \mathbf{u}) + \nabla \cdot \mathbf{q} + \rho \mathbf{g} \quad (5.3)$$

avec ρ la masse volumique (kg/m^3), \mathbf{u} la vitesse du fluide (m/s), p la pression (Pa), $\boldsymbol{\tau}$ le tenseur des contraintes visqueuses (Pa), F_σ la tension de surface liquide/gaz ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-2}$), \mathbf{g} l'accélération de la pesanteur ($\text{m} \cdot \text{s}^{-2}$), E l'énergie totale du fluide par unité de masse (J/kg) et \mathbf{q} le flux thermique dû à la conduction thermique ($\text{J} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$). À l'interface liquide/gaz, la force de tension de surface s'exprime comme $\mathbf{F}_\sigma = \sigma \nabla \cdot \mathbf{n}$ avec σ la tension de surface liquide/gaz (N/m) et \mathbf{n} le vecteur normal à l'interface par unité de volume (m/m^3).

L'approche diphasique Euler-Euler considère le milieu comme la superposition de deux fluides continus : les trois équations de Navier-Stokes sont donc résolues pour chaque fluide. Les approches Euler-Euler permettent notamment une meilleure prédiction des transferts de matière entre les phases ainsi qu'une meilleure prédiction en cas de configuration de phase dispersée (e.g. bulles, gouttes). Pour obtenir une description plus précise de l'interface, un modèle de recompression d'interface peut être ajouté (Coste, 2013).

L'approche VOF est une approche diphasique permettant de caractériser les interfaces (Hirt et Nichols, 1981). Les équations de Navier-Stokes ne sont résolues que pour une seule phase globale. Le caractère diphasique est obtenu par la résolution d'une équation supplémentaire portant sur la continuité de la fraction volumique α de chaque phase (Équation 5.4). La fraction volumique est définie telle que $\alpha = 1$ dans la phase n°1, $\alpha = 0$ dans la phase n°2 et $0 < \alpha < 1$ en présence de l'interface.

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (u \alpha) = 0 \quad (5.4)$$

En VOF, pour un fluide isotherme (on néglige l'équation de l'énergie), incompressible et non miscible, le système d'équations peut être réduit (Équation 5.5).

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) &= -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}_\sigma \\ \frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (u \alpha) &= 0 \end{aligned} \quad (5.5)$$

Concernant la prise en compte de la turbulence pour les simulations, les deux approches nécessitent l'utilisation de modèles de turbulence. Dans le cas de l'approche Euler-Euler, un modèle de turbulence peut être sélectionné pour chacune des phases de manière indépendante. Dans certains cas particuliers, comme pour les garnissages, le modèle de turbulence peut être activé pour une seule phase alors que les équations pour l'autre phase sont résolues en laminaire. Le modèle VOF ne comportant qu'une seule équation pour les deux fluides, s'il est activé, un modèle de turbulence unique est considéré pour les deux phases.

5.1.2 Choix d'une approche sur la base d'un cas test

Afin de comparer les deux approches, un cas test a été sélectionné dans la littérature. Dans leurs étude, Negny *et al.* (2001a) on étudié la géométrie d'un film ruisselant sur un tube sinusoïdal vertical. Une coupe 2D du tube a été effectuée et extrudée sur 0,75 mm afin d'obtenir une géométrie 3D permettant une simulation pouvant tenir compte du mouillage et des angles de contact. Un schéma de la géométrie est présenté à la Figure 5.1 (gauche). La géométrie est alors maillée de telle sorte que le film ruisselant, de l'ordre de grandeur de quelques centaines de μm , soit simulé. En proche paroi, la maille est fixée à $30\ \mu\text{m}$ d'épaisseur et le film est initialisé sur 6 mailles ($180\ \mu\text{m}$), l'épaisseur du domaine est divisée en 15 mailles (longueur de maille de $70\ \mu\text{m}$).

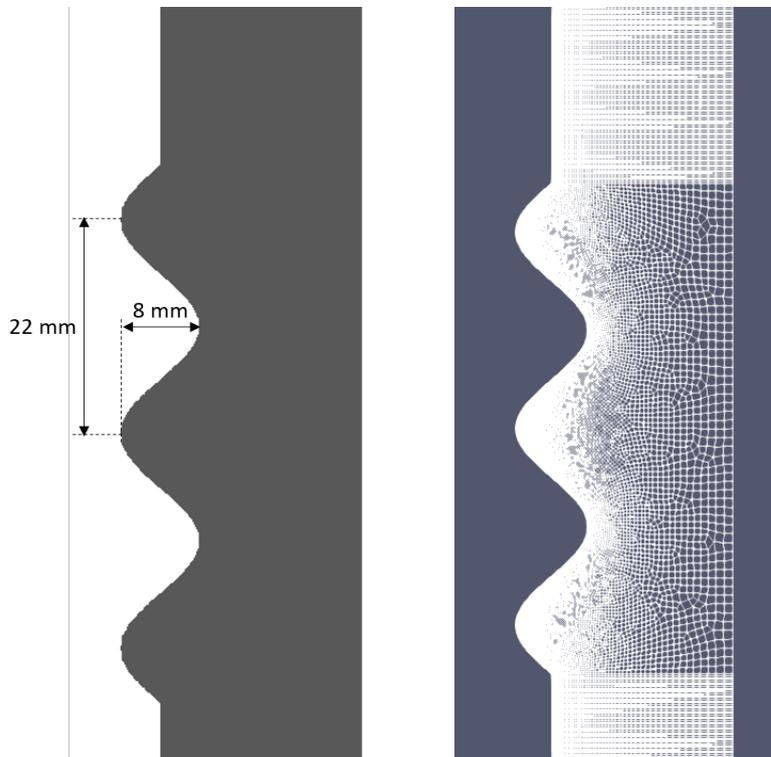


FIGURE 5.1 – Géométrie et maillage du cas test

Pour le cas test, afin de coller aux résultats de la littérature (Negny *et al.*, 2001a), le nombre de Reynolds du film liquide¹ est fixé à $Re = 150$.

Les simulations Euler-Euler sont faites avec le logiciel Neptune_CFD 4.2. Elles sont réalisées en laminaire côté liquide et côté gaz, le Reynolds liquide étant faible ($Re = 150$), et le gaz étant initialisé immobile. En VOF, les simulations ont été réalisées avec OpenFOAM-v1806; elles sont également réalisées en laminaire. Du fait de la sensibilité du calcul aux conditions d'entrées, la géométrie a été légèrement modifiée afin que le haut du garnissage soit incliné. Un exemple de comparaison des simulations du film ruisselant en Euler-Euler et en VOF est présenté à la Figure 5.2.

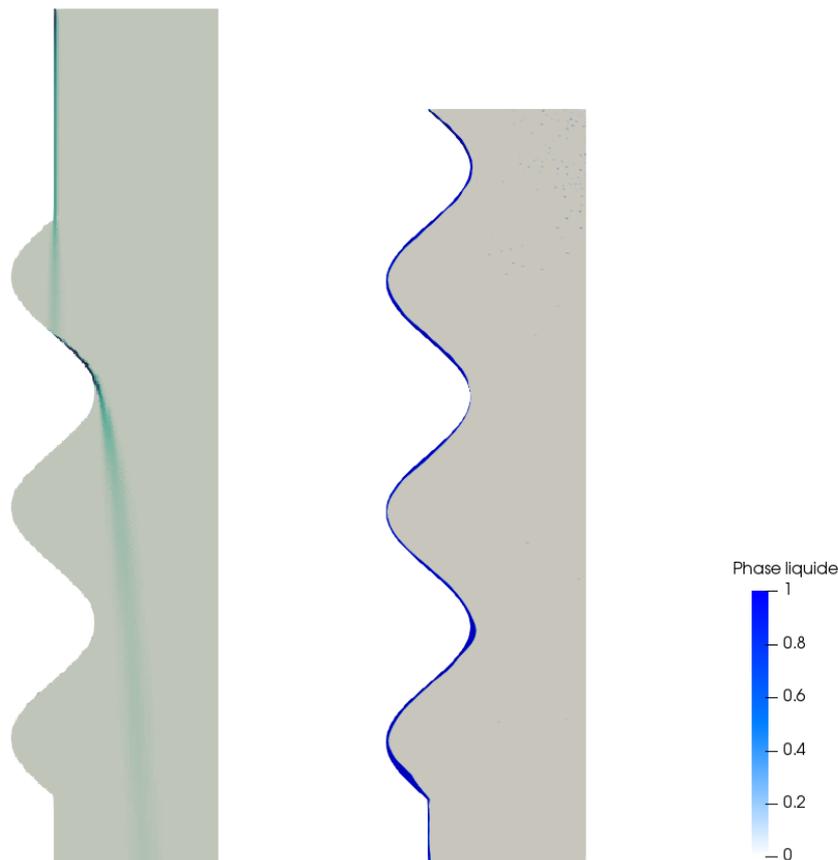


FIGURE 5.2 – Simulation du cas test avec les deux approches de MFN : Euler-Euler (gauche) et VOF (droite)

On observe qu'avec les simulations Euler-Euler le film liquide n'adhère pas à la paroi de la géométrie, contrairement aux résultats attendus alors qu'en VOF, le film reste collé à la paroi. Cela provient de la prépondérance de l'influence de la tension de surface par rapport à l'inertie du fluide : lors de l'établissement du film, l'angle de contact liquide/solide ainsi que la tension de surface liquide-gaz

1. $Re = \frac{\rho u \delta}{\mu}$ avec ρ la masse volumique du liquide, u la vitesse du liquide, δ l'épaisseur du film liquide et μ la viscosité dynamique

tendent à maintenir le fluide contre la paroi. Les équations du modèle utilisé ici en Euler-Euler ne représentent pas l'influence de ces forces ce qui provoque le détachement du fluide. Le logiciel utilisé ne tenant pas compte des forces liquide/solide, le film se décolle. Même en initialisant un film à la paroi, les instabilités de l'écoulement provoquent son décollement. Pour le VOF, il est possible de comparer les épaisseurs de film obtenues avec les épaisseurs de la littérature : les épaisseurs simulées sont de l'ordre de quelques centaines de micromètres avec un maximum à 600 μm et un minimum de 50 μm . Ces valeurs sont cohérentes avec les mesures effectuées par Negny *et al.* (2001a) dans l'étude de référence d'où provient le cas test (150 à 350 μm).

Ces observations valident l'importance de la prise en compte de l'angle de contact et de la tension de surface pour la simulation numérique des films ruisselants. Dans les cas des deux approches testées avec les deux outils sélectionnés, le choix se porte donc sur l'utilisation de l'approche VOF pour la simulation des films ruisselants sur les garnissages pour la suite de l'étude.

5.2 Matériel et méthode

Une fois l'approche de modélisation VOF sélectionnée à l'aide du cas test, l'étude se porte sur la géométrie du garnissage feuille des tours aéroréfrigérantes.

5.2.1 Géométrie et maillage

Afin de caractériser les films ruisselants d'une épaisseur de quelques centaines de micromètres, la géométrie choisie est un bout de feuille de garnissage de 5 cm par 5 cm ce qui représente une période de la géométrie sinusoïdale et donc une maille du garnissage. Une photo du garnissage et une image de la géométrie correspondante réalisée par ordinateur sont présentées à la Figure 5.3. La géométrie numérique est simplifiée dans le sens où elle ne prend pas en compte les perforations coupées par le découpage de la surface étudiée et que le diamètre des trous ainsi que leur espacement ont été moyennés (dû au procédé de fabrication, le diamètre et la répartition des trous ne sont pas homogènes sur un garnissage réel).

Un maillage cartésien de la géométrie conçue par ordinateur a ensuite été réalisé à l'aide du logiciel SALOME 8.5. Pour capturer les films ruisselants et particulièrement les écoulements dans les perforations du garnissage, il est nécessaire de réaliser un maillage très fin en paroi et dans les perforations. En effet, le nombre de mailles dans le film ruisselant et dans les perforations doit être suffisant pour capter les très faibles quantités de liquide et simuler correctement les faibles épaisseurs du film. De plus, plus le maillage est fin, plus la position de l'interface et donc l'épaisseur du film sont obtenues de manière précise. Trois maillages différents ont été réalisés et testés pour trouver le meilleur

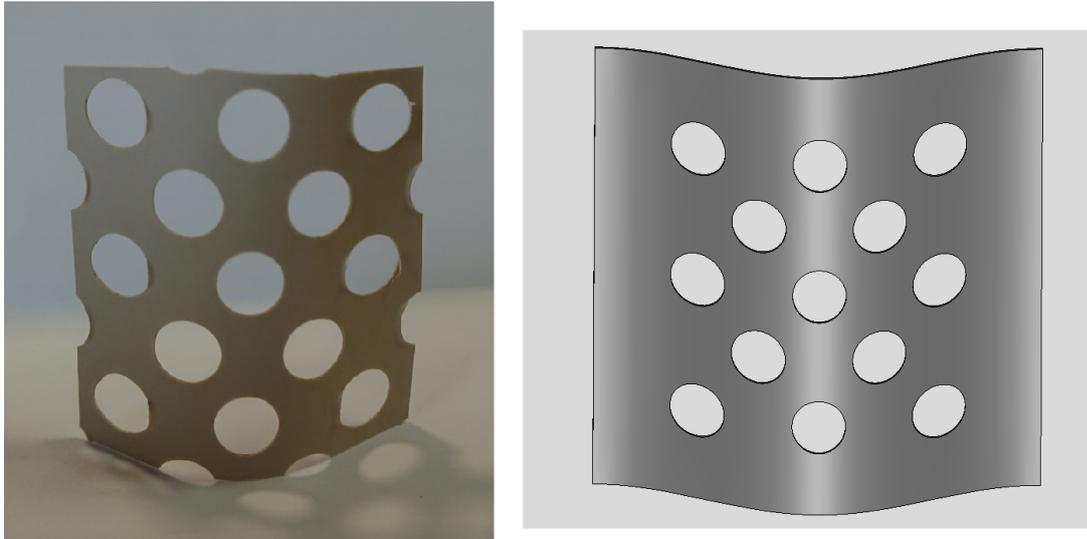


FIGURE 5.3 – Photographie de la partie du garnissage feuille que l'on veut simuler (gauche) et de la géométrie correspondante réalisée par ordinateur (droite)

compromis entre la précision nécessaire pour obtenir l'épaisseur du film et le temps de calcul. Les caractéristiques des trois maillages sont présentées dans le Tableau 5.1.

TABLE 5.1 – Caractéristiques des différents maillages testés

| | | Maillage raffiné | Maillage référence | Maillage relâché |
|--------------------------------|------------------|----------------------|---------------------|---------------------|
| Proche paroi & trous | Taille de maille | 20 μm | 30 μm | 50 μm |
| | Nb de mailles | 30 | 20 | 20 / 12 (trous) |
| Zone intermédiaire | Taille de maille | 50 μm | 100 μm | 200 μm |
| | Nb de mailles | 20 | 10 | 10 |
| Centre du canal | Taille de maille | 100 μm | 400 μm | 800 μm |
| | Nb de mailles | 10 | 10 | 10 |
| Nombre total de mailles | | 11,1 millions | 6,3 millions | 3,2 millions |

Les maillages sont de taille différente dans le cœur du domaine (zone intermédiaire et centre du canal) puisqu'il faut un nombre minimal de mailles dans chacune de ces zones quel que soit le raffinement du maillage. Pour l'étude du maillage, cette différence de taille n'induit pas de différence puisque la condition limite pour l'air est fixée en vitesse donc indépendante de la taille de la zone (contrairement à une condition en débit). La quantité d'eau injectée, elle, reste constante puisque la portion de garnissage est identique.

La réalisation d'un test a permis d'exclure le maillage relâché car l'épaisseur du film tombait régulièrement en dessous de trois mailles d'épaisseur. Le temps de calcul nécessaire avec le maillage le plus raffiné était largement augmenté et l'instabilité du calcul devenait plus importante : avec certaines

conditions initiales, le calcul ne parvenait pas à se lancer. Malgré une précision plus importante, cette instabilité a poussé le choix du maillage intermédiaire comme maillage de référence. Le maillage proche paroi et le maillage d'une perforation sont montrés à la Figure 5.4.

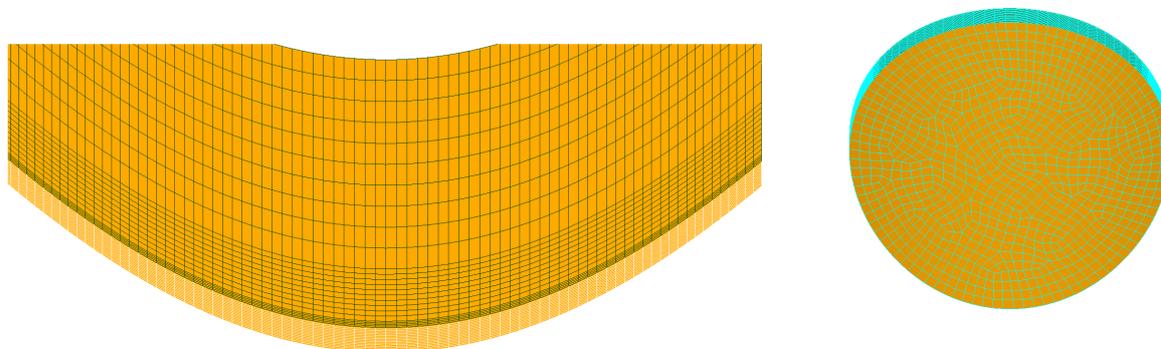


FIGURE 5.4 – Maillage en paroi du garnissage vu de dessus (gauche) et maillage d'une perforation (droite)

Pour les conditions aux limites, le maillage est divisé en six zones différentes : l'entrée liquide en haut le long de la paroi, la sortie liquide en bas le long de la paroi, l'entrée gaz en bas, la sortie gaz en haut, le mur solide sur la paroi du garnissage et les symétries sur les côtés restants du domaine. Le débit liquide est calculé grâce au taux d'arrosage rapporté à la longueur de garnissage et il est injecté dans la zone d'entrée liquide le long de la paroi sur une épaisseur fixée de $480\ \mu\text{m}$.

Pour la caractérisation du garnissage par la suite, toutes les simulations seront réalisées avec cette géométrie de garnissage.

5.2.2 Choix des conditions aux limites et des paramètres de simulation

La méthode VOF a été sélectionnée pour simuler les écoulements sur la géométrie de garnissage créée. Le solveur numérique sélectionné est *InterIsoFoam* qui intègre un algorithme d'iso-advection pour déterminer la position de l'interface. Bien que le film liquide soit laminaire avec une valeur du nombre de Reynolds comprise entre 20 et 150 selon les conditions opératoires, les simulations sont effectuées avec un modèle de turbulence puisque la circulation de l'air à contre-courant est turbulente (nombre de Reynolds de l'ordre de 3000). Les simulations sont donc réalisées avec le modèle de turbulence k-epsilon.

Dans OpenFOAM, il existe différents modèles disponibles pour simuler la tension de surface (e.g. non-glissement, angle de contact statique, angle de contact dynamique). Le modèle considéré est celui de l'angle de contact statique : la valeur est fixée comme condition limite et la valeur est implémentée dans la simulation via le modèle de Brackbill *et al.* (1992). L'angle de contact statique est défini pour une goutte de liquide déposé sur une surface solide, le système est alors triphasique : liquide, solide et gaz.

Ce système est défini par ses trois interfaces entre les phases deux à deux et par deux points triples de chaque côté de la goutte où les trois phases se rencontrent. L'angle de contact statique est l'angle formé entre la surface solide sur laquelle repose la goutte et le plan tangent à l'interface passant par ce point triple (angle θ sur la Figure 5.5). Dans cette configuration, les forces de tension de surface pour chaque interface sont reliées entre elles et à l'angle de contact statique par la relation de Young-Dupré présentée à l'Équation 5.6.

$$\cos\theta = \frac{\gamma_{s/g} - \gamma_{s/l}}{\gamma_{l/g}} \quad (5.6)$$

avec θ l'angle de contact statique (en $^\circ$), $\gamma_{s/g}$ la tension de surface solide/gaz (en N/m), $\gamma_{s/l}$ la tension de surface solide/liquide (en N/m) et $\gamma_{l/g}$ la tension de surface liquide/gaz (en N/m) ; cet équilibre est illustré à la Figure 5.5.

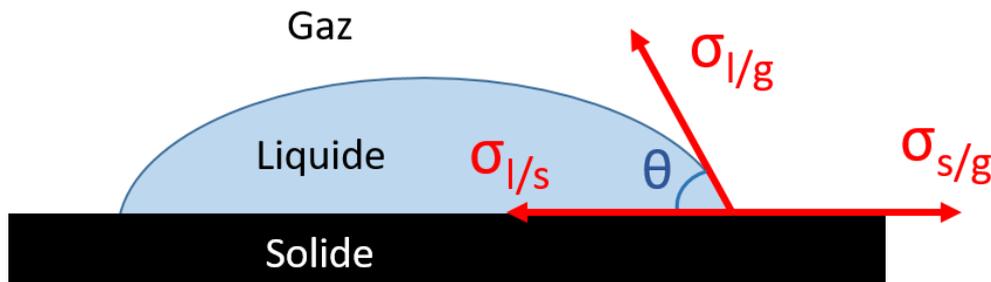


FIGURE 5.5 – Bilan des forces de tension de surface pour une goutte liquide déposée sur une surface solide - Représentation de l'angle de contact statique θ

Afin de réaliser les simulations, le réglage des conditions initiales est primordial pour être représentatif des conditions des écoulements réels. L'épaisseur du film étant fixée en entrée, le débit massique est fixé afin de respecter le taux d'arrosage des tours aéroréfrigérantes industrielles. Comme pour le plan d'expérience expérimental, trois taux d'arrosages ont été simulés : 7,5 ; 10 et 11,5 $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$. En bas du domaine, la vitesse d'air est fixée de manière à respecter un rapport F_a/F_e constant à 0,8 comme c'est le cas pour les garnissages industriels des tours aéroréfrigérantes des circuits de refroidissement étudiés. Les autres parties supérieures et inférieures du domaine qui ne sont ni l'entrée de l'eau ni l'entrée de l'air sont considérées comme des sorties libres fixées. Les limites verticales du domaine sont considérées comme des plans de symétrie. Comme vu précédemment, les conditions aux limites de la paroi solide vont être les plus importantes du fait de la prédominance de la force de tension de surface dans les simulations. La vitesse est fixée nulle en paroi et, pour le modèle de turbulence, une loi de paroi est activée dans OpenFOAM en fonction du raffinement du maillage. En fonction de la valeur calculée de la

distance à la paroi adimensionnée y^+ (Équation 5.7), une loi de paroi est activée si la valeur dépasse 10 (OpenFOAM : User Guide v1806, 2018; Popovac et Hanjalic (2007)). Le maillage a été conçu de telle sorte que les valeurs du y^+ en paroi soient comprises entre 0.8 et 4.8 (Figure 5.6) ce qui permet de ne pas activer de loi de paroi et d'avoir une représentation fidèle des vitesses en proche paroi du garnissage.

$$y^+ \equiv \frac{u_* y}{\nu} \quad (5.7)$$

avec y^+ la distance à la paroi adimensionnée, u_* la vitesse de friction (en m/s), y la distance à la paroi (en m) et ν la viscosité cinématique (en m^2/s).

Il est possible de noter que d'autres lois de proche paroi pourraient être utilisés avec des modèles de turbulence spécifiques appelés Bas-Reynolds mais le choix a été fait ici d'utiliser un modèle de turbulence qui puisse convenir aux forts nombres de Reynolds côté gaz et aux faibles nombres de Reynolds en proche paroi avec un maillage assez fin.

Toutes les informations détaillées sont disponibles dans la documentation du logiciel de simulation (OpenFOAM : User Guide v1806, 2018).

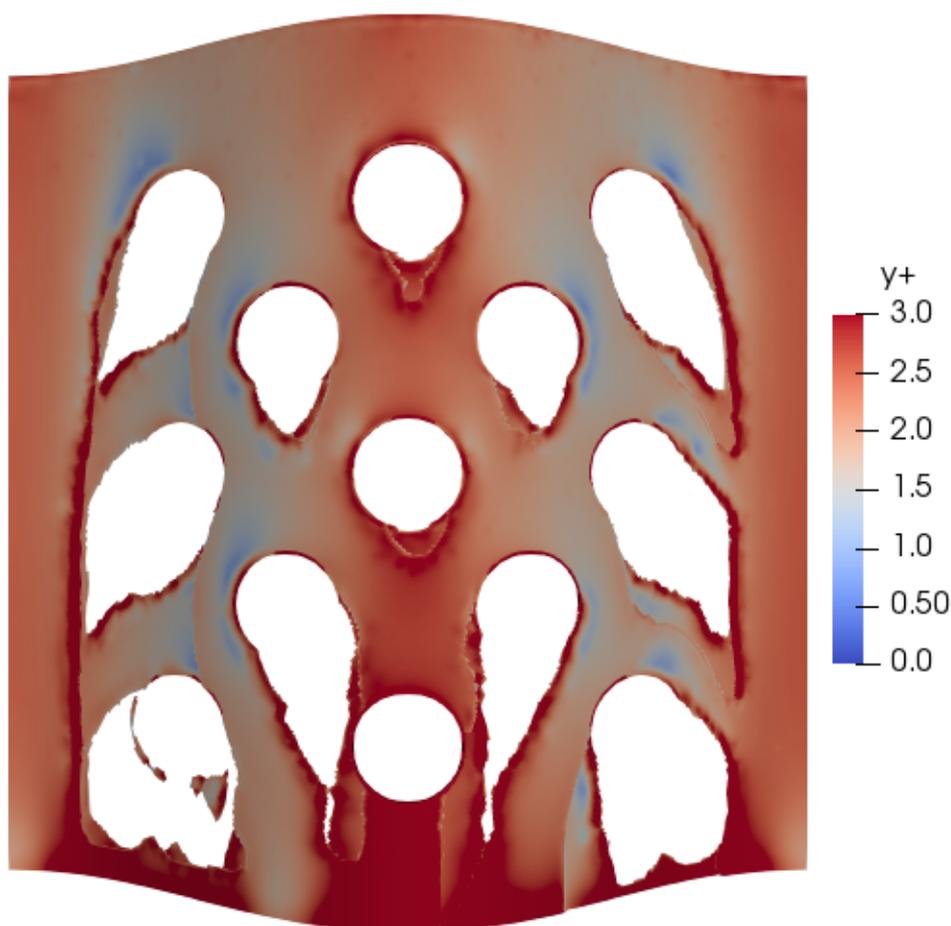


FIGURE 5.6 – Représentation de la valeur du y^+ en paroi pour les zones mouillées

Pour la condition limite en pression, une condition de zéro gradient est imposée à la paroi. L'ensemble des conditions aux limites est résumé dans le Tableau 6.1.

TABLE 5.2 – Résumé des types de conditions aux limites pour les simulations de MFN

| | Taux de phase liquide | Vitesse | Pression |
|----------------------------|------------------------------|---------------------|------------------------|
| Entrée d'eau | Fixé à 1 | Débit massique fixé | |
| Entrée d'air | Fixé à 0 | Vitesse fixée | |
| Sortie d'eau | Fixé à 1 | | Pression atmosphérique |
| Sortie d'air | Fixé à 0 | | Pression atmosphérique |
| Limites verticales | Symétrie | Symétrie | Symétrie |
| Paroi du garnissage | Angle de contact statique | Vitesse fixée à 0 | zéro gradient |

La détermination de la valeur de l'angle de contact statique pour les simulations numériques se base sur des mesures expérimentales réalisées par goniométrie. Par cette méthode, l'angle de contact statique est mesuré en déposant une goutte de liquide sur la surface étudiée et en mesurant l'angle que la goutte forme avec la surface, deux valeurs de l'angle peuvent être mesurées pour une même goutte (une de chaque côté). Le principe de fonctionnement des mesures par goniométrie est illustré sur la Figure 5.7.

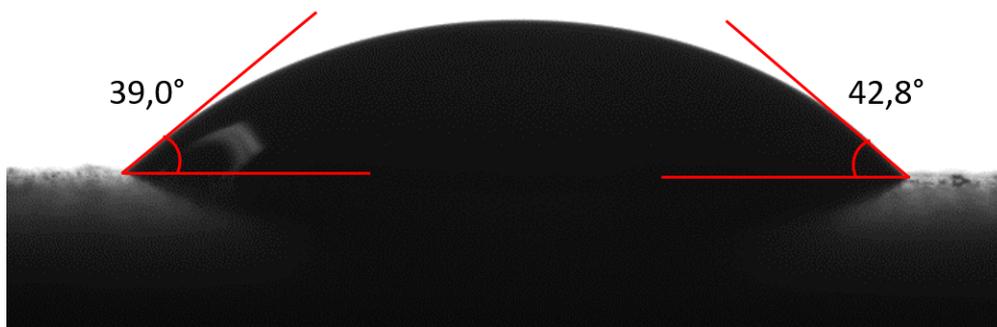


FIGURE 5.7 – Principe de mesure des angles de contact statiques par goniométrie

Les valeurs mesurées en laboratoire sur le garnissage feuille avec de l'eau à 20°C sont présentées dans le Tableau 5.3. L'angle 1 et l'angle 2 correspondent respectivement aux deux valeurs de l'angle de statique mesuré de chaque côté sur la même goutte d'eau.

TABLE 5.3 – Valeurs mesurées des angles de contact sur du garnissage feuille

| | | | | | | | | | | | |
|--------------------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|-------------------------|
| Angle 1 (°) | 26,9 | 39,0 | 42,6 | 45,2 | 39,6 | 45,4 | 42,7 | 49,9 | 42,6 | 30,7 | Moyenne : 40,4 |
| | | | | | | | | | | | Écart type : 6,9 |
| Angle 2 (°) | 34,9 | 42,8 | 48,7 | 45,2 | 38,0 | 49,2 | 41,6 | 52,6 | 40,9 | 34,2 | Moyenne : 42,8 |
| | | | | | | | | | | | Écart type : 6,2 |

Pour le plan d'expérience, trois angles de contact différents ont été considérés afin de balayer différentes configurations possibles de taux de mouillage et d'englober la plage de valeurs d'angles mesurées expérimentalement : 15°, 30° et 45°.

Les mesures ont aussi montré que dans le cas d'un garnissage encrassé, la couche de dépôt (généralement mélange de biofilm, de matières en suspension déposées et de tartre) induit un mouillage total donc un angle de contact considéré nul. Des simulations ont donc été réalisées pour reproduire le cas d'absence d'angle de contact avec le même modèle d'angle statique (valeur fixée à 1 degré).

En raison du grand nombre de maille du maillage sélectionné, les calculs sont lancés sur des 20 nœuds soit 260 cœurs d'un supercalculateur. Les simulations sont réalisées en régime transitoire à cause de la nature instable des écoulements simulés, avec un pas de temps variable (nombre de Courant maximum fixé à 0,5). Avec ces paramètres, le temps de calcul est d'environ 24 h pour simuler 1 à 3 secondes de temps physique simulé selon les conditions opératoires choisies (taux d'arrosage et angle de contact).

5.2.3 Post-traitement et grandeurs mesurées

L'objectif de l'étude est de pouvoir observer l'écoulement simulé et de mesurer l'épaisseur du film liquide, sa vitesse et le taux de mouillage surfacique. Pour l'épaisseur, des coupes verticales de la géométrie sont effectuées en douze points correspondant à des configurations différentes. Un exemple de 3 coupes différentes est présenté à la Figure 5.8 : la première (gauche) permet de capter les écoulements dans l'axe de symétrie du garnissage au centre, la deuxième (centre) permet d'observer le ruissèlement vertical entre les trous et la troisième (droite) permet d'observer l'écoulement sur les trous situés plus proche du bord dans la partie concave. Les 12 coupes uniformément réparties sur la largeur de la géométrie simulée permettent de caractériser l'ensemble de configurations d'écoulements observables. Les coupes sont symétriques par rapport à la coupe centrale (Figure 5.8 - gauche) et normale au garnissage. L'ensemble des images est obtenu par post-traitement avec le logiciel PARAVIEW des fichiers résultats des simulations OpenFOAM.

Le nombre de coupes permet d'obtenir une grande diversité d'épaisseurs de films liquides possibles aux différents endroits du garnissage. Cette exhaustivité est nécessaire afin d'avoir des distributions représentatives de l'ensemble des épaisseurs. Les différentes coupes obtenues sont post-traitées de la même manière que les films liquides filmés, par la méthode de contraste décrite dans la caractérisation

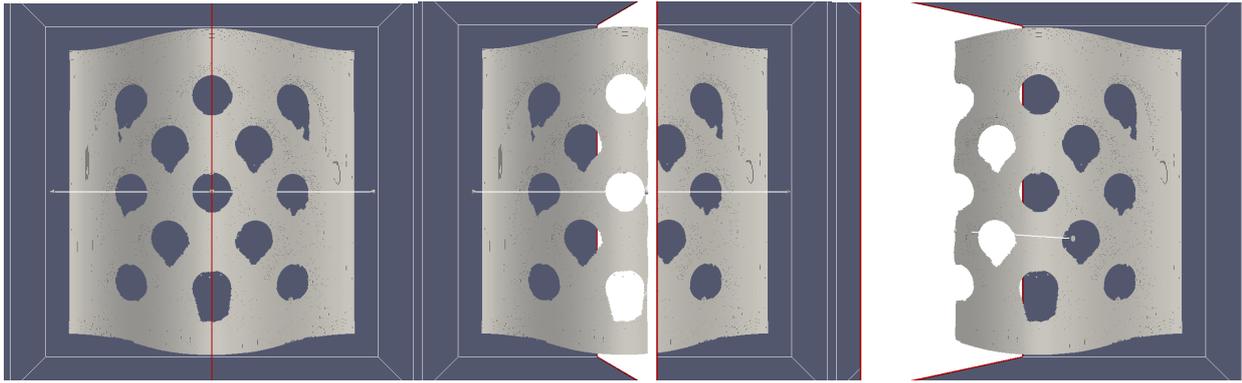


FIGURE 5.8 – Exemples de coupes verticales du garnissage utilisées pour le post-traitement : coupe centrale sur les perforations (gauche), coupe centrale entre les perforations (centre) et coupe sur les perforations latérales (droite)

expérimentale présentée au Chapitre 4 : le traitement d'image via Matlab permet d'obtenir les épaisseurs de films en fonction de la position verticale.

Pour le fluide, le post-traitement OpenFOAM permet d'obtenir directement les champs de vitesse dans le liquide et les profils de vitesse en fonction de l'épaisseur du film dans les endroits représentatifs.

Le taux de mouillage est mesuré par rapport à la surface pleine du garnissage : les perforations ne sont pas prises en compte dans ce calcul. De la même manière que l'épaisseur, le mouillage est obtenu par traitement d'image via MATLAB comme pour la caractérisation expérimentale.

Par un traitement supplémentaire portant à la fois sur les coupes pour visualiser l'épaisseur et sur la visualisation de l'écoulement face au garnissage, il est possible de savoir pour chaque perforation si une lentille d'eau est formée et quelle est son épaisseur. Des images de la formation d'une lentille d'eau sur une perforation du garnissage par augmentation du taux d'arrosage sont présentées Figure 5.9. Cela valide la capacité de l'approche CFD sélectionnée à simuler les lentilles d'eau.

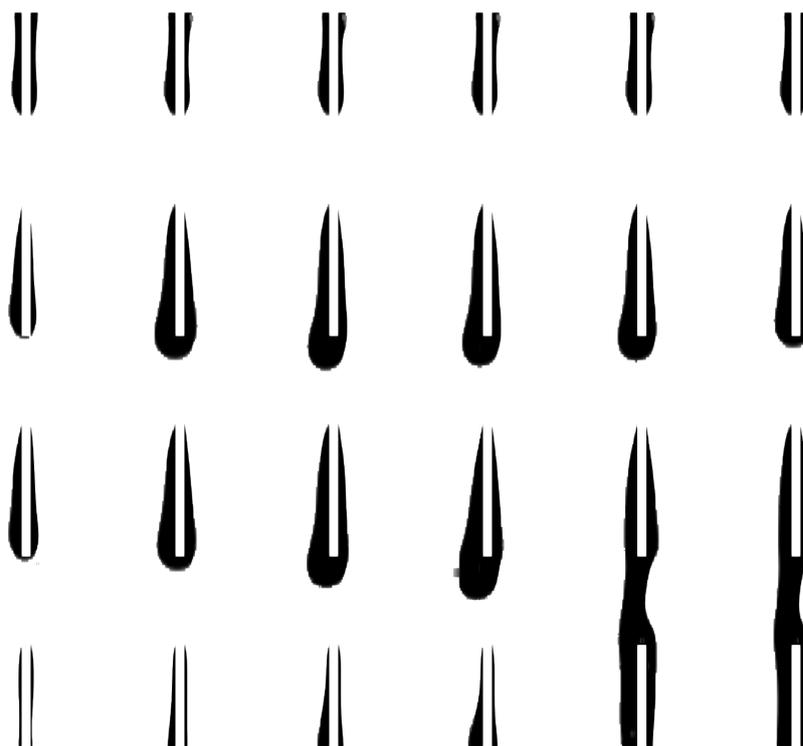


FIGURE 5.9 – Visualisation de la formation de la lentille d'eau lors de l'augmentation du débit liquide au cours du temps (de $7,5$ à $10 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$)

5.3 Résultats des simulations de MFN : caractérisation du garnissage à l'échelle système

5.3.1 Taux de mouillage

Afin d'évaluer l'influence de l'angle de contact liquide/solide choisi comme condition aux limites de la paroi, plusieurs simulations ont été réalisées à débit d'eau et d'air constants avec différents angles de contact statiques : 1 , 15 , 30 , 35 , 40 et 45° . Les résultats des simulations en régime permanent pour un taux d'arrosage de $7,5 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ sont présentés à la Figure 5.10.

On observe une nette influence de l'angle de contact sur le taux de mouillage du garnissage : par exemple jusqu'à 15° , le taux de mouillage du garnissage est considéré comme total. Dans le cas d'un mouillage partiel, pour un taux d'arrosage de $7,5 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ par exemple, le taux de mouillage est de 83% pour un angle de contact liquide/solide statique de 30° , diminue à 68% pour 35° , puis à 59% à 40° et enfin chute à 47% pour un angle de 45° . Dans le cas du mouillage non total (angles de 30 à 45°), les résultats détaillés de l'influence du taux d'arrosage sur le taux de mouillage sont présentés dans le Tableau 5.4.

Pour un angle de contact statique liquide/solide donné, il est aussi possible d'observer l'influence d'une augmentation du taux d'arrosage sur le mouillage. Les résultats sont présentés sur les points tracés

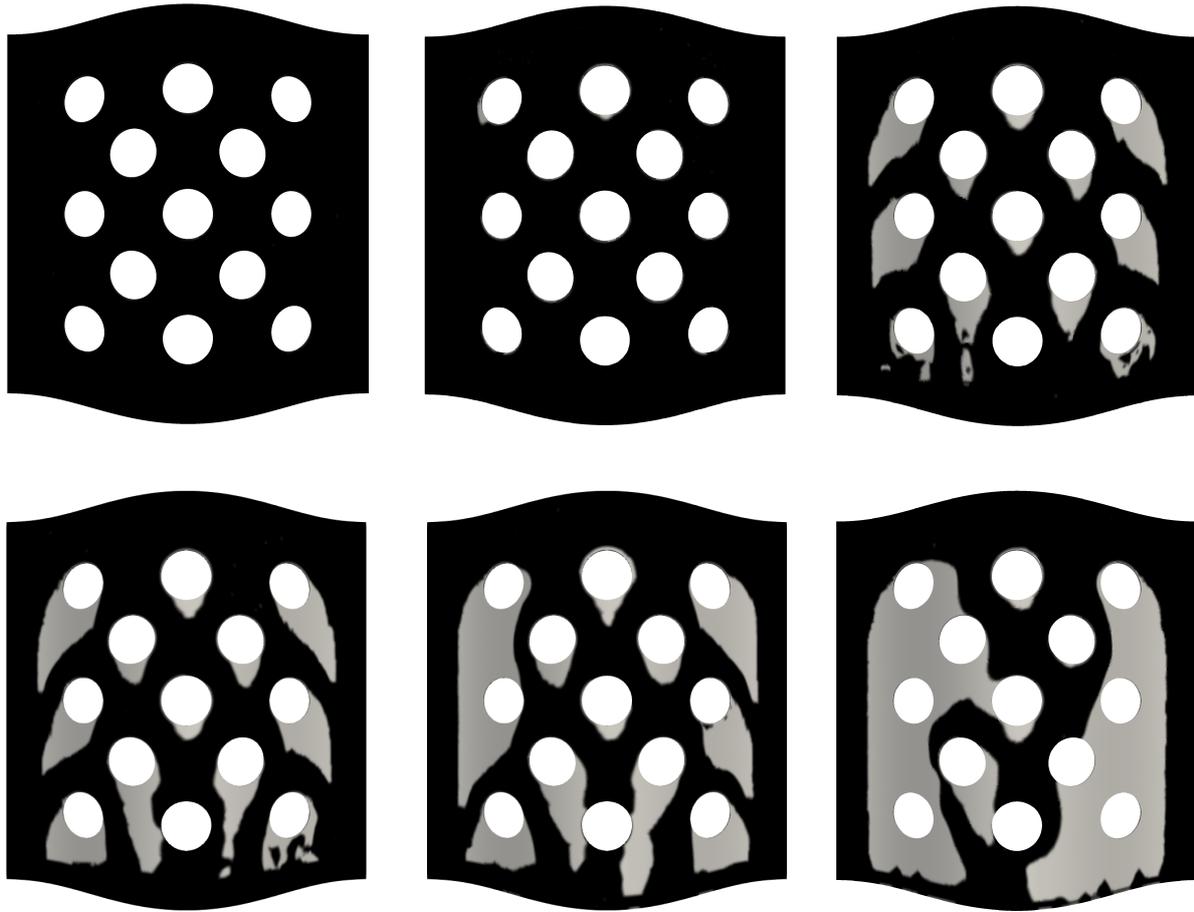


FIGURE 5.10 – Influence de l'angle de contact liquide/solide sur le taux de mouillage pour un taux d'arrosage de $10 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$: 1° (haut gauche), 15° (haut centre), 30° (haut droite), 35° (bas gauche), 40° (bas centre) et 45° (bas droite) - liquide en noir et surface en gris

à la Figure 5.11.

Pour un angle de contact donné, l'augmentation du taux d'arrosage conduit à une augmentation du taux de mouillage : l'augmentation de la quantité de liquide augmente la couverture du solide par le film liquide en plus de la formation possible des lentilles d'eau dans les perforations comme évoqué précédemment.

Pour les phénomènes surfaciques d'encrassement (e.g. précipitation du tartre, développement de biofilm, dépôt de MES), le taux de mouillage est donc le paramètre primordial afin de quantifier la proportion de solide concernée par ces mécanismes d'encrassement des surfaces au cours du temps. Plus généralement, la prise en compte du mouillage et de la formation des lentilles peut être considérée en regardant des grandeurs caractéristiques des garnissages comme l'aire interfaciale : l'aire interfaciale regroupe la surface de l'interface liquide/gaz du film ruisselants et la double interface des lentilles de fluide au niveau des trous.

TABLE 5.4 – Taux de mouillage (en %) en fonction du débit et du taux d'arrosage

| | | Taux d'arrosage ($\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$) | | | |
|----------------------|----|--|-----|-----|------|
| | | 7,5 | 9 | 10 | 11,5 |
| Angle de contact (°) | 30 | 77% | 81% | 85% | 89% |
| | 35 | 69% | 72% | 80% | 83% |
| | 40 | 57% | 65% | 73% | 76% |
| | 45 | 47% | 56% | 61% | 67% |

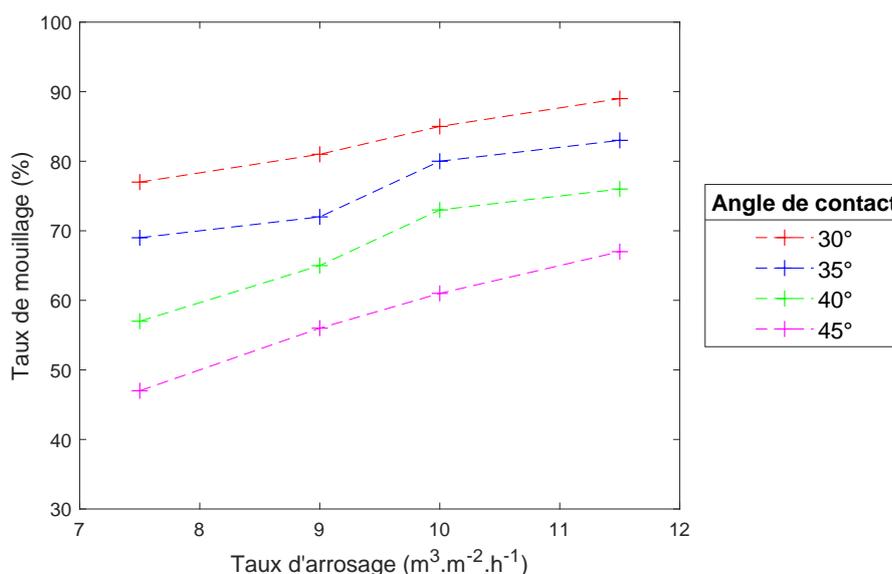


FIGURE 5.11 – Tracé des courbes du mouillage en fonction du taux d'arrosage pour des angles de contact de 30, 35, 40 et 45°

5.3.2 Taux de rétention liquide

Le taux de rétention liquide, abrégé rétention liquide (notée h_L) mesure le volume de liquide par volume de tour aéroréfrigérante en mètre cube de liquide par mètre cube de garnissage (unité simplifiée par la suite en m^3/m^3). La rétention liquide permet aussi de remonter au temps de séjour ; ces deux grandeurs sont primordiales pour considérer les phénomènes volumiques dans les modèles de performance des garnissages. Les valeurs de la rétention liquide dans le garnissage obtenues par simulations de MFN sont présentées dans le Tableau 5.5.

Pour un angle de contact donné, le taux de rétention liquide augmente avec le taux d'arrosage. Cela s'explique par l'augmentation de la quantité de fluide : une partie du fluide est retenue par le garnissage augmentant alors l'épaisseur du film liquide et, par conséquent, le volume de fluide présent. Un débit plus important aura donc tendance à favoriser les réactions volumiques si tous les autres paramètres restent constants. Pour un taux d'arrosage fixé, la rétention liquide diminue avec l'augmentation de

TABLE 5.5 – Rétention liquide (en m^3/m^3) en fonction du taux d'arrosage et de l'angle de contact

| | | Angle de contact ($^\circ$) | | | | |
|---|------|-------------------------------|--------|--------|--------|--------|
| | | 15 | 30 | 35 | 40 | 45 |
| Taux d'arrosage ($\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$) | 7,5 | 0,0497 | 0,0429 | 0,0357 | 0,0331 | 0,0284 |
| | 9 | 0,0547 | 0,0479 | 0,0390 | 0,0360 | 0,0331 |
| | 10 | 0,0594 | 0,0551 | 0,0493 | 0,0461 | 0,0359 |
| | 11,5 | 0,0664 | 0,0612 | 0,0606 | 0,0593 | 0,0458 |

l'angle de contact ce qui est dû à la diminution du taux de mouillage qui n'est pas assez compensée par l'augmentation de l'épaisseur du film pour maintenir la valeur du taux de rétention.

5.3.3 Aire interfaciale

Une autre grandeur très utilisée en Génie Chimique est l'aire interfaciale gaz/liquide notée a . L'aire interfaciale correspond à la surface totale d'échange à l'interface air/eau sur l'ensemble de la géométrie simulée par MFN. Afin de la rendre transposable, l'aire interfaciale est généralement exprimée par rapport à la surface géométrique de garnissage (a_0) en mètre carré d'interface liquide/gaz par mètre carré de garnissage (unité simplifiée par la suite en m^2/m^2); elle est notée a/a_0 . Cette grandeur est très utile pour quantifier les phénomènes de transfert entre les phases. De nombreuses corrélations ont été développées dans la littérature afin de prédire l'aire interfaciale en fonction des nombres adimensionnels hydrodynamiques (Billet et Schultes, 1999; Tsai *et al.*, 2011). Grâce aux simulations de MFN, les valeurs du rapport a/a_0 en fonction des angles de contact et du taux d'arrosage ont été obtenues et sont présentées dans le Tableau 5.6. La surface de garnissage disponible par face est de $2,01 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$.

TABLE 5.6 – a/a_0 (en m^2/m^2) en fonction du taux d'arrosage et de l'angle de contact

| | | Angle de contact ($^\circ$) | | | | |
|---|------|-------------------------------|------|------|------|------|
| | | 15 | 30 | 35 | 40 | 45 |
| Taux d'arrosage ($\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$) | 7,5 | 0,95 | 0,83 | 0,64 | 0,61 | 0,45 |
| | 9 | 0,98 | 0,86 | 0,69 | 0,59 | 0,49 |
| | 10 | 1,00 | 0,89 | 0,81 | 0,73 | 0,56 |
| | 11,5 | 1,03 | 0,90 | 0,82 | 0,79 | 0,64 |

On observe donc par exemple une aire interfaciale supérieure à la surface disponible de garnissage dans le cas d'un angle de 15° et un taux d'arrosage de $11,5 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ puisque la totalité de la surface est mouillée et qu'en plus des lentilles d'eau sont formées dans certaines perforations. Dans les cas où

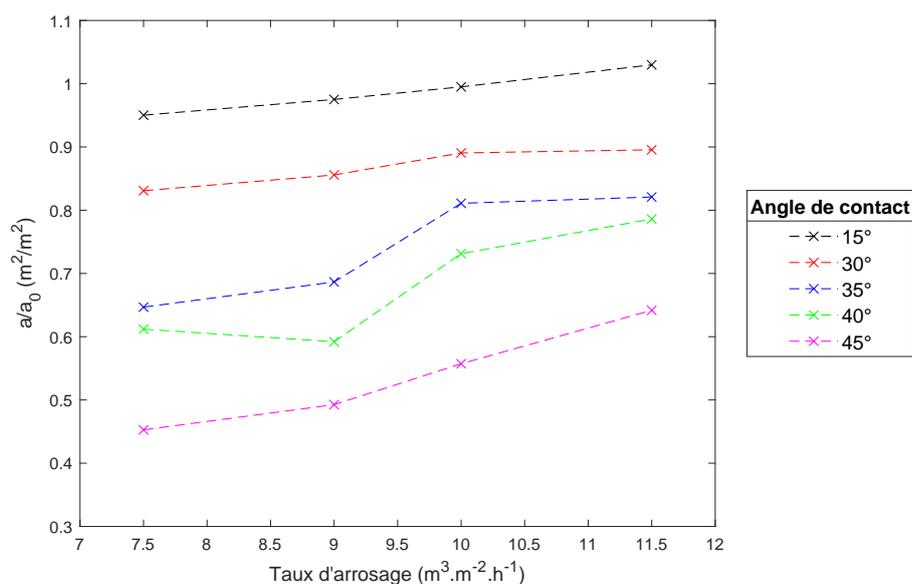


FIGURE 5.12 – Rapport de l'aire interfaciale a/a_0 en fonction du taux d'arrosage et des valeurs de l'angle de contact

il n'y a pas de lentille d'eau, le rapport entre la surface mesurée et la surface totale du garnissage nous permet de retrouver le taux de mouillage : par exemple, dans le cas du taux de $7,5 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ et de l'angle de contact de 30° , on retrouve bien un rapport a/a_0 de 0,83 soit le mouillage de 83% mesuré à la surface du solide. Globalement, pour un angle de contact donné, on observe une légère augmentation de l'aire interfaciale.

5.4 Résultats des simulations locales des écoulements par méthode VOF

Une fois les grandeurs telles que le taux de mouillage, le taux de rétention liquide ou l'aire interfaciale obtenues à l'échelle du système, les simulations de MFN permettent aussi de caractériser localement les écoulements sur les garnissages. Comme évoqué précédemment, si les grandeurs à l'échelle du système dans les garnissages sont bien documentées dans la littérature, l'étude des paramètres locaux des écoulements tels que l'épaisseur des films ruisselants, la vitesse du fluide ou la contrainte de cisaillement restent à étudier.

5.4.1 Simulation de la vitesse du liquide

La vitesse du liquide suit un profil particulier dans la couche de liquide imposée par la condition limite à la paroi et par la vitesse du fluide à l'interface gaz/liquide. C'est cette vitesse caractéristique du film

ruisselant qui est appelée vitesse superficielle du liquide. Grâce aux simulations de MFN, il est possible d'obtenir la valeur de la vitesse dans chaque maille du fluide. Après post-traitement, il est possible de remonter à l'ensemble des vitesses superficielles après identification de la maille abritant l'interface. Les distributions statistiques pour les quatre taux d'arrosages sont présentées pour les angles de contact statiques de 15, 30, 35, 40 et 45° respectivement aux Figures 5.13, 5.14, 5.15, 5.16 et 5.17.

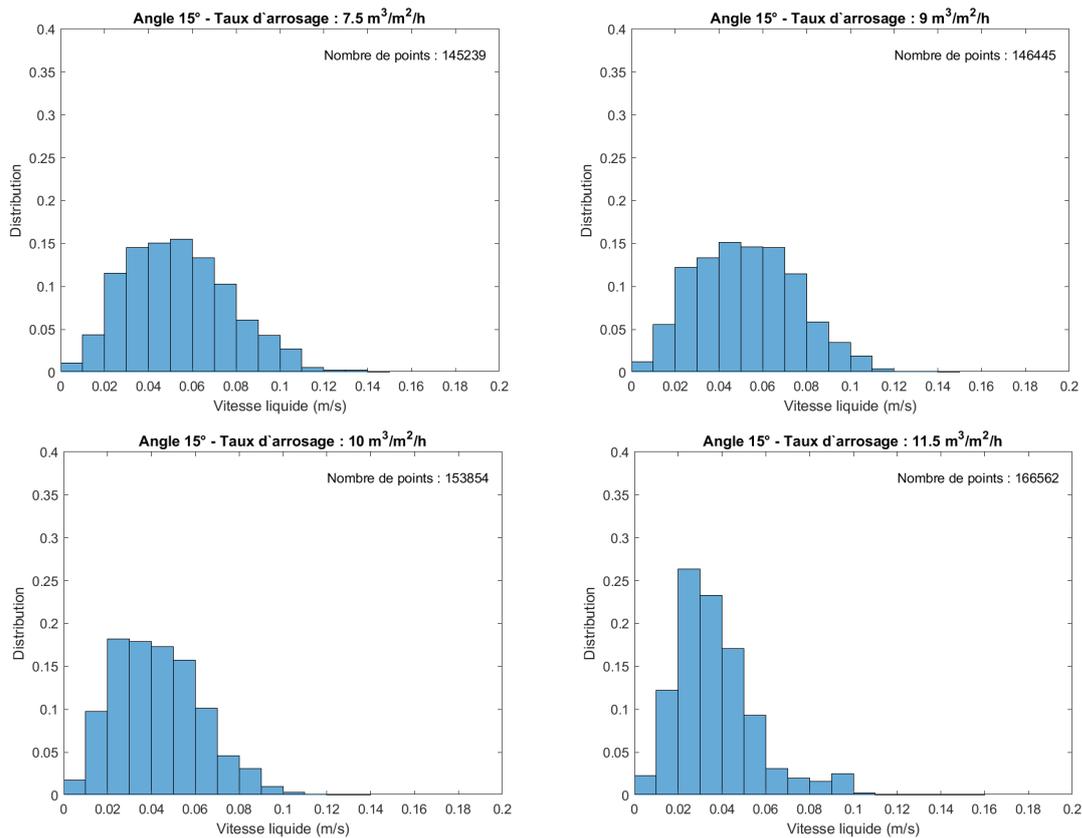


FIGURE 5.13 – Distribution des vitesses superficielles du liquide en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 15°

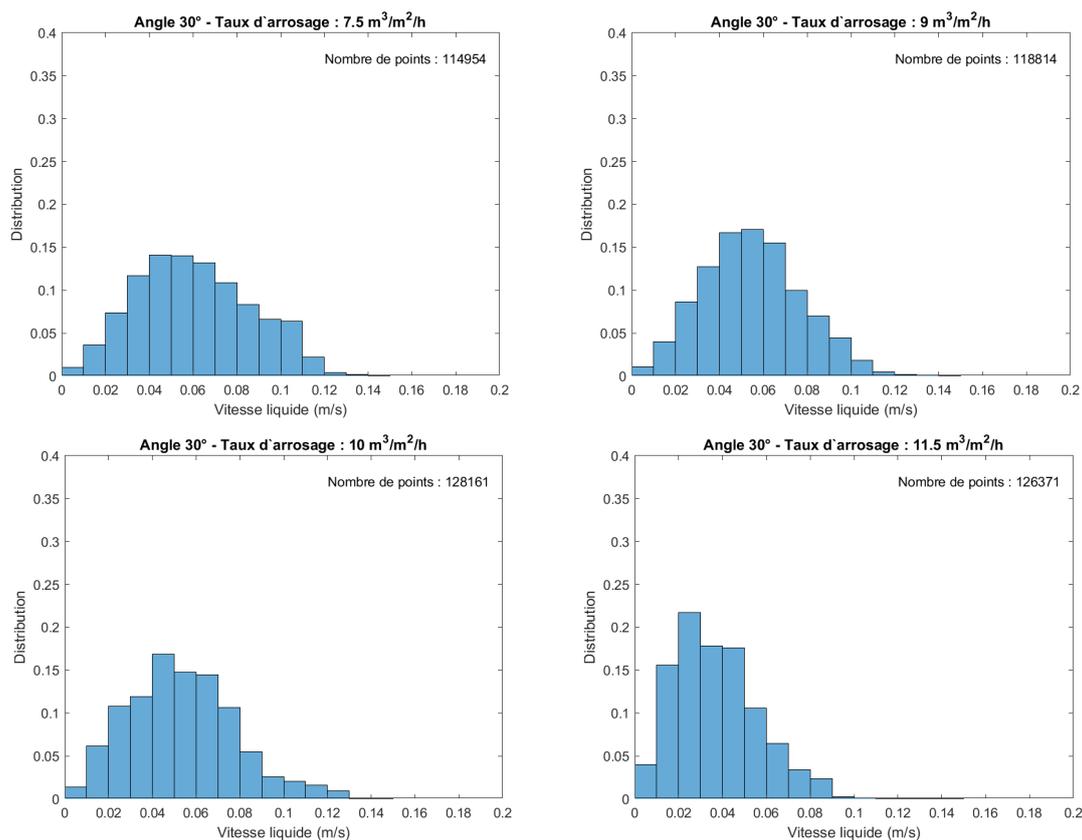


FIGURE 5.14 – Distribution des vitesses superficielles du liquide en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 30°

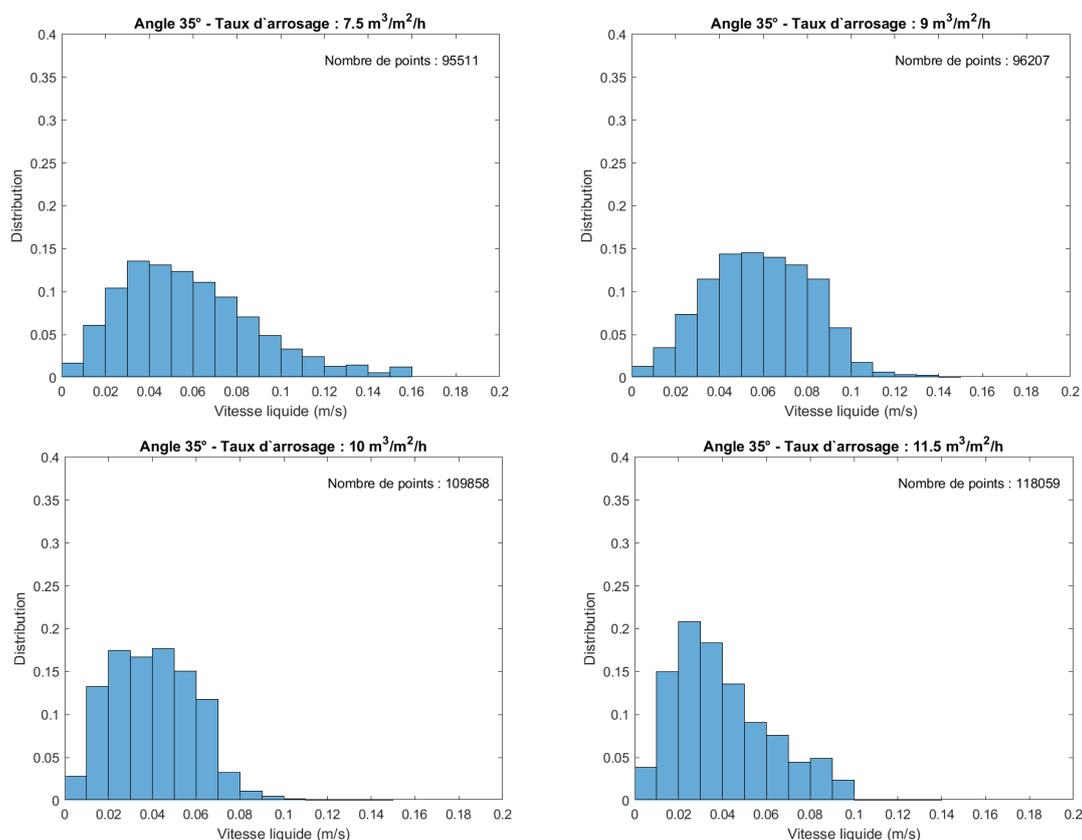


FIGURE 5.15 – Distribution des vitesses superficielles du liquide en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 35°

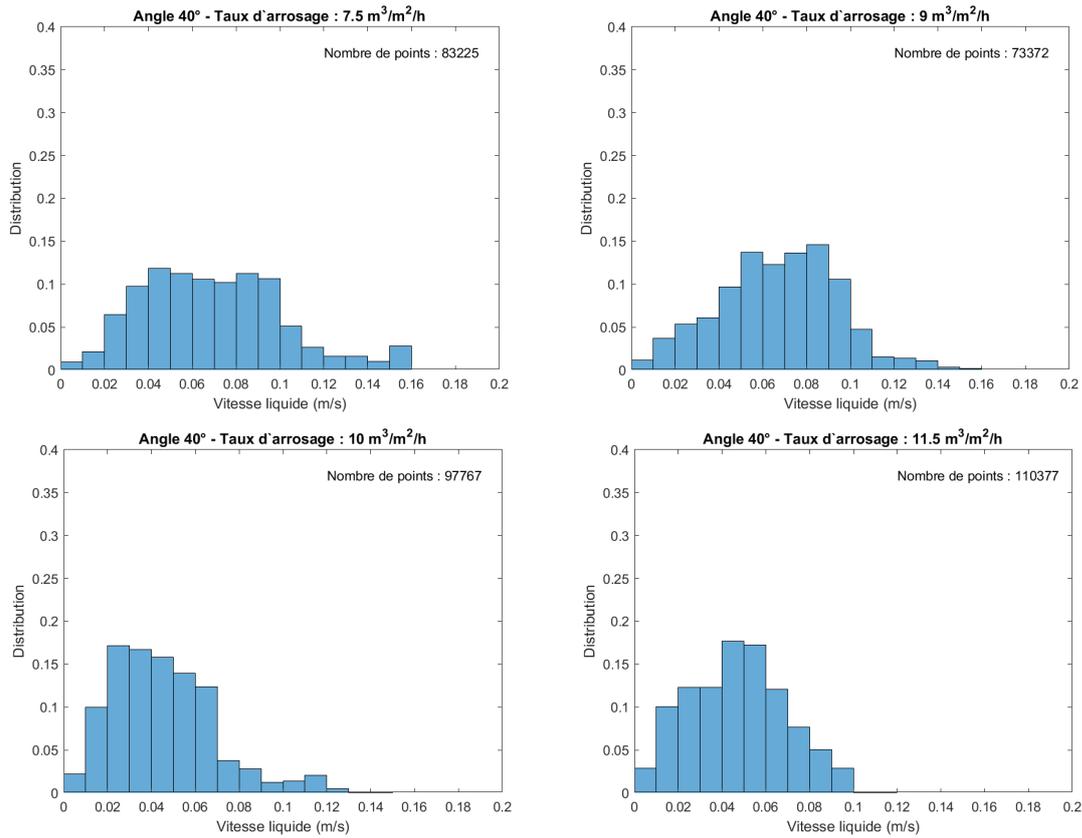


FIGURE 5.16 – Distribution des vitesses superficielles du liquide en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 40°

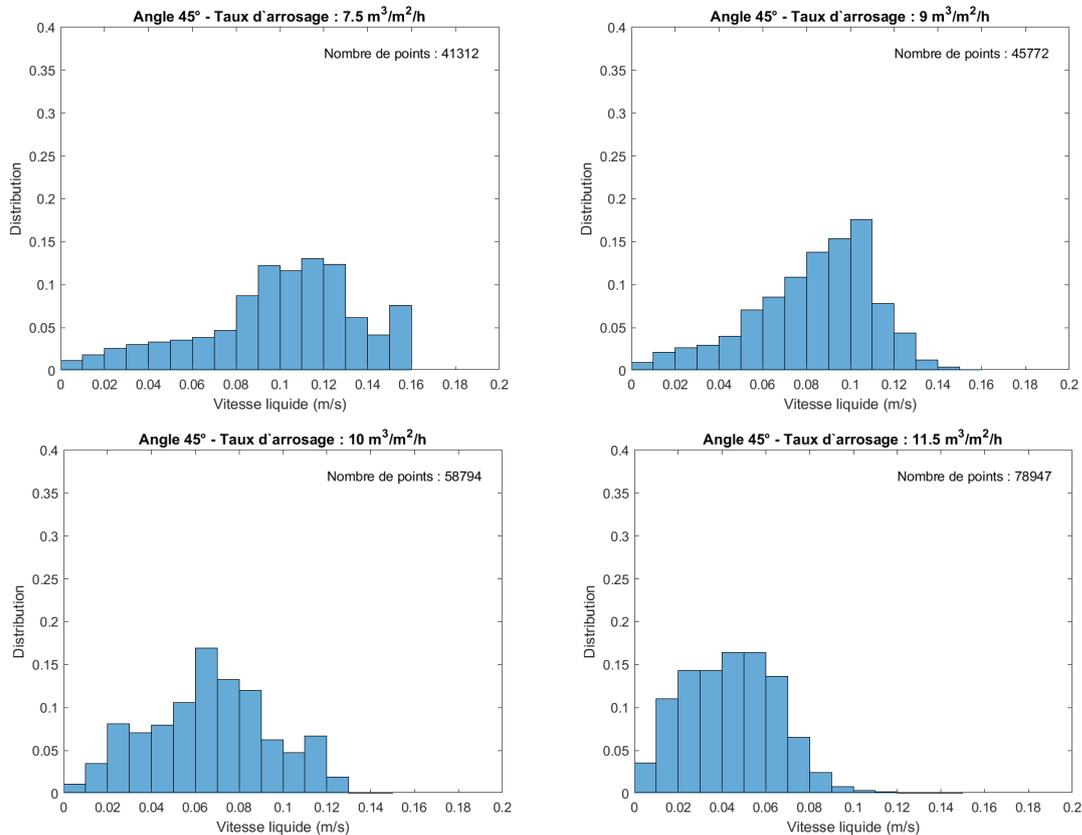


FIGURE 5.17 – Distribution des vitesses superficielles du liquide en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 45°

Quel que soit l'angle de contact, on observe une tendance à la diminution de la moyenne de la distribution des vitesses avec l'augmentation du taux d'arrosage ainsi qu'une diminution de l'écart type (la distribution se resserre). De même, l'augmentation de l'angle de contact (donc la diminution du taux de mouillage) pour un même taux d'arrosage implique une augmentation de la vitesse du liquide à l'interface : en moyenne +0,007 m/s entre 15 et 30° et + 0,038m/s entre 30 et 45° pour taux d'arrosage de 7,5 m³.m⁻².h⁻¹. Cela signifie que l'augmentation de la surface mouillée a tendance à diminuer la vitesse superficielle du liquide ruisselant sur le garnissage. Avec l'augmentation du mouillage pour un taux d'arrosage donné, avec une épaisseur qui évolue peu, la tension de surface va avoir tendance à étaler le fluide et donc, pour un débit d'eau constant, à le ralentir.

Concernant les profils de vitesse dans le film, on distingue trois cas : le cas d'un paquet de fluide juste avant une perforation, le cas d'une lentille d'eau formée et le cas du film ruisselant continu sur la paroi loin d'un obstacle (Figure 5.18).

Pour le haut de la perforation, on observe une chute de vitesse proche de la paroi correspondant à la boucle de recirculation qui se forme lorsque le paquet de fluide occupe toute la partie inférieure de la paroi et communique avec l'autre côté du garnissage par la partie supérieure de la perforation sans créer de lentille d'eau (effet Coanda). Pour la lentille d'eau, le profil est constant d'un côté à l'autre avec les deux vitesses aux extrémités fixées par la vitesse de l'interface. Enfin, pour le film ruisselant le long de la paroi, le profil de vitesse est linéaire dans la première maille du fait de la condition de vitesse nulle en paroi et de la loi imposée en proche paroi, puis le profil devient logarithmique dans la couche limite avant d'atteindre un profil parabolique dans toute l'épaisseur du film jusqu'à la valeur de vitesse imposée à l'interface. Un exemple dans le cas d'un film ruisselant établi est détaillé à la Figure 5.19. Les paramètres des différents profils de vitesse sont disponibles dans le Tableau 5.7. L'épaisseur de la couche limite peut être obtenue en considérant la limite de 99% de la vitesse maximale atteinte soit la limite de la zone logarithmique.

TABLE 5.7 – Paramètres de la décomposition du profil de vitesse du film ruisselant

| Profil | Paramètre | Valeur | Coefficient de détermination |
|----------------------|------------------|---------------|-------------------------------------|
| Linéaire | a ₁ | 2458 | R ² =0,97 |
| | b ₁ | 0,003 | |
| Logarithmique | a ₂ | 0,0092 | R ² =0,98 |
| | b ₂ | 0,1924 | |
| Parabolique | a ₃ | -20429 | R ² =0,99 |
| | b ₃ | 27,135 | |
| | c ₃ | 0,1121 | |

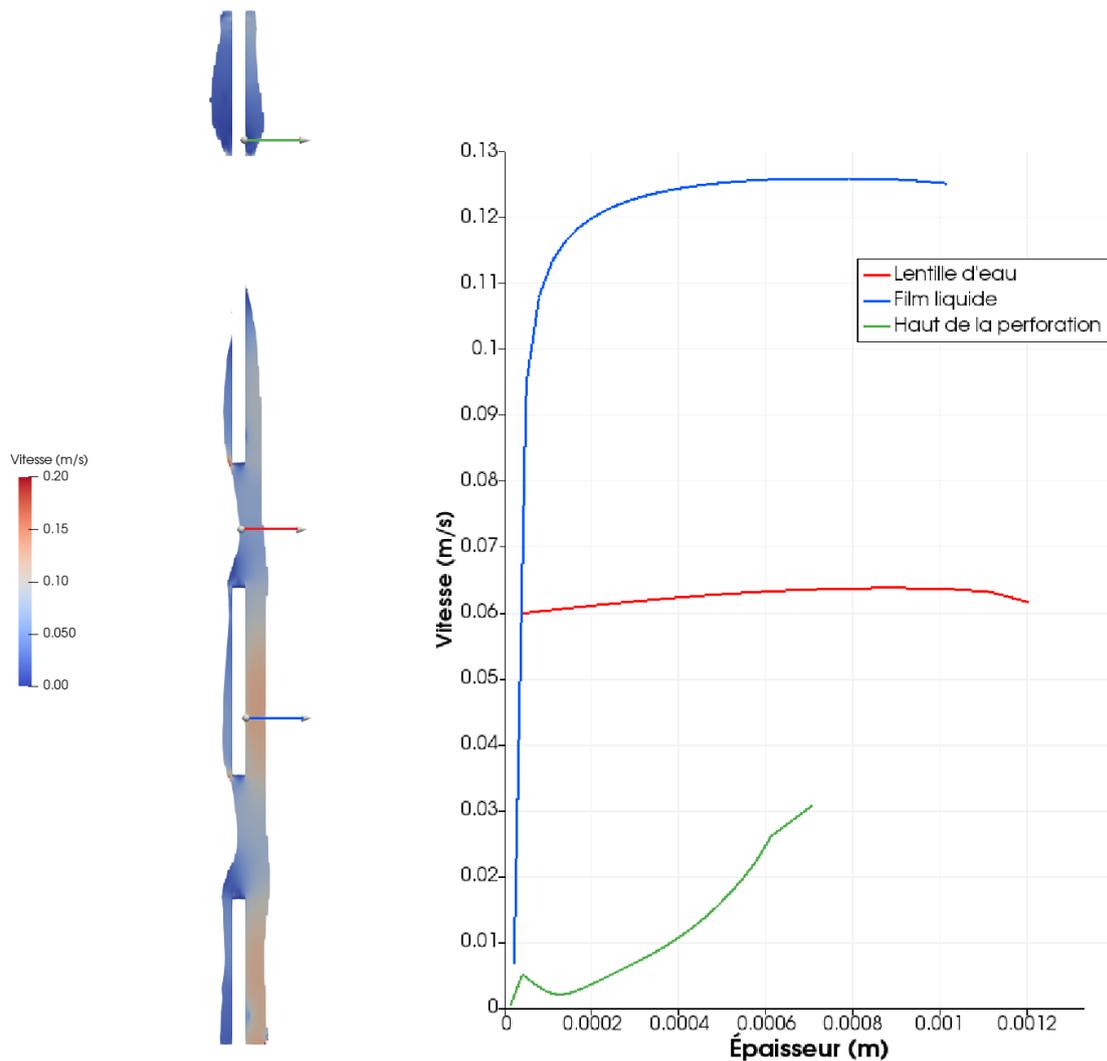


FIGURE 5.18 – Profils de vitesse en fonction de la nature de l'écoulement le long de la paroi : lentille d'eau, film liquide et recirculation en haut d'une perforation

5.4.2 Simulation de la contrainte de cisaillement

Grâce au profil de vitesse dans le film liquide, il est possible de calculer la contrainte de cisaillement en paroi t_w . La contrainte de cisaillement est l'un des paramètres principaux d'intérêt pour les modèles d'encrassement à la paroi du garnissage, puisqu'il exprime la force exercée par le fluide à la paroi et donc sur les possibles dépôts dus à l'encrassement. L'expression de la contrainte de cisaillement fait intervenir le gradient de vitesse en proche paroi ainsi que la viscosité du fluide (équation 5.8).

$$\tau_w = \mu \frac{\partial u}{\partial y} \quad \text{en } y = 0 \quad (5.8)$$

avec μ la viscosité dynamique du fluide (Pa.s), u la composante de la vitesse du fluide tangentielle à la

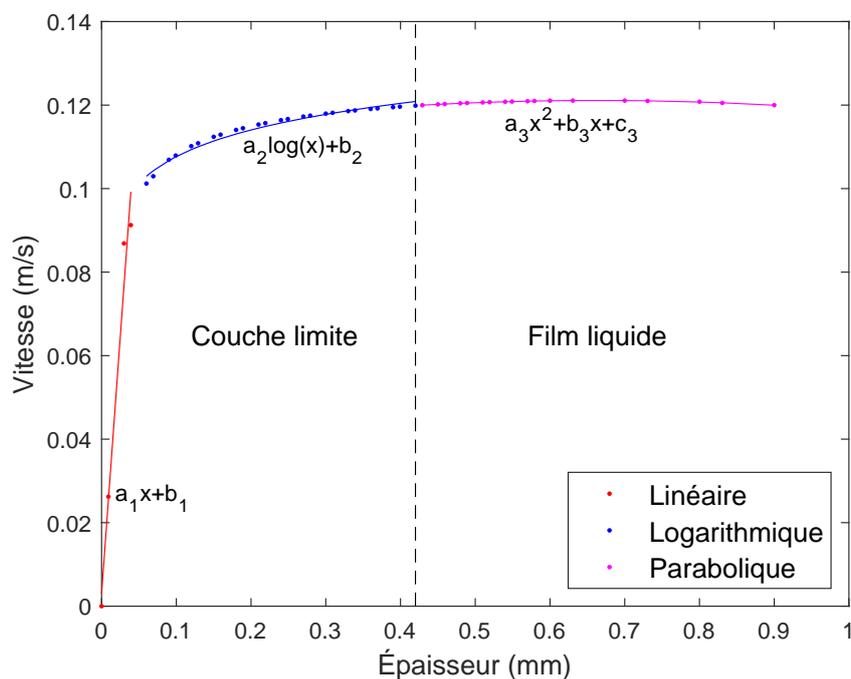


FIGURE 5.19 – Décomposition du profil de vitesse en fonction de l'épaisseur du film dans le cas d'un film ruisselant établi

paroi (m/s) et y la distance normale à la paroi (m).

Grâce aux simulations de MFN et aux profils de vitesse dans le film ruisselant, il est possible d'obtenir les distributions des contraintes de cisaillement en fonction des taux d'arrosage et des angles de contact. Les distributions statistiques des contraintes de cisaillement pour les quatre taux d'arrosages sont présentées pour les angles de contact statiques de 15, 30, 35, 40 et 45° respectivement aux Figures 5.20, 5.21, 5.22, 5.23 et 5.24.

Les résultats montrent que les deux paramètres n'ont que très peu d'influence sur la valeur de la contrainte de cisaillement : quel que soit l'angle de contact ou le taux d'arrosage, les ordres de grandeur des contraintes de cisaillement sont compris entre 1 et 10 Pa. La moyenne de chaque distribution est explicitée dans le Tableau 5.8.

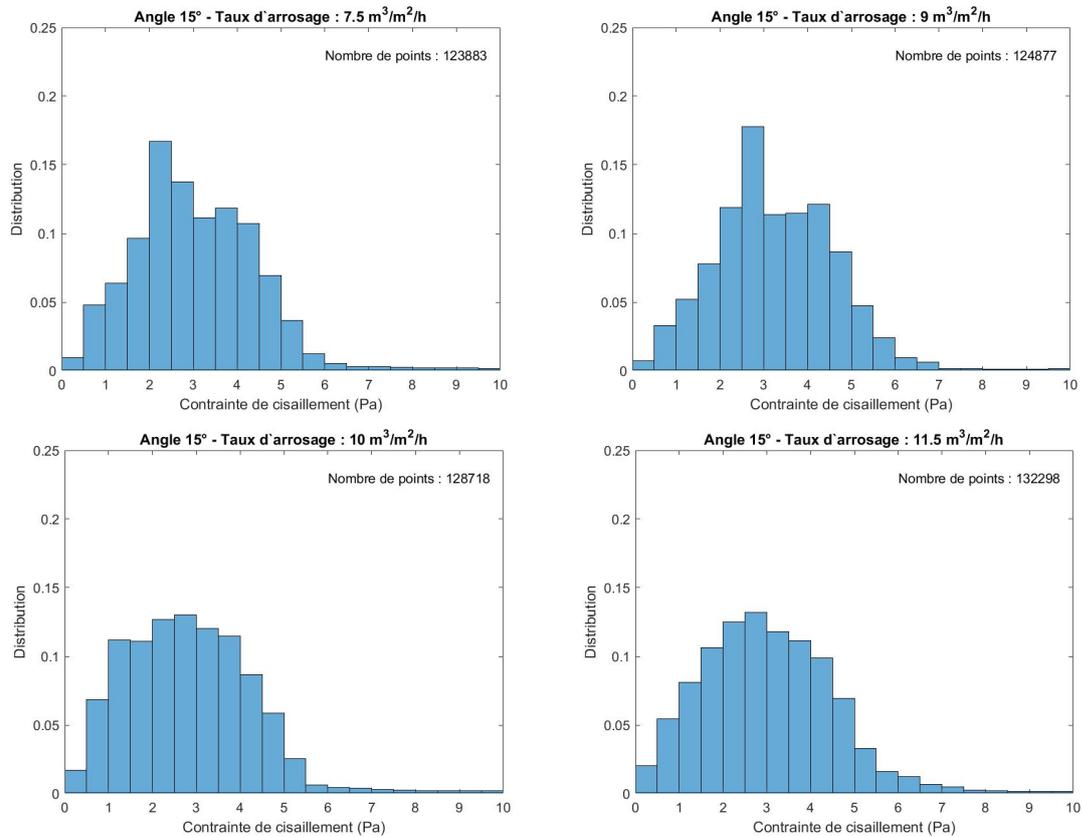


FIGURE 5.20 – Distribution des contraintes de cisaillement en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 15°

TABLE 5.8 – Moyenne des contraintes de cisaillement en paroi (en Pa) pour différents taux d'arrosages et différents angles de contact

| | Angles de contact (°) | | | | | |
|---|-----------------------|-----|-----|-----|-----|-----|
| | 15 | 30 | 35 | 40 | 45 | |
| Taux d'arrosage ($\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$) | 7,5 | 3,1 | 3,2 | 3,0 | 3,2 | 3,2 |
| | 9 | 3,3 | 3,4 | 3,3 | 3,4 | 3,5 |
| | 10 | 2,8 | 3,5 | 2,9 | 3,1 | 3,4 |
| | 11,5 | 3,0 | 3,1 | 3,1 | 3,3 | 3,2 |

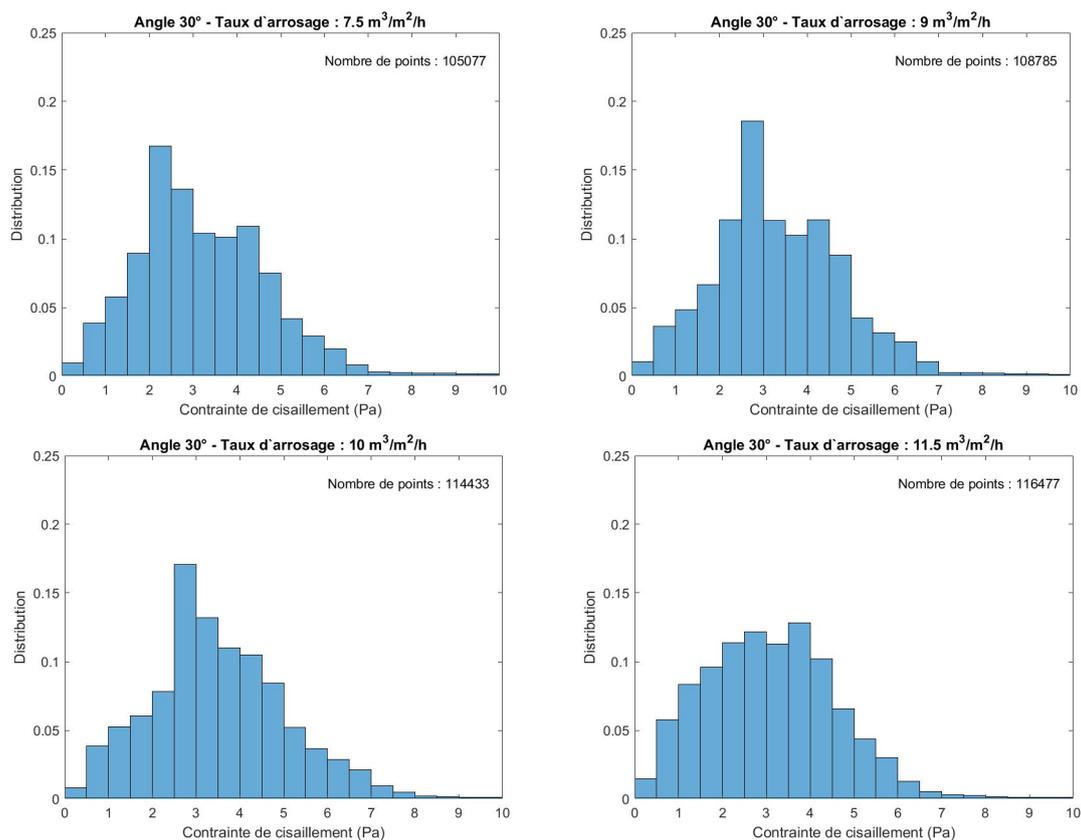


FIGURE 5.21 – Distribution des contraintes de cisaillement en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 30°

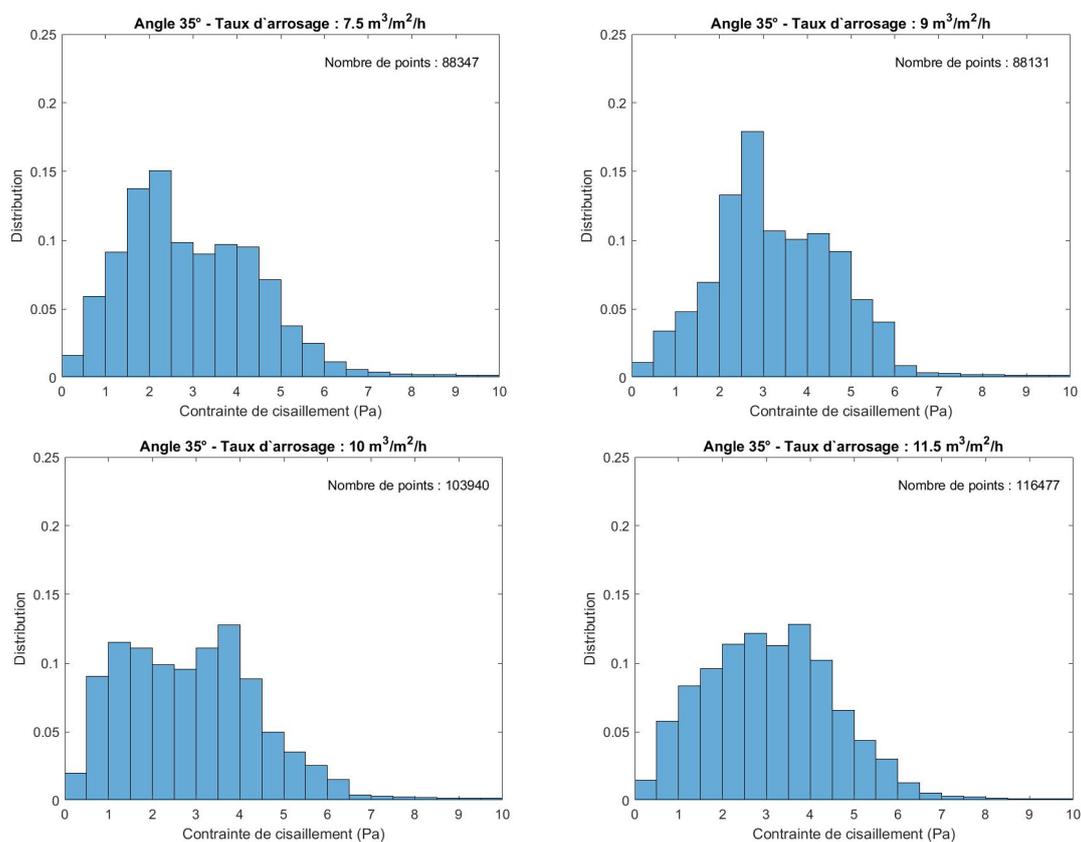


FIGURE 5.22 – Distribution des contraintes de cisaillement en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 35°

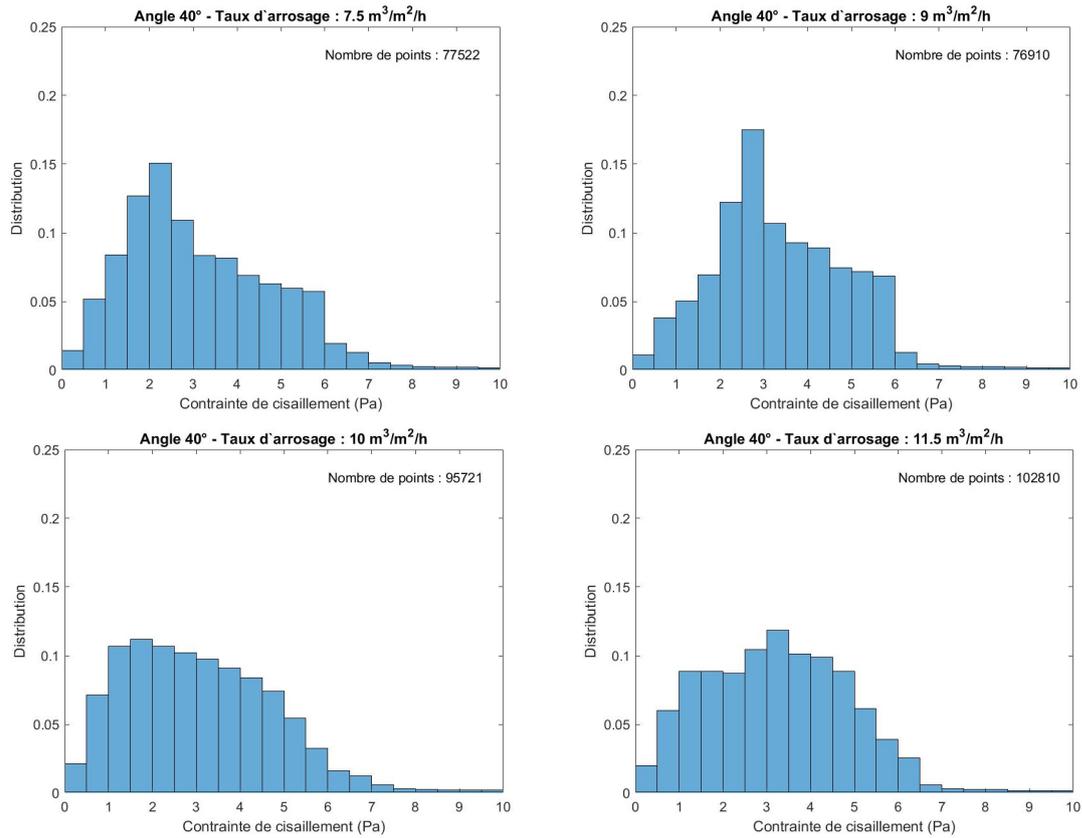


FIGURE 5.23 – Distribution des contraintes de cisaillement en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 40°

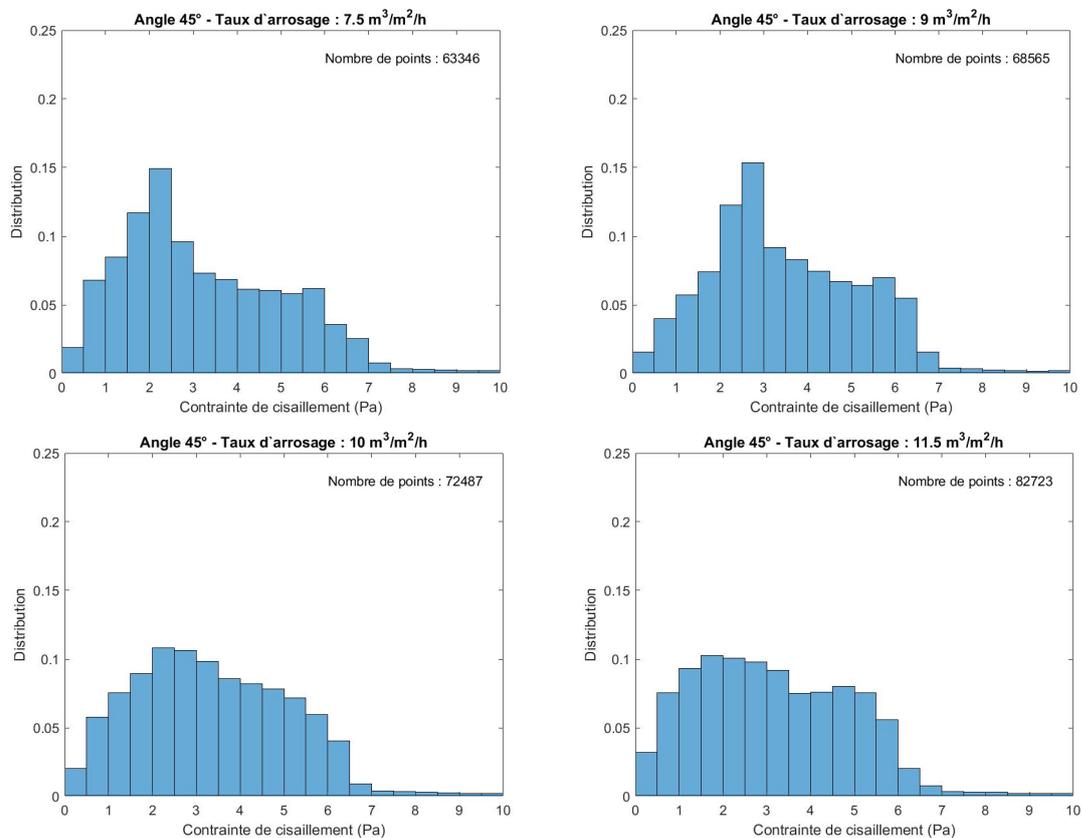


FIGURE 5.24 – Distribution des contraintes de cisaillement en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 45°

5.4.3 Simulation des épaisseurs de film

Il est ressorti de l'étude du taux de mouillage dans la partie précédente que deux cas pouvaient être identifiés : le cas d'un mouillage total et le cas d'un mouillage partiel. Il a été observé que le mouillage total correspond à un angle de contact statique liquide/solide de 1 ou 15°. Le mouillage partiel correspond aux angles de contact supérieurs à 30°.

Cas du mouillage total L'objectif est d'étudier le cas d'une partie du garnissage totalement mouillée. Le mouillage total signifie que la totalité de la paroi solide est mouillée, cependant il ne tient pas compte du fait que les perforations peuvent être ou non recouvertes de liquide. Différents taux d'arrosages correspondant aux valeurs du plan d'expérience expérimental ont été simulés : 7,5 ; 10 et 11,5 m³.m⁻².h⁻¹. Pour chaque débit, les épaisseurs de film et les vitesses d'eau ont été étudiées à l'intérieur du garnissage (côté concave) et à l'extérieur (côté convexe).

La première observation est que l'augmentation du débit liquide en cas de mouillage total va provoquer la création de lentilles d'eau. La Figure 5.25 présente les épaisseurs liquides des films sur l'emplacement de coupe verticale centrale (Figure 5.8 gauche). Pour un taux d'arrosage de 7,5 m³.m⁻².h⁻¹, aucune lentille d'eau n'est formée ; pour 10 m³.m⁻².h⁻¹, une première lentille se forme sur la perforation du bas et pour 11,5 m³.m⁻².h⁻¹, la perforation centrale et celle du bas sont recouvertes. Dans le cas d'une hauteur de garnissage utilisée dans les tours industrielles (1 à 1,5m), de nombreuses perforations sont présentes. L'hypothèse est donc que seules les perforations en haut du garnissage ou les perforations après une discontinuité d'une feuille de garnissage (e.g. jointure entre les blocs, zone de collage entre les feuilles) ne sont pas remplies par une lentille d'eau. Cela revêt une grande importance surtout pour le taux d'arrosage les plus élevés.

Comme le mouillage de la surface est total, l'augmentation du débit conduit donc à la création d'une interface au niveau des perforations du garnissage. L'augmentation de la quantité de matière et la force inertielle du fluide apportent l'énergie nécessaire à la création de la double interface (gaz/liquide/gaz).

Pour les épaisseurs de film, les distributions en fonction des différents débits sont présentées à la Figure 5.26.

Il est possible d'observer une influence du débit liquide sur les paramètres des distributions des épaisseurs de film : augmentation de la moyenne de la distribution des épaisseurs en fonction de l'augmentation du débit liquide. On observe aussi que plus le taux d'arrosage augmente, plus l'écart type de la distribution des résultats des simulations est important.

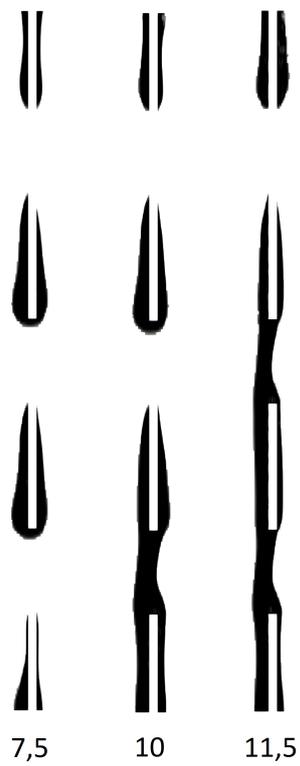


FIGURE 5.25 – Épaisseur de film suivant la coupe centrale : évaluation du mouillage des perforations du garnissage pour différents taux d'arrosage de 7,5; 10 et 11,5 m³.m⁻².h⁻¹ et un angle de contact de 15°

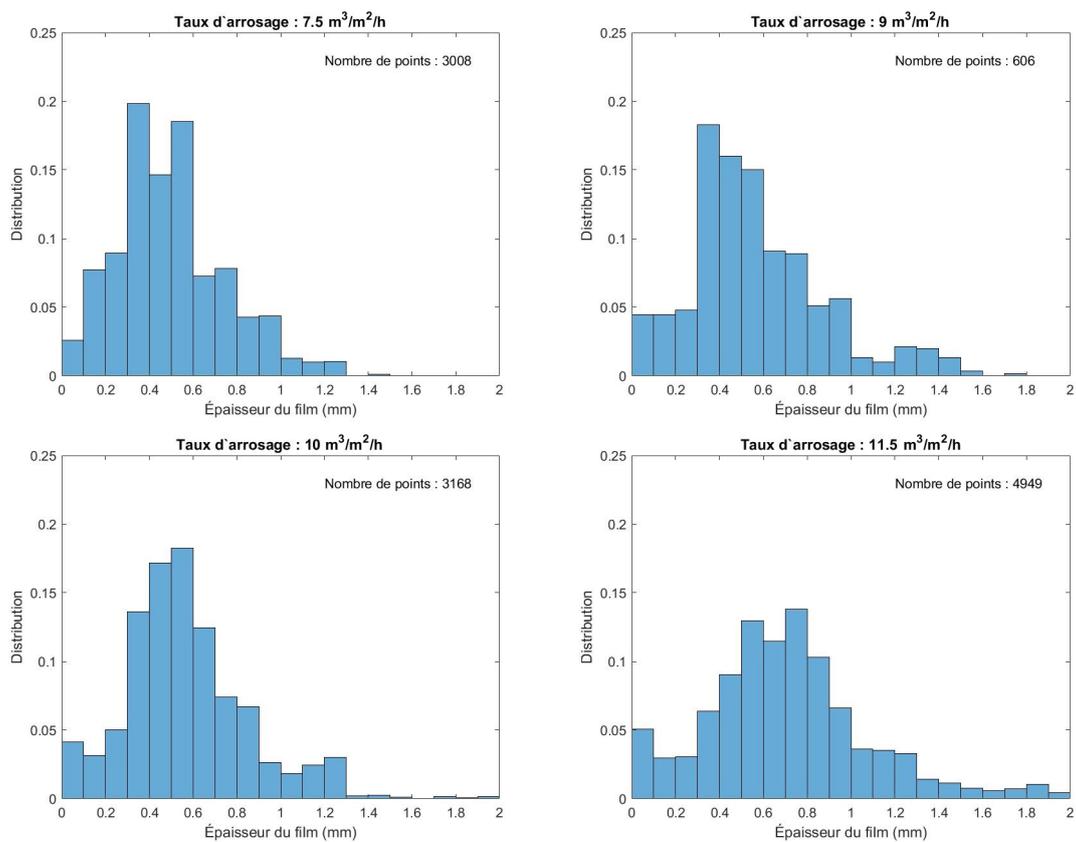


FIGURE 5.26 – Distribution des épaisseurs de films en fonction du taux d’arrosage pour un angle de contact de 15°

Cas du mouillage partiel Dans le Chapitre 6, la caractérisation expérimentale des garnissages a mis en avant un mouillage non total des garnissages ainsi qu'une valeur du taux de mouillage non fixe en fonction de la localisation sur le garnissage. De plus, les mesures des angles de contact par goniométrie (Tableau 5.3) ont montré des angles de contact compris entre 26,9 et 52,6° pour une moyenne de 41,6° et un écart type de 6,5. Pour le mouillage partiel, les simulations ont donc été réalisées avec quatre valeurs d'angle de contact : 30, 35, 40 et 45°. Les distributions des épaisseurs de film liquide pour les différents taux d'arrosages sont présentées respectivement à la Figure 5.27 pour l'angle de contact de 30°, à la Figure 5.15 pour 35°, à la Figure 5.16 pour 40° et à la Figure 5.30 pour l'angle de 45°.

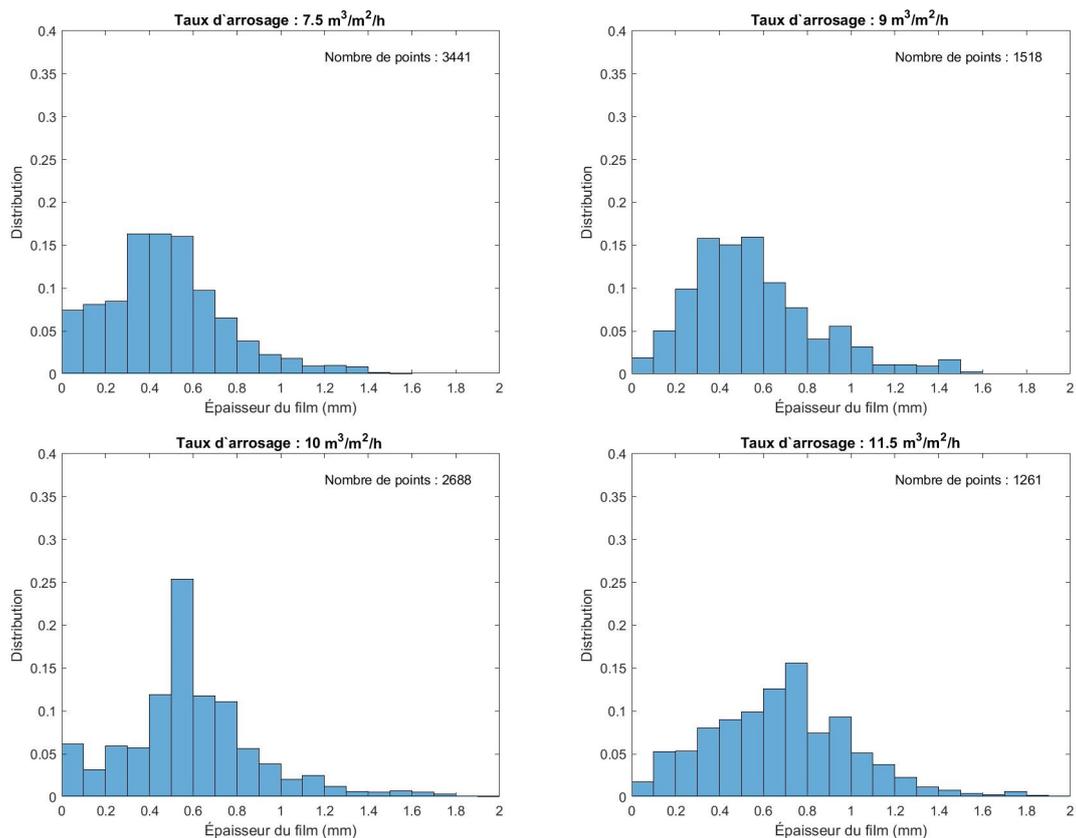


FIGURE 5.27 – Distribution des épaisseurs de films en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 30°

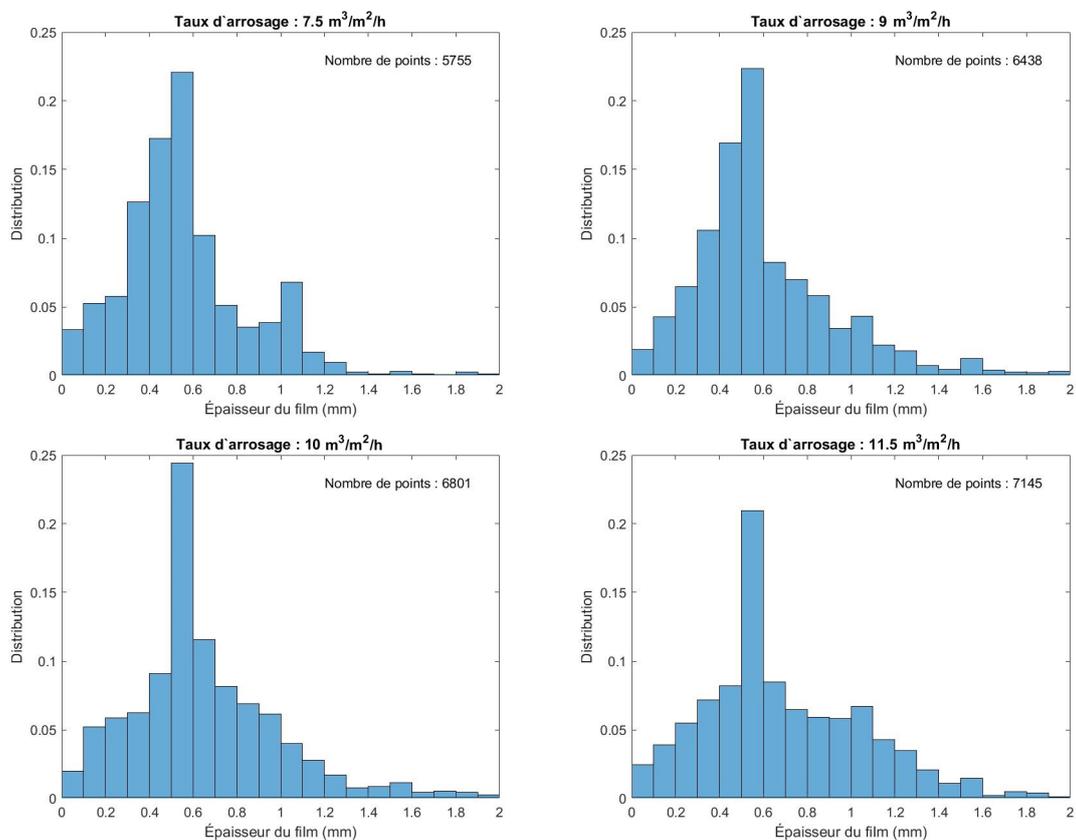


FIGURE 5.28 – Distribution des épaisseurs de films en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 35°

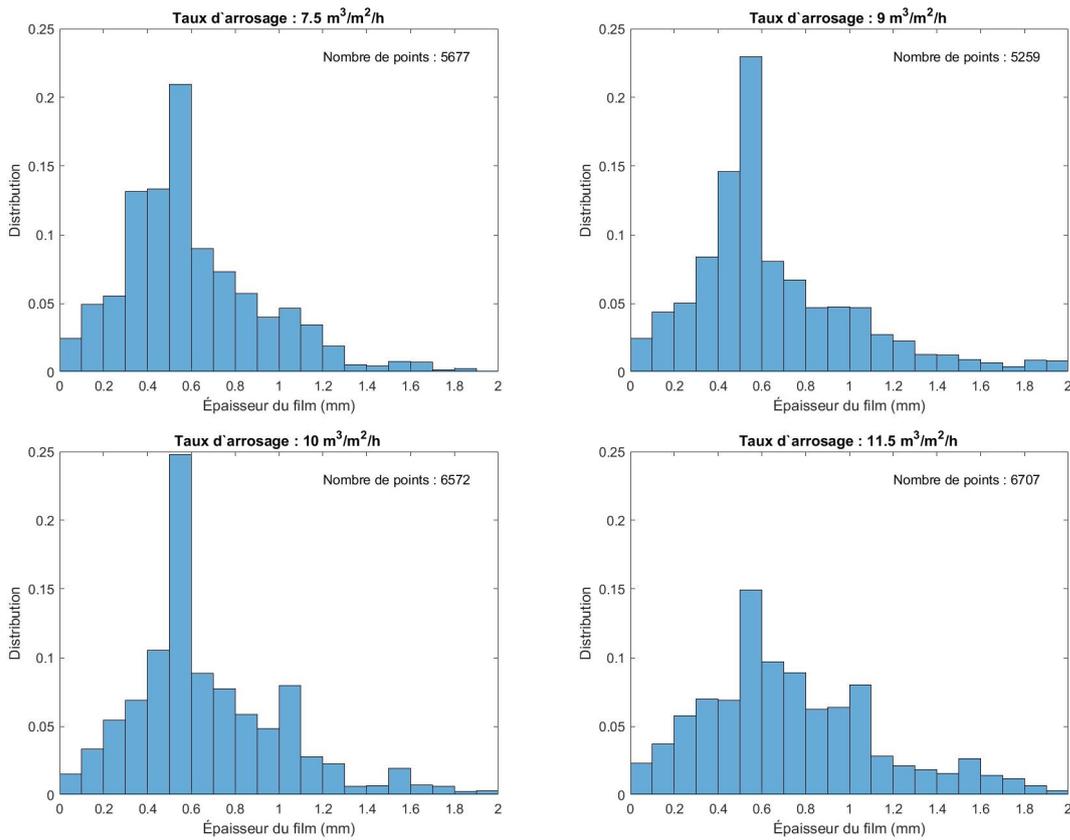


FIGURE 5.29 – Distribution des épaisseurs de films en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 40°

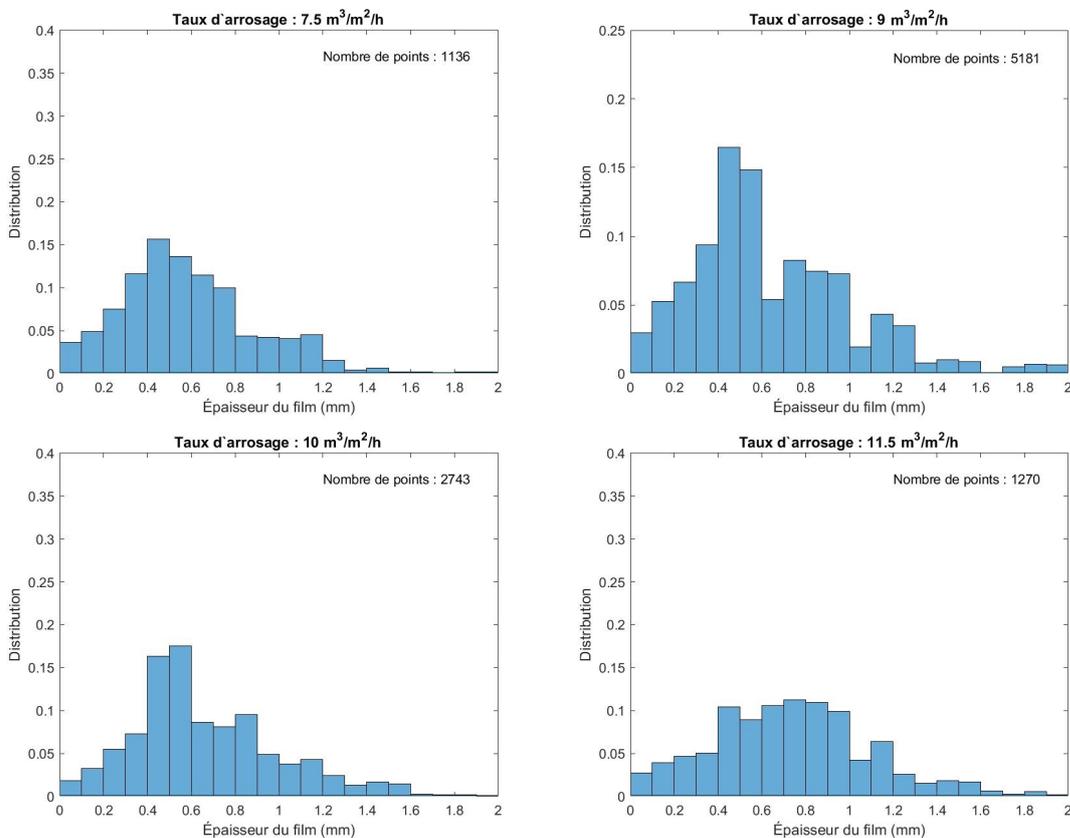


FIGURE 5.30 – Distribution des épaisseurs de films en fonction du taux d'arrosage pour un angle de contact de 45°

L'épaisseur de film étant une grandeur locale, il est possible de tirer des tendances de comportement en fonction du taux d'arrosage et de l'angle de contact en raisonnant, par exemple, sur des grandeurs caractéristiques comme les moyennes ou les médianes. Ainsi, en traçant les moyennes des distributions des épaisseurs de film en fonction du taux d'arrosage pour les valeurs d'angles de contact données (Figure 5.31), on observe une nette tendance à la hausse de l'épaisseur moyenne lorsque le taux d'arrosage augmente quel que soit l'angle de contact. Les résultats des simulations montrent une augmentation 41 % de l'épaisseur pour un angle de 15°, augmentation de 46 % pour 30°, 49 % pour 35°, 36 % pour 40° et 34 % pour 45° pour une augmentation de 53 % du taux d'arrosage (de 7,5 à 11,5 m³.m⁻².h⁻¹).

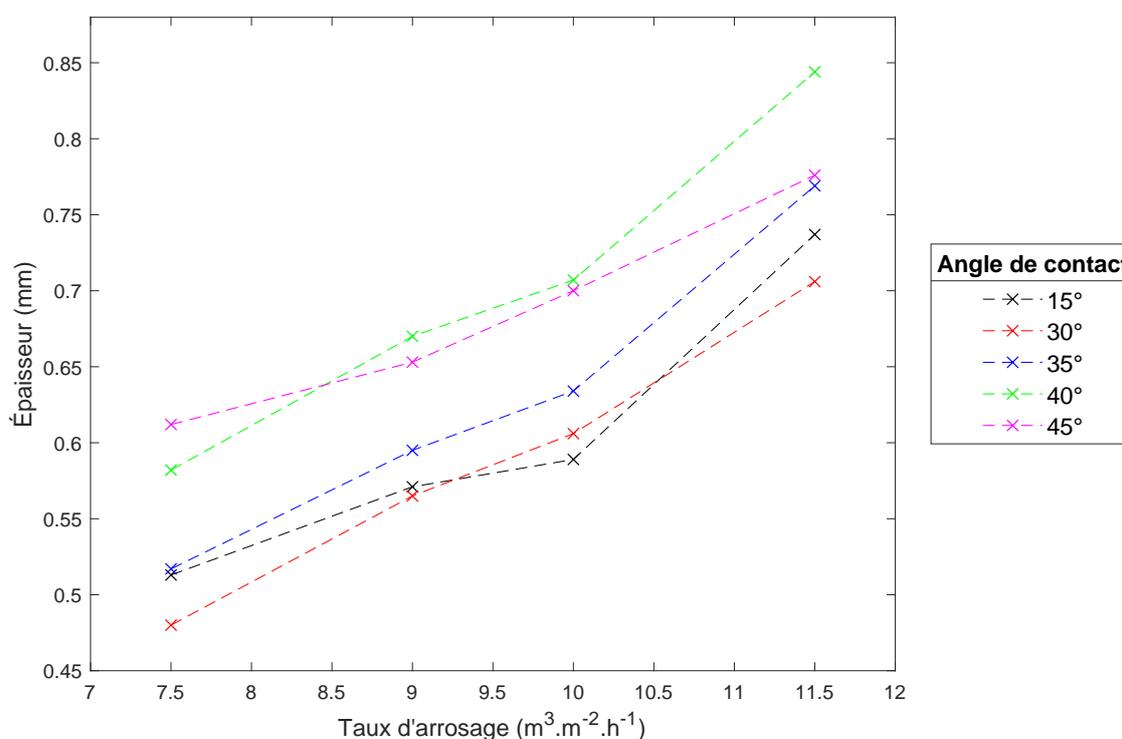


FIGURE 5.31 – Courbes des moyennes des distributions des épaisseurs de film liquide en fonction du taux d'arrosage pour les valeurs d'angles de contact considérées

Même si la moyenne permet l'observation de tendances générales, afin de rester exhaustif dans la description des phénomènes influant sur l'épaisseur des films (tenir compte des instabilités par exemple), l'ensemble de la distribution statistique devra être prise en compte comme donnée d'entrée des différents modèles d'encrassement.

5.5 Conclusion

Ce chapitre a présenté la caractérisation numérique des écoulements dans les garnissages. Un cas test préliminaire tiré de la littérature a permis la comparaison de l'approche VOF et de l'approche Euler-Euler pour les simulations de MFN. La méthode VOF (avec OpenFOAM) a été identifiée comme la plus adaptée pour la simulation des écoulements dans le garnissage feuille car prenant en compte les forces de tension de surface liquide/solide. La géométrie d'un élément représentatif du garnissage feuille a été conçue par ordinateur et maillée afin de pouvoir simuler les écoulements. Ensuite, une campagne de simulations de mécanique des fluides numérique a été menée afin d'obtenir les valeurs des paramètres hydrodynamiques d'intérêt. Différentes conditions aux limites et hypothèses de simulations telles que l'angle de contact liquide/solide (étudié préalablement en laboratoire) et le taux d'arrosage liquide ont été balayées afin d'étudier l'influence de ces conditions sur les écoulements.

Pour chaque grandeur d'intérêt locale comme l'épaisseur, la vitesse du fluide à l'interface gaz/liquide ou la contrainte de cisaillement à la paroi, il a été possible de simuler une distribution statistique des valeurs. Ce sont les valeurs de ces distributions obtenues qui serviront de données d'entrée aux modèles d'encrassement. De même, pour les grandeurs à l'échelle système de la géométrie de garnissage simulée tel que le taux de mouillage, l'aire interfaciale ou le taux de rétention liquide, des courbes de tendances ont été tracées qui pourront servir de calage pour les paramètres du modèle compartimental.

Afin de poursuivre l'étude, il serait possible d'augmenter les gammes des simulations afin d'étendre le cadre de l'étude à des conditions de fonctionnement plus proches d'autres applications industrielles. Dans ce cadre, la prise en compte de l'angle de contact par un modèle d'angle de contact dynamique par rapport au modèle d'angle statique pourrait être étudiée. La réalisation de géométries des autres types de garnissage ainsi que la conduite de simulations pourrait aider à la caractérisation de ces autres garnissages et permettre la comparaison de leurs performances et notamment leur prédisposition à l'encrassement.

Synthèse sur les écoulements dans les circuits de refroidissement

Pour les différentes parties du circuit, les méthodes de caractérisation des écoulements ont été décrites dans le Chapitre 3. Les écoulements dans les garnissages ont été étudiés en détail par l'expérience et la simulation de MFN aux Chapitres 4 et 5. Comme elle n'a pas été étudiée dans les chapitres précédents, les études hydrodynamiques des bassins froids et des conduites en charge sont respectivement présentées dans ce chapitre aux sections 6.1 et 6.2. Ce chapitre présente donc la synthèse des informations hydrodynamiques disponibles pour les types d'écoulements dans les conduites et les tubes de condenseur, le bassin froid et les garnissages. En fin de chapitre, les résultats sont discutés et des perspectives pour des études futures sont données.

6.1 Hydrodynamique dans les bassins froids

L'étude hydrodynamique du bassin froid a été faite par simulations de MFN avec le logiciel CODE_SATURNE.

6.1.1 Géométrie et maillage

Une fois les données géométriques complètes pour le bassin, la géométrie présentée à la Figure 6.1 et le maillage ont été réalisés à l'aide du logiciel SALOME 8.3. Le maillage compte 2,8 millions de mailles de taille caractéristique 0,25 m afin de pouvoir simuler l'influence des plus petits obstacles que sont les piliers.

La difficulté de réalisation du maillage réside dans la grande disparité des tailles des éléments de la géométrie. Le bassin, dont le périmètre est de 330 m, a une taille très grande devant les piliers de soutien du garnissage dont le périmètre est de 1,7 m. Cette différence rend difficile le choix de la taille locale 2D. En effet, une longueur choisie trop grande ne permettrait pas de prendre en compte les obstacles pour le fluide, les effets turbulents de ceux-ci sur l'écoulement et les gradients de vitesse proche des parois

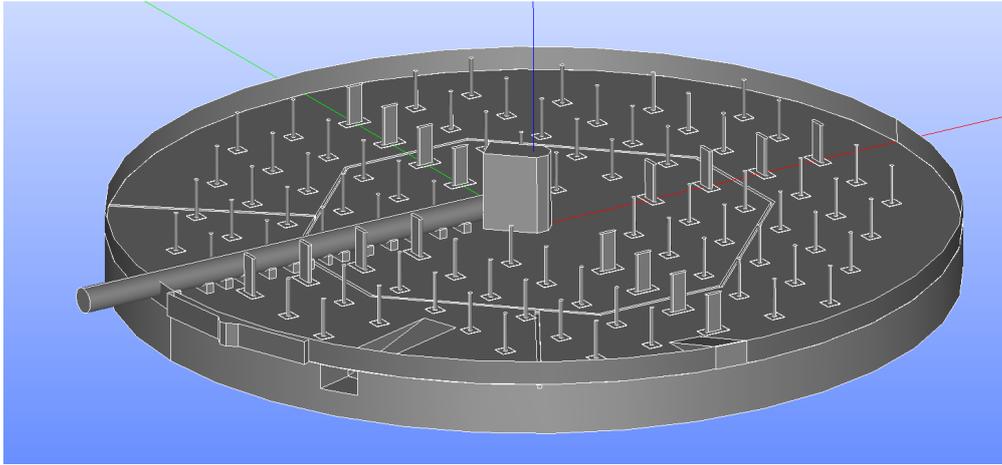


FIGURE 6.1 – Géométrie du bassin froid

qui sont essentiels pour le calcul des contraintes de cisaillement. Au contraire, un raffinement trop fin conduirait à un nombre de mailles très important ainsi qu'un temps de calcul très long. La longueur de taille de maille choisie est de 0,25 m. L'algorithme utilisé avec SALOME 8.3 propose une répartition homogène des mailles loin des parois effectuant le recollement au milieu des surfaces pleines, ce qui assure un maillage régulier dans le corps du fluide mais aussi autour des plus petits obstacles.

6.1.2 Paramètres des simulations

Ces simulations de MFN ne tenant compte que de la phase liquide (simulations monophasiques) ont été réalisées avec le logiciel CODE_SATURNE version 4.2.1. Comme aucune étude du transfert thermique dans le bassin n'est menée, les propriétés du fluide incompressible sont considérées constantes (propriétés de l'eau à 20°C) et les simulations sont réalisées de manière isotherme. Pour la simulation de la turbulence, c'est le modèle k-omega SST qui a été choisi, après comparaison avec le modèle k-epsilon linear production. Le modèle k-omega SST est utilisé avec une loi de paroi logarithmique afin de mieux caractériser les gradients de vitesse proche paroi et ainsi de pouvoir évaluer l'ordre de grandeur des contraintes de cisaillement en paroi.

Du fait de la complexité de la géométrie et notamment de l'entrée du fluide dans le bassin qui se fait sous forme de pluie sur une partie de la surface du bassin, des hypothèses ont du être faites sur les conditions d'entrées de l'eau. Elle se fait à la surface du bassin et est considérée comme uniforme sur 75% de la surface totale, le débit étant fixé comme condition d'entrée. Le reste de la surface est simulée comme un mur avec condition de glissement afin de maintenir le niveau constant. L'ensemble des sorties est effectué sous forme de sorties libres à pression atmosphérique afin de conserver le débit. L'ensemble des conditions limites est résumé dans le Tableau 6.1.

TABLE 6.1 – Résumé des types de conditions limites pour les simulations de MFN

| | Vitesse | Pression |
|---|-------------------------------------|---------------------------|
| Surface du bassin - entrée d'eau | Débit fixé | |
| Surface du bassin non arrosée | Condition de glissement | Zéro gradient |
| Parois du bassin | Vitesse fixée à 0 + loi de paroi | Zéro gradient |
| Sortie d'eau pompage | Sortie libre | Pression atmosphérique |
| Déversoirs | Sortie libre | Pression atmosphérique |

6.1.3 Résultats

La première variable étudiée est la vitesse du fluide au sein du bassin : l'intensité du vecteur vitesse ainsi que ses composantes selon chaque axe. La Figure 6.2 présente le champ de vitesse sur une coupe du bassin dans le plan horizontal à une profondeur de 0.5 m soit la moitié de la profondeur totale du bassin.

Sur cette coupe, il est possible d'observer une forte amplitude de vitesses avec des valeurs comprises entre 0,3 mm/s au niveau des zones dites mortes et 1,3 m/s au niveau de la sortie vers la pompe. Les obstacles principaux à l'écoulement du fluide vers la sortie sont le château d'eau central, le plan incliné d'accès au bassin, le tuyau d'alimentation en eau chaude et les piliers de suspension de ce tuyau. Les piliers de suspension du garnissage sont la source de création de sillages mais impactent peu l'intensité et la direction du fluide à l'échelle du bassin. Il est possible d'identifier trois zones de faible vitesse et de recirculation du fluide. La plus importante des zones de très faibles vitesses est située à l'opposé de la sortie. À l'aide du champ des vecteurs vitesse dans le plan horizontal présenté à la Figure 6.3 (haut), il est possible de distinguer une boucle de recirculation entre le minimum de vitesse et la paroi du bassin. La présence de cette boucle est confirmée par la coupe verticale présentée à la Figure 6.3 (bas).

En plus des champs de vitesse, un traceur passif a été ajouté aux simulations afin de réaliser une expérience de traçage numérique. Dans CODE_SATURNE, le traceur permet de suivre le mouvement des paquets de fluide par résolution des équations de transport avec pris en compte de la diffusion moléculaire (auto-diffusion pour le suivi de l'eau) et de la diffusion turbulente. Le modèle choisi est le modèle de transport SGDH (*Simple Gradient Diffusion Hypothesis*) par lequel la direction principale de la turbulence est supposée identique au gradient principal de la diffusion (CODE_SATURNE, 2019). Pour

les simulations, valeur du nombre de Schmidt turbulent est supposée égale à 1 ; cette valeur peut être discutée en fonction de la géométrie réelle du système. Par exemple, dans la littérature, Gualtieri *et al.* (2017) et Hreiz *et al.* (2019) présentent différents cas pour des systèmes similaires. Des mesures dans les bassins des circuits de refroidissement industriels pourront être réalisées afin de corriger éventuellement cette valeur dans le modèle de MFN.

Le traceur permet d'obtenir la distribution des temps de séjour pour les écoulements dans le bassin afin de caractériser l'hydrodynamique globale : une DTS unique est donc réalisée. Ce traceur passif est injecté à travers l'entrée du fluide dans le bassin c'est à dire simultanément sur la surface arrosée du bassin (75 % de la surface totale). La Figure 6.4 montre la courbe de la DTS numérique (fonction $E(t)$) en fonction du temps écoulé depuis l'injection du traceur.

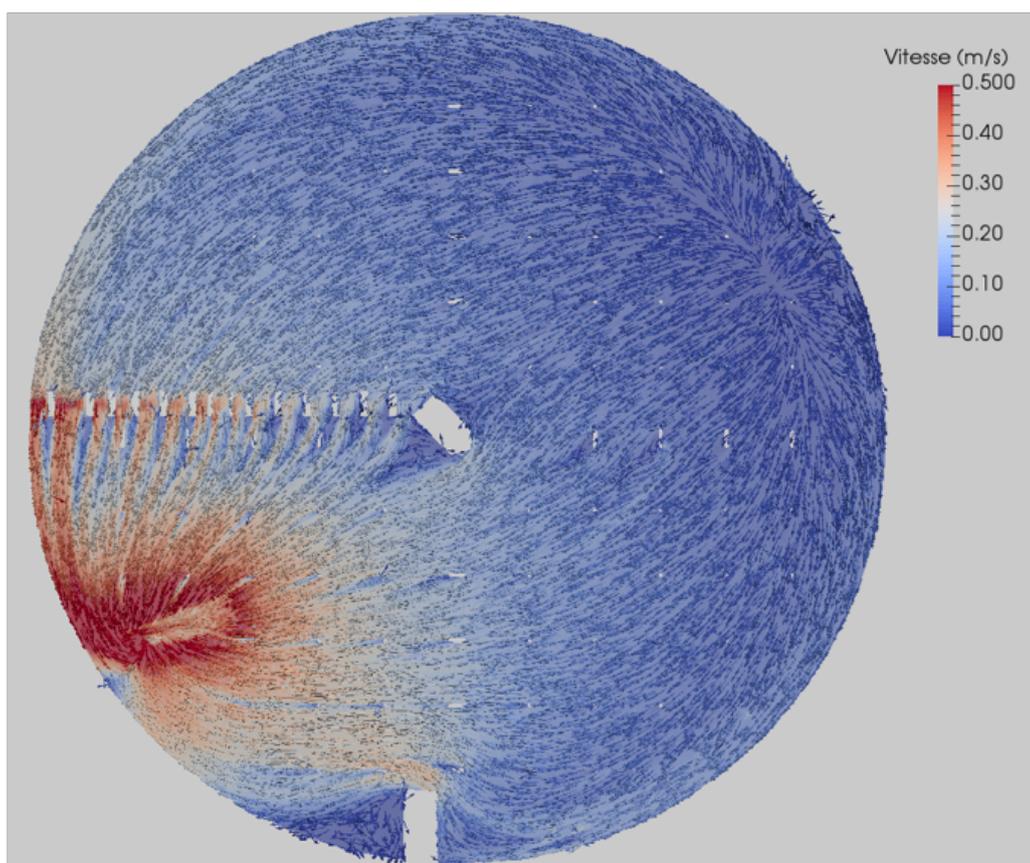
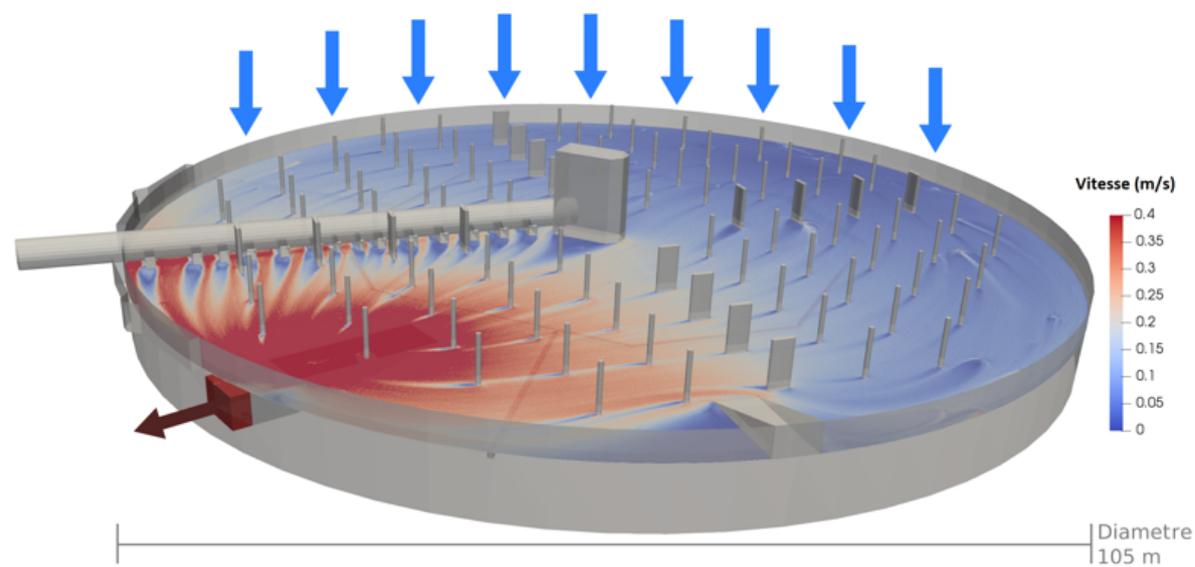


FIGURE 6.2 – Champ de vitesse dans le bassin froid : superposition à la géométrie (haut) et représentation des vecteurs vitesse sur une coupe horizontale à 50 cm de profondeur (bas)

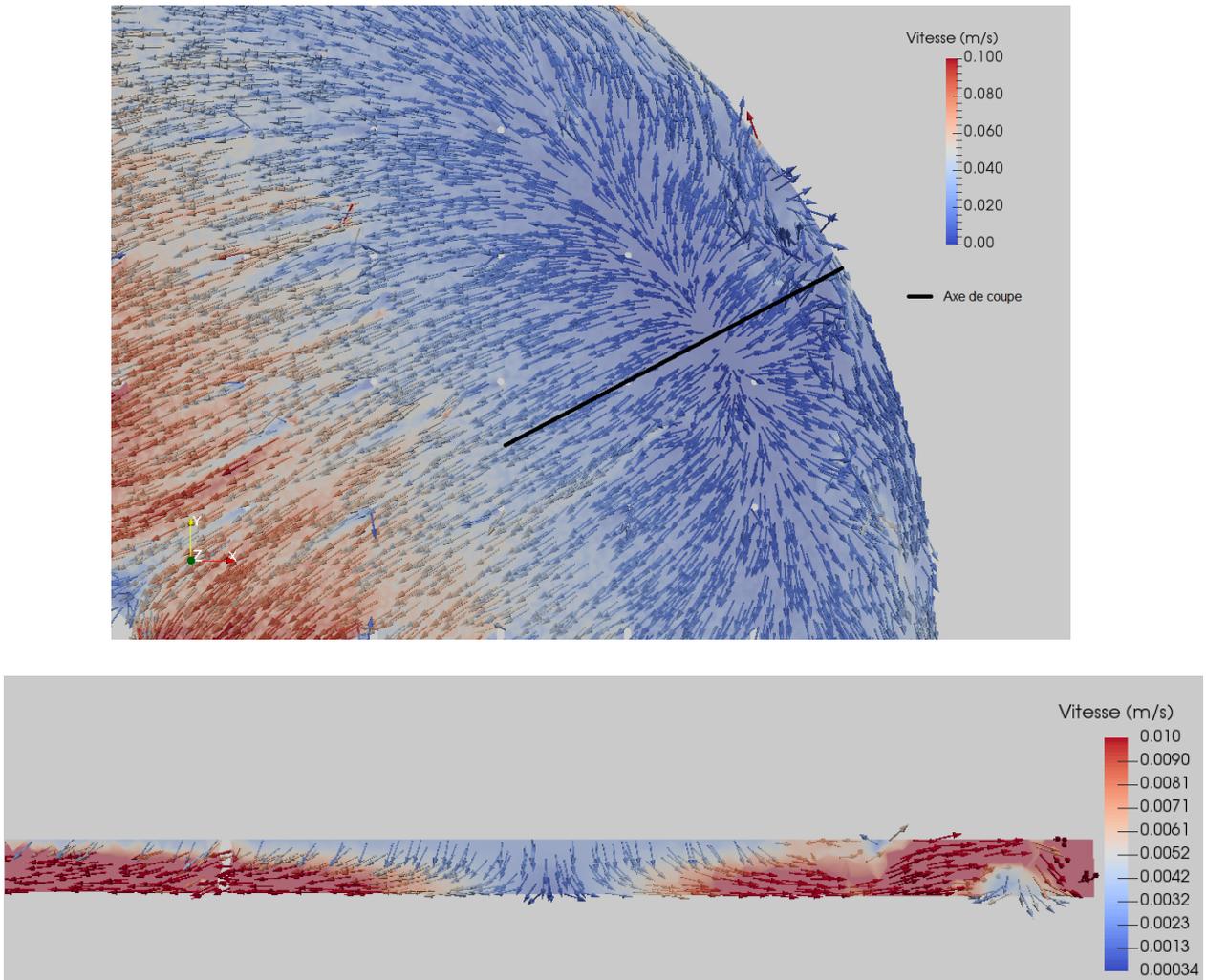


FIGURE 6.3 – Champ de vitesse dans la zone de très faibles vitesses pour une profondeur de 0,5 m ($t = 1900$ s) - Coupe dans le plan xy (haut) et coupe verticale selon l'axe prédéfini (bas)

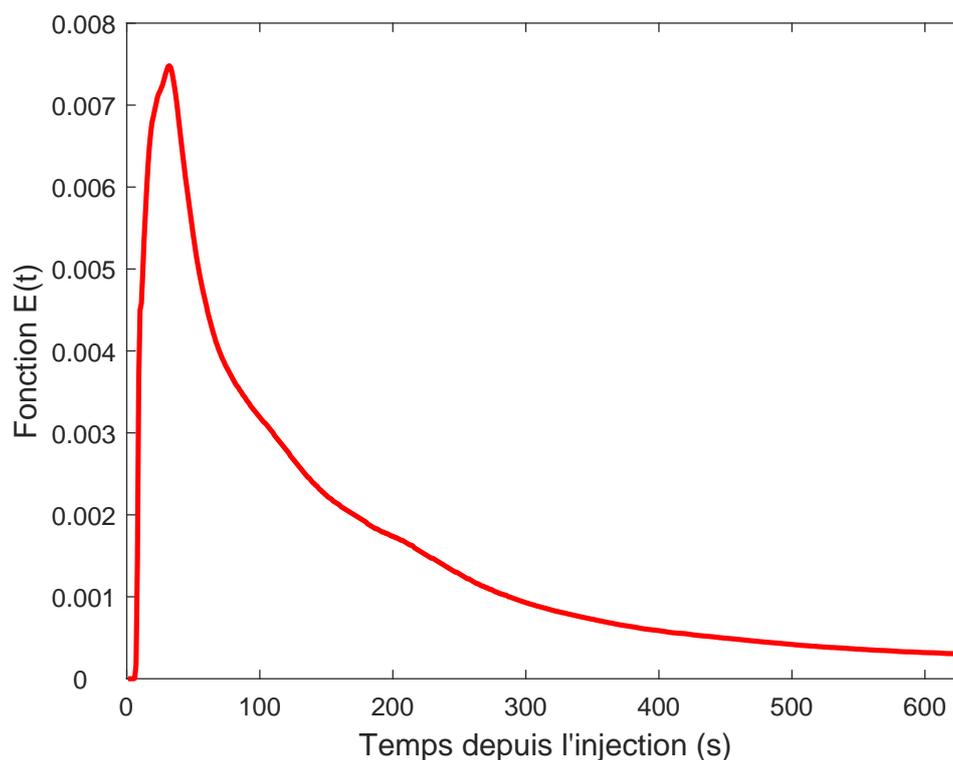


FIGURE 6.4 – Courbe DTS obtenue par MFN : fonction $E(t)$ en fonction du temps écoulé depuis l'injection du traceur

La courbe de la DTS du bassin froid est une information supplémentaire pour modéliser le bassin froid à l'échelle système et pour construire le futur modèle compartimental. Sur la courbe il est possible d'observer un premier pic puis une décroissance exponentielle de la fonction $E(t)$. Le traceur étant injecté sur la totalité de la surface arrosée, le pic peut s'expliquer par le court circuit provoqué par l'injection de traceur dans la zone proche de la sortie. Il est aussi possible d'observer une traînée de la courbe de la fonction caractéristique des zones de très faibles vitesses et de recirculation. Cette DTS numérique sera un outil précieux pour la détermination du modèle compartimental du bassin dans le Chapitre 8.

Les simulations de MFN nous permettent aussi d'obtenir les valeurs de la contrainte de cisaillement en paroi, ces valeurs obtenues dépendent de la loi de paroi choisie pour les simulations. La Figure 6.5 haut présente la cartographie des valeurs de taux de cisaillement en fonction de la position dans le bassin. De manière logique, les valeurs les plus élevées de contraintes de cisaillement se trouvent dans les zones où la vitesse est la plus élevée (zones proches de la sortie par pompage) avec des valeurs de l'ordre du pascal. A l'opposé, loin de la sortie, les valeurs de la contrainte de cisaillement sont très faibles dans les zones de faible vitesse avec des valeurs pouvant être inférieures à 0,05 Pa. Le Figure 6.5 bas présente elle la distribution statistique des valeurs dans la totalité du bassin.

Ces champs de vitesses et la cartographie des valeurs de la contrainte de cisaillement en paroi obtenus par MFN nous donnent ainsi les paramètres nécessaires pour cartographier les écoulements dans le bassin et délimiter différentes zones d'intérêt hydrodynamiques qui serviront à la construction du modèle dans la Partie III.

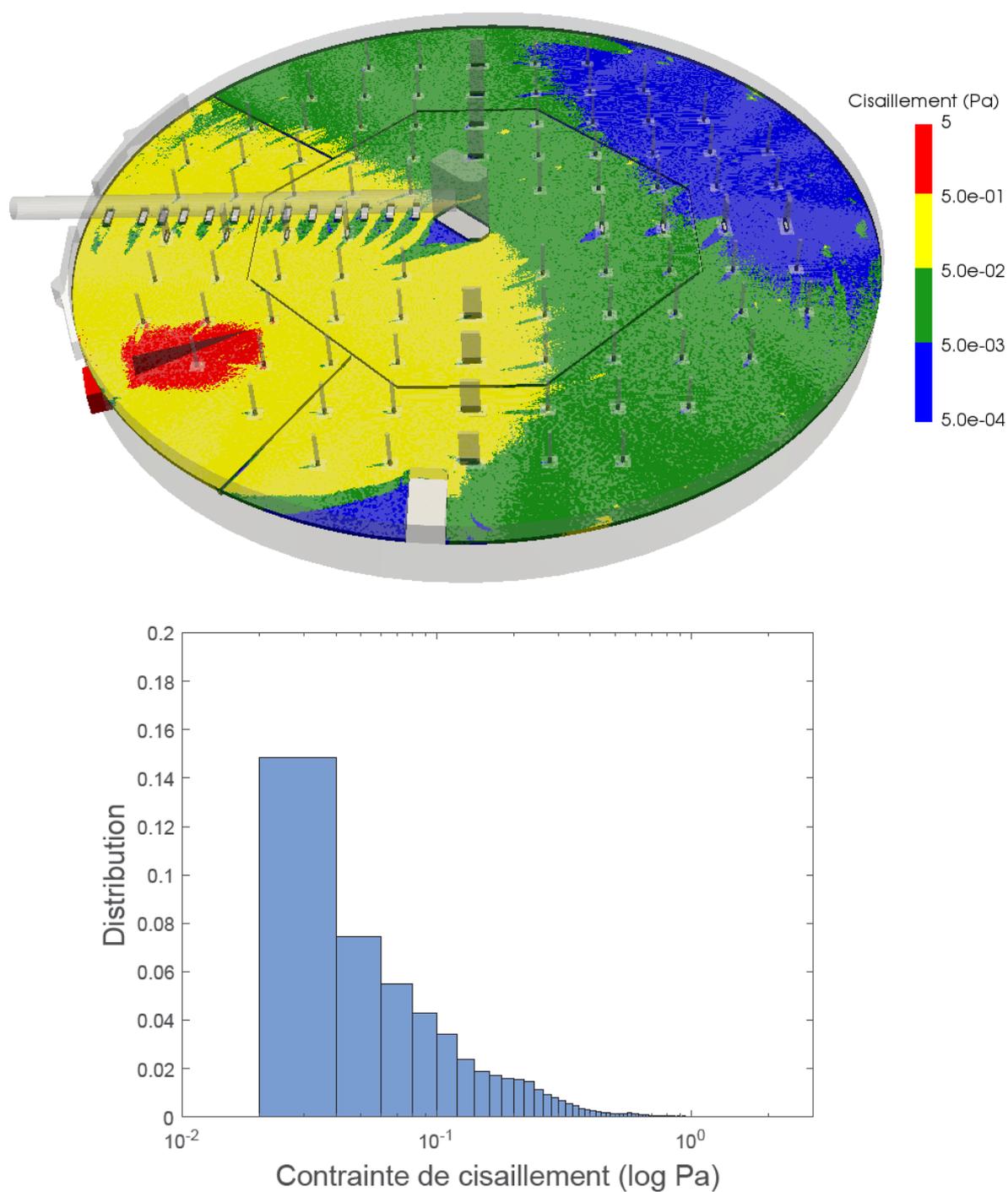


FIGURE 6.5 – Cartographie des valeurs de la contrainte de cisaillement en paroi dans le bassin froid (haut) et distribution statistique des valeurs de la contrainte de cisaillement dans le bassin froid (échelle logarithmique) (bas)

6.2 Hydrodynamique dans les conduites

6.2.1 Écoulement turbulent établi

Les calculs sont effectués pour les deux cas de référence déjà présentés au Chapitre 3 : un tube de condenseur de diamètre de 1,5 cm et une conduite en béton d'un diamètre de 2,8 m. Les grandeurs caractéristiques des écoulements sont rappelées dans le Tableau 6.2. Les écoulements sont considérés comme établis donc à une distance supérieure à la longueur d'établissement de tout obstacle ou changement de direction de la conduite.

TABLE 6.2 – Grandeurs caractéristiques de l'écoulement en conduite dans les circuits de refroidissement pour 4 températures de fonctionnement

| | T (°C) | Débit (m ³ /s) | Diamètre (m) | u_{moy} (m/s) | Re | L_e (m) |
|------------------------|----------|------------------------------|-----------------|---------------------------|----------------------|-----------|
| Tube condenseur | 10°C | 3,19.10 ⁻⁴ | 0,015 | 1,81 | 1,78.10 ⁴ | 0,34 |
| | | 17,25 | 2,8 | 2,80 | 5,15.10 ⁶ | 162 |
| Conduite béton | 20°C | 3,19.10 ⁻⁴ | 0,015 | 1,81 | 2,69.10 ⁴ | 0,36 |
| | | 17,25 | 2,8 | 2,80 | 7,78.10 ⁶ | 173 |
| Tube condenseur | 30°C | 3,19.10 ⁻⁴ | 0,015 | 1,81 | 3,37.10 ⁴ | 0,38 |
| | | 17,25 | 2,8 | 2,80 | 9,76.10 ⁶ | 180 |
| Conduite béton | 40°C | 3,19.10 ⁻⁴ | 0,015 | 1,81 | 4,12.10 ⁴ | 0,39 |
| | | 17,25 | 2,8 | 2,80 | 1,19.10 ⁷ | 186 |

Grâce aux équations régissant les écoulements turbulents établis, il est donc possible de calculer les grandeurs caractéristiques des écoulements dans les conduites telles que la vitesse limite ou encore la contrainte de cisaillement en paroi. La viscosité et la masse volumique de l'eau intervenant dans les équations, différentes températures de fonctionnement possibles sont considérées pour observer l'impact des propriétés de transport du fluide sur la contrainte de cisaillement en paroi notamment. Les caractéristiques des écoulements sont résumées dans le Tableau 6.3 pour quatre températures de fonctionnement et une rugosité moyenne fixée à 10 µm pour un tube de condenseur en acier et 500 µm pour les conduites en béton.

La température du fluide influence la contrainte de cisaillement en paroi, mais les résultats restent dans le même ordre de grandeur (moins de 2 Pa de différence pour le tube de condenseur et moins de 0,5 Pa pour les conduites béton pour une variation de température de 10 à 40°C). Cependant, du fait de la grande variation de la viscosité du fluide en fonction de la température dans la gamme de température d'intérêt, le cisaillement en paroi nommé γ et exprimé en (s⁻¹) va être multiplié par plus de deux entre

TABLE 6.3 – Grandeurs caractéristiques de l'écoulement en conduite dans les circuits de refroidissement pour 4 températures de fonctionnement

| | T (°C) | Rugosité (μm) | Exposant loi vitesse | u_{lim} (m/s) | f | τ_w (Pa) | γ (s^{-1}) |
|------------------------|-------------|-------------------------------|-------------------------|---------------------------|--------|---------------|------------------------------|
| Tube condenseur | 10°C | 10 | 6,5 | 2,08 | 0,0325 | 17,5 | 11483 |
| | | 500 | 10,3 | 3,07 | 0,0136 | 16,1 | 10570 |
| Conduite béton | 20°C | 10 | 6,7 | 2,08 | 0,0307 | 16,5 | 16430 |
| | | 500 | 10,7 | 3,06 | 0,0136 | 15,9 | 15783 |
| Tube condenseur | 30°C | 10 | 6,7 | 2,08 | 0,0300 | 16,1 | 20128 |
| | | 500 | 10,9 | 3,06 | 0,0136 | 15,8 | 19711 |
| Conduite béton | 40°C | 10 | 6,8 | 2,07 | 0,0295 | 15,7 | 24118 |
| | | 500 | 11,1 | 3,05 | 0,0135 | 15,6 | 23962 |

10 et 40°C.

La rugosité de la paroi est un autre paramètre important influençant l'écoulement dans les tubes et les conduites. Elle dépend du matériau des conduites, de l'état d'usage des composants du circuit, du temps d'exploitation ainsi que de l'état et de la nature de l'encrassement en paroi. La Figure 6.6 présente l'évolution des contraintes de cisaillement en paroi pour une rugosité de tube de condenseur allant de 10 μm à 1 mm et une rugosité de conduite en béton allant de 100 μm à 10 mm pour une température de l'eau de 20°C.

Dans les conditions d'écoulement du circuit de refroidissement considéré, la rugosité aura une influence importante sur la contrainte de cisaillement en paroi. Il est donc important d'adapter le calcul des paramètres hydrauliques en fonction des états de surface et donc de l'état d'usage du système (e.g. tubes de condenseurs neufs ou usés, âge et usure des conduites en béton...).

Les profils de vitesse dans un demi-tube de condenseur et dans une demi conduite sont présentés à la Figure 6.7 pour une température de 20°C.

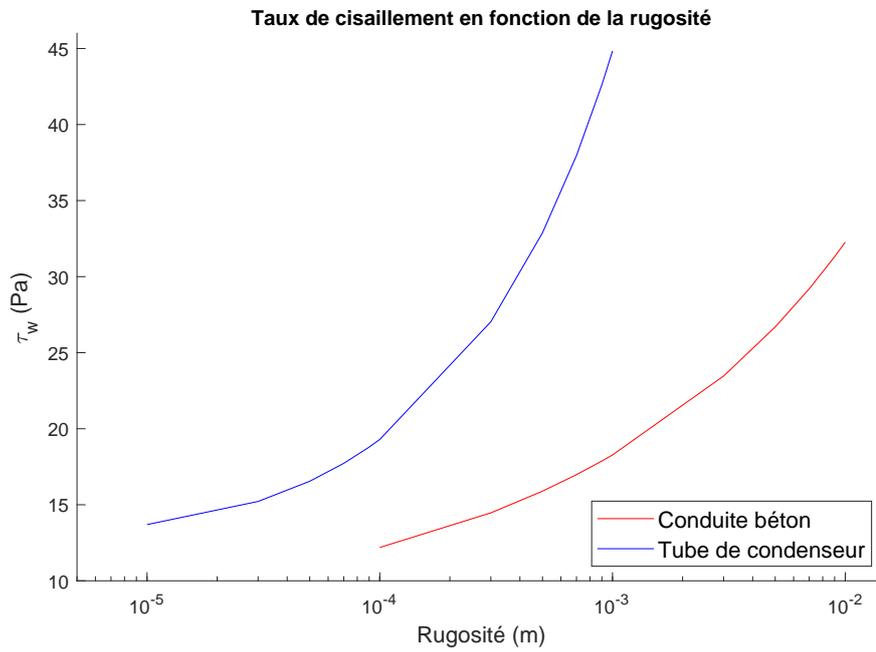


FIGURE 6.6 – Contrainte de cisaillement en paroi en fonction de la rugosité pour un tube de condenseur et une conduite béton (température 20°C)

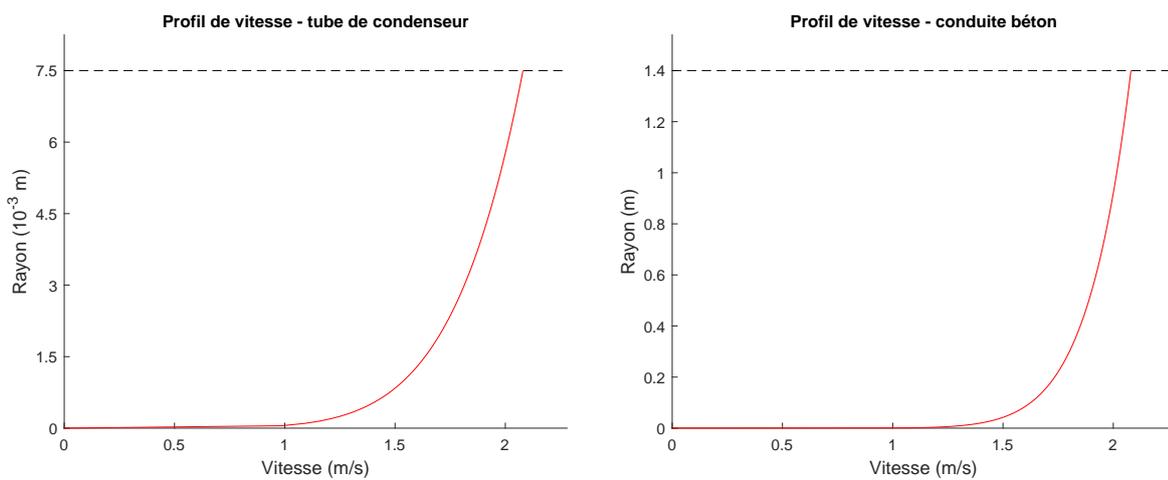


FIGURE 6.7 – Profil de vitesse dans un demi tube de condenseur (gauche) et dans une demi conduite (droite)

6.2.2 Écoulements dans la zone de transition turbulente

La longueur d'établissement de l'écoulement turbulent dans les conduites en béton du circuit de refroidissement est de 173 m pour un écoulement à 20°C. Sur l'ensemble du circuit de refroidissement, la distance entre les différents éléments (e.g. pompe, condenseur, tour aéroréfrigérante...) ainsi que la présence nombreux obstacles (e.g. coudes, arrivée de l'appoint, prélèvement de la purge...) font que cette longueur d'établissement est rarement atteinte. Pour les conduites en béton, il est donc nécessaire de considérer les variations de l'écoulement lors de la transition vers le profil turbulent établi. Pour cela, des simulations de MFN monophasiques des conduites béton ont été réalisées afin d'obtenir les profils de vitesse et les contraintes de cisaillement en paroi pour des longueurs inférieures à la longueur d'établissement.

Deux géométries ont été testées : un tube droit avec des profils de vitesse et de turbulence uniformes en entrée (cas de l'entrée dans une conduite après pompage par exemple) et un tube droit avec en entrée un coude de 120° suivant un écoulement précédemment établi (cas majorant d'un changement de direction de la conduite).

Les courbes de l'évolution de la contrainte de cisaillement en fonction de la position dans le tube sont tracés à la Figure 6.8 dans le cas d'un écoulement initialisé avec une vitesse uniforme sur l'ensemble de la section et une dissipation turbulente de 5% et pour le cas d'un écoulement en sortie d'un coude de 120° faisant suite à un écoulement établi dans une conduite droite (rugosité de 500 μm et température de 20°C). Dans le cas du coude, il est possible de distinguer deux cas : le suivi de la contrainte de cisaillement du côté de l'intrados et de l'extrados du coude.

On observe que dans le cas d'une initialisation homogène du champ de vitesse, la contrainte de cisaillement pendant l'établissement de l'écoulement est supérieure puis tend vers la valeur de la contrainte de cisaillement du régime permanent. Dans le cas d'un écoulement sortant d'un coude de la conduite, le profil de vitesse est déséquilibré selon le côté de la courbure (accélééré à l'extrados et ralenti à l'intrados). Cela induit une valeur de contrainte de cisaillement supérieure à la valeur du régime établi dans le cas de la sortie du côté de l'extrados et une valeur inférieure du côté de l'intrados. Dans les trois situations, un premier pic est observé quelques mètres après l'initialisation, dans le cas de l'extrados, la valeur du pic monte jusqu'à deux fois la valeur du régime établi. On observe cependant que la longueur d'établissement pour la contrainte de cisaillement est plus courte que la valeur calculée dans la littérature. Ainsi, si l'on considère un écart inférieur à 1% par rapport à la valeur limite de la contrainte de cisaillement, les longueurs d'établissement sont de 85 m pour le profil uniforme, 107 m pour l'intrados et 115 m pour l'extrados. Il est aussi possible d'observer que les trois situations convergent vers la même valeur limite de 13,6 Pa. Cette valeur est proche de la valeur calculée grâce aux corrélations de

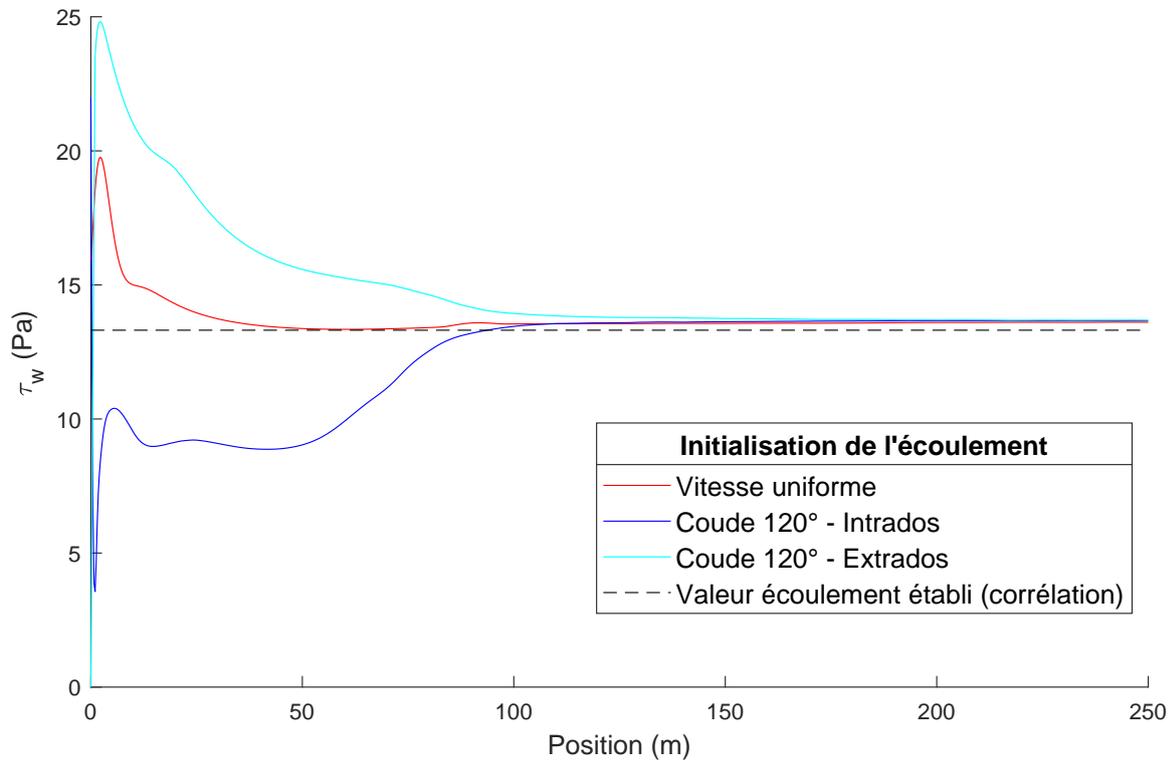


FIGURE 6.8 – Évolution de la contrainte de cisaillement en fonction de la position dans la conduite pour un écoulement initialisé avec une vitesse uniforme ou par un coude de 120° après un écoulement turbulent établi - profils du côté de l'intrados et de l'extrados du coude (rugosité de 500 μm , température de 20°C)

la littérature 13,3 Pa. La différence peut s'expliquer par le choix du modèle de turbulence et l'utilisation de lois de paroi dans le modèle MFN. Une étude complémentaire pourrait être menée en comparant différents modèles de turbulence et notamment des modèles de turbulence dits de bas Reynolds avec des lois de parois adaptées aux régimes de transition et à la viscosité en proche paroi. Il serait alors possible d'estimer le biais dû au modèle de turbulence dans la prédiction de la contrainte de cisaillement et particulièrement dans la valeur en écoulement établi.

Grâce aux travaux de la littérature et aux simulations de MFN, il est possible de pleinement caractériser les écoulements dans les conduites en béton et dans les tubes de condenseur des circuits de refroidissement. Les profils de vitesse en tout point des conduites et les contraintes de cisaillement en paroi peuvent ainsi être calculés ou simulés pour des écoulements turbulents pleinement établis mais aussi dans les zones de transitions. Pour ces zones de transition, il serait possible de simuler les particularités des géométries de chaque circuit de refroidissement étudié, mais pour rendre les résultats transposables pour différentes configurations, il serait possible d'évaluer les cas limites minimum et

maximum en simulant respectivement l'intrados et l'extrados d'un écoulement sortant d'un coude formant l'angle le plus obtus du circuit (120° dans le cas étudié).

6.3 Synthèse de l'hydrodynamique dans les garnissages

6.3.1 Données hydrodynamiques disponibles

Les résultats obtenus grâce à l'exploitation du dispositif expérimental dans les conditions opératoires similaires aux conditions de fonctionnement réelles et les résultats obtenus grâce aux simulations de MFN sont pleinement complémentaires. Le plan d'expérience renseigne, dans la limite de la représentativité du dispositif expérimental, sur la réalité des écoulements avec ce que cela comporte d'instabilités et de variations dues au régime chaotique comme expliqué précédemment. Ainsi, la distribution des épaisseurs et des taux de mouillage obtenus expérimentalement est plus représentative que celle des simulations de MFN. En complément, il est possible d'essayer de reproduire des conditions similaires de taux de mouillage et d'épaisseurs de film via les outils de simulations de MFN et d'obtenir les informations non disponibles expérimentalement comme le profil de vitesse selon l'épaisseur du film liquide ou la contrainte de cisaillement en paroi. Une attention particulière doit donc être apportée à la réconciliation des données pour les épaisseurs et les taux de mouillage.

Les résultats montrent que le taux de mouillage obtenu dans les simulations de MFN dépend très fortement de l'angle de contact statique. Les mesures expérimentales présentées ne permettent pas d'identifier une valeur unique précise pour les simulations, mais seulement une gamme de valeurs : en fonction de l'encrassement et de la localisation sur la surface, les mesures peuvent varier entre 27° et 50°. Les valeurs choisies de 15°, 30° et 45° pour les simulations permettent l'étude de l'influence du taux d'arrosage sur le mouillage. Cependant, dans l'optique d'obtenir des informations complémentaires cohérentes pour la construction du modèle compartimental, les résultats du taux de mouillage simulé permettent de faire correspondre les cas simulés aux cas étudiés expérimentalement. Les cas simulés de 30° et 45° permettant d'obtenir les distributions minorantes et majorantes pour les différents paramètres d'intérêt (épaisseur, vitesse, contrainte de cisaillement). Le taux de mouillage obtenu par MFN est majoré puisque les simulations sont réalisées avec l'hypothèse du liquide 100 % sous forme de film liquide et non sous forme de goutte ou de paquets de fluide tombant entre les canaux.

En comparant les résultats obtenus expérimentalement et les simulations numériques par MFN, il est possible d'observer que les simulations de MFN ont tendance à surestimer l'épaisseur du film pour un taux de mouillage similaire (cas simulé de l'angle de contact de 45°). En effet, les résultats expérimentaux donnent des moyennes de 380 à 520 μm pour des taux d'arrosages allant de 7,5 à 11,5 $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ alors que les simulations de MFN donnent des valeurs de 610 à 780 μm . Cela s'explique par la supposition

que la totalité du débit liquide est distribuée sous forme de film ruisselant uniquement (condition limite d'entrée du fluide en haut du garnissage) alors que dans le cas réel, l'aspersion ou encore le décrochement de liquide dans le garnissage provoquent un écoulement en partie dispersé sous forme de gouttes tombant entre les feuilles du garnissage. La complémentarité des approches permet une caractérisation complète des films liquides sur le garnissage.

Une stratégie de caractérisation est donc de considérer les résultats expérimentaux pour les taux de mouillage, puis d'utiliser l'angle de contact statique pour reproduire le taux de mouillage. Ces conditions de simulations permettent alors d'obtenir les informations complémentaires comme la vitesse superficielle du fluide et la contrainte de cisaillement.

Les valeurs des contraintes de cisaillement obtenues grâce aux simulations de MFN peuvent être discutées en comparaison des corrélations disponibles dans la littérature. En effet, en utilisant les corrélations des écoulements laminaires en conduites, on obtient pour un film avec un nombre de Reynolds $Re = 30$ et une vitesse superficielle de 0,1 m/s, un coefficient de friction estimé à 2,1 et des contraintes de cisaillement de l'ordre de 2,7 Pa ce qui correspond aux ordres de grandeur des valeurs simulées.

Une synthèse des données disponibles est proposée au tableau 6.4.

TABLE 6.4 – Résumé des données hydrodynamiques disponibles

| | Grandeur locale | Grandeur système | Expérimental | MFN | Utilisation pour le modèle |
|-----------------------------------|------------------------|-------------------------|---------------------|------------|---|
| Taux de mouillage | | X | X | X | Valeurs moyennes expérimentales & calage des paramètres MFN |
| Aire interfaciale | | X | | X | valeurs moyennes MFN |
| Rétention liquide | | X | | X | valeurs moyennes MFN |
| Vitesse superficielle | X | | | X | distributions MFN |
| Épaisseur de films | X | | X | X | distributions expérimentales & MFN |
| Contrainte de cisaillement | X | | | X | distributions MFN |

6.3.2 Caractérisation pour le transfert de matière

Comme évoqué dans la synthèse de l'état de l'art de la Partie II, les garnissages des tours aéroréfrigérantes présentent des singularités par rapport aux garnissages structurés généralement étudiés dans la littérature par l'utilisation de PVC et une faible perte de charge afin de favoriser le tirage naturel. Dans les études de référence portant sur les performances des garnissages, les auteurs se sont appliqués à proposer des corrélations pour prédire l'aire interfaciale en fonction des conditions hydrodynamiques du système (Billet et Schultes, 1999; Iliuta *et al.*, 2004; Tsai *et al.*, 2011) pour différents types de garnissages. En se basant sur leurs travaux et la forme des corrélations et grâce aux résultats obtenus avec les simulations de MFN, il est possible de proposer une corrélation pour caractériser le garnissage feuille utilisé dans les tours aéroréfrigérantes. La corrélation proposée par Billet et Schultes (1999) est exprimée par l'Équation 6.1.

$$\frac{a}{a_0} = 1,5(a_0 d)^{-0,5} \left(\frac{u_{L0} d}{\nu_L} \right)^{-0,2} \left(\frac{u_{L0}^2 \rho_L d}{\sigma_{G/L}} \right)^{0,75} \left(\frac{u_{L0}^2}{g d} \right)^{-0,45} \quad (6.1)$$

avec a l'aire interfaciale gaz/liquide du fluide (m^2/m^3), a_0 la surface spécifique solide du garnissage (m^2/m^3), d la longueur hydraulique caractéristique (m), u_{L0} le taux d'arrosage (ou vitesse en fût vide) ($\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$), ν_L la viscosité cinématique du liquide (m^2/s), ρ_L la masse volumique du liquide (kg/m^3), $\sigma_{G/L}$ la tension de surface gaz/liquide (N/m) et g l'accélération gravitationnelle (m/s^2).

Cette corrélation peut être exprimée de façon générale en fonction des nombres adimensionnels hydrodynamiques comme dans l'Équation 6.2.

$$\frac{a}{a_0} = A \cdot Re^\alpha We^\beta Fr^\gamma \quad (6.2)$$

Dans la corrélation de Billet et Schultes, les différents coefficients et exposants ont été déterminés pour des garnissages différents de ceux considérés ici. De plus, cette corrélation prend en compte une valeur constante de la tension de surface gaz/liquide pour un matériau donné. Dans leurs travaux, Tsai *et al.* (2011) pointent aussi la nécessité de discuter la prise en compte de l'angle de contact liquide/solide dans les corrélations pour les aires interfaciales.

Dans les cas des garnissages feuille étudiés dans ce travail, le plan d'expérience numérique permet de balayer les vitesses de fluide (ici la vitesse en fut vide) et les angles de contact liquide/solide. Les résultats des travaux MFN identifient aussi très clairement l'angle de contact liquide/solide comme un paramètre primordial du taux de mouillage et donc de l'aire interfaciale. C'est pourquoi, la corrélation proposée doit tenir compte d'une tension de surface liquide/solide prenant en compte l'angle de contact comme exprimé à l'Équation 6.3.

$$\sigma_{L/S} = \sigma_{G/S} - \sigma_{G/L} \cdot \cos\theta \quad (6.3)$$

avec $\sigma_{L/S}$ la tension de surface liquide/solide en (N/m), $\sigma_{G/S}$ la tension de surface gaz/solide en (N/m), $\sigma_{G/L}$ la tension de surface gaz/liquide en (N/m) et θ l'angle de contact liquide/solide.

En tenant compte de l'étude des phénomènes prépondérants, il a été démontré (voir Chapitre 3) que les forces visqueuses sont négligeables dans les conditions opératoires étudiées donc la corrélation proposée ne fait pas intervenir le nombre de Reynolds. Cette corrélation de l'aire interfaciale présentée à l'Équation 6.4 et tient compte des trois forces importantes : force inertielle, force gravitaire et force superficielle.

$$\frac{a}{a_0} = A \cdot We^\alpha Fr^\beta \left(\frac{\sigma_{G/L}}{\sigma_{L/S}} \right)^\gamma \quad (6.4)$$

avec les nombres de Weber et de Froude définis comme suit (Équations 6.5 et 6.6) :

$$We = \frac{u_{L0}^2 \rho_L d_h}{\sigma_{G/L}} \quad (6.5)$$

$$Fr = \frac{u_{L0}^2}{g d_h} \quad (6.6)$$

avec u_{L0} le taux d'arrosage (ou vitesse en fût vide) ($m^3 \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$), ρ_L la masse volumique du liquide (kg/m^3), d_h la longueur hydraulique caractéristique (m), $\sigma_{G/L}$ la tension de surface gaz/liquide (N/m) et g l'accélération gravitationnelle (m/s^2). Pour le garnissage feuille, la longueur hydraulique correspond à la largeur d'un canal vertical soit 5 cm.

Cette corrélation fait intervenir les deux nombres de Weber et de Froude comme la forme proposée par Tsai *et al.* (2011). Cependant, la corrélation proposée dans ce travail fait intervenir de manière directe le phénomène de tension de surface avec le rapport des tensions de surface gaz/liquide et liquide/solide.

Pour les différentes conditions opératoires simulées, les valeurs de l'aire interfaciale a/a_0 obtenues par simulations de MFN ont été utilisées pour caler le paramètre A et les exposants (α , β et γ) de la corrélation. Ces paramètres sont présentés dans le Tableau 6.5.

TABLE 6.5 – Résumé des données hydrodynamiques disponibles

| Paramètre | Valeur |
|-----------|--------|
| A | 0,208 |
| α | 0,742 |
| β | -0,540 |
| γ | -0,561 |

La Figure 6.9 présente les valeurs de a/a_0 calculées par la corrélation par rapport aux valeurs simulées

par MFN ainsi que l'intervalle de confiance à 95 %.

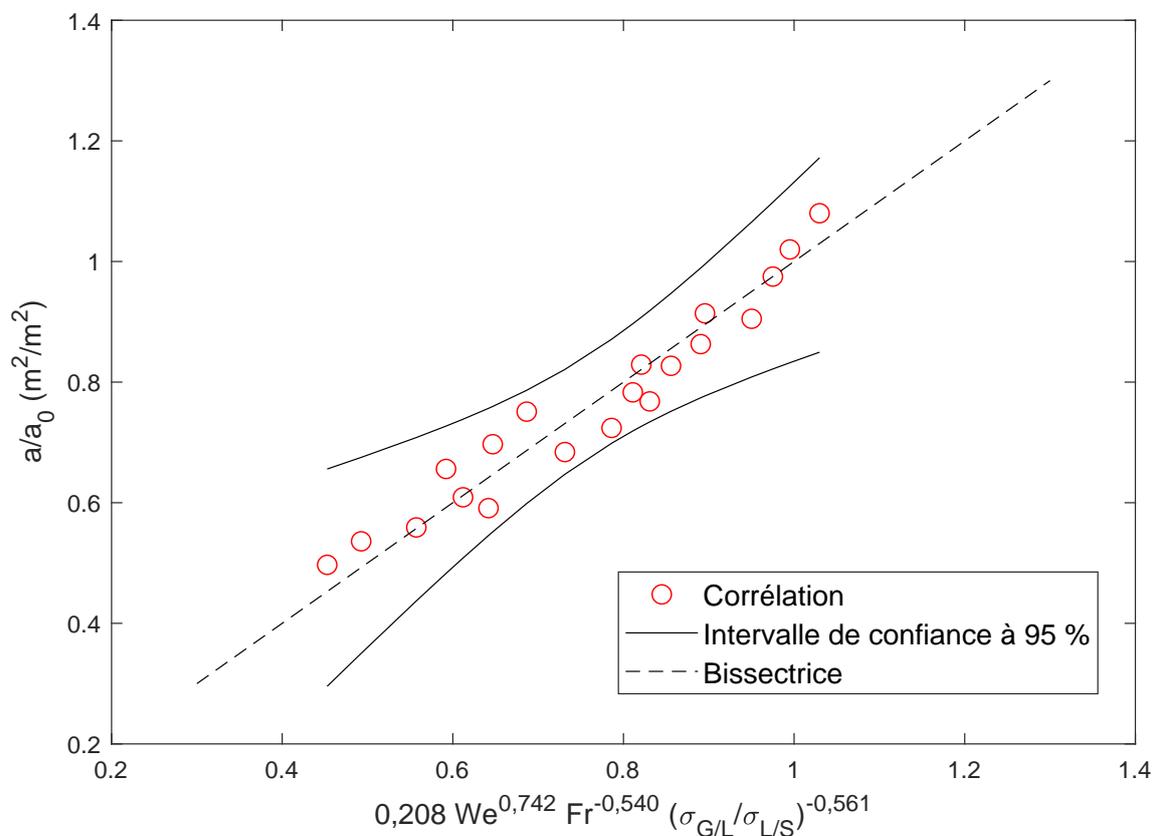


FIGURE 6.9 – Tracé des valeurs de l'aire interfaciale a/a_0 simulées par rapport aux valeurs obtenues par la corrélation proposée et représentation de l'intervalle de confiance à 95 %

La corrélation ainsi déterminée permet une bonne prédiction des aires interfaciales pour caractériser l'hydrodynamique à l'échelle système du garnissage feuille. Cela démontre la capacité des simulations de MFN pour établir des corrélations pour les grandeurs caractéristiques des phénomènes de transfert dans les garnissages. En plus de travaux précédemment présentés dans la littérature, la corrélation proposée tient compte de l'angle de contact liquide/solide qui est primordial pour l'étude des écoulements sur les garnissages.

6.3.3 Hydrodynamiques dans les autres garnissages des tours aéroréfrigérantes

Les deux autres types de garnissages (hybrides et grilles présentés au Chapitre 1) ont pu être observés grâce au dispositif expérimental. Cependant, du fait de la nature très chaotique des écoulements et de la structure complexe des garnissages, les méthodes développées dans le Chapitre 4 pour le garnissage feuille n'ont pas pu être directement transposées. Les premières observations ont permis de mettre en évidence des régimes d'écoulement variés dus à la géométrie des deux garnissages. Pour le garnissage

hybride, une partie de l'écoulement se fait sous forme de films et des filets d'eau qui se forment le long des structures plastiques et une autre partie sous forme d'écoulement dispersé tombant en goutte entre les mailles. Du fait de la structure complexe, de nombreuses gouttes de la phase dispersées impactent la structure et alimentent les films et filets et de nombreuses gouttes se détachent du solide alimentant la phase dispersée. Sur la Figure 6.10 on peut observer un film stable sur la droite de la structure, une goutte dans l'air en haut à gauche des images et le détachement d'une goutte passant du film à la phase dispersée à gauche de la structure plastique. Les images sont séparées par 2,5 millisecondes.

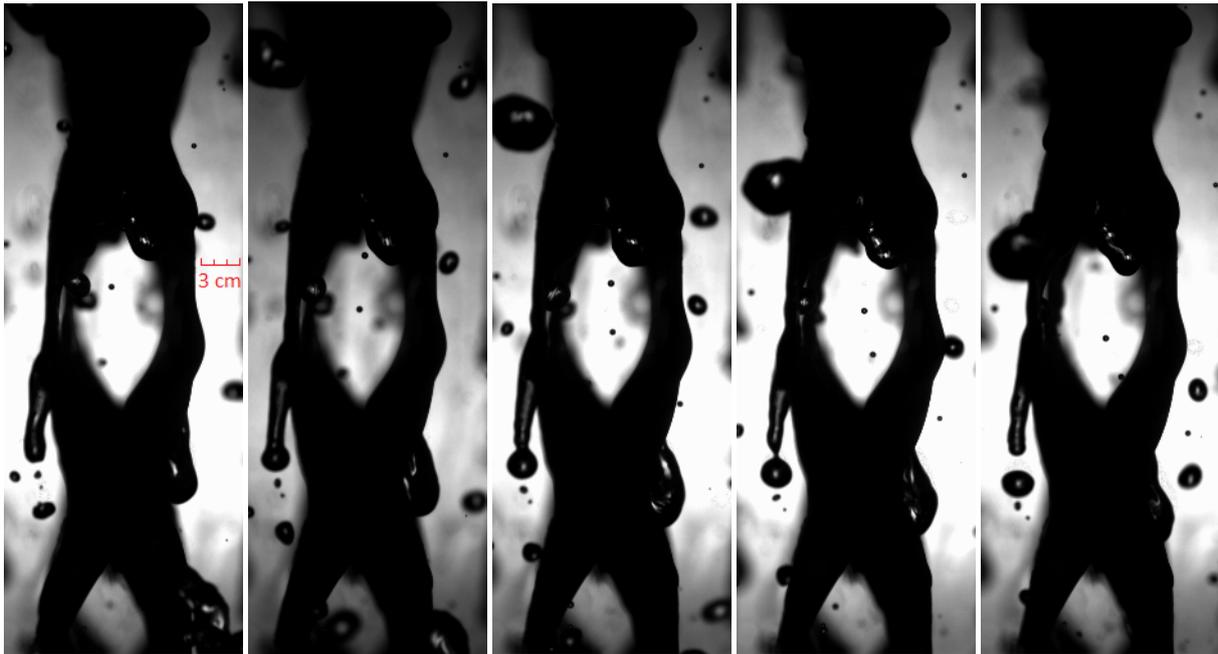


FIGURE 6.10 – Exemple de visualisation des écoulements pour le garnissage hybride - Goutte dans la phase dispersée, film ruisselant sur le garnissage et détachement d'une goutte (temps entre les images : 2,5 ms)

Pour le garnissage grille, les vidéos montrent que la structure du garnissage et les ergots placés sur les fils de plastique favorisent le détachement en gouttes ou en paquets du fluide présent le long des fils. Lorsque l'écoulement s'effectue le long du garnissage, la forme des fils implique un écoulement annulaire qui les entoure totalement. La Figure 6.10 présente quelques images de la visualisation des écoulements dans le packing grille avec détachement d'un paquet de fluide.

La poursuite de l'étude pourrait avoir pour objectif l'adaptation des méthodes de visualisation disponibles (contraste pour les épaisseurs et fluorescence pour le mouillage) ou le développement de nouvelles méthodes plus adaptées afin de caractériser pleinement les écoulements dans ces garnissages.

En parallèle, des simulations de MFN pourraient être réalisées sur ces deux géométries. Cependant, du fait de la structure lacunaire, une attention particulière devrait être portée pour la condition d'entrée du fluide : il est impossible de supposer un écoulement à 100% stratifié le long des structures du garnissage,

il serait donc nécessaire de reproduire en entrée du liquide une condition d'arrosage ou de pluie similaire au cas des tours aéroréfrigérantes et respectant les taux d'arrosages souhaités.

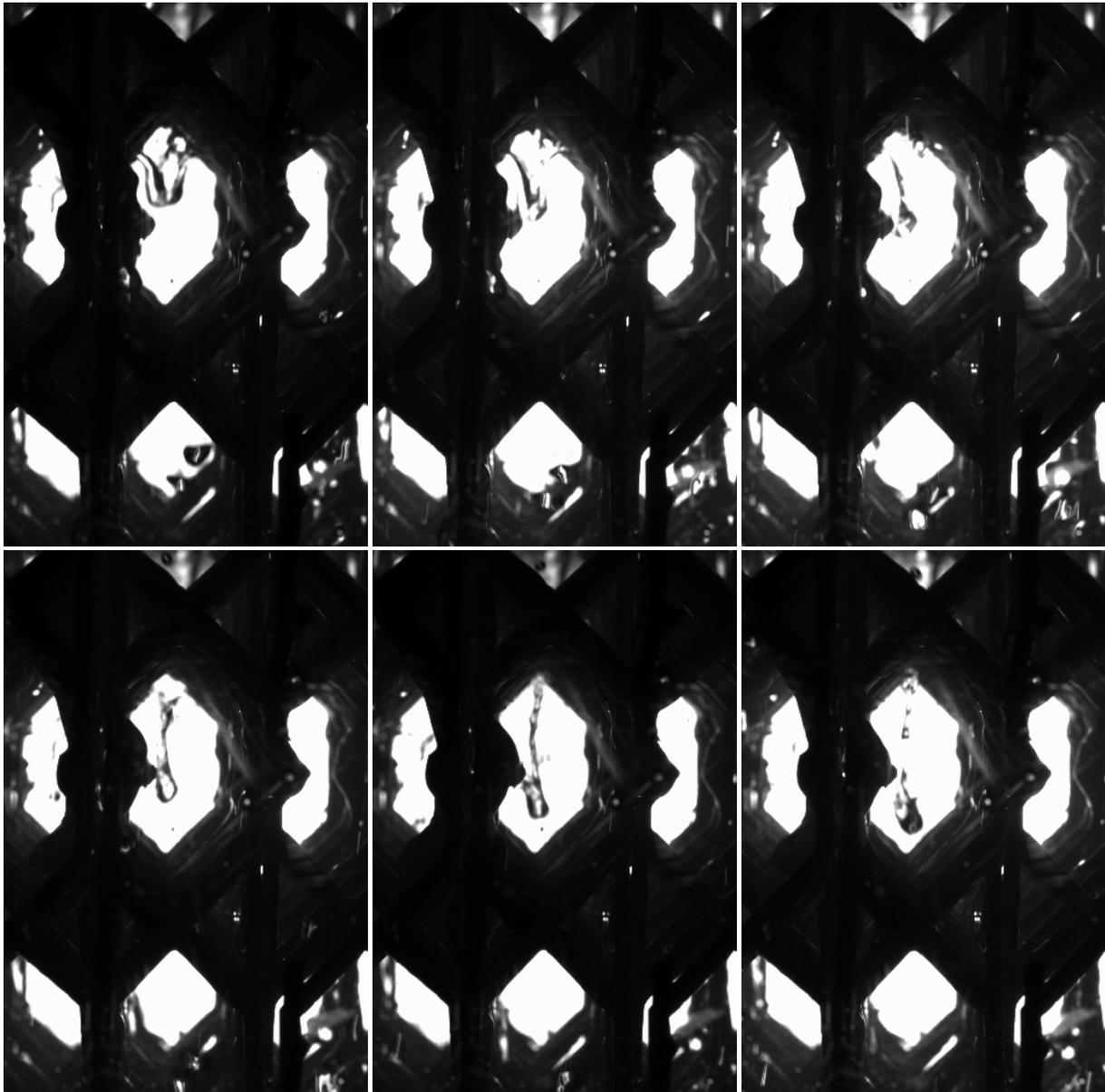


FIGURE 6.11 – Exemple de visualisation des écoulements pour le garnissage grille - Détachement d'un bloc de fluide du garnissage au centre de la maille (temps entre les images : 2,5 ms)

6.4 Discussion sur les résultats

6.4.1 Informations disponibles et validation des résultats

L'exploitation du dispositif expérimental et des résultats des simulations de MFN a permis la caractérisation hydrodynamique du garnissage feuille étudié aussi bien à l'échelle du système qu'à l'échelle locale. Par l'étude expérimentale, le garnissage a pu être caractérisé de manière locale par observation directe des écoulements à une échelle réduite. La mesure des épaisseurs et des taux de mouillages a pu être réalisée en faisant varier les conditions expérimentales comme le taux d'arrosage ou la vitesse d'air. Les valeurs des résultats obtenus et les distributions des différents paramètres sont des données nouvelles puisque l'hydrodynamique des garnissages de types feuille dans ces conditions opératoires n'avait pas été étudiée auparavant dans la littérature. L'analogie avec des études de garnissages proches et la comparaison avec des résultats similaires ont permis de valider les méthodes mises en place et les résultats par analyse des ordres de grandeur et des phénomènes. Les épaisseurs de film observées de l'ordre de quelques centaines de micromètres sont comparables aux films ruisselants sur les parois verticales étudiés dans la littérature Negny *et al.* (2001a). De même, les taux de mouillage observés pour les taux d'arrosage choisis correspondent aux valeurs de la littérature (Ataki et Bart, 2006; Morison *et al.*, 2006). Le taux de mouillage est effectivement inférieur à 100 % pour les tours de refroidissement parce que le taux d'arrosage est inférieur aux valeurs recommandées pour le design des colonnes d'autres industries comme expliqué dans l'exposé bibliographique du Chapitre 3 (Trambouze *et al.*, 1984).

En supplément des données expérimentales, les simulations de MFN sur les garnissages ont permis de compléter la caractérisation des garnissages de type feuille. La simulation par mécanique des fluides numérique des écoulements dans les garnissages de type feuille n'avait pas été traitée dans la littérature. De même, les simulations des écoulements dans les conditions de films fins ruisselants sur une paroi verticale n'étaient que très peu documentées. La réalisation de telles simulations a demandé une importante étude méthodologique afin d'obtenir les paramètres hydrodynamiques des écoulements : taux de mouillage, épaisseur de film mais aussi vitesse superficielle, taux de rétention liquide et aire interfaciale. Les résultats obtenus sont cohérents avec les résultats expérimentaux avec un ordre de grandeur de plusieurs centaines de micromètres, même si la valeur est surestimée pour les simulations en raison de l'hypothèse que la totalité du liquide est sous forme de film liquide. Pour le taux de mouillage, les résultats obtenus expérimentalement permettent de valider le choix du paramètre de l'angle de contact. En effet, des mesures d'angles de contact statiques réalisées sur des garnissages ont permis de donner une gamme de valeur d'angles de contact appliqués au matériau du garnissage. La

comparaison des simulations pour les différents angles de contact de cette gamme avec les résultats expérimentaux a permis d'identifier les valeurs de l'angle de contact du modèle MFN nécessaires pour reproduire les valeurs obtenues. Le cas d'un garnissage réel est cohérent avec un angle statique paramètre du modèle MFN fixé entre 35 et 45° selon les distributions. Pour le taux de rétention liquide et l'aire interfaciale, les résultats sont là aussi en accord avec les résultats de la littérature (Billet et Schultes, 1999; Tsai *et al.*, 2011). Une corrélation pour prédire l'aire interfaciale du garnissage en fonction des nombres adimensionnels hydrauliques a été proposée. Cette corrélation permet donc d'évaluer les performances de transfert du garnissage feuille à partir des caractéristiques globales de l'écoulement. L'approche VOF avec modèle d'angle de contact statique est une méthode adaptée pour capter les phénomènes d'intérêt des écoulements dans le garnissage.

Pour le bassin froid, des simulations monophasiques ont été réalisées afin d'obtenir les champs de vitesse dans l'ensemble du volume d'eau. Une grande disparité d'intensité de vitesses a pu être observée dans le bassin. Des zones de faibles vitesses et des zones de recirculation ont pu être identifiées. Ces zones correspondent aux zones observées dans les bassins industriels de tours aéroréfrigérantes : derrière les obstacles, loin de la sortie par pompage. Dans les conduites les corrélations classiques de la littérature ont été appliquées pour les régimes de turbulence établie. Pour le régime d'établissement de la turbulence, des simulations de MFN ont permis de pleinement caractériser les écoulements sur l'ensemble des conduites.

Les travaux réalisés ont permis d'obtenir une connaissance complète des écoulements dans toutes les parties du circuit de refroidissement de manière inédite. La synthèse des valeurs obtenues est présentée dans le Tableau 6.6.

6.4.2 Limites méthodologiques

Malgré l'obtention de résultats cohérents sur les écoulements dans les différentes parties du circuit, de nombreuses limites inhérentes aux méthodes utilisées pour la caractérisation influent sur les résultats obtenus.

Tout d'abord, la caractérisation expérimentale présente de nombreuses limitations méthodologiques. Même si le dispositif expérimental a été construit pour être représentatif des écoulements dans les garnissages, le changement d'échelle a ses limites. La distribution du liquide a été conçue de manière à être homogène mais elle ne peut être semblable à la distribution réelle des tours aéroréfrigérantes qui utilise les jets croisés de plusieurs buses d'aspersion avec impact sur une surface de type « sprinkler » qui n'est pas reproductible à échelle du laboratoire. De plus, les méthodes optiques de mesure utilisées ne permettent pas une caractérisation complète du garnissage. Seules les grandeurs locales visibles (épaisseur et taux de mouillage) ont été mesurées sur le dispositif. Les méthodes optiques présentent

TABLE 6.6 – Gammes de valeurs des données hydrodynamiques disponibles pour les différentes parties du circuit

| | Garnissages | Bassin froid | Conduites | Tubes de condenseur |
|---|----------------|--------------|-----------|---------------------|
| Taux de mouillage (%) | 50 - 100 | | | |
| a/a_0 | 0,45 - 1,05 | | | |
| Rétention liquide (m^3/m^3) | 0,028 - 0,067 | | | |
| Vitesse du liquide (m/s) | 0,03 - 0,12 | 0,01 - 1 | 2,8 | 1,8 |
| Épaisseur de films (m) | 0,0001 - 0,001 | | | |
| Contrainte de cisaillement (Pa) | 2 - 4 | 0,01 - 2 | 10 - 20 | 0,01 - 2 |

aussi une limitation intrinsèque due à la résolution de l'image. Les mesures de l'épaisseur du film liquide et du taux de mouillage sont donc limitées par la taille de chaque pixel comme cela a été évoqué lors de la présentation du matériel numérique utilisé. La résolution augmente avec la diminution de la fréquence d'acquisition. C'est pourquoi la présentation des résultats sous forme de distributions statiques de classes de valeurs permet de limiter l'influence de ce manque de précision sur les résultats.

Pour les simulations de MFN, la limitation provient des hypothèses effectuées pour aboutir à la résolution des calculs. Lors des simulations avec OpenFOAM, le film liquide est supposé établi à l'entrée supérieure du domaine, négligeant la part du débit tombant sous forme de gouttes entre les parois verticales. C'est la raison pour laquelle les simulations de MFN surestiment les valeurs des épaisseurs des films liquides et des taux de mouillage.

Les simulations sont aussi réalisées sans tenir compte du transfert entre les phases. La résolution des équations en régime isotherme sans tenir compte du changement de phase du liquide par évaporation permet d'obtenir la caractérisation du ruissellement du film liquide sur le garnissage mais sans être représentatif de la totalité des phénomènes. L'utilisation du modèle de l'angle de contact statique correspondant à des mesures expérimentales a permis de simuler correctement le taux de mouillage dans les gammes étudiées. Cependant, des études ont montré que l'utilisation d'un modèle d'angle de contact dynamique pouvait permettre de rendre les simulations plus représentatives sur une plus grande gamme de valeurs du plan d'expérience si le calage du modèle avec des données expérimentales n'est pas possible (Solomenko *et al.*, 2017). L'utilisation d'un modèle d'angle de contact statique permet

de prendre en compte la rugosité du matériau de manière indirecte. Or la rugosité peut avoir une influence non négligeable sur la contrainte de cisaillement qui est un paramètre primordial pour les modèles d'encrassement futur, l'encrassement induisant lui-même un changement de rugosité. Les simulations montrent que, quel que soit l'angle de contact, les valeurs de la contrainte de cisaillement sont sensiblement les mêmes. Cela tend à confirmer que dans les gammes d'écoulements concernés, le modèle utilisé n'a que peu d'influence sur le cisaillement, mais des études plus complètes devront être menées pour confirmer ces résultats.

Pour le bassin froid, les simulations ont été réalisées en monophasique et l'entrée a été supposée uniforme sur une partie de la surface du bassin. Ces simulations ne tiennent pas compte de l'entrée du débit sous forme de pluie et de la turbulence supplémentaire ponctuelle que peut provoquer l'impact de chaque goutte sur la surface. Les simulations sont aussi réalisées en isotherme dans la totalité du volume du bassin bien que le temps de séjour de certaines zones soit très élevé. De plus, la surface libre du bassin et l'arrivée d'eau sous forme de pluie peuvent être influencées par les conditions météorologiques et la vitesse du vent. Ces raisons font aussi que l'injection du traceur pour la DTS numérique se fait sur la totalité de la surface arrosée. La DTS pourrait être plus précise avec plusieurs injections différenciées en fonction de la localisation à la surface du bassin.

6.4.3 Retombées des résultats

Les résultats obtenus peuvent permettre à court terme de mieux connaître le comportement hydrodynamique des parties du circuit de refroidissement. Pour l'exploitant de ces circuits, cette connaissance permet d'identifier en fonction des champs de vitesses et des zones de recirculation la pertinence du placement des interconnexions avec les autres circuits (e.g. arrivée ou pompage du fluide, mélange d'espèces chimiques) en fonction des objectifs recherchés. Par exemple, une injection de traitement dans une zone de faible vitesse réduit très fortement l'efficacité du mélange et donc potentiellement l'utilité du traitement. De même, une connaissance précise de l'hydrodynamique permet d'évaluer le placement des différents capteurs assurant le suivi des paramètres du circuit. Une cartographie de l'hydrodynamique comme celle du bassin peut aussi justifier du choix de l'emplacement de prélèvements pour les mesures ponctuelles. Dans le cas du garnissage, des paramètres hydrodynamiques tels que le taux de mouillage, la rétention liquide et l'aire interfaciale donnent des informations directes à l'industriel sur l'efficacité du corps d'échange pour le transfert thermique. Les résultats qui montrent un taux de mouillage très inférieur à 100 % pour le garnissage feuille dans des conditions d'utilisation nominale peuvent faciliter la justification du choix d'un garnissage avec moins de surface et donc moins lourd. La réalisation de simulations de MFN sur des géométries de garnissages peut donc aider à évaluer et valider leur performance. Cela peut conduire à un gain de temps et de

moyens pour le choix des garnissages futurs. En complément, ces simulations sont aussi potentiellement utiles pour la conception des garnissages du futur.

De manière moins directe, la caractérisation des écoulements dans le circuit de refroidissement peut servir de point de départ et de données d'entrée pour la modélisation de phénomènes dépendant de l'hydrodynamique. C'est le cas pour le modèle de prédiction de l'encrassement biologique qui a été développé et qui sera présenté dans la Partie III.

6.4.4 Perspectives des études hydrodynamiques

Afin de compléter les résultats obtenus dans le cadre de cette étude, il est possible de poursuivre la caractérisation hydrodynamique du circuit de refroidissement. En utilisant le même dispositif expérimental, la première étape serait de poursuivre la caractérisation hydrodynamique des autres garnissages (hybride et grille) avec les méthodes optiques présentées ici. Pour compléter l'étude du ruissèlement des films liquide, des systèmes de suivi de particules (PIV ou PTV) pourraient être adaptés au dispositif pour mesurer expérimentalement les vitesses superficielles. La PIV et la PTV pourraient aussi permettre la réalisation d'expériences de traçage pour obtenir une DTS expérimentale des garnissages.

Le dispositif expérimental conçu peut aussi être utile pour la compréhension des phénomènes de transfert dans les garnissages. Il serait aussi intéressant d'évaluer les coefficients de transfert de masse entre les deux phases dans les garnissages : la mesure du coefficient de transfert gaz/liquide peut se faire en étudiant la quantité d'eau évaporée dans la colonne à l'aide des capteurs de température et d'humidité dont elle est équipée. De même, l'étude des profils de température au sein du garnissage peut permettre de connaître la performance thermique des garnissages qui est une autre information intéressante pour le fonctionnement des tours aéroréfrigérantes.

Pour les simulations de MFN, les perspectives découlent des limites des simulations actuelles. Pour poursuivre la modélisation des écoulements, des simulations de MFN pourraient être réalisées avec différents modèles en paroi comme le modèle d'angle de contact dynamique. Les simulations pourraient être réalisées en tenant compte du transfert thermique et du transfert de matière entre les phases afin de mesurer l'importance de ces transferts et leur influence réelle sur l'écoulement du film ruisselant sur le garnissage feuille. Enfin, les simulations de MFN des autres garnissages permettraient de compléter la connaissance de l'hydrodynamique dans les garnissages industriels utilisés dans les tours aéroréfrigérantes.

6.5 Conclusion

L'hydrodynamique dans toutes les parties du circuit de refroidissement a été étudiée en détail. Pour le bassin froid, des simulations de MFN monophasiques ont été réalisées et les champs de vitesses ont été obtenus. Pour les écoulements en conduites les corrélations de la littérature et des simulations numériques ont été utilisées afin d'obtenir toutes les grandeurs nécessaires. Enfin, pour les garnissages, un travail complet de caractérisation des écoulements a été réalisé. L'hydrodynamique est caractérisée de façon complémentaire grâce aux données provenant de mesures expérimentales et de simulations de MFN. Cette caractérisation complète permet de disposer de toutes les grandeurs hydrodynamiques nécessaires au développement et à la résolution des modèles d'encrassement présentés dans les chapitres suivants.

TROISIÈME PARTIE

**Modélisation compartimentale
appliquée au développement de
biofilm**

Modèle d'encrassement biologique

Le choix des modèles d'encrassement est primordial pour la construction du modèle. Comme nous l'avons montré dans le Chapitre 1, il existe différentes manières de modéliser les phénomènes d'encrassement. Le choix du modèle va dépendre de son objectif final et des paramètres d'influence principaux de l'étude : respectivement modéliser l'influence de l'écoulement sur l'encrassement et donc les paramètres hydrodynamiques principaux (e.g. régime d'écoulement, vitesse, contrainte de cisaillement).

La croissance des biofilms est un mécanisme complexe dans lequel plusieurs phénomènes entrent en jeu. Tous ces processus agissent de manière couplée et rendent une modélisation mathématique détaillée très complexe et difficile à résoudre (Wanner *et al.*, 2006). Comme évoqué dans le Chapitre 1, les phénomènes influençant l'équilibre du biofilm ont des temps caractéristiques très variés (Picioreanu *et al.*, 2000). L'équilibre du développement des biofilms est principalement dû à deux phénomènes concurrents : la production de matière organique et le détachement ou le décroissance de cette matière organique. Lorsque les deux phénomènes se compensent, le régime permanent est atteint et l'épaisseur du biofilm a atteint son équilibre pour les conditions opératoires considérées. Le modèle de production de matière organique peut donc être décomposé en deux termes : un terme de production et un terme de perte comme présenté à l'Équation 7.1. Cette équation n'est valable qu'après le temps d'incubation (t_{lim}), en dessous du temps d'incubation, la vitesse de croissance est nulle.

$$\begin{aligned} \text{pour } t < t_{lim} : \quad & \frac{dX}{dt} = 0 \\ \text{pour } t \geq t_{lim} : \quad & \frac{dX}{dt} = J_P - J_R \end{aligned} \tag{7.1}$$

avec X la concentration massique surfacique de biofilm en kg/m^2 , t le temps en secondes, t_{lim} le temps d'incubation en s, J_P le terme de production du biofilm en $\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$ et J_R le terme de perte du biofilm en $\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$. Les termes J_P et J_R dépendant de manière directe ou indirecte de la quantité de biomasse, des paramètres hydrodynamiques et des conditions opératoires.

Afin de simplifier la modélisation mathématique, il est possible d'étudier ces temps caractéristiques

et de les comparer afin de déterminer des régimes de prépondérance de certains processus bio-physico-chimiques et d'identifier les phénomènes limitants. Pour cela, le Génie des Procédés se base sur le calcul de nombres adimensionnels permettant la comparaison et la quantification relative des phénomènes. L'analyse de la modélisation de l'équilibre des biofilms peut être divisée en deux parties : la croissance du biofilm et son déclin. Pour le déclin, les phénomènes de mort naturelle et d'arrachement ne sont pas en compétition directe mais s'additionnent. Pour la croissance des biofilms, les phénomènes en compétition sont la cinétique de réaction biologique de croissance et les phénomènes de transport au sein et à l'extérieur du biofilm (diffusion et convection). Le modèle de développement du biofilm s'intéresse à la masse de biofilm mais pas particulièrement à sa composition.

L'objectif de ce chapitre est de construire le modèle biologique de développement du biofilm pour le circuit de refroidissement. Pour cela, dans un premier temps, une analyse des régimes a été réalisée pour comprendre les phénomènes limitants. Ensuite, la structure du modèle biologique simple permettant de répondre à la question posée a été construite. Enfin, les différents paramètres du modèle ont été déterminés à l'aide des données expérimentales de la littérature pour obtenir le modèle final.

7.1 Détermination des régimes des phénomènes

Cette section a pour but d'identifier le mécanisme limitant pour le modèle de croissance du biofilm. Les phénomènes de transfert sont d'abord présentés de manière générale en fonction du régime prédominant (convectif ou diffusif) et pour chaque cas, les outils d'étude des régimes sont définis de manière générale sous forme de nombre adimensionnels. Ils sont ensuite détaillés pour les différentes configurations rencontrées dans les circuits de refroidissement : à l'intérieur du biofilm et dans les différents écoulements des différentes parties du circuit.

7.1.1 Compétition entre phénomènes de transfert et réaction biologique

Afin d'étudier la compétition entre la cinétique biologique et l'apport en réactifs nécessaires à la réaction, les nombres de Damköhler sont utilisés. Ils comparent le temps caractéristique d'une réaction chimique ou biologique au temps caractéristique du transfert de masse. Dans le cas du biofilm, deux nombres adimensionnels adaptés en fonction de la région sont définis : un nombre pour le transport des réactifs dans le fluide jusqu'à l'interface eau/biofilm et un nombre pour le transport des réactifs à l'intérieur du biofilm.

Dans le cas d'un régime convectif, le nombre de Damköhler ($Da_{\text{convectif}}$) défini à l'Équation 7.2 compare le temps caractéristique d'apport des réactifs à l'interface par convection ($t_{\text{réaction}}$) avec le temps caractéristique de la réaction biologique ($t_{\text{transfert}}$).

$$Da_{convectif} = \frac{t_{transfert}}{t_{réaction}} = \frac{k_{app} L_c}{K} \quad (7.2)$$

avec k_{app} la constante apparente de croissance du biofilm en s^{-1} , K le coefficient de transfert de masse à l'interface liquide/biofilm en m/s et L_c la longueur caractéristique de l'écoulement en m .

La constante k_{app} correspond à l'inverse du temps caractéristique de la réaction de croissance du biofilm. Elle peut être obtenue en considérant la vitesse maximale de réaction de croissance du biofilm divisée par la concentration en substrat.

Pour le régime de diffusion, le nombre de Damköhler diffusif ($Da_{diffusif}$) défini à l'Équation 7.3 compare le temps caractéristique de la réaction biologique ($t_{réaction}$) avec le temps caractéristique de transfert par diffusion ($t_{diffusion}$).

$$Da_{diffusif} = \frac{t_{diffusion}}{t_{réaction}} = \frac{k_{app} L_c^2}{D_{fluide}} \quad (7.3)$$

avec k_{app} la constante apparente de croissance du biofilm en s^{-1} , D_{fluide} le coefficient de diffusion du réactif limitant dans le fluide en m^2/s et L_c la longueur caractéristique de l'écoulement en m .

Dans les deux cas, si le nombre de Damköhler est supérieur à 1, le temps caractéristique du transfert est plus grand que le temps de la réaction, la croissance du biofilm est alors limitée par l'apport des réactifs à l'interface ou par la diffusion des réactifs dans le biofilm. Si le nombre de Damköhler est inférieur à 1, le temps caractéristique de la réaction est supérieur au temps caractéristique du transfert, on parle de régime réactionnel et la croissance du biofilm est limitée par la cinétique de réaction.

Si le nombre de Damköhler pour le régime de diffusion ($Da_{diffusif}$) se calcule grâce au taux de croissance du biofilm et au coefficient de diffusion qui dépendent des propriétés intrinsèques des espèces en présence, le nombre de Damköhler en régime de transfert par convection ($Da_{convectif}$) fait intervenir le coefficient de transfert convectif qui dépend des conditions hydrodynamiques. Il est possible de calculer ce coefficient K grâce au nombre adimensionnel de Sherwood qui quantifie le rapport entre le transfert de masse par convection par rapport au transfert par diffusion à travers une interface (Équation 7.4).

$$Sh = \frac{K L_c}{D_{fluide}} \quad (7.4)$$

avec K le coefficient de transfert de masse en m/s , L_c la longueur caractéristique de l'écoulement en m et D_{fluide} le coefficient de diffusion des réactifs dans le fluide en m^2/s .

La valeur du coefficient de transfert de masse K peut être obtenue car il existe de nombreuses corrélation du nombre de Sherwood en fonction des autres nombres adimensionnels hydrodynamiques :

le nombre de Reynolds (rapport des forces d'inertie sur les forces visqueuses) et le nombre de Schmidt (rapport entre la viscosité et la diffusivité). Ces deux nombres sont rappelés aux Équations 7.5 et 7.6 :

$$Re = \frac{u L_C}{\nu} \quad (7.5)$$

$$Sc = \frac{\nu}{D_{fluide}} \quad (7.6)$$

avec u la vitesse du fluide en m/s, L_C la longueur caractéristique de l'écoulement en m, ν la viscosité cinématique du fluide en m^2/s et D_{fluide} le coefficient de diffusion des réactifs dans le fluide en m^2/s .

7.1.2 Dans le biofilm

La production de matière organique au sein du biofilm est effectuée par la croissance au sein même de ce biofilm. En fonction de la répartition des réactifs et de leur consommation, une partie seulement ou la totalité du biofilm peut être réactives. Là encore, l'étude de la compétition entre la réaction biologique et les phénomènes de transport vont permettre d'identifier le processus limitant la croissance de la biomasse. Le biofilm est considéré comme une phase hydrodynamiquement immobile donc la totalité du transport des réactifs se fait par diffusion.

Un calcul d'ordre de grandeur du nombre de Damköhler en régime diffusif (Équation 7.3) est réalisé avec des données de la littérature. En considérant un coefficient de diffusion des réactifs dans l'eau de l'ordre de $1.10^{-9} m^2/s$ (Picioreanu *et al.*, 2000), un taux de croissance de *Pseudomonas Fluorescens*, généralement considéré dans les biofilms d'eau brute de source froide, d'une valeur de $6,67.10^{-5} s^{-1}$ (Souza *et al.*, 2020) et une épaisseur de biofilm de 500 μm dans de l'eau à 20°C, le calcul du nombre de Damköhler donne une valeur de $1,67.10^{-2}$. Cela signifie que la croissance est limitée par la vitesse de réaction. La totalité du biofilm est réactive et le transfert de matière des nutriments n'est pas limitant pour le modèle de croissance. Cette hypothèse est valable tant que le temps caractéristique de la diffusion reste très inférieur au temps caractéristique de la réaction, le même calcul permet donc de déterminer une épaisseur de biofilm limite à partir de laquelle le transfert entre en compétition avec la réaction. En conservant les données considérées précédemment, l'épaisseur limite est de 1,2 mm pour que le transfert reste 10 fois plus rapide que la réaction et de 2,7 mm pour un transfert deux fois plus rapide que la réaction.

Au-delà de ces épaisseurs limites, la diffusion dans le biofilm devra être prise en compte comme influant sur la concentration de substrat : cette concentration ne sera plus constante suivant la profondeur du biofilm et le gradient de concentration ainsi créé influencera le transfert de matière. Dans ce cas dit du biofilm épais, une équation supplémentaire devra être considérée pour obtenir ce profil de

concentration à partir de la loi de Fick et de la vitesse de réaction comme présenté à l'Équation :

$$\frac{\partial S}{\partial t} = D_{biofilm} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} - r_S \quad (7.7)$$

avec S la concentration en réactif considérée en kg/m^3 , t le temps en s , $D_{biofilm}$ le coefficient de diffusion des réactifs dans le biofilm en m^2/s , x la dimension selon la profondeur du biofilm en m et r_S la vitesse de consommation du réactif considéré en $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$.

Dans le cas particulier du régime stationnaire, l'équation de la réaction-diffusion se simplifie donc l'Équation 7.7 devient :

$$D_{biofilm} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} = r_S \quad (7.8)$$

Comme expliqué ultérieurement, l'expression de la vitesse de consommation du réactif dépend du modèle cinétique choisi. Pour les biofilms, le modèle de Monod est souvent privilégié mais dans certains cas, il peut être simplifié en réaction d'ordre 0 ou d'ordre 1 (Morgenroth, 2008).

7.1.3 Dans le fluide

Dans les garnissages

Les écoulements dans les garnissages ont été observés et caractérisés dans la Partie II. Dans les écoulements sous forme de films ruisselants, côté paroi, la couche limite s'établit rapidement et occupe une grande partie de l'épaisseur du film. On peut voir par exemple sur la Figure 5.18 que l'épaisseur de la couche limite est estimée à la moitié de l'épaisseur du film ruisselant. Donc, en raison des faibles vitesses du film, le régime de transfert est diffusionnel dans le film. Dans le cas d'un film liquide d'une épaisseur de 1 mm, et pour un coefficient de diffusion de l'ordre de $2.10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ (NaCl dissous dans l'eau), la valeur du nombre de Damköhler est de $3,34.10^{-2}$. Cela signifie que la croissance du biofilm n'est pas non plus limitée par l'apport des réactifs à l'interface liquide/biofilm via la diffusion dans le fluide. Dans les garnissages, la croissance du biofilm est donc uniquement limitée par la vitesse de la réaction biologique.

Dans les tubes de condenseur

Pour les écoulements en conduite, le mécanisme de transfert de matière prédominant est déterminé en calculant le nombre de Sherwood (Équation 7.4). Dans les configurations d'écoulements connues, il existe des corrélations du nombre de Sherwood en fonction du nombre de Reynolds et du nombre de Schmidt. Pour les écoulements turbulents, l'analogie de Chilton-Colburn (Chilton et Colburn, 1936)

est utilisée pour obtenir les corrélations sur le transfert de matière par analogie avec les corrélations en transfert thermique. Ainsi, une corrélation du nombre de Sherwood en fonction du nombre de Reynolds et du nombre de Schmidt est obtenue par analogie avec des corrélations du nombre de Nusselt (qui caractérise le transfert thermique convectif par rapport au transfert thermique par conduction), en fonction du nombre de Reynolds et du nombre de Prandtl (qui caractérise la diffusivité de la quantité de mouvement par rapport à la diffusivité thermique).

Dans le cas des tubes de condenseur, les corrélations du transfert thermique peuvent donc être utilisées comme la corrélation de Dittus-Boelter (Équation 7.9) dans le cas d'un tube lisse ou la corrélation de Gnielinski (Équation 7.10) qui tient compte de la rugosité de l'interface (Muller-Steinhagen, 2010).

$$Sh = 0,023 Re^{4/5} Sc^{0,3} \quad (7.9)$$

$$Sh = \frac{(f_D/8)(Re - 1000) Sc}{1 + 12,7(f_D/8)^{1/2}(Sc^{2/3} - 1)} \quad (7.10)$$

avec f_D le facteur de friction de Darcy dont la méthode de calcul dans les cas des conduites rugueuse a été détaillé au Chapitre 3.

Dans le cas du biofilm, la rugosité apparente de l'interface est différente de celle de la paroi du tube. Les travaux de Peyton (1996) ont montré que la rugosité de l'interface est égale à la rugosité de la paroi augmentée de 20% de l'épaisseur du biofilm. Ainsi, dans le cas d'un tube de condenseur de 15 mm de diamètre avec une rugosité de 50 μm et un biofilm de 500 μm d'épaisseur, le biofilm établi aura une rugosité de 150 μm . Le calcul du nombre de Sherwood par la corrélation de Gnielinski dans ces conditions donne une valeur de 1145 ce qui confirme la prédominance du transfert par convection.

Le calcul du nombre de Sherwood permet donc le calcul du nombre de Damköhler en régime convectif comme montré à l'Équation 7.11 :

$$Da_{convectif} = \frac{k_{app} L_c}{K} = \frac{k_{app} L_c^2}{Sh D_{fluide}} \quad (7.11)$$

Dans les conditions définies précédemment d'après les valeurs de la littérature, le nombre de Damköhler dans les tubes de condenseur a une valeur de $6,55 \cdot 10^{-3}$. Le temps caractéristique de la réaction est donc très supérieur au temps caractéristique des réactifs à l'interface biofilm/liquide. Dans les tubes du condenseur, la croissance du biofilm est donc uniquement limitée par la vitesse de la réaction biologique.

Le long d'un tube de condenseur, la température de l'eau varie provoquant une modification des

propriétés physico-chimiques du fluide. En considérant deux valeurs extrêmes de température soit 5°C et 40°C respectivement, la valeur du nombre de Damköhler varie de $1,1 \cdot 10^{-2}$ à $5,7 \cdot 10^{-3}$ respectivement. Le régime reste donc bien le même dans toute la gamme de température.

Dans les conduites en béton

La méthodologie pour la caractérisation du cas des conduites en béton est très similaire à celle du cas des tubes de condenseur. Le calcul du nombre de Damköhler convectif (Équation 7.2) est réalisé avec la corrélation de Gnielinski (Équation 7.10) pour le nombre de Sherwood afin de tenir compte de la rugosité des conduites. Pour les conduites en béton de diamètre de 2,8 m et un biofilm d'épaisseur 1 mm la rugosité du béton considérée à 500 μm subit une majoration de 200 μm et passe à 700 μm . Dans ces conditions, la valeur du nombre de Damköhler est de 1,6. La réaction et le transfert des réactifs ont donc la même échelle de temps. Les deux phénomènes doivent donc être pris en compte dans le modèle de croissance du biofilm.

Dans le bassin froid

Pour le calcul du nombre de Damköhler dans le bassin froid il est nécessaire là aussi de déterminer la valeur du nombre de Sherwood. La modélisation du bassin froid peut être ramenée au cas bien connu dans la littérature d'un canal ouvert (Horn et Lackner, 2014). Il est possible d'utiliser la corrélation définie par Li et Chen (1994) et présentée à l'Équation 7.12 pour exprimer le nombre de Sherwood en fonction des nombres de Reynolds et de Schmidt.

$$Sh = 0,0153 Re^{0,833} Sc^{0,32} \quad (7.12)$$

La variation de vitesse dans le bassin étant très importante, il est plus pertinent dans ce cas de calculer la gamme des nombres de Sherwood pouvant caractériser les écoulements dans le bassin. Par exemple, pour des vitesses comprises entre 0,01 et 0,5 m/s respectivement, la valeur du nombre de Sherwood calculée par la corrélation présentée va de 298 à 7762 respectivement. Ces valeurs confirment la prédominance du transfert par convection sur le transfert par diffusion. Les valeurs des nombres de Damköhler pour la gamme de vitesses considérée sont calculées avec la formule présentée à l'Équation 7.11. Le calcul donne pour les vitesses de 0.01 et 0.5 m/s respectivement, des valeurs de nombres de Damköhler de 140 et 5 respectivement. Le temps caractéristique de la réaction est donc inférieur au temps caractéristique des réactifs à l'interface biofilm/liquide. Bien que la valeur du nombre soit plutôt faible pour la valeur de la vitesse la plus élevée (0,5 m/s) dans le bassin froid, la croissance du biofilm semble limitée par le transfert des réactifs.

Cela est d'autant plus probable que la corrélation de Li et Chen ne tient pas compte de la rugosité des parois, la corrélation est établie à partir des travaux de Dawson et Trass (1972) pour un canal lisse. L'étude paramétrique de la corrélation de Gnielinski utilisée précédemment dans les tubes de condenseur rugueux permet de voir que la rugosité augmente le facteur de friction et donc augmente le nombre de Sherwood (favorise le transfert par convection). Cette augmentation du nombre de Sherwood avec l'augmentation de la rugosité permet donc de conclure à une diminution du nombre de Damköhler en fonction de la rugosité et donc à une augmentation de la vitesse relative du transfert de matière par rapport à la réaction biologique.

Le modèle peut donc ne tenir compte que du transfert de matière dans les zones de faibles vitesses du bassin mais la compétition entre la vitesse de réaction et le transfert doit apparaître pour les zones de plus forte vitesse comme la sortie du bassin par pompage.

En résumé, les valeurs des nombres de Damköhler pertinents calculés dans le biofilm et dans chaque partie du circuit sont présentées dans le Tableau 7.1.

TABLE 7.1 – Résumé des valeurs des nombres de Damköhler pertinents dans le biofilm et dans chaque partie du circuit : $Da_{\text{convectif}}$ pour le bassin froid, les conduites, les tubes de condenseur et Da_{diffusif} à l'intérieur du biofilm et dans les films ruisselant dans les garnissages

| | $Da_{\text{convectif}}$ | Da_{diffusif} |
|----------------------------|---|------------------------|
| Biofilm | | $1,67 \cdot 10^{-2}$ |
| Conduites en béton | 1,6 | |
| Tubes de condenseur | $1,1 \cdot 10^{-2}$ à $5,7 \cdot 10^{-3}$ | |
| Bassin froid | 5 à 140 | |
| Garnissage | | $3,34 \cdot 10^{-2}$ |

7.2 Modélisation du biofilm

Dans la section précédente, l'étude a été menée avec des ordres de grandeur pour appréhender les régimes phénoménologiques régissant la croissance d'un biofilm d'eau naturelle en fonction du type d'écoulement. Afin de généraliser le modèle de croissance du biofilm à l'ensemble des éléments du circuit et donc à l'ensemble des conditions hydrodynamiques, l'approche la plus adaptée est de déterminer une équation cinétique générale pondérée par des termes pour évaluer l'influence de chaque paramètre environnemental (e.g. concentration en substrat, température) et l'influence des régimes

définis précédemment sur la cinétique. Les équations de croissance des biofilms sont généralement supposées d'ordre 0, d'ordre 1 ou utilisent une cinétique de Monod dans le cas d'une forte dépendance à la consommation des réactifs (Morgenroth, 2008).

Dans le cas des différentes parties du circuit, l'étude de systèmes similaires dans la littérature permet de supposer une réaction d'ordre 1 (Melo et Viera, 1999; Souza *et al.*, 2020). En effet, le modèle de Monod (Équation 7.13) peut être simplifié dans le cas où la concentration en réactif limitant S est très petite devant la constante du modèle K_S . Dans ce cas,

$$\mu_{max} \frac{S}{K_S + S} = \mu_{app} S \quad \text{avec} \quad \mu_{app} = \frac{\mu_{max}}{K_S} \quad (7.13)$$

avec μ_{max} le taux de croissance maximal du biofilm en s^{-1} , μ_{app} le taux de croissance apparent du biofilm en $m^3 \cdot kg^{-1} \cdot s^{-1}$, K_S la constante de Monod en kg/m^3 et S la concentration en réactif limitant en kg/m^3 .

7.2.1 Influence du régime bio-physico-chimique : définition des critères d'efficacité

Pour que le modèle choisi soit transposable à toutes les parties du circuit, le terme de croissance doit pouvoir prendre en compte la limitation de la vitesse de réaction biologique par le phénomène le plus lent en fonction des situations présentées précédemment (e.g. limitation réactionnelle, limitation du transfert). L'approche utilisée peut être comparée aux modèles utilisés en catalyse hétérogène : la croissance d'un biofilm peut être assimilée aux étapes de diffusion externe, diffusion interne et de réaction chimique de catalyse hétérogène (Scacchi *et al.*, 2011). Pour tenir compte du phénomène limitant, des critères d'efficacité interne et externe sont définis pour obtenir une équation cinétique correspondante à partir d'un modèle défini dans des conditions connues. Ces critères rendent le modèle cinétique utilisable dans toute la gamme de conditions voulues. Le critère d'efficacité interne quantifie l'influence de la limitation de la diffusion des réactifs sur la cinétique biologique ; de manière similaire, le critère d'efficacité externe quantifie l'influence de la limitation du transfert des réactifs à travers l'interface fluide/biofilm sur la cinétique. La valeur des critères d'efficacité dépend de l'ordre apparent de l'équation cinétique, comme présenté précédemment.

Pour évaluer l'efficacité interne du biofilm, un nouveau nombre adimensionnel appelé critère de Thiele (ou module de Thiele) est défini. Dans ce cas, il correspond à la racine carrée du nombre de Damköhler. La formule d'un critère d'efficacité noté η_{int} est présentée à l'Équation 7.14 :

$$\eta_{int} = \frac{\tanh(\sqrt{Da_{biofilm}})}{\sqrt{Da_{biofilm}}} \quad (7.14)$$

avec $Da_{biofilm}$ le nombre de Damköhler diffusif (Équation 7.3) calculé à l'intérieur du biofilm et $\tanh()$

la fonction tangente hyperbolique. Le facteur d'efficacité est calculé faisant le rapport du taux de réaction local intégré sur la surface sur le taux de réaction surfacique idéal d'où l'apparition de la fonction tangente hyperbolique (Scacchi *et al.*, 2011).

Ainsi, lorsque le transfert par diffusion est très rapide devant la réaction biologique (i.e. la réaction est le phénomène limitant), le nombre de Damköhler aussi est très petit devant 1 ($Da_{biofilm} \ll 1$) et le facteur d'efficacité vaut 1. Lorsque les vitesses des deux phénomènes sont du même ordre de grandeur, $Da_{biofilm} \sim 1$, et le critère d'efficacité prend une valeur comprise entre 0 et 1. Il prend alors une valeur inférieure à 1 pour traduire le gradient de concentration en réactifs dû à la rapidité de leur consommation par rapport à la diffusion au sein du biofilm. Enfin, lorsque le biofilm est épais et que le nombre de Damköhler est très supérieur à 1 ($Da_{biofilm} \gg 1$), le facteur d'efficacité est encore plus petit et tend vers zéro de telle sorte que le facteur d'efficacité multiplié par la quantité totale de biofilm soit constante ($\eta_{int} X = constante$). Cela traduit le cas où la pénétration du biofilm est partielle et où la totalité des réactifs apportés par la diffusion interne est consommée avant d'atteindre la paroi. Seulement une partie du biofilm est donc active et participe à la croissance.

À l'instar du critère d'efficacité interne, un critère d'efficacité externe noté η_{ext} est défini pour quantifier la potentielle limitation de l'apport en réactifs par le transport à travers l'interface entre le biofilm et le fluide. Ce critère d'efficacité fait intervenir le coefficient de transfert de masse et la vitesse apparente de réaction interne. Le critère d'efficacité externe doit donc tenir compte de l'efficacité interne de la réaction. Le critère d'efficacité externe est défini à l'Équation 7.15 :

$$\eta_{ext} = \frac{K}{K + k_{app} L_c} = \frac{1}{1 + Da_{externe}} \quad (7.15)$$

avec K le coefficient de transfert de masse en m/s, k_{app} la constante apparente de croissance du biofilm en s^{-1} , L_c la longueur caractéristique de l'écoulement en m et $Da_{externe}$ le nombre de Damköhler convectif calculé pour le transfert à l'interface fluide/biofilm.

Lorsque le transfert de matière est prépondérant par rapport à la réaction biologique ($Da_{externe} \ll 1$), la réaction est le phénomène limitant et donc $\eta_{ext} \sim 1$. Dans le cas contraire, lorsque $Da_{externe} \gg 1$, la valeur de l'efficacité diminue et tend vers 0, quantifiant la limitation de l'apport des réactifs. Le critère d'efficacité peut alors être approximé comme $\eta_{ext} \sim 1/Da_{externe}$.

7.2.2 Influence des conditions environnementales

Afin de conserver le formalisme cinétique d'ordre 1 apparent, il est possible de considérer l'effet des paramètres d'état comme la température ou la concentration initiale en réactifs comme analogue à de nouveaux facteurs d'influence. Cependant, contrairement aux critères d'efficacité définis pour les

différents régimes de réaction/transfert de matière qui dépendent des nombres adimensionnels, les facteurs d'influence pour la température et la quantité de substrat nécessitent le choix de valeurs de référence pour lesquelles la vitesse apparente de réaction sera définie. La valeur des références dépend donc du plan d'expérience mis en place pour déterminer la vitesse apparente de la réaction.

Pour la température, de nombreuses études ont été présentées dans la littérature pour déterminer la dépendance des vitesses de croissance en fonction de la température. Le développement des microorganismes est généralement limité à une plage donnée de température dans laquelle la production atteint son maximum pour une valeur particulière : en deça, la réaction est limitée par un manque d'énergie d'activation comme pour des cinétiques de réactions chimiques et au-delà, la forte température provoque la mort des micro-organismes. La cinétique des réactions biologiques suit une loi similaire à une loi d'Arrhénius pour les faibles températures (en-deça de la température optimale) et une forte décroissance exponentielle au-delà jusqu'à atteindre une température maximale à partir de laquelle la totalité des microorganismes est inactive et la vitesse de croissance est nulle (Mohr et Krawiec, 1980). La vitesse de réaction des micro-organismes en fonction de la température peut donc être estimée par un modèle d'Eyring (Huang *et al.*, 2011). Le modèle d'Eyring permet de calculer la vitesse de réaction en fonction de la température comme présenté à l'Équation 7.16 :

$$\mu(T) = A T e^{-\frac{Ea}{RT}} [1 - e^{B(T-T_{max})}] \quad (7.16)$$

avec μ le taux de croissance en s^{-1} , T la température en K, T_{max} la température maximale de développement au-delà de laquelle la vitesse de croissance est nulle, Ea l'énergie d'activation en J/mol, R la constante des gaz parfaits en $J.mol^{-1}.K^{-1}$ et A et B les constantes du modèle respectivement en $s^{-1}.K^{-1}$ et en K^{-1} .

La température maximale, l'énergie d'activation ainsi que les constantes A et B dépendent de l'espèce biologique considérée et doivent être calées grâce à des données expérimentales obtenues, par exemple, en laboratoire. Les travaux de Mohr et Krawiec (1980) fournissent des points expérimentaux de vitesses de réaction en fonction de la température pour différentes espèces. Il a donc été possible de déterminer les valeurs et les paramètres du modèle d'Eyring pour un biofilm de *Pseudomonas Aeruginosa* comme présenté dans le Tableau 7.2. Le modèle obtenu correspond aux valeurs expérimentales avec un indicateur R^2 de 0,94.

TABLE 7.2 – Paramètres de l'équation d'Eyring pour une population de *Pseudomonas Aeruginosas* calées à partir de données expérimentales

| Paramètre (Unité) | Valeur |
|---|-------------------|
| A ($\text{h}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$) | $6,02 \cdot 10^5$ |
| Ea (J/mol) | 48 487 |
| B (K^{-1}) | 0,2 |
| T _{max} (K) | 319,5 |
| R² | 0,94 |

La Figure 7.1 présente le modèle proposé en comparaison avec les points expérimentaux issus des travaux de Mohr et Krawiec (1980) pour les paramètres présentés dans le Tableau 7.2.

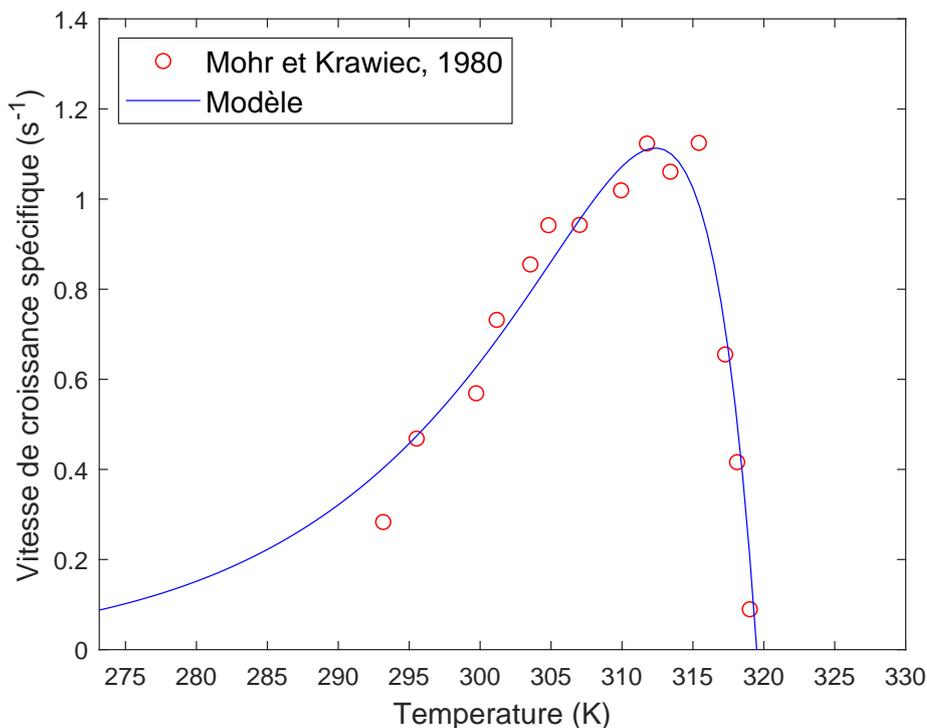


FIGURE 7.1 – Influence de la température sur la vitesse de croissance spécifique - Comparaison du modèle d'Eyring proposé avec les données expérimentales de Mohr et Krawiec (1980)

Le définition du modèle pour la prédiction du taux de croissance permet donc de définir un critère d'efficacité de la cinétique de croissance en fonction de la température par rapport à la température de référence pour laquelle la constante cinétique a été calée. Ainsi le facteur d'influence en température noté $f_T(T)$ se définit tel que présenté à l'Équation 7.17 :

$$f_T(T) = \frac{\mu(T)}{\mu(T_{ref})} \quad (7.17)$$

avec μ le taux de croissance du biofilm en s^{-1} calculé par le modèle d'Eyring présenté à l'Équation 7.16, T la température en K et T_{ref} la température de référence en K.

De même que la température, la quantité initiale de réactifs présente dans le fluide a une influence du premier ordre sur la croissance du biofilm. En effet, c'est la concentration initiale en substrat dans le système qui va influencer sur l'efficacité de la réaction biologique. De la même manière, l'équation de croissance du biofilm ne dépend pas directement de la quantité de substrat disponible mais elle doit prendre en compte un facteur d'influence pour la quantité de substrat présente au moment de la modélisation par rapport à la quantité de substrat de référence présente utilisée pour caler le modèle. La réaction étant supposée du premier ordre apparent, le facteur d'influence en fonction de la concentration de substrat notée $f_S(S)$ peut s'écrire comme le rapport des concentrations (Équation 7.18).

$$f_S(S) = \frac{\mu_{app} S}{\mu_{app} S_{ref}} = \frac{S}{S_{ref}} \quad (7.18)$$

avec μ_{app} le taux de croissance apparent du biofilm en $m^3.kg^{-1}.s^{-1}$, S la concentration en réactif en kg/m^3 et S_{ref} la concentration en substrat de référence en kg/m^3 .

7.2.3 Influence de l'hydrodynamique

L'hydrodynamique dans le fluide à l'extérieur du biofilm apparaît déjà très clairement dans le terme de production en intervenant dans la compétition des phénomènes à l'interface fluide/biofilm. En effet, à travers la caractérisation des régimes d'écoulement et le calcul des nombres adimensionnels comme le nombre de Reynolds, le nombre de Schmidt ou le nombre de Sherwood, l'hydrodynamique influe sur le terme de production du biofilm à travers le critère d'efficacité externe défini précédemment. Cependant, le rôle de l'écoulement dans le transfert externe et l'apport des réactifs ne suffit pas à justifier l'équilibre des biofilms. En effet, des études ont montré que le contexte hydrodynamique agissait sur le biofilm en imposant aussi une contrainte à sa surface (Wanner *et al.*, 2006; Morgenroth, 2008; Wang et Zhang, 2010; Horn et Lackner, 2014). Deux paramètres de l'écoulement sont généralement étudiés pour caractériser l'influence de l'écoulement sur le détachement des biofilms : la vitesse de l'écoulement (Pinheiro *et al.*, 1988; Nebot *et al.*, 2007; Trueba *et al.*, 2015; Souza *et al.*, 2020) ou la contrainte de cisaillement à la surface du biofilm (Peyton, 1996; Duddu *et al.*, 2009; Perrin *et al.*, 2018).

Les modèles se basant sur la vitesse du fluide ne sont pas généralisables contrairement aux modèles en contrainte de cisaillement. En effet, pour une même vitesse de fluide, la contrainte en paroi peut

être différente en fonction de la géométrie ou encore de la nature de matériau et de sa rugosité. La caractérisation des écoulements dans les différentes parties du circuit présentée dans la Partie II, et particulièrement le calcul des contraintes de cisaillement en paroi, montre bien qu'une même vitesse peut conduire à des contraintes de cisaillement différentes (e.g. conduites en béton et tubes de condenseur sous certaines conditions) et que des contraintes de cisaillement de même ordre de grandeur peuvent être obtenus avec des conditions hydrodynamiques très variées (e.g. tube de condenseur et écoulements dans les garnissages feuille). Afin de rendre le modèle transposable, la contrainte de cisaillement est donc le paramètre le plus pertinent puisqu'il traduit réellement la contrainte subie par la surface du biofilm. De plus, les études de la littérature ont montré que la vitesse de détachement pour des conditions hydrodynamiques données dépendait de la quantité de biofilm formé. Le flux de détachement du biofilm peut donc être modélisé comme un terme dépendant de la contrainte de cisaillement multiplié par la masse de biofilm :

$$J_R = D_\tau(\tau) X \quad (7.19)$$

avec J_R le terme de perte du biofilm en $\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$, D la vitesse de détachement du biofilm dépendante de la contrainte de cisaillement en s^{-1} , τ la contrainte de cisaillement en Pa et X la masse de biofilm en kg/m^2 .

7.2.4 Modèle de biofilm proposé dans ce travail

En étudiant l'influence des différents régimes prépondérants sur la cinétique biologique du biofilm (e.g. phénomènes de transport, cinétique de réaction) ainsi que l'influence des conditions environnementales, comme la quantité de substrat ou la température, il est donc possible de construire des critères d'efficacité permettant de tenir compte de tous ces paramètres de premier ordre dans la croissance du biofilm. L'expression du terme de production du biofilm J_P en fonction des différents critères d'efficacité est présentée à l'Équation 7.20 :

$$J_P = J_{Pmax} f_S(S) f_T(T) \eta_{int} \eta_{ext} \quad (7.20)$$

avec J_P le terme de production en $\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$, J_{Pmax} la vitesse maximale de croissance du biofilm en $\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$, $f_S(S)$ le facteur d'influence dû à la concentration du substrat dans le fluide, $f_T(T)$ le facteur d'influence liée à la température, η_{int} l'efficacité interne du biofilm traduisant la compétition entre la réaction et la diffusion interne et η_{ext} l'efficacité externe représentant la compétition entre le transfert des réactifs à l'interface et la réaction. La vitesse maximale de croissance du biofilm J_{Pmax} peut donc être déterminée en utilisant des données expérimentales dont les conditions opératoires sont pleinement

connues ou contrôlées (e.g. température, concentration des espèces dans le fluide, hydrodynamique). Ce sont ces conditions opératoires qui correspondent aux valeurs de la concentration de substrat de référence (S_{ref}) et la température de référence (T_{ref}).

Les expressions des différents termes d'efficacité sont résumées dans le tableau 7.3 :

TABLE 7.3 – Définition et expression des critères d'efficacité et des facteurs d'influence intervenant dans le terme de production du biofilm J_P

| Critère d'efficacité | Phénomènes quantifiés | Expression | N° Équation |
|---|---|---|-------------|
| Efficacité interne du biofilm | Transfert diffusif interne vs Réaction biologique | $\eta_{int} = \frac{\tanh(\sqrt{Da_{biofilm}})}{\sqrt{Da_{biofilm}}}$ | 7.14 |
| Efficacité externe du biofilm | Transfert externe à l'interface vs Réaction biologique | $\eta_{ext} = \frac{1}{1+Da_{externe}}$ | 7.15 |
| Facteurs d'influence | Grandeurs étudiées | Expression | N° Équation |
| Influence de la température | Température d'étude vs Température de référence | $f_T(T) = \frac{\mu(T)}{\mu(T_{ref})}$ | 7.17 |
| Influence de la quantité de substrat | Concentration en substrat d'étude vs Concentration en substrat de référence | $f_S(S) = \frac{S}{S_{ref}}$ | 7.18 |

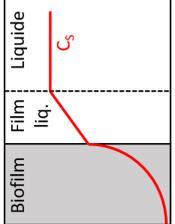
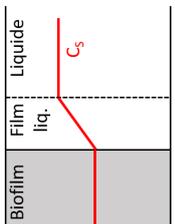
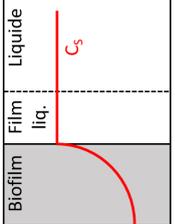
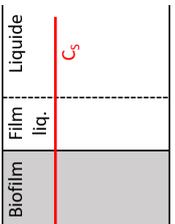
La vitesse de réaction est établie comme un bilan de matière sur le biofilm : la variation de la masse de biofilm dans le temps dX/dt est égale à la différence du terme de production de biofilm J_P et du terme de perte du biofilm J_R définis précédemment. En rassemblant les deux termes de production et de perte, le modèle de développement du biofilm tenant compte des conditions hydrodynamiques et des conditions opératoires est donc le modèle défini à l'Équation 7.21.

$$\frac{dX}{dt} = J_{Pmax} f_S(S) f_T(T) \eta_{int} \eta_{ext} - D_\tau(\tau) X \quad (7.21)$$

En fonction des régimes des phénomènes, cette équation peut être simplifiée et certains termes peuvent être négligés. Le Tableau 7.4 présente les quatre cas particuliers et l'équation simplifiée qui en résulte dans le cas d'une température égale à la température de référence et d'une quantité de substrat

égale à la quantité de substrat de référence ($f_T(T) = f_S(S) = 1$).

TABLE 7.4 – Identification des régimes prédominants de transfert, simplification de l'équation du modèle de biofilm en découplant et illustration de l'évolution du profil de concentration du réactif limitant C_S (hypothèse $f_T(T) = f_S(S) = 1$)

| | Limitation diffusion interne | Limitation réactionnelle |
|-------------------------------------|---|---|
| | $Da_{\text{biofilm}} \gg 1$ $\eta_{\text{int}} \sim 1/\sqrt{Da_{\text{biofilm}}}$ | $Da_{\text{biofilm}} \ll 1$ $\eta_{\text{int}} \sim 1$ |
| Limitation transfert externe | <p>Limitation par le transfert interne ET externe</p> <p>$Da_{\text{externe}} \gg 1$ $\eta_{\text{ext}} \sim 1/Da_{\text{externe}}$</p> <p>$J_{Pmax} \frac{1}{\sqrt{Da_{\text{biofilm}}}} \frac{1}{Da_{\text{externe}}} - D_T(\tau) X$</p> <p>$\frac{dX}{dt} = \frac{1}{\sqrt{Da_{\text{biofilm}}}} \frac{1}{Da_{\text{externe}}} - D_T(\tau) X$</p>  | <p>Limitation par le transfert externe</p> <p>$\frac{dX}{dt} = J_{Pmax} \frac{1}{Da_{\text{externe}}} - D_T(\tau) X$</p>  |
| Limitation réactionnelle | <p>Limitation par le transfert interne</p> <p>$Da_{\text{externe}} \ll 1$ $\eta_{\text{ext}} \sim 1$</p> <p>$\frac{dX}{dt} = J_{Pmax} \frac{1}{\sqrt{Da_{\text{biofilm}}}} - D_T(\tau) X$</p>  | <p>Régime réactionnel</p> <p>$\frac{dX}{dt} = J_{Pmax} - D_T(\tau) X$</p>  |

7.3 Détermination des paramètres du modèle

Une fois la forme du modèle de développement du biofilm identifiée, il est nécessaire de caler les paramètres restants qui dépendent de la nature du biofilm considéré. De nombreuses études de la littérature utilisent des campagnes expérimentales menées en laboratoire pour caler la vitesse maximale de croissance J_{Pmax} (par exemple Pinheiro *et al.* (1988); Souza *et al.* (2020)). Cependant, un tel plan d'expérience en laboratoire n'est pas réellement représentatif de l'écologie réelle d'un biofilm industriel et nécessite de supposer la prédominance d'une espèce de microorganismes particulière. De plus, l'étude de la croissance du biofilm en laboratoire ne tient pas compte des éventuelles inclusions de matières supplémentaires puisque l'eau utilisée est généralement loin de la composition d'une eau brute réelle contenant des microorganismes en suspension ainsi que des matières en suspension. Le biofilm formé n'est donc pas réellement pur et le terme de production doit tenir compte des inclusions non organiques. Un calage des paramètres à partir de différentes données disponibles dans la littérature sur des biofilms, formés dans des installations industrielles semblables aux circuits de refroidissement étudiés, permettra donc d'être représentatif d'un biofilm réel.

Afin de déterminer l'expression du critère D en fonction de la contrainte de cisaillement (Équation 7.19), l'objectif est donc d'utiliser les données disponibles dans la littérature proposant des caractéristiques de biofilms dans différentes conditions hydrodynamiques. Dans le même temps, les conditions étant totalement connues, les critères d'efficacité (η_{int} et η_{ext}) et les facteurs d'influence ($f_S(S)$ et $f_T(T)$) seront connus et il sera possible d'utiliser les données pour déterminer la vitesse maximale de croissance pour le biofilm réel (J_{Pmax}).

7.3.1 Données disponibles

L'objectif étant de représenter le plus fidèlement possible un biofilm réel susceptible de se former dans les circuits de refroidissement utilisant de l'eau brute naturelle, plusieurs ensembles de données ont été utilisés afin d'obtenir un modèle transposable. En effet, les études portant sur des parties de circuits de refroidissement, et particulièrement les tubes de condenseur, ont montré que chaque auteur proposait un modèle unique et calé avec ses propres données afin de correspondre au plus près à son cas d'étude. Cependant, ces modèles n'étaient que très peu transposables aux autres cas, car les constantes et les paramètres étaient trop spécifiques.

Pour cela, cinq études provenant de publications différentes ont donc été sélectionnées pour estimer les paramètres du modèle de biofilm présenté précédemment : Nebot *et al.* (2006, 2007); Lopez-Galindo *et al.* (2012); Trueba *et al.* (2015); Garcia et Trueba (2018). Les résultats de ces études sont issus principalement de dispositifs expérimentaux présentant des tubes de condenseurs refroidis avec de

l'eau brute de mer. Chaque ensemble de données comporte un ou plusieurs cas d'étude de conditions hydrodynamiques différentes montant à 14 le nombre de cas différents.

Pour l'ensemble de ces 14 ensembles de données, les informations ont été regroupées et homogénéisées afin de pouvoir calculer la contrainte de cisaillement. Ces études proposent deux indicateurs différents concernant la croissance du biofilm en fonction du temps : le suivi de caractéristiques thermiques de l'installation (la résistance au transfert thermique dans les tubes de condenseur) ou le suivi des caractéristiques du biofilm directement (masse ou épaisseur du biofilm). L'épaisseur de biofilm et la masse de biofilm par unité de surface sont reliées par la masse volumique du biofilm. Les études des biofilms formés ont montré qu'ils sont composés à plus de 80 % de fluide (Garcia et Trueba, 2018). La masse volumique du biofilm est donc considérée égale à la masse volumique du fluide de l'étude. La résistance thermique est directement reliée à l'épaisseur du biofilm par la conductivité thermique du biofilm comme montré à l'Équation 7.22.

$$\delta = \Delta R_f \lambda_{biofilm} \quad (7.22)$$

avec δ l'épaisseur du biofilm en m, ΔR_f l'augmentation de la résistance du transfert thermique en $m^2.K^{-1}.W^{-1}$ et $\lambda_{biofilm}$ la conductivité thermique du biofilm en $W.m^{-1}.K^{-1}$.

Les études proposant des mesures de résistance du transfert thermique proposent aussi une évaluation de la conductivité thermique du biofilm. La conductivité thermique du biofilm dépend aussi des conditions hydrodynamiques. Les données disponibles dans les travaux de Trueba *et al.* (2015) permettent d'établir une relation linéaire entre la conductivité thermique et la vitesse du fluide permettant d'extrapoler les valeurs de la conductivité thermique.

$$\lambda_{biofilm} = 1 - \frac{0,2}{3}u \quad \text{pour } 0 < u < 3 \text{ m/s} \quad (7.23)$$

Le calcul de la contrainte de cisaillement final est réalisé d'après la méthodologie explicitée au Chapitre 3 en calculant le facteur de friction de Darcy. Cependant, le calcul de la contrainte de cisaillement doit tenir compte de la rugosité du biofilm et non de la rugosité du tube. La valeur de la rugosité du biofilm est calculée en utilisant la relation proposée par Peyton (1996) qui propose une augmentation de la rugosité de la surface hôte (paroi du tube) augmentée de 20 % de l'épaisseur du biofilm. Toutes ces relations permettent d'obtenir pour les différents ensembles de données, une valeur de la masse finale de biofilm formée dans les tubes de condenseur. Ces données sont présentées dans le Tableau 7.5.

TABLE 7.5 – Paramètres et données disponibles dans la littérature sur la croissance des biofilms dans les tubes de condenseur

| Publication | N° Cas | Vitesse du fluide (m/s) | Rugosité du tube (μm) | Masse finale de biofilm (kg/m^2) | Contrainte de cisaillement (Pa) |
|------------------------------------|--------|-------------------------|------------------------------------|--|---------------------------------|
| Garcia et Trueba (2018) | 1 | 0,93 | 0,8 | 0,40 | 4,43 |
| | 2 | 1,39 | 0,8 | 0,37 | 9,36 |
| | 3 | 1,95 | 0,8 | 0,34 | 15,9 |
| | 4 | 2,78 | 0,8 | 0,27 | 32,6 |
| Trueba <i>et al.</i> (2015) | 5 | 1,0 | 0,4 | 0,42 | 5,2 |
| | 6 | 1,2 | 0,4 | 0,31 | 6,8 |
| | 7 | 1,6 | 0,4 | 0,24 | 11,2 |
| | 8 | 3,0 | 0,4 | 0,09 | 31,0 |
| Lopez-Galindo <i>et al.</i> (2012) | 9 | 2,0 | 1,0 | 0,28 | 16,5 |
| Nebot <i>et al.</i> (2007) | 10 | 1,55 | 1,0 | 0,31 | 10,4 |
| | 11 | 1,85 | 1,0 | 0,31 | 14,6 |
| | 12 | 2,44 | 1,0 | 0,24 | 23,5 |
| | 13 | 3,05 | 1,0 | 0,13 | 31,9 |
| Nebot <i>et al.</i> (2006) | 14 | 2,0 | 1,0 | 0,27 | 16,4 |

7.3.2 Détermination des paramètres de l'équation

L'étude des différents ensembles de données permet dans un premier temps de valider la forme du modèle. Toutes les courbes qui représentent la masse de biofilm en fonction du temps montrent une vitesse de croissance qui diminue en fonction du temps jusqu'à atteindre une tendance asymptotique correspondant à la masse du biofilm à l'équilibre. Il est aussi possible d'observer un temps de retard pour le développement du biofilm correspondant au temps d'induction nécessaire à la formation des premiers nucléis qui amorcent la réaction biologique.

À partir des données des différentes publications, il est possible d'analyser la relation entre la quantité de biofilm à l'équilibre dans les tubes de condenseur et la contrainte de cisaillement. Même si les ensembles de données de la littérature travaillent avec la vitesse du fluide, le modèle construit est basé sur la contrainte de cisaillement calculée à partir de la vitesse du fluide et des données géométriques. La Figure 7.2 présente la masse finale de biofilm finale obtenue par rapport à la contrainte de cisaillement.

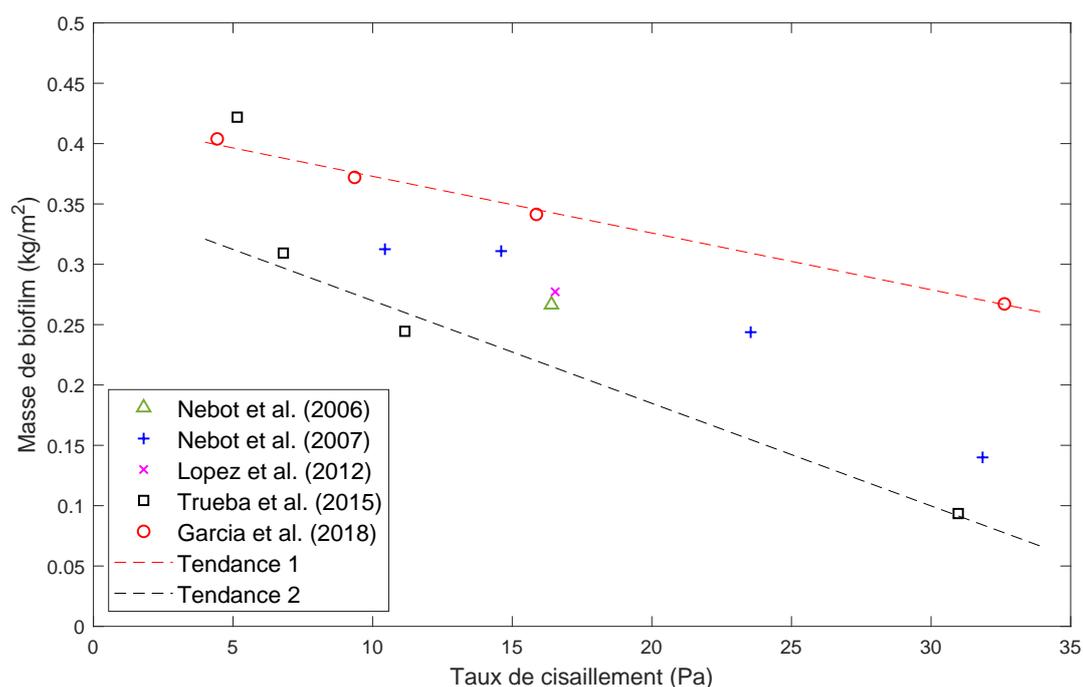


FIGURE 7.2 – Représentation de la masse finale de biofilm en fonction de la contrainte de cisaillement pour les différents cas de la littérature

La première observation est que lorsque la contrainte de cisaillement augmente, la masse finale du biofilm déposé diminue quels que soient les ensembles de données considérés. En effet, pour les trois publications ayant fait varier les conditions hydrodynamiques tout paramètre constant par ailleurs (Nebot *et al.*, 2006; Trueba *et al.*, 2015; Garcia et Trueba, 2018), la variation de la contrainte de cisaillement conduit à une diminution de la quantité de biofilm formé. En observant l'ensemble des points, une tendance linéaire se dégage. De manière plus précise, il est possible d'encadrer l'ensemble des points par deux courbes de tendance affines dont les paramètres sont présentés dans le Tableau 7.6. Les courbes de tendances sont tracées graphiquement en utilisant les ensembles de données extrêmes qui encadrent l'ensemble des points.

De même, il est possible de tracer le temps de demi-croissance du biofilm en fonction de la contrainte de cisaillement. Les courbes sont présentées à la Figure 7.3.

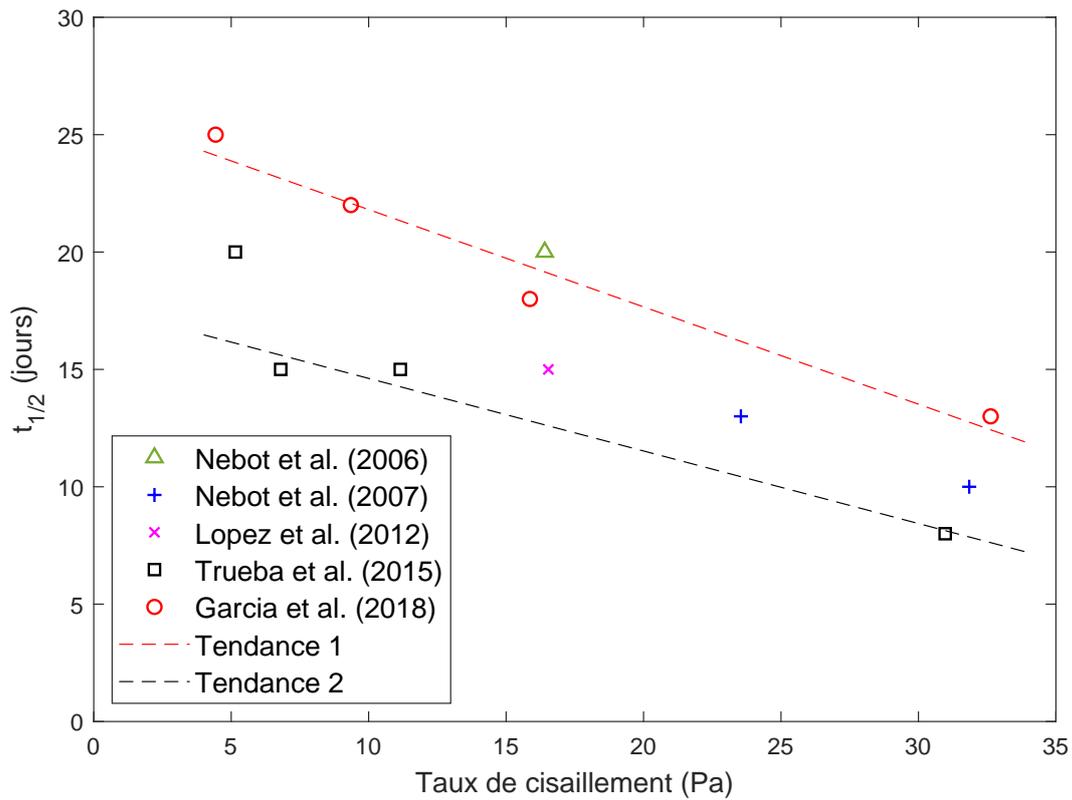


FIGURE 7.3 – Représentation du temps de demi-croissance du biofilm en fonction de la contrainte de cisaillement pour les différents cas de la littérature

De la même manière, le graphique montre que le temps de demi-croissance diminue avec l'augmentation de la contrainte de cisaillement. Deux tendances sont aussi identifiées pour encadrer les valeurs de demi-temps de croissance de la masse de biofilm. Les paramètres des courbes de tendance sont présentés dans le Tableau 7.6.

TABLE 7.6 – Paramètres des courbes de tendance de dépendance de la masse finale de biofilm (X_{max}) et du temps de demi-croissance ($t_{1/2}$) en fonction de la contrainte de cisaillement (τ)

$$X_{max} = a\tau + b \quad t_{1/2} = c\tau + d$$

| Profil | Paramètre | Valeur | Paramètre | Valeur |
|-------------------|-----------|---------|-----------|--------|
| Tendance 1 | a_1 | -0,0047 | c_1 | -0,415 |
| | b_1 | 0,420 | d_1 | 25,9 |
| Tendance 2 | a_2 | -0,0085 | c_2 | -0,309 |
| | b_2 | 0,355 | d_2 | 17,7 |

Les deux courbes de tendance donnent les valeurs limites des paramètres lorsque le biofilm atteint l'équilibre (lorsque le temps tend vers infini). À l'aide de ces conditions limites, il est donc possible de

déterminer les paramètres de l'Équation 7.21 en l'adaptant aux cas des études disponibles. Ainsi, les calculs des facteurs d'efficacité interne et externe présentés dans le Tableau 7.7 pour les différents cas donnent des valeurs égales à 1. Cela confirme les calculs d'ordre de grandeur menés précédemment concluant que dans les tubes de condenseur, les phénomènes de transfert interne et externe ne limitaient pas la réaction. Le régime est donc purement réactionnel et l'équation du modèle peut donc être simplifiée comme présenté dans le Tableau 7.4.

TABLE 7.7 – Paramètres et données disponibles dans la littérature sur la croissance des biofilms dans les tubes de condenseur

| Publication | N° Cas | Da_{biofilm} | η_{int} | Da_{externe} | η_{ext} |
|---------------------------------------|--------|-----------------------|---------------------|-----------------------|---------------------|
| Garcia et Trueba (2018) | 1 | $5,18.10^{-3}$ | 1 | $1,03.10^{-2}$ | 1 |
| | 2 | $4,39.10^{-3}$ | 1 | $6,98.10^{-3}$ | 1 |
| | 3 | $3,70.10^{-3}$ | 1 | $5,33.10^{-3}$ | 1 |
| | 4 | $2,27.10^{-3}$ | 1 | $3,67.10^{-3}$ | 1 |
| Trueba <i>et al.</i> (2015) | 5 | $5,65.10^{-3}$ | 1 | $9,58.10^{-3}$ | 1 |
| | 6 | $3,04.10^{-3}$ | 1 | $8,04.10^{-3}$ | 1 |
| | 7 | $1,90.10^{-3}$ | 1 | $6,12.10^{-3}$ | 1 |
| | 8 | $2,77.10^{-4}$ | 1 | $3,43.10^{-4}$ | 1 |
| Lopez-Galindo <i>et al.</i> (2012) | 9 | $2,44.10^{-3}$ | 1 | $6,05.10^{-3}$ | 1 |
| Nebot <i>et al.</i> (2007) | 10 | $3,10.10^{-3}$ | 1 | $7,65.10^{-3}$ | 1 |
| | 11 | $3,07.10^{-3}$ | 1 | $6,05.10^{-3}$ | 1 |
| | 12 | $1,89.10^{-3}$ | 1 | $5,04.10^{-3}$ | 1 |
| | 13 | $6,22.10^{-4}$ | 1 | $4,14.10^{-4}$ | 1 |
| Nebot <i>et al.</i> (2006) | 14 | $2,25.10^{-3}$ | 1 | $6,05.10^{-3}$ | 1 |

De plus, les constantes servant aussi choix pour des paramètres de référence en concentration de substrat et en température ainsi que pour les facteurs d'influence $f_S(S)$ et $f_T(T)$ sont égaux à 1. Ceci permet de choisir les valeurs de référence. Concernant la température, elle varie le long du tube. Pour l'ensemble des dispositifs expérimentaux, les tubes ont une longueur comprise entre 3,1 et 3,2 m et la température côté calandre de l'échangeur est fixée entre 35 et 36°C. La différence de température de l'eau brute de refroidissement entre l'entrée et la sortie, qui dépend du débit d'eau à l'intérieur des tubes, est estimée entre 5 °C pour une vitesse de fluide de 1 m/s et 3°C pour 3 m/s (Trueba *et al.*, 2015). La température d'entrée de l'eau de refroidissement dans le condenseur dépend des conditions extérieures puisque l'eau est directement prélevée dans le milieu naturel. Les durées des campagnes expérimentales étant comprises entre 60 et 80 jours, les conditions de températures pouvaient varier entre 15 et 19 °C. L'eau était prélevée dans la mer pour tous les cas, la variation de température sur les cycles jour/nuit

est négligeable. En considérant un profil de température linéaire le long du tube, la température de référence est de 18,5 °C. Concernant la concentration en substrat, l'utilisation d'eau brute naturelle de mer rend difficile sa caractérisation exacte. Dans l'objectif d'être représentatif de l'ensemble du substrat, le paramètre choisi est la Demande Biologique en Oxygène à 5 jours (DBO5) qui représente la quantité de matière biologique présente dans une certaine quantité d'eau. La DBO5 est calculée en mesurant la quantité d'oxygène nécessaire pour oxyder les matières organiques par des bactéries de référence pendant 5 jours. Par la suite, le sigle sera abrégé en DBO. Des relevés réalisés dans l'Océan Atlantique pour de l'eau salée proche des côtes donnent une DBO moyenne au cours de l'année de 1,1 mg/L. Donc $S_{ref} = 1,1 \text{ mg/L}$ et $T_{ref} = 291,65 \text{ K}$.

Afin de représenter le temps d'incubation t_{lim} , le modèle doit incorporer un temps de retard. L'équation de croissance du biofilm devient donc :

$$\begin{aligned} \text{pour } t < t_{lim} : \quad & \frac{dX}{dt} = 0 \\ \text{pour } t \geq t_{lim} : \quad & \frac{dX}{dt} = J_{Pmax} - D_{\tau}(\tau) X \end{aligned} \quad (7.24)$$

Cette équation possède une solution analytique exprimant la quantité de biofilm en fonction du temps. La solution analytique ne dépend donc pas du temps mais du temps à partir de la fin de la période d'incubation t_{lim} :

$$\begin{aligned} \text{pour } t < t_{lim} : \quad & X(t) = 0 \\ \text{pour } t \geq t_{lim} : \quad & X(t) = \frac{J_{Pmax}}{D_{\tau}(\tau)} + C_1 e^{-D_{\tau}(\tau)(t-t_{lim})} \end{aligned} \quad (7.25)$$

En utilisant la condition de quantité de biofilm nulle à $t = t_{lim}$, il est possible d'évaluer l'expression de la constante C_1 et grâce aux relations obtenues précédemment liant la quantité de biofilm maximale (en $t \rightarrow \infty$) et les contraintes de cisaillement, il est possible d'obtenir :

$$C_1 = -\frac{J_{Pmax}}{D_{\tau}(\tau)} \quad (7.26)$$

$$D_{\tau}(\tau) = \frac{1}{a\tau + b} \quad (7.27)$$

Les valeurs des paramètres J_{Pmax} , a et b peuvent être calés grâce aux données du Tableau 7.6 et aux points expérimentaux des différents ensembles de données. Après résolution de l'équation différentielle, les valeurs obtenues pour les paramètres sont données dans le Tableau 7.8.

TABLE 7.8 – Paramètres du modèle de croissance du biofilm pour les différents cas de calage et enveloppe des tendances des modèles

$$\frac{dX}{dt} = J_{Pmax} - \frac{1}{a\tau + b} X$$

| | J_{Pmax} (kg.m ⁻² .s ⁻¹) | a | b |
|-------------------|---|----------|----------|
| Équation | 0,019 | -0,498 | 24,9 |
| Tendance 1 | 0,020 | -0,551 | 29,8 |
| Tendance 2 | 0,018 | -0,449 | 20,1 |

La masse de biofilm prédite par le modèle superposé avec les données expérimentales des différents cas tests sont présentés sur les Figures 7.4 à 7.9. La courbe en trait plein représente le modèle proposé avec l'ensemble de paramètres défini pour l'ensemble des cas. La zone colorée représente les valeurs comprises entre les deux tendances associées au modèle détaillé précédemment. Les cas 10 et 11 ne sont pas considérés pour la validation du modèle puisque pour ces deux ensembles de données les points des courbes sont identiques dans la publication (Nebot *et al.*, 2007). Ils ne sont donc pas utilisables pour caler les valeurs des paramètres.

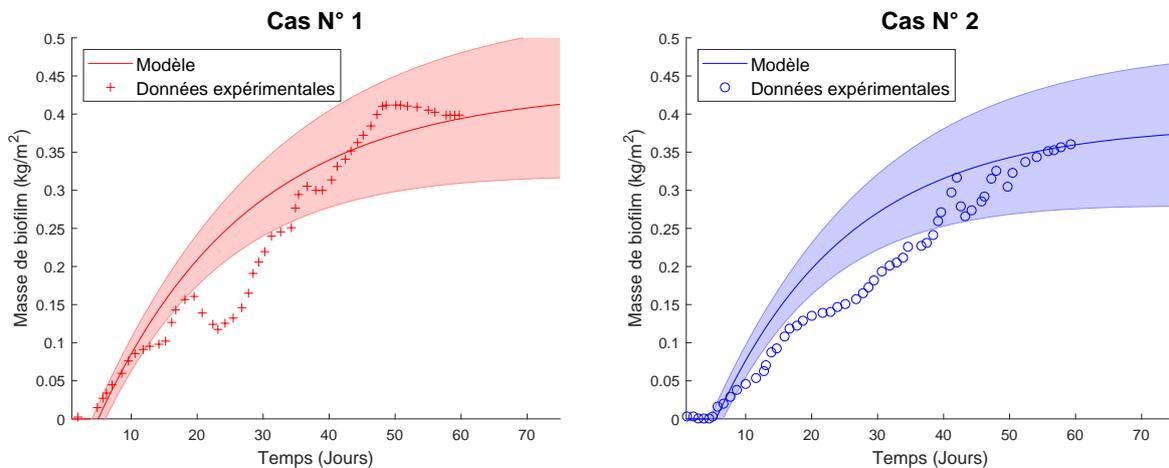


FIGURE 7.4 – Modèle et tendances du modèle proposés pour prédire la masse de biofilm en fonction du temps et comparaison avec les données expérimentales pour les cas N° 1 et 2 (Garcia et Trueba, 2018)

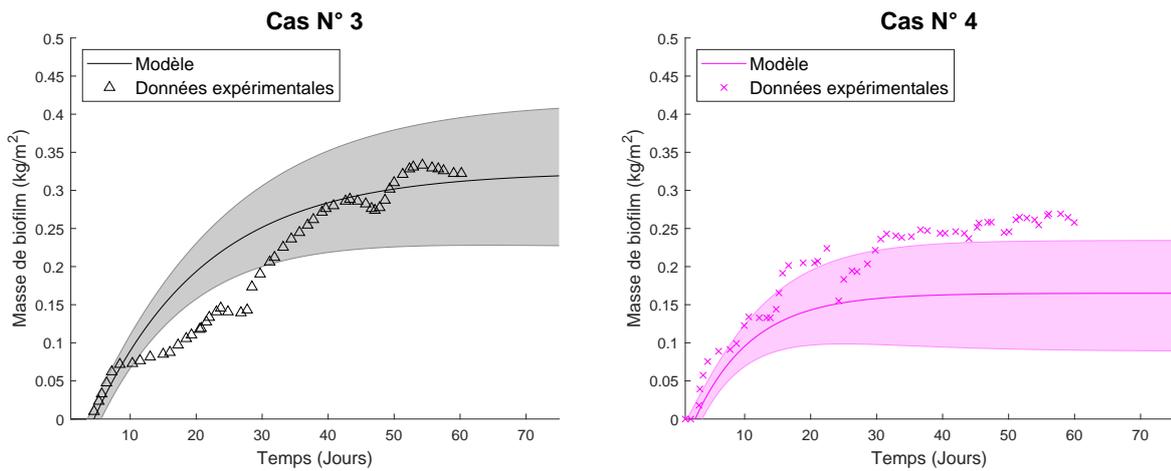


FIGURE 7.5 – Modèle et tendances du modèle proposés pour prédire la masse de biofilm en fonction du temps et comparaison avec les données expérimentales pour les cas N° 3 et 4 (Garcia et Trueba, 2018)

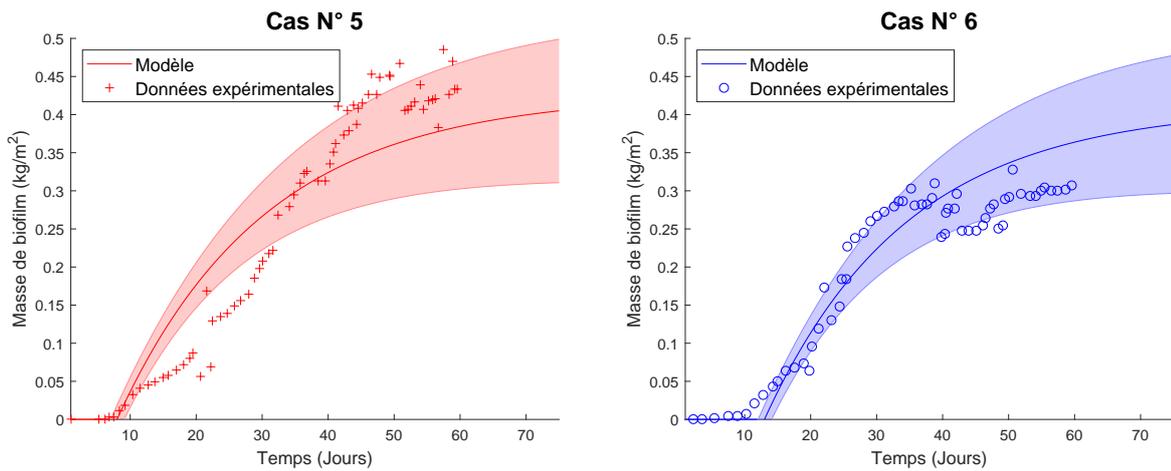


FIGURE 7.6 – Modèle et tendances du modèle proposés pour prédire la masse de biofilm en fonction du temps et comparaison avec les données expérimentales pour les cas N° 5 et 6 (Trueba *et al.*, 2015)

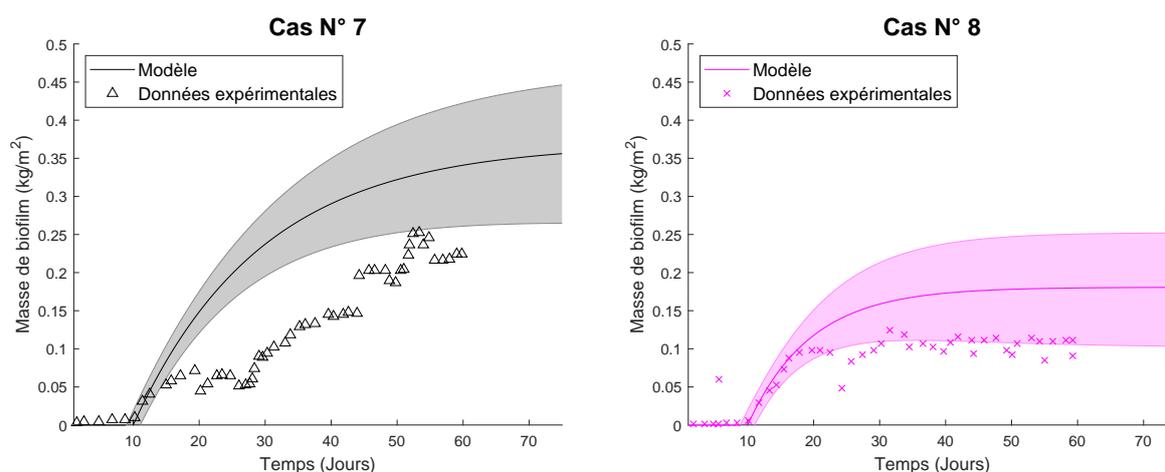


FIGURE 7.7 – Modèle et tendances du modèle proposés pour prédire la masse de biofilm en fonction du temps et comparaison avec les données expérimentales pour les cas N° 7 et 8 (Trueba *et al.*, 2015)

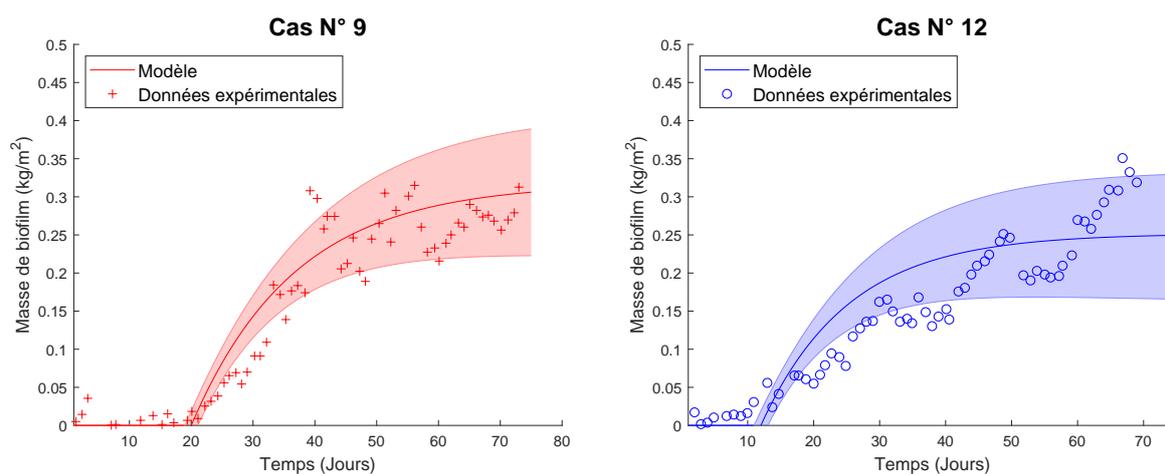


FIGURE 7.8 – Modèle et tendances du modèle proposés pour prédire la masse de biofilm en fonction du temps et comparaison avec les données expérimentales pour les cas N° 9 et 12 (Lopez-Galindo *et al.*, 2012; Nebot *et al.*, 2007)

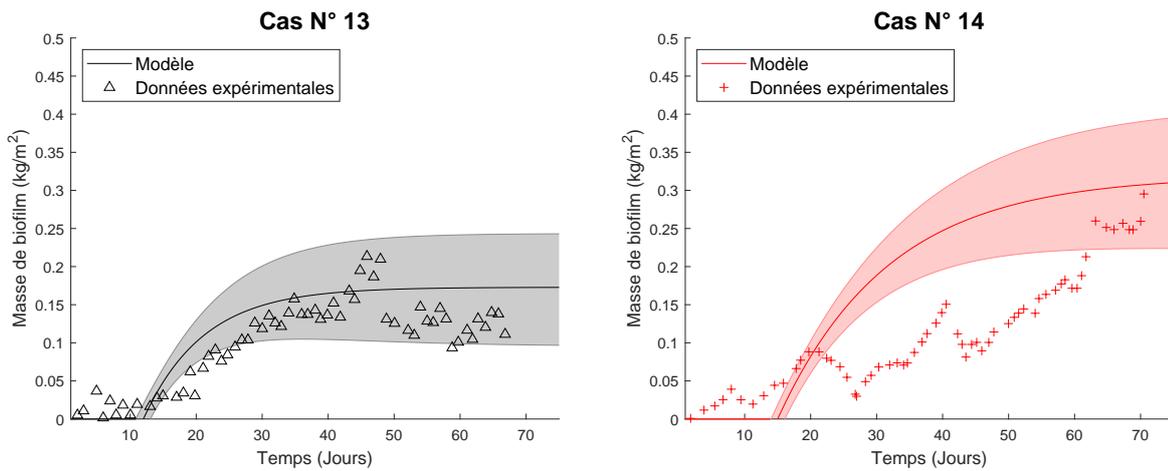


FIGURE 7.9 – Modèle proposé et comparaison avec les données expérimentales pour les cas N° 13 et 14 (Nebot *et al.*, 2007, 2006)

Le modèle proposé prédit correctement dans la plupart des cas la quantité de biofilm finale en tenant compte de la gamme comprise entre les deux tendances qui encadrent la valeur du modèle. Cependant, pour quelques exemples, le modèle construit avec les paramètres communs à toutes les approches échoue à prédire l'influence de la contrainte de cisaillement sur la croissance et la quantité finale comme pour le cas N°4 ou N°7 (Figure 7.5 (droite) et 7.7 (gauche)).

La formulation du modèle avec les paramètres identifiés pour la formation d'un biofilm générique d'eau naturelle dans les tubes de condenseur est donc :

$$\begin{aligned}
 \text{pour } t < t_{lim} : & \quad \frac{dX}{dt} = 0 \\
 \text{pour } t \geq t_{lim} : & \quad \frac{dX}{dt} = J_{Pmax} f_S(S) f_T(T) \eta_{int} \eta_{ext} - \frac{1}{-0,498\tau + 24,9} X
 \end{aligned} \tag{7.28}$$

7.3.3 Étude de sensibilité des différents paramètres

La forme du modèle étant établie, l'influence des différents termes et des différents paramètres peut être étudiée. L'influence de la température sur la vitesse de croissance du biofilm suit la forme de la courbe d'Eyring : la Figure 7.10 (gauche) présente la masse finale de biofilm en fonction de la température pour des conditions opératoires et des paramètres de simulations tous inchangés par ailleurs. Dans les mêmes conditions opératoires fixées et à température constante, l'influence de la concentration de substrat sur la masse finale de biofilm obtenue est linéaire comme le montre la Figure 7.10 (droite). Sur les deux courbes, le régime de référence est mentionné comme repère (point en noir). Le régime de référence correspond aux valeurs de température et de concentration de substrat de référence ($T_{ref} = 291,65 K$ et $S_{ref} = 1,1 mg/L$), à une contrainte de cisaillement de 15 Pa et aucune limitation de transfert interne ou externe.

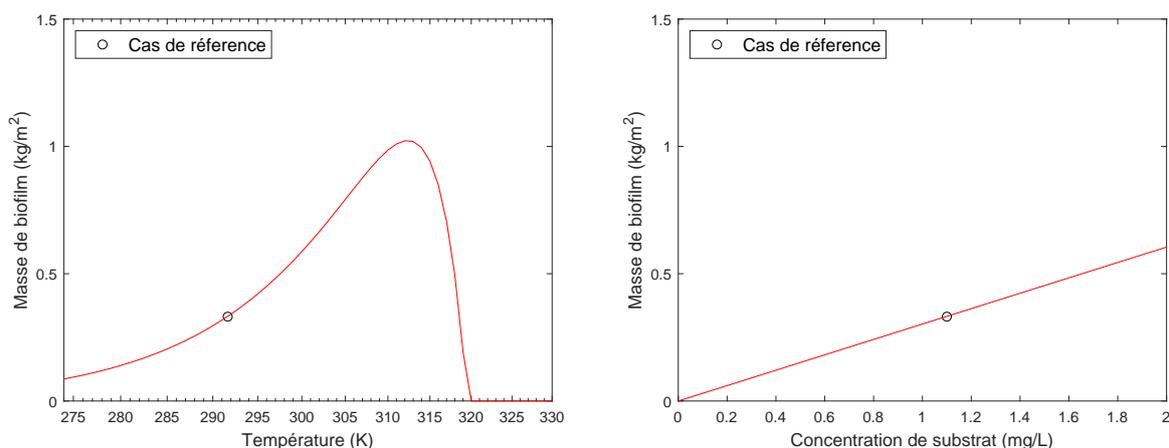


FIGURE 7.10 – Influence de la température (gauche) et de la quantité de substrat (droite) sur la masse finale de biofilm

De la même manière, l'influence de la limitation des phénomènes de transfert sur la réaction est quantifiable à travers le calcul des critères d'efficacité définis précédemment. Les nombres de Damköhler internes au biofilm (Da_{biofilm}) et dans le fluide (Da_{externe}) permettent de quantifier la prédominance relative des phénomènes de transfert sur la réaction chimique. La Figure 7.11 (gauche) présente la masse finale de biofilm en fonction du régime interne (Da_{biofilm}) et la Figure 7.11 (droite) présente la masse finale de biofilm en fonction du régime externe (Da_{externe}) toute autre condition maintenue constante. Les influences des phénomènes de transfert externe ou interne ont la même forme : une efficacité égale à 1 lorsque le transfert est suffisamment rapide devant la réaction biologique et une efficacité très faible lorsque la résistance au transfert devient trop importante. Ces résultats correspondent aux régimes particuliers identifiés dans le Tableau 7.4.

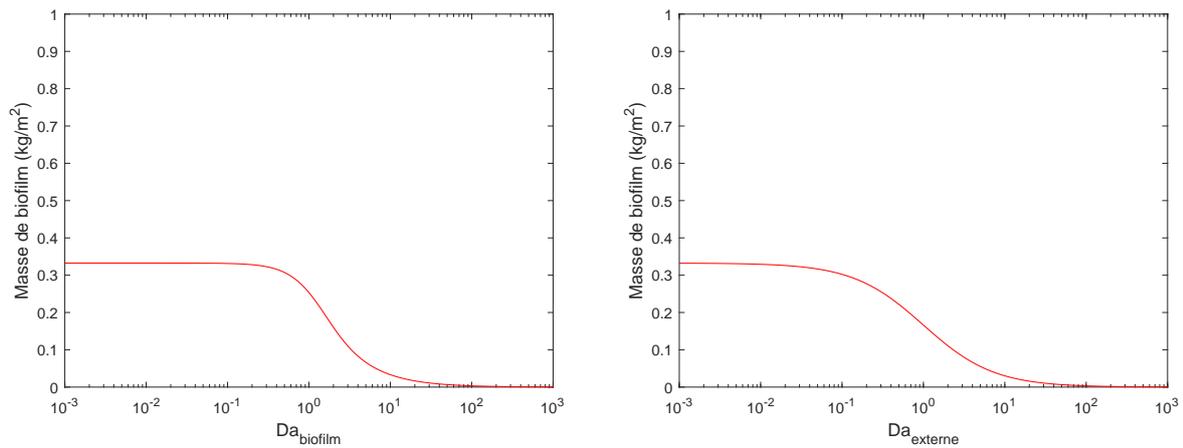


FIGURE 7.11 – Influence de la valeur du nombre de Damköhler dans le biofilm (gauche) et du nombre de Damköhler externe (droite) sur la masse finale de biofilm

Enfin, l'influence de l'hydrodynamique à travers la contrainte de cisaillement est représentée à la Figure 7.12 tout autre paramètre maintenu constant. À titre d'exemple, le régime de référence fixé à une contrainte de cisaillement de 15 Pa est repéré sur la figure par le marqueur noir. L'hypothèse et la forme du terme $D_\tau(\tau)$ déduite des données expérimentales conduisent à une dépendance affine de la masse finale de biofilm en fonction de la contrainte de cisaillement.

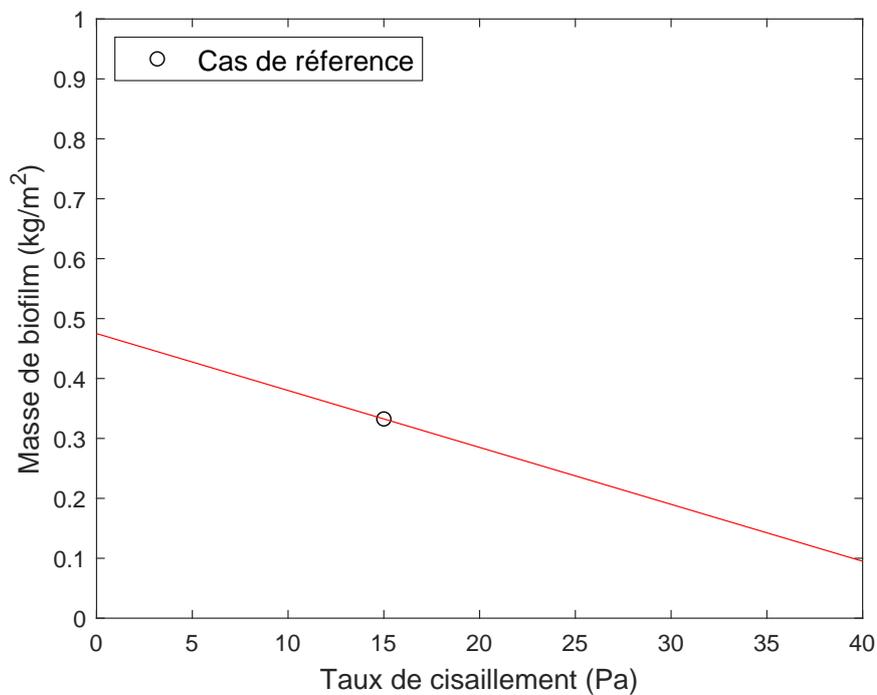


FIGURE 7.12 – Représentation du temps de demi-croissance du biofilm en fonction de la contrainte de cisaillement pour les différents cas de la littérature

7.3.4 Discussion du modèle proposé

L'objectif de ce travail étant de proposer un modèle de biofilm de référence adapté à un circuit de refroidissement industriel, l'intérêt est de compiler l'ensemble des données disponibles. C'est pourquoi les paramètres choisis ne s'adaptent pas parfaitement à tous les ensembles de données présentés. Par sa construction et l'utilisation de la modélisation mathématique des biofilms, la forme du modèle proposé correspond en tendance à tous les cas de données de la littérature sur l'encrassement des tubes de condenseur : une croissance exponentielle asymptotique avec la formation d'un plateau pour les temps longs. Cela signifie que la vitesse de croissance de la masse de biofilm est la plus importante au temps initial (correspondant au temps de la fin de la période d'incubation) puis diminue jusqu'à devenir nulle lorsque le biofilm atteint son équilibre. Cet équilibre est dû à l'égale importance du mécanisme de croissance biologique et des mécanismes de dégénérescence du biofilm et d'arrachement induit par les contraintes hydrodynamiques.

La réalité bio-physico-chimique du modèle le rend donc adaptable individuellement à chaque ensemble de données, il est donc possible d'identifier les paramètres pour adapter le modèle à chaque publication. Ainsi, à titre d'exemple une modification des paramètres pour le cas N°7 permet d'appréhender la dynamique de croissance du biofilm et la quantité finale de biofilm (Figure 7.13).

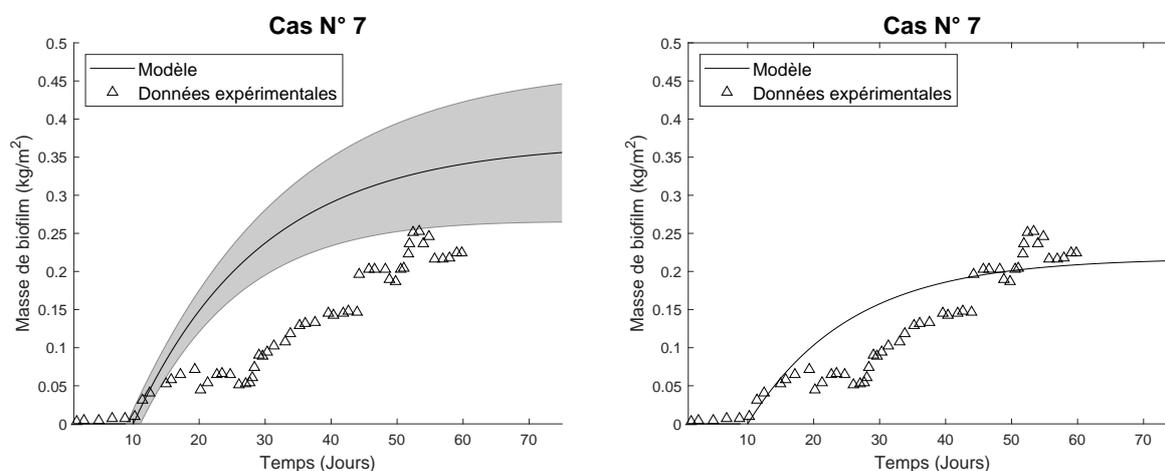


FIGURE 7.13 – Exemple de la possibilité de l'équation à convenir à la modélisation de tous les cas de la littérature : modèle général et tendances (gauche) et modèle calé pour le cas N°7 (droite) (Trueba *et al.*, 2015)

Le choix de traduire l'influence de l'hydrodynamique sur le biofilm en utilisant la contrainte de cisaillement comme paramètre permet de rendre le modèle adaptable à diverses géométries. Ainsi, le modèle de biofilm construit est transposable aux autres parties du circuit de refroidissement. Les caractéristiques de l'écoulement intervenant aussi dans les différents coefficients et facteurs d'influence

définis. Dans les conduites en béton et dans le bassin froid, le calcul des nombres adimensionnels ayant montré la limitation de l'apport en réactifs par le transfert externe, le coefficient d'efficacité externe sera inférieur à 1. Dans le bassin, les contraintes de cisaillement très faibles vont conduire à un terme d'arrachement du biofilm plus faible et donc une épaisseur finale plus importante. Les données expérimentales ne couvrent pas la gamme des faibles contraintes de cisaillement (< 4 Pa), les données du modèle seront donc extrapolées pour ces valeurs.

Certaines hypothèses ont été nécessaires afin de développer le modèle de croissance biologique. Pour la cinétique apparente, le modèle est supposé d'ordre 1. Le calage des courbes avec les données expérimentales a permis de valider ce choix. Cependant, dans le cas d'un biofilm plus complexe, une autre possibilité est d'utiliser une cinétique de Monod. Pour transposer le modèle à un autre type de biofilm ou à un système hydrodynamique différent, la forme de l'équation cinétique devra potentiellement être modifiée pour un ordre apparent différent ou une cinétique de Monod. De même, pour le modèle créé, l'équation cinétique ne dépend que de la concentration en substrat assimilée à une concentration de DBO. Dans certains cas (zones stagnantes), le développement devrait aussi tenir compte de la concentration en oxygène dans le milieu. Pour le circuit de refroidissement, la concentration en oxygène n'est limitante dans aucune partie du circuit. La concentration en DBO a été choisie comme paramètre pour la cinétique du modèle en raison de sa représentativité de la quantité de matière organique présente dans les eaux de surface utilisées pour les circuits.

Enfin, le moyen de s'affranchir des hypothèses et des simplifications inhérentes au calage du modèle est de mener une campagne d'étude particulière portant sur la nature des biofilms dans les différentes parties du circuit. Une première étape serait d'étudier l'écologie spécifique des biofilms des circuits de refroidissement en fonction de la localisation pour affiner la sélection des modèles biologiques et de l'équation de l'ordre apparent de l'équation cinétique. En plus, une étude de croissance des biofilms caractéristiques des circuits de refroidissement en fonction des régimes d'écoulement et des différentes contraintes de cisaillement sur les différentes surfaces permettrait d'affiner la dépendance entre le terme de perte du biofilm et la contrainte de cisaillement.

7.4 Conclusion

L'étude des phénomènes influençant la croissance et l'équilibre des biofilms dans les circuits de refroidissement a permis d'identifier des régimes particuliers de prédominance de certains phénomènes par rapport aux autres (e.g. transfert externe à l'interface fluide/biofilm, diffusion interne, réaction biologique). La caractérisation de ces différents phénomènes et régimes particuliers a rendu possible la construction d'un modèle de croissance du biofilm prenant en compte indépendamment l'influence

de tous les paramètres et de toutes les conditions opératoires. Des critères d'efficacité pour quantifier les compétitions entre les phénomènes de transfert et les réactions biologiques, et des facteurs d'influence pour mesurer l'influence des conditions opératoires telles que la température et la concentration en substrat, ont été créés et leur sensibilité a été évaluée. Le modèle résultant tient compte de l'influence de l'hydrodynamique au travers de l'étude du transfert externe mais aussi directement de la dépendance à la contrainte de cisaillement. Les paramètres du modèle ont été calés et validés avec différents ensembles de données sur les biofilms dans les tubes de condenseur disponibles dans la littérature.

L'utilisation des critères d'efficacité basés sur les nombres adimensionnels calculés à partir des temps caractéristiques des phénomènes ainsi que la paramétrisation en contrainte de cisaillement et non en vitesse permet de rendre le modèle adaptable aux autres régimes d'écoulement. La paramétrisation en utilisant différentes sources de données permet de proposer un modèle caractéristique de la croissance d'un biofilm de circuit de refroidissement non spécifique à une qualité d'eau et à des conditions opératoires précises. Les facteurs d'influences en quantité de substrat et en température permettent l'adaptabilité à toutes les conditions opérationnelles observables dans les circuits de refroidissement industriels.

Ce modèle transposable aux autres parties du circuit de refroidissement est donc opérationnel pour alimenter les différents compartiments du modèle hydrodynamique construit pour caractériser l'influence de l'hydrodynamique sur la croissance du biofilm.

Modèle compartimental du circuit de refroidissement

Le modèle de développement du biofilm ayant été construit, il est maintenant possible de développer le modèle compartimental visant à cartographier l'influence de l'hydrodynamique sur le développement de l'encrassement microbologique dans les circuits de refroidissement industriel. Pour cela, il est nécessaire de mettre en pratique les approches de modélisation présentées dans la Partie I afin de rassembler au sein d'un unique modèle compartimental les données hydrodynamiques obtenues dans la Partie II et le modèle du biofilm présenté dans le Chapitre 7.

Le première étape est la construction des compartiments pour les parties du circuit de refroidissement en se basant sur les critères hydrodynamiques. Ensuite, la résolution du modèle de formation du biofilm dans les différents compartiments permettra de simuler une cartographie de l'encrassement dans les circuits de refroidissement. Pour cela, plusieurs scénarios seront simulés faisant varier les conditions environnementales (température, qualité d'eau) et les caractéristiques du circuit (géométrie, comportement hydrodynamique). Les résultats seront présentés afin de couvrir l'ensemble des conditions opératoires d'un circuit de refroidissement industriel. Ces scénarios simulés tiennent compte de l'encrassement biologique sans les traitements biocides qui sont généralement utilisés dans les circuits de refroidissement industriels. Enfin, les hypothèses utilisées pour la construction du modèle construit seront discutées et les perspectives d'améliorations ainsi que les débouchés pour les travaux futurs seront présentés.

8.1 Construction des compartiments

L'approche de modélisation compartimentale a été présentée dans le Chapitre 2 à travers la revue bibliographique faite par Jourdan *et al.* (2019). La construction du modèle et sa structure reposent sur les critères de détermination des compartiments. Ces critères dépendent de l'objectif du modèle, de l'hydrodynamique et du phénomène d'intérêt à modéliser. Ainsi, dans le cas du modèle pour prédire le développement du biofilm, les critères de construction sont ceux influençant la croissance du biofilm

et qui ont été identifiés lors de la construction du modèle biologique : les conditions hydrodynamiques (e.g. les régimes d'écoulement, les champs des vecteurs vitesse ou le taux de cisaillement en paroi) et la température. Étant donné la grande variété de conditions hydrodynamiques dans le circuit, la division en compartiments va dépendre de la partie du circuit de refroidissement considérée.

8.1.1 Écoulements en conduites cylindriques : tubes de condenseur et conduites en béton

L'étude des écoulements dans les conduites cylindriques a permis de déterminer que le régime est fortement turbulent. Cependant, dans le cas des conduites en béton, le régime turbulent nécessite quelques centaines de mètres pour s'établir. La longueur d'établissement ayant été déterminée et les écoulements ayant été simulés par MFN, les caractéristiques des écoulements dans les tubes de condenseur et dans les conduites en béton sont connues. Quelle que soit la localisation dans le tuyau, l'écoulement est principalement monodirectionnel dans le sens du tube. La température du fluide évolue fortement le long des tubes de condenseur. Pour les conduites en béton, deux cas sont à distinguer : les conduites avant le condenseur où la température de l'eau est la plus basse du circuit (abrégée par la suite température froide) et les conduites après le condenseur où la température est la plus élevée du circuit (abrégée par la suite température chaude). La température ne varie que très faiblement le long de la conduite. L'écoulement peut donc être assimilé à un écoulement idéal de réacteur piston. La détermination des compartiments va donc se faire en fonction du profil de température le long des tubes de condenseur. L'écoulement de type piston peut être assimilé à un réseau de réacteurs parfaitement agités (RPA) en série appelé cascade de RPA (Villermoux, 1993; Potier *et al.*, 2005) avec chaque RPA correspondant à une température. Le nombre de RPA (J) correspondant est calculé grâce au nombre de Peclet qui est fonction du nombre de Reynolds d'après la relation de l'Équation (Trambouze *et al.*, 1984).

$$\frac{1}{Pe} = \frac{d}{L} \left[\frac{3 \cdot 10^7}{Re^{2,1}} + \frac{1,35}{Re^{0,125}} \right] \quad (8.1)$$

avec L la longueur du tube en m, d le diamètre du tube en m et Re le nombre de Reynolds.

Le nombre de réacteurs équivalent J est égal à $J = \frac{Pe}{2} + 1$. Ainsi, pour un seul tube de condenseur de diamètre de 1,5 cm, d'une longueur de 11 m avec un débit de $3,19 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$, le nombre de Peclet est égal à 1870 (écoulement très piston); donc le nombre de RPA dans la cascade équivalent à un écoulement piston est de 936. Pour une conduite en béton de diamètre de 2,8 m et d'une longueur de 259 m avec un débit de $17,25 \text{ m}^3/\text{s}$ (conduite froide), le nombre de Peclet est de 498, donc l'écoulement piston est équivalent à une cascade de 250 RPA en série. Pour une conduite en béton de longueur 513 m toute

autre caractéristique égale par ailleurs (conduite chaude), la valeur du nombre de Peclet est de 987 et le nombre de réacteurs équivalent est de 495.

Les tubes de condenseur et les conduites en béton peuvent donc être modélisés comme des cascades de RPA. Un exemple est présenté à la Figure 8.1. Pour la communication entre les compartiments représentant les conduites en béton et le réseau de réacteurs étant unique, le débit correspond au débit total du circuit. De même, chaque tube du condenseur est considéré comme une cascade de RPA indépendante. Bien que la répartition du débit entre les tubes n'est pas totalement homogène, l'hypothèse considérée pour le modèle est une répartition homogène du débit liquide. Le débit circulant théorique entre les compartiments est donc égal au débit total du circuit de refroidissement divisé par le nombre de tubes.

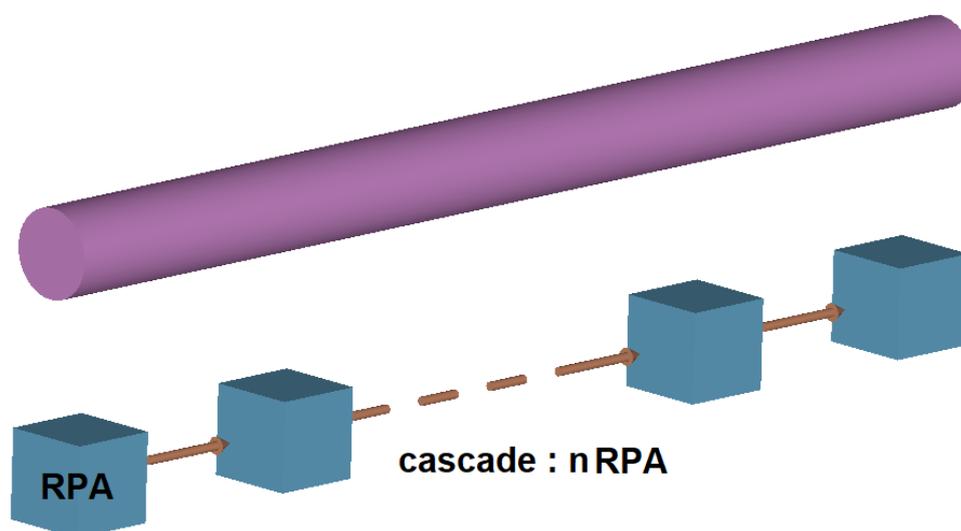


FIGURE 8.1 – Représentation du modèle compartimental pour une conduite cylindrique en charge - Pour les conduites en béton : $n = 250$ pour la conduite froide et $n = 495$ pour la conduite chaude ; pour un tube de condenseur : $n = 936$.

Pour tenir compte de la longueur d'établissement dans les conduites en béton, le calcul des paramètres hydrodynamiques dans la cascade de RPA doit être différent selon le régime de turbulence. Dans les premiers RPA de la cascade modélisant le volume de tube correspondant à la longueur d'établissement, les données hydrodynamiques (e.g. profil de vitesse, contrainte de cisaillement) proviennent des résultats des simulations de MFN. Dans les RPA suivants, les données hydrodynamiques peuvent être calculées avec les corrélations du régime turbulent établi. Afin de simplifier le code du modèle, les cascades de RPA modélisant les conduites en béton sont divisées en deux cascades en série correspondant respectivement à l'établissement de la turbulence et au régime turbulent établi. Ainsi, la conduite froide est modélisée par deux cascades en série composées respectivement de 160 et de 90 RPA en série ; et la conduite chaude est modélisée par deux cascades en série composées respectivement

de 179 et de 316 RPA en série.

8.1.2 Écoulements dans les garnissages

Dans les garnissages, l'écoulement ruisselant est aussi monodirectionnel. L'écoulement du liquide peut donc aussi être modélisé comme un réacteur piston vertical. De la même manière que pour les tubes de condenseur, le transfert thermique entre l'eau et l'air au cours du ruissèlement va entraîner une modification de la température du fluide. Dans ce cas, l'écoulement peut donc être simulé par une cascade de RPA avec un profil de température en fonction de la position verticale dans le garnissage, chaque RPA étant considéré comme homogène en température. Le régime d'écoulement dans les films ruisselant étant laminaire, le nombre de Peclet (Pe) se calcule en tenant compte de la dispersion axiale selon la formule présentée Équation 8.2 (Villermaux, 1993).

$$Pe = \frac{uL}{D_{ax}} \quad (8.2)$$

avec L la longueur de l'écoulement ou dimension axiale (en m), u la vitesse du fluide (en m/s) et D_{ax} le coefficient de dispersion axiale dans le fluide. Pour les garnissages en régime laminaire, le coefficient de dispersion axiale peut être déterminé à partir du coefficient de diffusion en utilisant la formule proposée par Wakao et Funazkri (1978) (Équation 8.3).

$$\frac{D_{ax}}{D} = 20 + 0,5 Re Sc \quad (8.3)$$

avec D_{ax} le coefficient de dispersion axiale dans le fluide, D le coefficient de diffusion dans le fluide, Re le nombre de Reynolds et Sc le nombre de Schmidt. Pour les garnissages, le calcul du nombre de Peclet donne une valeur de 9970 donc un nombre de RPA en série (J) égal à 4988.

En raison du grand diamètre de la tour, les conditions environnementales varient suivant la position radiale. En effet, la vitesse d'air varie en fonction de la localisation dans la tour aéroréfrigérante : les vitesses d'air sont plus élevées au centre de la tour qu'à sa périphérie. La caractérisation hydrodynamique des écoulements dans les garnissages n'a pas montré d'influence forte de la vitesse d'air sur la nature de l'écoulement liquide, cependant le transfert thermique et la température du fluide peuvent être différents. Les travaux de Li *et al.* (2019) démontrent l'influence de la position radiale dans la tour sur la vitesse d'air et donc sur le transfert thermique. Les simulations réalisées par Blain *et al.* (2016) montrent une différence de température de l'air de l'ordre de 3 °C en fonction du rayon sur une même hauteur de la tour aéroréfrigérante. Cette différence peut être accentuée par les conditions météorologiques et particulièrement par la vitesse et la direction du vent : le vent crée une inhomogénéité supplémentaire de la vitesse de l'air ascendant, donc une plus grande différence de

transfert thermique et une différence de température d'air et d'eau en fonction de la position radiale.

L'ensemble du garnissage peut donc être modélisé par un réseau de cascades de RPA mises en parallèle pour simuler la répartition de l'air comme présenté sur la Figure 8.3. L'arrosage étant homogène à la surface du garnissage, le débit de chaque cascade de RPA dépend de la surface considérée pour une condition de vitesse d'air et de température d'air constante. Les critères de détermination des compartiments sur un plan horizontal sont donc la vitesse et la température de l'air. Le nombre de cascades en parallèle dépend donc des conditions environnementales considérées : valeur et amplitude des profils de température sur une section verticale de garnissage. Une cartographie de la température de l'air sur des sections de tour aéroréfrigérante comme présentée à la Figure 8.2 (Blain *et al.*, 2016) peut servir de détermination de la répartition radiale des cascades de RPA en parallèle.

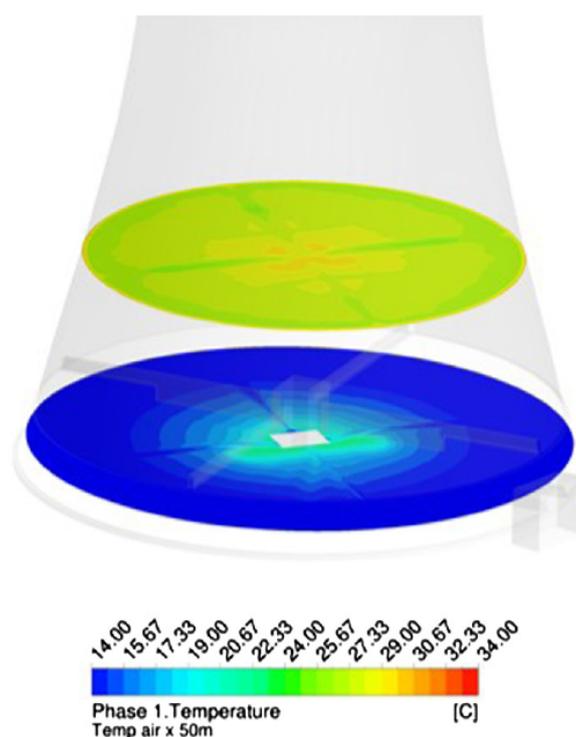


FIGURE 8.2 – Température de l'air (en °C) pour deux sections avant et après le garnissage dans la tour aéroréfrigérante (Blain *et al.*, 2016)

La caractérisation des écoulements dans les garnissages réalisée dans la Partie II a permis de déterminer des gammes de valeurs pour les paramètres principaux de l'écoulement. Ainsi, pour chaque cascade de RPA, le taux d'arrosage est connu et fixé en fonction de la surface de la section modélisée et les grandeurs hydrodynamiques considérées (e.g. vitesse du fluide, taux de cisaillement) le sont sous forme de distribution statistique. Le modèle compartimental doit donc tenir compte de la variabilité des données hydrodynamiques.

Dans la suite de l'étude de cas, le garnissage est divisé en cinq cascades en parallèle afin de représenter

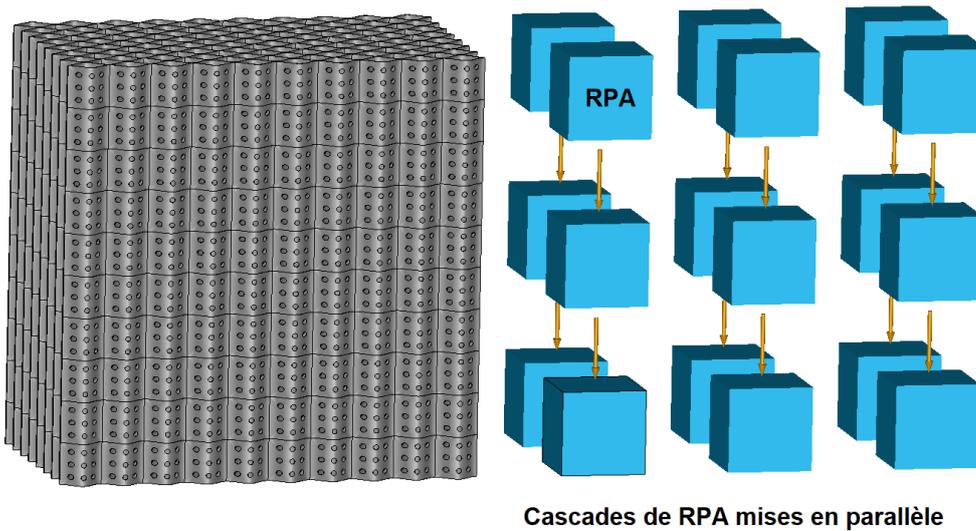


FIGURE 8.3 – Représentation du modèle compartimental pour un bloc de garnissage

différents profils de températures. La température chaude en tête de garnissage est maintenue constante pour l'ensemble des cascades et la température froide est choisie afin de modéliser cinq différences de températures différentes : 6, 8, 10, 12 et 14 °C. Les surfaces arrosées, donc les volumes de chaque cascade, sont prises égales afin d'obtenir, sur l'ensemble de la tour, un refroidissement de l'eau moyenné de 10 °C correspondant à la valeur observée sur les tours aëroréfrigérantes humides à tirage naturel.

8.1.3 Écoulements dans le bassin froid

Les simulations de MFN réalisées pour la caractérisation des écoulements dans le bassin, dont les résultats ont été présentés dans le Chapitre 6, ont permis d'identifier la vitesse comme le critère principal de construction des compartiments. En effet, dans le bassin, l'intensité de la vitesse du fluide dépend très fortement de la localisation par rapport à la sortie par pompage : la vitesse du fluide est de l'ordre de 0,01 m/s dans les zones les plus éloignées de la sortie du bassin alors qu'en sortie, le fluide circule plus de 100 fois plus vite. De plus, le tracé des champs de vecteurs vitesse a permis d'identifier des zones de recirculation dans le bassin.

La première étape est donc la prise en compte de la direction et du sens de l'écoulement du fluide. L'observation des champs de vecteur vitesses à plusieurs profondeurs du bassin permet la division du bassin en trois zones principales : la zone centrale du bassin et les deux zones de recirculation (la zone située à l'opposé de la sortie et celle située derrière le plan incliné d'accès au bassin).

Dans un second temps, pour raffiner la division des compartiments, l'intensité de la vitesse est prise en compte. En s'appuyant sur la cartographie de la vitesse du fluide par MFN, il est possible de diviser le bassin en zones supplémentaires selon la valeur de la vitesse comme présenté à la Figure 8.4.

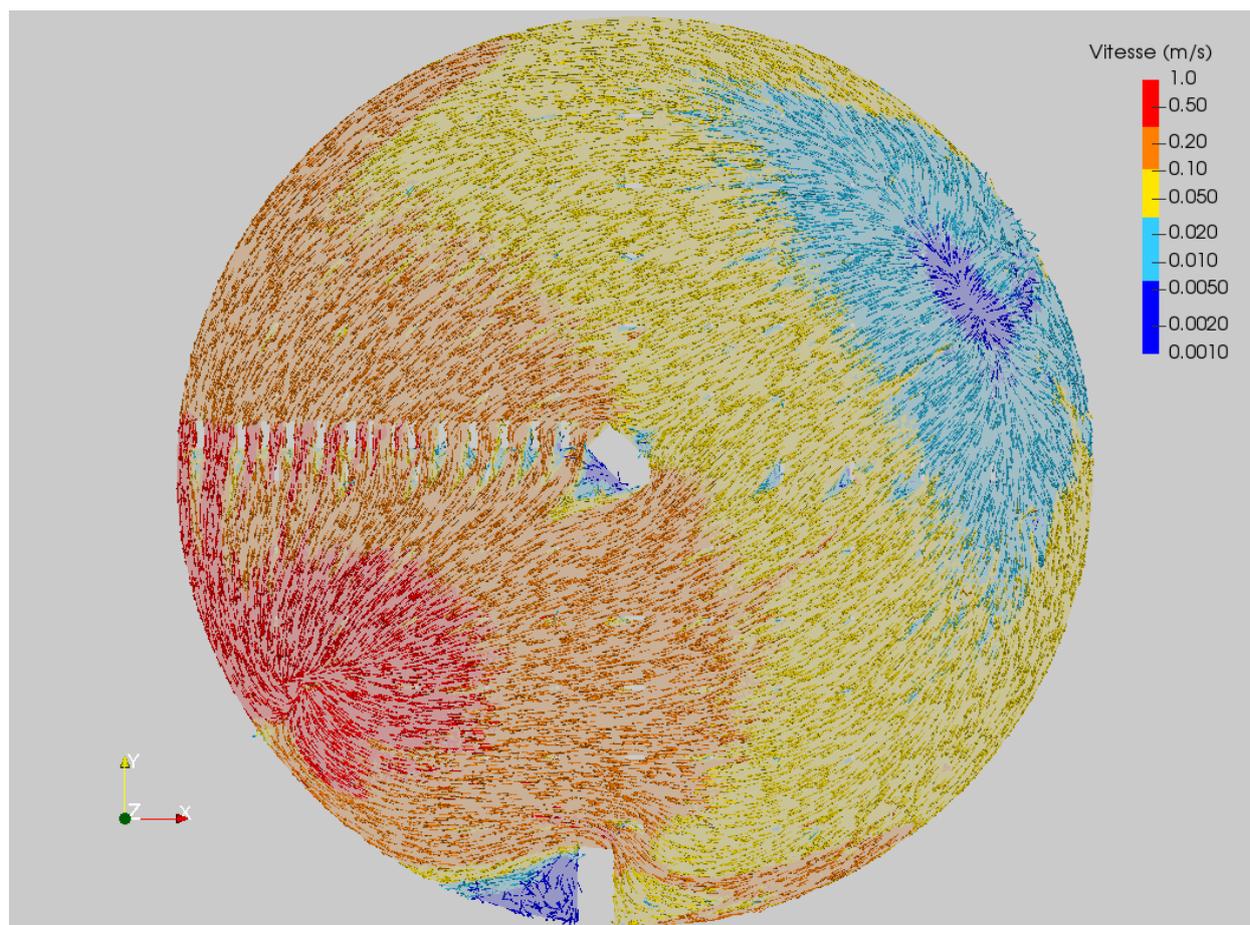


FIGURE 8.4 – Division du bassin en zones selon la valeur de la vitesse à $t=1900$ s, $z=0,5$ m

Les cinq zones identifiées sont la zone forte vitesse (en rouge sur la Figure 8.4) correspondant à la sortie du bassin, la zone de vitesses moins élevées dont les vecteurs convergent vers la sortie (en orange), la zone intermédiaire correspondant au centre du bassin (en jaune) et les deux zones bleues de fluide de faible vitesse correspondant au plan incliné et à la zone opposée à la sortie. Le long des parois, on observe un décalage des vitesses par rapport au centre du bassin : pour un même éloignement vis-à-vis de la sortie, les vitesses sont plus importantes aux bords du bassin. La zone de recirculation correspondant à la zone de faible vitesse, un seul découpage sera suffisant.

En recoupant les zones définies grâce au sens et à la vitesse de l'écoulement du fluide, quatre zones sont retenues : la zone de circulation, la zone proche des parois latérales du bassin, la zone centrale et la zone de la sortie. Chaque zone peut ensuite être découpée en compartiments afin d'obtenir la structure finale du modèle pour le bassin. Chaque zone est considérée comme un réseau de RPA en série avec recirculation. Les paramètres de chaque réseau (nombre de RPA en série, taux de recirculation) doivent être déterminés. Un schéma du découpage en zones et en compartiments dans le plan horizontal du bassin est présenté à la Figure 8.5.

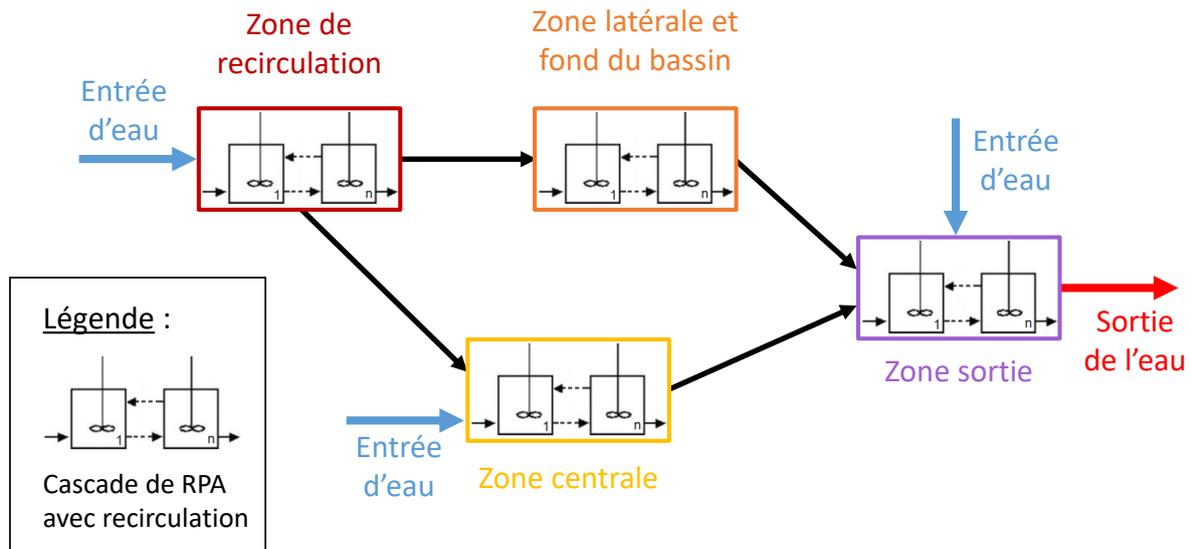


FIGURE 8.5 – Schéma du modèle compartimental du bassin froid : chaque zone est divisée en compartiments (cascade de RPA en série avec recirculation)

Concernant la structure verticale du modèle en fonction de la profondeur, les zones proches du fond se comportent de la même manière que les zones latérales : ces zones sont soumises aux contraintes imposées par les parois et ne sont pas directement alimentées par l'entrée du fluide qui se fait sous forme de pluie à la surface de l'eau. La zone du fond peut donc être rassemblée avec les zones latérales.

L'entrée du fluide dans le bassin se fait par pluie sur une partie de la surface du bassin. Seules la zone de faible vitesse, la zone centrale et la zone de la sortie du bassin sont arrosées. Pour la sortie, la totalité du débit est pompée hors du bassin par la zone de sortie. Les débits provenant de la pluie tombant des garnissages ainsi que les débits totaux circulants dans chaque zone du bassin sont exprimés dans le Tableau 8.1.

TABLE 8.1 – Débits d'entrée sous forme de pluie dans les différentes parties du bassin froid

| | Débit d'entrée sous forme de pluie (m^3/s) | Débit d'entrée provenant des autres zones (m^3/s) |
|--|---|--|
| Zones de recirculation | 2,43 | 0 |
| Zone latérale et fond du bassin | 10,43 | 0,5 |
| Zone centrale | 0 | 1,93 |
| Zone de sortie | 3,89 | 12,86 |

Dans chaque zone, l'écoulement n'étant pas idéal, le nombre de RPA ne peut pas être supposé suffisamment grand afin d'être équivalent à un écoulement piston. De même, pour la majorité des zones, l'écoulement complexe ne peut être simulé avec un seul RPA. Chaque zone sera donc modélisée par un réseau de réacteurs RPA en série avec possibilité de recirculation entre les réacteurs afin d'être représentatif des cas réels. Pour chaque zone, le nombre de RPA dans le réseau et, le cas échéant, les flux de recirculation (taux de reflux) doivent être déterminés : la méthode utilisée est expliquée dans les travaux de Potier *et al.* (2005). Un traceur passif est ajouté aux simulations de MFN dans le but d'obtenir une DTS du bassin. Le scalaire passif est injecté sous forme d'échelon et la concentration en traceur est mesurée à la sortie du bassin. Un modèle de réseau est donc simulé et comparé avec la DTS obtenue par MFN : cela permet d'obtenir le nombre apparent de réacteurs (J_{app}) pour les cascades de RPA modélisant chaque zone. Ce nombre n'étant pas forcément entier, le nombre réel de RPA (J) et le taux de recirculation sont calculés avec la méthode des travaux de Potier *et al.* (2005). Les paramètres du modèle pour les différentes zones sont donnés dans le Tableau 8.2.

TABLE 8.2 – Paramètres des réseaux de réacteurs pour chaque zone du bassin froid

| | Volume de la zone (m ³) | Nombre de RPA apparent - J_{app} | Nombre de RPA - J | Taux de reflux |
|--|-------------------------------------|------------------------------------|---------------------|----------------|
| Zones de recirculation | 3297 | 4 | 4 | 0 |
| Zone latérale et fond du bassin | 2569 | 4,4 | 5 | 0,087 |
| Zone centrale | 1567 | 1,3 | 2 | 1,17 |
| Zone de sortie | 545 | 3,6 | 4 | 0,076 |

Les courbes de la fonction $E(t)$ obtenues par le traceur via les simulations de MFN et par le modèle proposé sont présentées à la Figure 8.6.

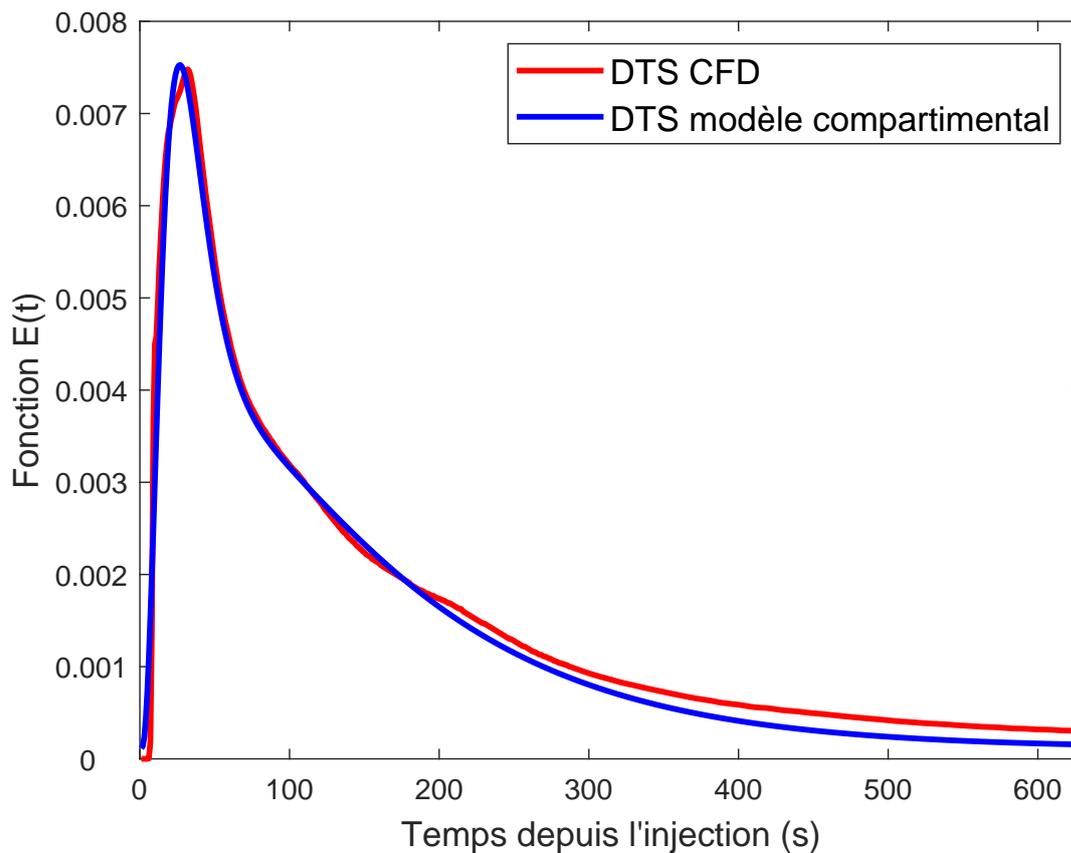


FIGURE 8.6 – Comparaison de la courbe de la fonction $E(t)$ obtenue par DTS numérique avec la courbe obtenue par le modèle compartimental proposé

Les deux courbes correspondent, validant ainsi les paramètres identifiés pour le modèle

compartimental. Le modèle sous-estime légèrement la trainée due aux zones de recirculation ou aux zones mortes du bassin. Ces zones sont importantes car propices au dépôt des matières en suspension et donc au développement du biofilm. Il est possible de faire l'hypothèse que le volume de recirculation non appréhendé par le modèle correspond aux quelques mètres cubes que constitue la zone de recirculation identifiée à côté du plan incliné d'accès au bassin visible sur les cartographies des champs de vitesses.

La structure finale du modèle compartimental du bassin est illustrée à la Figure 8.7.

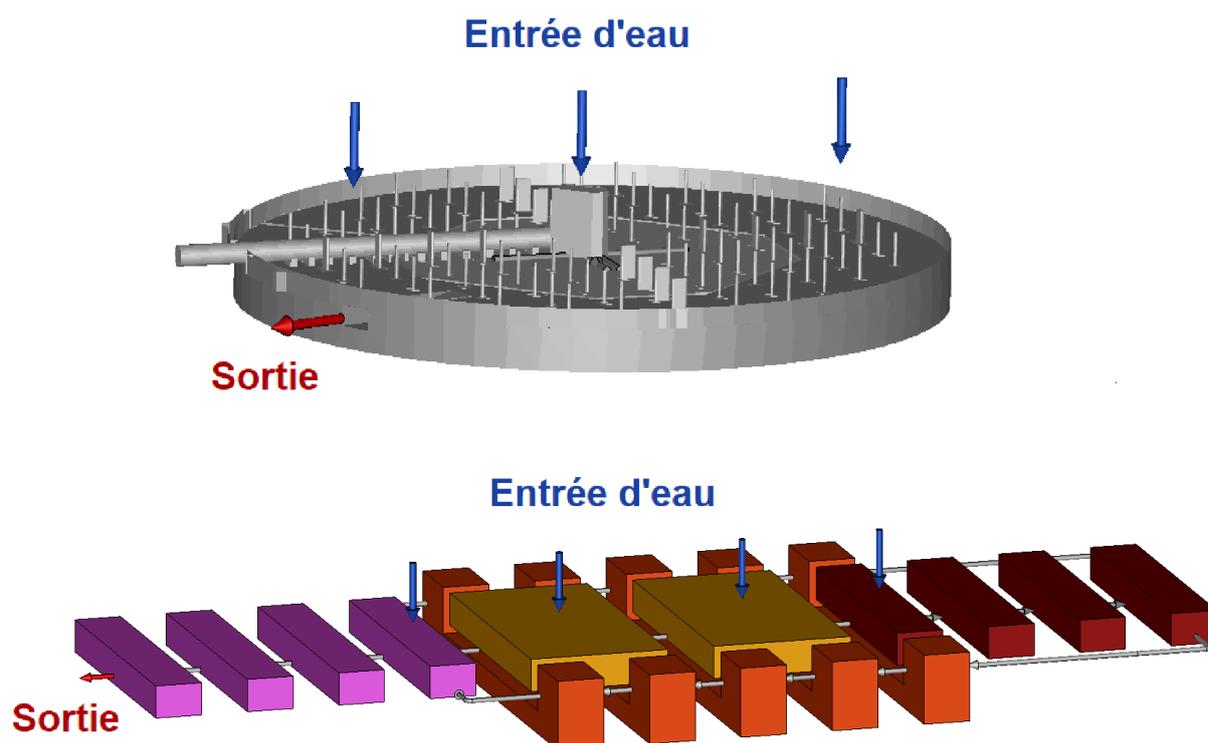


FIGURE 8.7 – Représentation du modèle compartimental pour le bassin froid : dessin du bassin froid réalisé par ordinateur (haut) et modèle compartimental correspondant (bas)

8.1.4 Modèle compartimental du circuit de refroidissement complet

Pour représenter la totalité du circuit de refroidissement les modèles des différents éléments doivent être assemblés et connectés. Le modèle du circuit de refroidissement se compose de 17 éléments différents listés ci-dessous et représentés sur la Figure 8.8 :

- 5 cascades de 4988 RPA en parallèle pour la tour aéroréfrigérante (1 à 5)
- 1 sortie de fluide correspondant à la quantité d'eau évaporée dans la tour aéroréfrigérante sans sortie d'espèces chimiques (6)
- 4 zones pour le bassin froid chacune divisée en réseau de RPA en série avec recirculation pour un

nombre total de 15 RPA (7 à 10)

- 1 sortie fluide à la sortie du bassin froid correspondant à la purge du circuit (11)
- 1 entrée de fluide correspondant à la quantité d'eau d'appoint (eau de mer ou de rivière) injectée en entrée de la conduite d'eau froide entre le bassin et le condenseur (12)
- 2 cascades de respectivement 160 et 90 RPA en série pour modéliser la conduite d'eau froide amenant l'eau de la sortie du bassin froid au condenseur (13 & 14)
- 1 cascade de 936 RPA pour modéliser le condenseur (15)
- 2 cascades de respectivement 179 et 316 de RPA en série pour modéliser la conduite d'eau chaude amenant l'eau de la sortie du condenseur à la tour aéroréfrigérante (16 & 17)

La division de chaque zone en compartiments a été décrite pour chaque élément du circuit dans les paragraphes précédents.

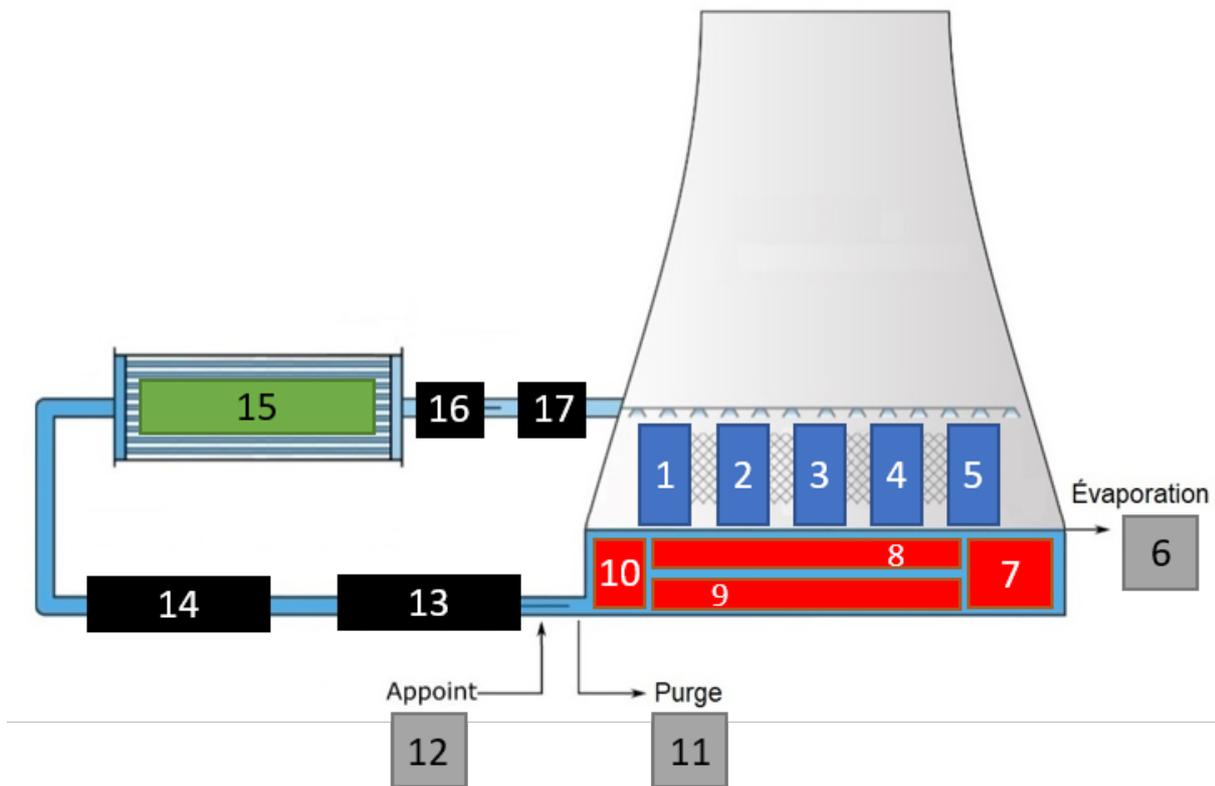


FIGURE 8.8 – Répartition géométrique des différents éléments du modèle compartimental du circuit de refroidissement complet

Pour les connexions entre les zones, les cinq zones en parallèle de la tour aéroréfrigérante (zones 1 à 5) alimentent les zones 7, 8 et 10 du bassin correspondant respectivement à la zone de faible vitesse et de recirculation, à la zone centrale et à la zone de sortie du bassin. Une partie du débit de ces cinq zones de la tour est aussi sorti du modèle pour simuler la quantité d'eau évaporée (6) qui correspond à $0,5 \text{ m}^3/\text{s}$. Dans le bassin, la circulation entre les zones se fait comme décrit dans la partie

précédente (Tableau_8.1). La zone 10 de sortie du bassin assure l'alimentation de la zone 13. Les zones 13 et 14 en série servent de modèle à la conduite de circulation de l'eau froide entre le bassin et le condenseur. La zone 11 est une sortie du circuit modélisant la purge de $0,75 \text{ m}^3/\text{s}$. La zone 12 permet d'injecter la quantité d'eau d'appoint ($1,25 \text{ m}^3/\text{s}$) dans le circuit au niveau de l'entrée de la conduite de circulation d'eau froide (entrée de la zone 13). Le débit circulant est alors le débit nominal du circuit de refroidissement à savoir $17,25 \text{ m}^3/\text{s}$. La zone 14 alimente la zone 15 représentant le condenseur. La sortie de la zone 15 alimente la zone 16. Les zones 16 et 17 en série modélisent la conduite de circulation d'eau chaude. Enfin, la zone 17 alimente de manière égale les cinq zones en parallèle de la tour aéroréfrigérante pour boucler la circulation de l'eau dans le circuit de refroidissement.

Le modèle compartimental a été codé avec le logiciel MATLAB R2018a.

8.2 Scénarios simulés et résultats

Une fois les compartiments déterminés, le modèle prédit la quantité de biofilm par unité de surface dans les différentes parties du circuit de refroidissement. Le modèle tient compte des caractéristiques hydrodynamiques grâce à la construction des compartiments, mais aussi grâce aux paramètres hydrodynamiques caractéristiques des écoulements dans les différents éléments du circuit. Il tient compte aussi des paramètres environnementaux tels que la quantité de substrat présente dans l'eau de refroidissement ou la température. Pour les conditions environnementales, les gammes de valeurs ainsi que les cas de référence ont été établis avec des données provenant d'un fleuve français. Le modèle est maintenant utilisé pour connaître la quantité de biofilm dans les parties du circuit et obtenir la cartographie de croissance du biofilm. Cette partie va aussi étudier la sensibilité du modèle compartimental. Pour cela différents scénarios sont simulés :

- Simulation de la croissance du biofilm dans les différents éléments du circuit pour des conditions environnementales fixées et des conditions hydrodynamiques de référence définies comme la valeur la plus probable des distributions obtenues lors de la caractérisation des écoulements (Section 8.2.1)
- Étude de la sensibilité des paramètres hydrodynamiques dans les garnissages (contrainte de cisaillement, épaisseur du film et vitesse superficielle) pour tout autre paramètre fixé par ailleurs (Section 8.2.2)
- Étude de la sensibilité des paramètres hydrodynamiques dans les différentes zones du bassin froid (contrainte de cisaillement et vitesse du fluide) pour tout autre paramètre fixé par ailleurs (Section 8.2.3)
- Étude de la sensibilité des paramètres hydrodynamiques dans la zone d'établissement de la

turbulence des conduites froides et chaudes (contrainte de cisaillement) pour tout autre paramètre fixé par ailleurs (Section 8.2.4)

- Simulation de la croissance du biofilm dans les différents éléments du circuit pour des conditions de températures variables au cours d'une année en raison des saisons avec une qualité d'eau fixée et les conditions hydrodynamiques de référence (Section 8.2.5)
- Simulation de la croissance du biofilm dans les différents éléments du circuit pour différentes qualités d'eau (concentration de substrat), pour une température fixée et les conditions hydrodynamiques de référence (Section 8.2.6)

8.2.1 Simulation de la croissance du biofilm dans les différents éléments du circuit

Pour chaque partie du circuit de refroidissement les compartiments ont été déterminés et le modèle peut être résolu dans les conditions nominales de fonctionnement du circuit de refroidissement. Les paramètres hydrodynamiques dans les garnissages sont fixés aux valeurs les plus probables des distributions déterminées dans la Partie II pour un taux d'arrosage de $10 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^2 \cdot \text{h}^{-1}$. Les conditions environnementales sont fixées aux valeurs moyennes (moyenne de température sur l'année et moyenne de concentration en substrat). Ces conditions sont listées dans le Tableau 8.3.

TABLE 8.3 – Paramètres hydrodynamiques dans les garnissages et conditions environnementales choisies pour effectuer les simulations des parties du circuit de refroidissement

| Paramètres hydrodynamiques des garnissages | |
|--|------|
| Contrainte de cisaillement (Pa) | 3,0 |
| Vitesse superficielle (m/s) | 0,08 |
| Épaisseur du film liquide (mm) | 0,55 |
| Conditions environnementales | |
| Température chaude (°C) | 33 |
| Température froide (°C) | 23 |
| Quantité de substrat - DBO (10^{-3} kg/m^3) | 1,0 |

Les simulations sont réalisées alors que les éléments du circuit sont déjà remplis d'eau. Les courbes de la Figure 8.9 représentent la masse de biofilm par unité de surface à partir de la colonisation et de

la croissance du biofilm (le temps d'incubation n'est pas représenté). Pour chaque partie du circuit, la masse de biofilm par unité de surface est moyennée sur l'ensemble des compartiments de la partie afin d'obtenir une valeur caractéristique de l'élément dans sa globalité. Par exemple, la valeur pour le garnissage tient compte de celles des cinq cascades de RPA en parallèle ayant chacune un profil de température vertical différent. La moyenne est pondérée par la surface de chaque compartiment.

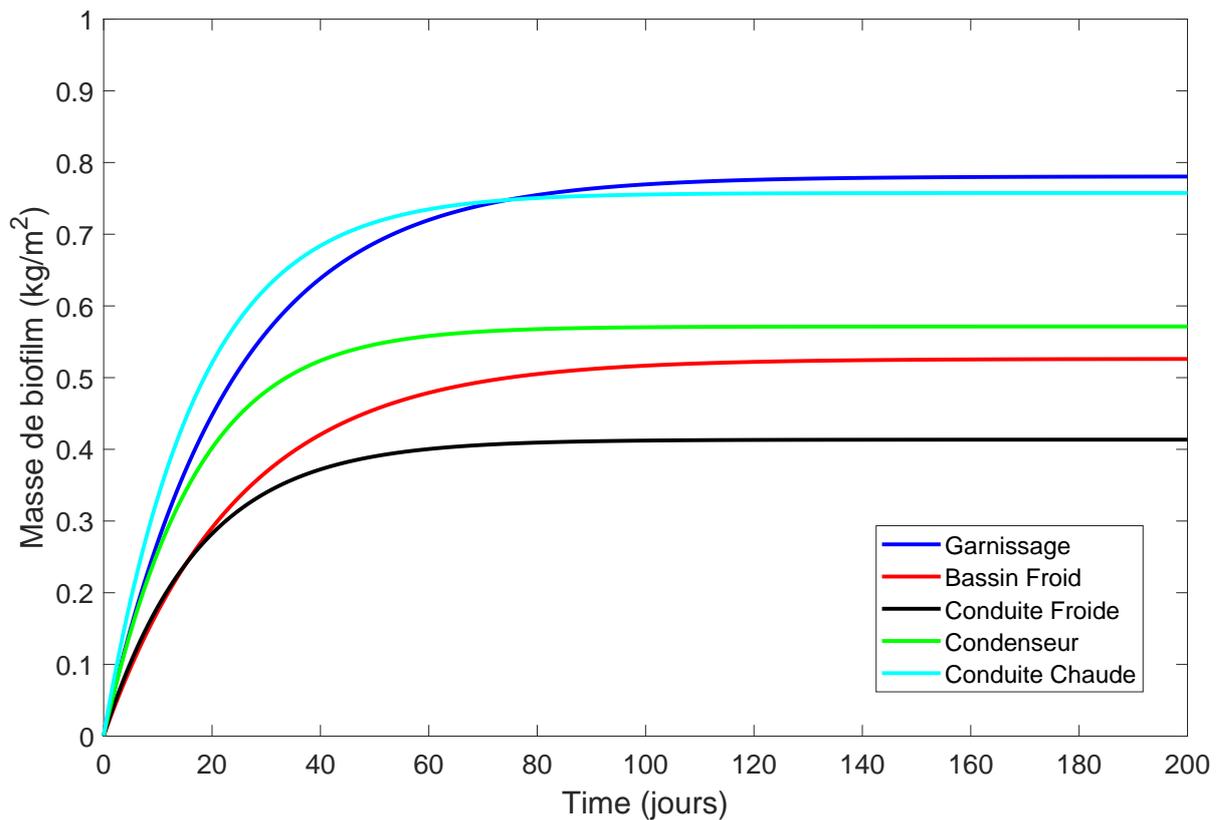


FIGURE 8.9 – Évolution de la masse de biofilm moyenne par unité de surface en fonction du temps pour les différentes parties du circuit de refroidissement (température et qualité d'eau constantes dans le temps)

Sur toutes les courbes on observe le régime transitoire de croissance du biofilm puis la masse du biofilm reste constante lorsque le régime permanent est atteint. La durée du régime transitoire varie selon la partie du circuit de refroidissement considérée : elle est d'environ 70 jours pour la masse de biofilm dans les conduites froides et dans le condenseur, de 90 jours pour la conduite chaude et de près de 120 jours pour le garnissage et le bassin froid.

Un des paramètres primordiaux influençant la quantité de biofilm est la température. Ce qui explique que la conduite chaude soit une zone plus propice au développement de biofilm que la conduite froide alors que les écoulements sont similaires. Cependant, les profils de température considérés sur l'ensemble garnissages et dans le condenseur sont similaires même s'ils sont inversés. Dans ce cas, la

différence de masse finale de biofilm entre les garnissages ($0,77 \text{ kg/m}^2$) et le condenseur ($0,56 \text{ kg/m}^2$) s'explique par la nature des écoulements. En effet, la valeur de la contrainte de cisaillement est de 3 Pa dans le garnissage pour des valeurs de 16 et 17 Pa selon la température dans le condenseur. La différence s'explique donc par l'importance de l'arrachement du biofilm dans le condenseur comparé au faible arrachement dans le garnissage.

Alors que les quantités finales de biofilm dans la conduite chaude et dans le condenseur sont du même ordre de grandeur, la dynamique de croissance du biofilm est plus rapide dans la conduite. Cela s'explique par le taux de cisaillement plus élevé dans la conduite que dans le garnissage. Le biofilm croît plus rapidement dans la conduite que dans les garnissages, mais l'arrachement étant plus important, la quantité de biofilm cesse d'augmenter. Pendant ce temps, la croissance du biofilm dans les garnissages est plus lente en raison du gradient de température, mais la contrainte de cisaillement étant moins forte, la quantité de biofilm à l'équilibre dépasse légèrement celle de la conduite chaude.

8.2.2 Influence des paramètres hydrodynamiques dans les garnissages

La caractérisation de l'hydrodynamique dans les garnissages effectuée dans la Partie II permet d'alimenter le modèle compartimental. Si la dépendance du modèle biologique aux paramètres principaux (température, concentration de substrat, contrainte de cisaillement, facteurs d'efficacité au transfert) a été étudiée au Chapitre 7, il est nécessaire d'analyser l'influence de l'hydrodynamique des films ruisselants sur le modèle de production de biofilm intégré dans le modèle compartimental. Les gammes des paramètres hydrodynamiques tels que le taux de mouillage, l'épaisseur du film liquide, la vitesse superficielle et la contrainte de cisaillement sont divisées en classes selon les distributions obtenues lors de la caractérisation hydrodynamique des garnissages. Pour le taux de mouillage, les résultats obtenus expérimentalement montrent des valeurs comprises entre 35 et 65 % avec une moyenne de 50 % et un écart type de 10 %, la taille de classe choisie est donc de 3 %. Pour la contrainte de cisaillement, les valeurs considérées sont comprises entre 2 et 4 Pa avec des classes de 0,2 Pa. Concernant la vitesse superficielle, les valeurs sont comprises entre 0,03 m/s et 0,1 m/s avec des classes de 0,01 m/s. Enfin, l'épaisseur du film liquide est comprise entre 0,3 mm et 0,8 mm avec une largeur de classe fixée à 0,05 mm. Les valeurs sont résumées dans le Tableau 8.4.

TABLE 8.4 – Caractéristiques des classes de valeurs pour les paramètres hydrodynamiques dans les garnissages : taux de mouillage, épaisseur de film liquide, vitesse superficielle et contrainte de cisaillement

| | Taux de mouillage (%) | Épaisseur du film liquide (mm) | Vitesse superficielle (m/s) | Contrainte de cisaillement (Pa) |
|--------------------------|---------------------------|--------------------------------|-----------------------------|---------------------------------|
| Classes | Valeur inférieure | 35 | 0,3 | 2 |
| | Valeur supérieure | 65 | 0,8 | 4 |
| | Taille des classes | 3 | 0,05 | 0,2 |
| Nombre de classes | 10 | 10 | 6 | 10 |

Le taux de mouillage, l'épaisseur du film et la vitesse superficielle sont liées par le débit et le taux de rétention dans les garnissages. Cependant, il est possible d'étudier l'influence de chacun de ces paramètres sur le modèle compartimental du biofilm de manière indépendante. Ainsi, le taux de mouillage joue sur la surface du réacteur soumise à l'encrassement. La vitesse superficielle et l'épaisseur du film liquide influent sur le régime d'écoulement et donc sur les critères d'efficacité au transfert externe du biofilm, mais aussi sur le transport des réactifs dans les différents compartiments de la cascade. Enfin, la contrainte de cisaillement a une influence directe sur le modèle de développement du biofilm dont elle est l'une des grandeurs d'entrée principales.

Le régime d'écoulement du film liquide restant laminaire quelle que soit la vitesse superficielle ou l'épaisseur de film considérées, ces deux grandeurs n'ont que très peu d'influence sur le modèle de croissance du biofilm. La quantité finale de biofilm par mètre carré a été simulée pour les différentes valeurs limites des classes de vitesse superficielle et d'épaisseur de film liquide. Les résultats pour cinq profils de température verticaux le long des garnissages sont présentés à la Figure 8.10. Les cinq profils de température représentent la différence de transfert thermique dans les garnissages induit par les différences de débits d'air : la température chaude en tête de garnissage est identique (fixée à 40 °C), mais les cinq températures froides en pied de tour sont différentes puisqu'elles sont fonction du refroidissement (différences de températures comprises entre 6 et 14 °C). La concentration en substrat est fixée à $1,0 \cdot 10^{-3}$ kg/m³ de DBO.

Les deux courbes montrent que l'épaisseur du film liquide et la vitesse superficielle n'ont pas d'influence sur la masse finale de biofilm dans les garnissages : 0,12 % de variation entre 0,3 et 0,8 mm d'épaisseur de film liquide et 0,05 % de variations entre 0,03 m/s et 0,1 m/s pour la vitesse superficielle.

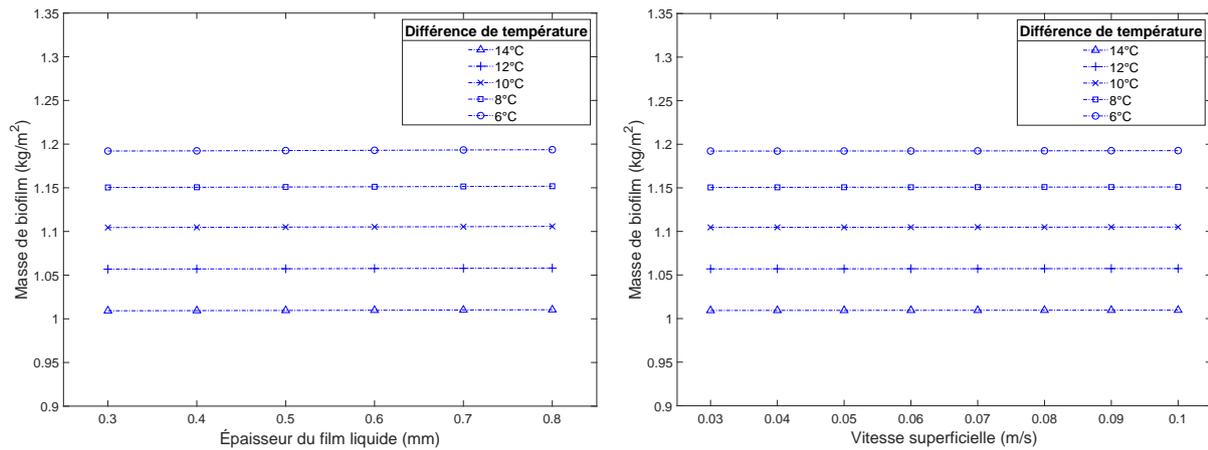


FIGURE 8.10 – Masse finale de biofilm par unité de surface en fonction de l'épaisseur du film liquide (gauche) et de la vitesse superficielle (droite) pour cinq profils de températures différents (température chaude fixée et cinq valeurs de température froide pour cinq différences de température)

En effet, pour toutes les valeurs de la gamme, la valeur du critère d'efficacité externe ne varie pas et reste proche de 1.

Concernant la contrainte de cisaillement, le modèle biologique a été construit sur une dépendance affine. Cette évolution affine se retrouve donc dans les profils de masse maximale de biofilm en fonction des différentes valeurs des classes des contraintes de cisaillement. Elles sont présentées à la Figure 8.11 :

Enfin, le taux de mouillage va déterminer la surface de garnissage soumise à l'écoulement et donc susceptible d'accueillir le développement du biofilm. L'intérêt de la résolution du modèle en masse de biofilm par unité de surface permet de ne pas prendre en compte le taux de mouillage directement dans le modèle compartimental. Le taux de mouillage va influencer en amont les caractéristiques du film liquide (la vitesse du fluide ainsi que l'épaisseur), mais il n'entre pas en compte dans le calcul de la masse de biofilm. Le taux de mouillage intervient lorsque la quantité totale de masse de biofilm présente dans les garnissages doit être calculée. La quantité de biofilm par unité de masse est alors multipliée par la surface arrosée du garnissage qui correspond à la surface totale du garnissage pondérée par le taux de mouillage.

Dans tous les cas, il est possible d'observer que plus la différence de température entre la température chaude et la température froide est faible, c'est-à-dire que plus la température reste relativement chaude, plus la masse de biofilm développée dans le garnissage est importante.

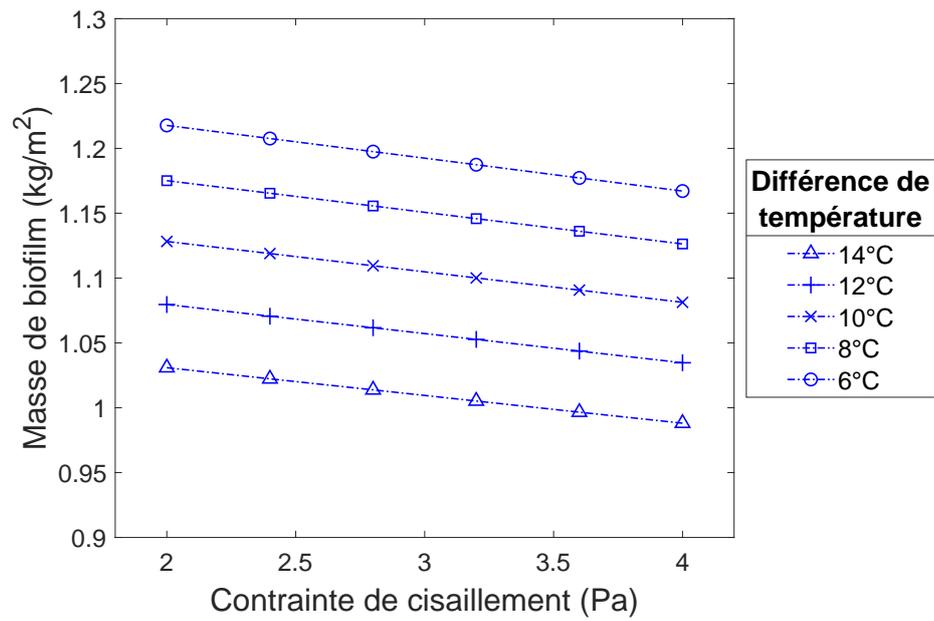


FIGURE 8.11 – Masse finale de biofilm par unité de surface en fonction de la contrainte de cisaillement pour cinq profils de températures

8.2.3 Influence des paramètres hydrodynamiques dans le bassin froid

Dans le bassin froid, l'hydrodynamique dans les quatre zones identifiées a été caractérisée grâce aux simulations de MFN dont les résultats sont présentés dans la Partie II. Les classes des paramètres étudiés sont présentées dans le Tableau 8.5 :

TABLE 8.5 – Caractéristiques des classes de valeurs pour les paramètres hydrodynamiques dans le bassin froid : vitesse du fluide et contrainte de cisaillement

| | | Vitesse (m/s) | Contrainte de cisaillement (Pa) |
|--|---------------------------|------------------|------------------------------------|
| Zones de faible vitesse et de recirculation | Valeur inférieure | 0,002 | 0,005 |
| | Valeur supérieure | 0,02 | 0,05 |
| | Taille des classes | 0,002 | 0,005 |
| Zones latérales et fond | Valeur inférieure | 0,02 | 0,05 |
| | Valeur supérieure | 0,2 | 0,5 |
| | Taille des classes | 0,02 | 0,05 |
| Zone centrale | Valeur inférieure | 0,02 | 0,05 |
| | Valeur supérieure | 0,2 | 0,5 |
| | Taille des classes | 0,02 | 0,05 |
| Sortie | Valeur inférieure | 0,2 | 0,5 |
| | Valeur supérieure | 2 | 2 |
| | Taille des classes | 0,2 | 0,5 |

Pour l'étude de l'influence de la contrainte de cisaillement, la vitesse du fluide est fixée à la valeur centrale des classes choisies pour chaque partie du bassin. Ainsi, la vitesse du fluide est fixée à 0,009 m/s pour la zone de faible vitesse, 0,09 m/s pour la zone latérale et le fond du bassin ainsi que pour la zone centrale et enfin à 0,9 m/s. Les valeurs des masses finales de biofilm simulées pour les quatre parties du bassin sont présentés à la Figure 8.12.

De même, pour l'étude de l'influence de la vitesse, la contrainte de cisaillement est fixée à la valeur centrale des classes choisies pour chaque partie du bassin, ce qui correspond à 0,0225 Pa pour la zone de faible vitesse et de recirculation, 0,225 Pa pour la zone latérale et fond ainsi que pour la zone centrale et enfin à 0,75 Pa pour la zone de sortie. Les résultats des masses finales de biofilm simulées pour les quatre parties du bassin sont présentées à la Figure 8.12.

Dans les gammes étudiées, les valeurs de contraintes de cisaillement considérées pour chaque partie du circuit n'ont pas d'influence forte sur la masse finale de biofilm. La zone centrale et la zone latérale et fond du bassin sont exposées aux mêmes contraintes hydrodynamiques. Leurs valeurs sont aussi regroupées sur les mêmes graphiques (Figure 8.12 milieu).

Une légère influence est observable lorsque les contraintes de cisaillement deviennent supérieures à 0,5 Pa pour la zone de sortie du bassin puisque la masse finale de biofilm diminue de 3 % lorsque la contrainte passe de 0,5 à 2 Pa. D'autre part, il est possible de noter une forte influence de l'augmentation de la vitesse dans les zones de très faible vitesse et de recirculation. Cela s'explique par la taille

caractéristique hydrodynamique du bassin de 1 m qui correspond à sa profondeur. Dans la gamme de vitesse comprise entre 0,002 m/s et 0,02 m/s, le transport externe du biofilm est en compétition avec la réaction biologique. Le temps caractéristique de l'apport des réactifs jusqu'au biofilm devient grand devant le temps caractéristique de réaction. Ainsi la valeur du critère d'efficacité externe défini dans le modèle est inférieure à 1. Pour une vitesse de 0,002 m/s, la valeur du critère d'efficacité externe est de 0,3285, elle remonte à 0,56 pour une vitesse de 0,004 m/s et à 0,87 pour une vitesse de 0,02 m/s ce qui explique l'allure de la courbe (Figure 8.12 haut droite). L'explication est la même pour la zone centrale et la zone latérale et fond du bassin. Entre 0,02 et 0,2 m/s le facteur d'efficacité externe varie entre 0,87 et 1.

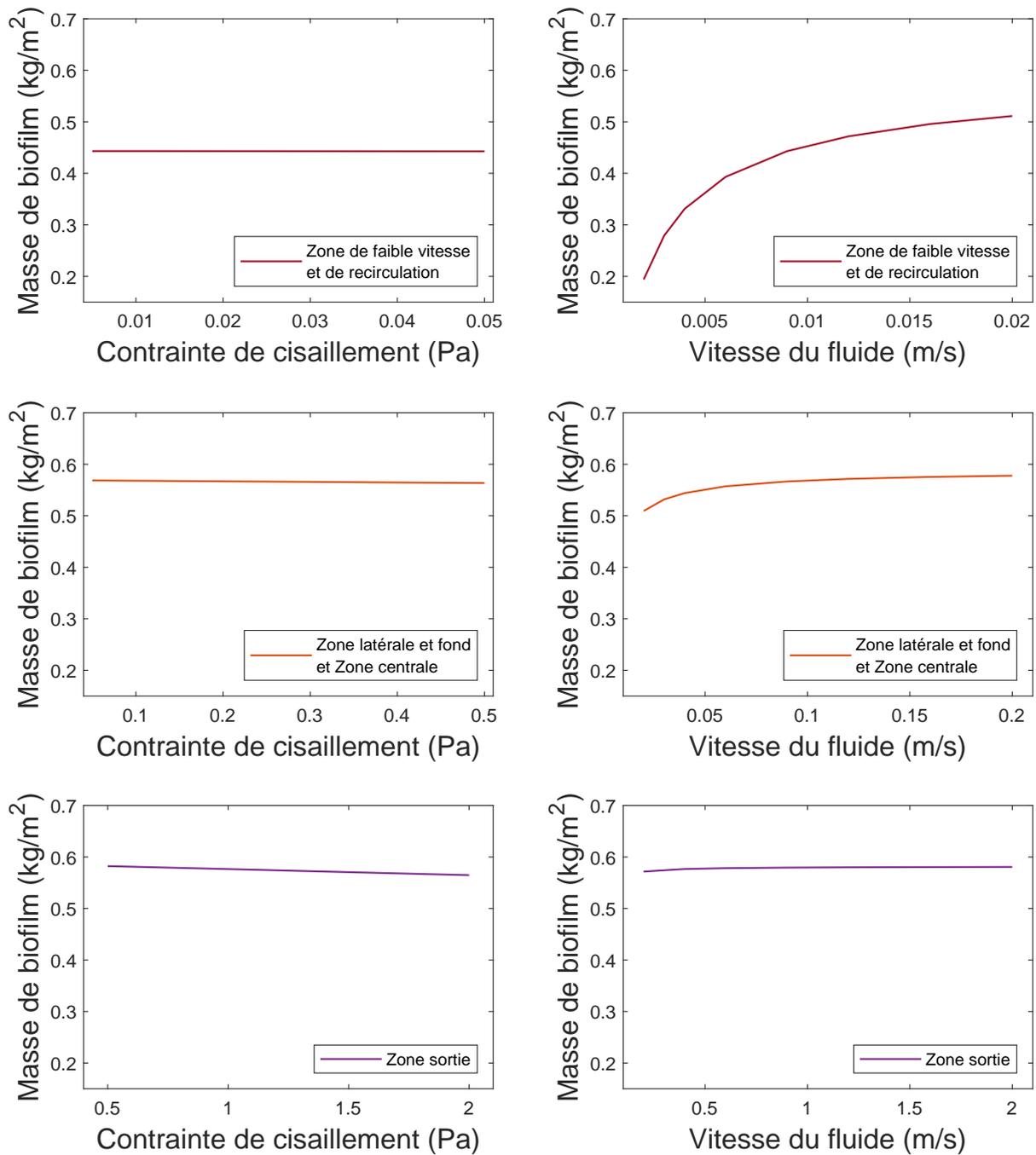


FIGURE 8.12 – Masse finale de biofilm par unité de surface en fonction de la contrainte de cisaillement (gauche) et de la vitesse du fluide (droite) pour les quatre zones du bassin : zone de faible vitesse (haut), zone centrale ainsi que zone latérale et fond (milieu) et zone de la sortie du bassin (bas)

8.2.4 Influence des paramètres hydrodynamiques dans la zone d'établissement de la turbulence dans les conduites

La caractérisation hydrodynamique dans les conduites en béton a montré que, dans les zones où la turbulence est établie, la contrainte de cisaillement pouvait être calculée de manière fiable avec les corrélations de la littérature. Cependant, dans la zone d'établissement, il a été nécessaire d'effectuer des simulations de MFN pour obtenir le profil des contraintes de cisaillement en fonction de la position dans le tube (Chapitre 6, Figure 6.6). Ce profil dépend de la nature de l'écoulement avant la conduite (e.g. turbulence homogène due à un obstacle, coude). Ces profils de contraintes de cisaillement ont été repris afin d'effectuer des simulations de croissance de biofilm avec le modèle compartimental. La température est fixée à 23°C dans la conduite froide et 33°C dans la conduite chaude. La quantité de substrat et tous les autres paramètres hydrauliques (débit et vitesse) sont maintenus constants. Les valeurs des conditions de simulation sont présentées Tableau 8.6.

TABLE 8.6 – Conditions environnementales choisies pour effectuer les simulations des conduites chaude et froide en béton

| Conditions environnementales | |
|---|-----|
| Température chaude (°C) | 33 |
| Température froide (°C) | 23 |
| Quantité de substrat - DBO (10 ⁻³ kg/m ³) | 1,0 |

La Figure 8.13 présente la masse finale de biofilm par unité de surface pour les différents profils de contraintes de cisaillement obtenus avec différentes initialisations de l'écoulement : vitesse uniforme et dissipation turbulente fixée à 5 %, intrados d'un coude à 120° et extrados du même coude.

Les courbes obtenues présentent la même allure que l'inverse des profils de contraintes de cisaillement : plus la contrainte de cisaillement est importante et moins la masse surfacique de biofilm sera élevée. La masse de biofilm la plus grande se développe donc à la sortie de l'intrados du coude à 120°, là où la contrainte est la plus faible. À l'inverse, la masse déposée dans l'extrados est très faible à l'entrée du tube. Les valeurs de masse de biofilm tendent ensuite vers la même valeur qu'en régime turbulent établi qui est atteinte après une centaine de mètres de conduite.

La température de l'eau influe sur la masse finale de biofilm comme expliqué précédemment. Mais la température de l'eau joue aussi sur l'importance de l'influence de la contrainte de cisaillement : plus la

masse de biofilm est importante, plus la contrainte de cisaillement a un effet sur l'équilibre du biofilm. Pour la même variation de contraintes de cisaillement entre le coude et la turbulence établie, l'équilibre d'un biofilm plus épais de la conduite chaude (en raison de la température plus favorable) sera plus influencé par les forces de frottement mécanique en paroi que le biofilm développé dans la conduite froide. Par exemple, pour l'intrados du coude, la masse de biofilm varie entre 0,99 et 0,79 kg/m² (soit 30 %) pour la conduite chaude et entre 0,79 et 0,43 kg/m² (soit 20 %) pour la conduite froide.

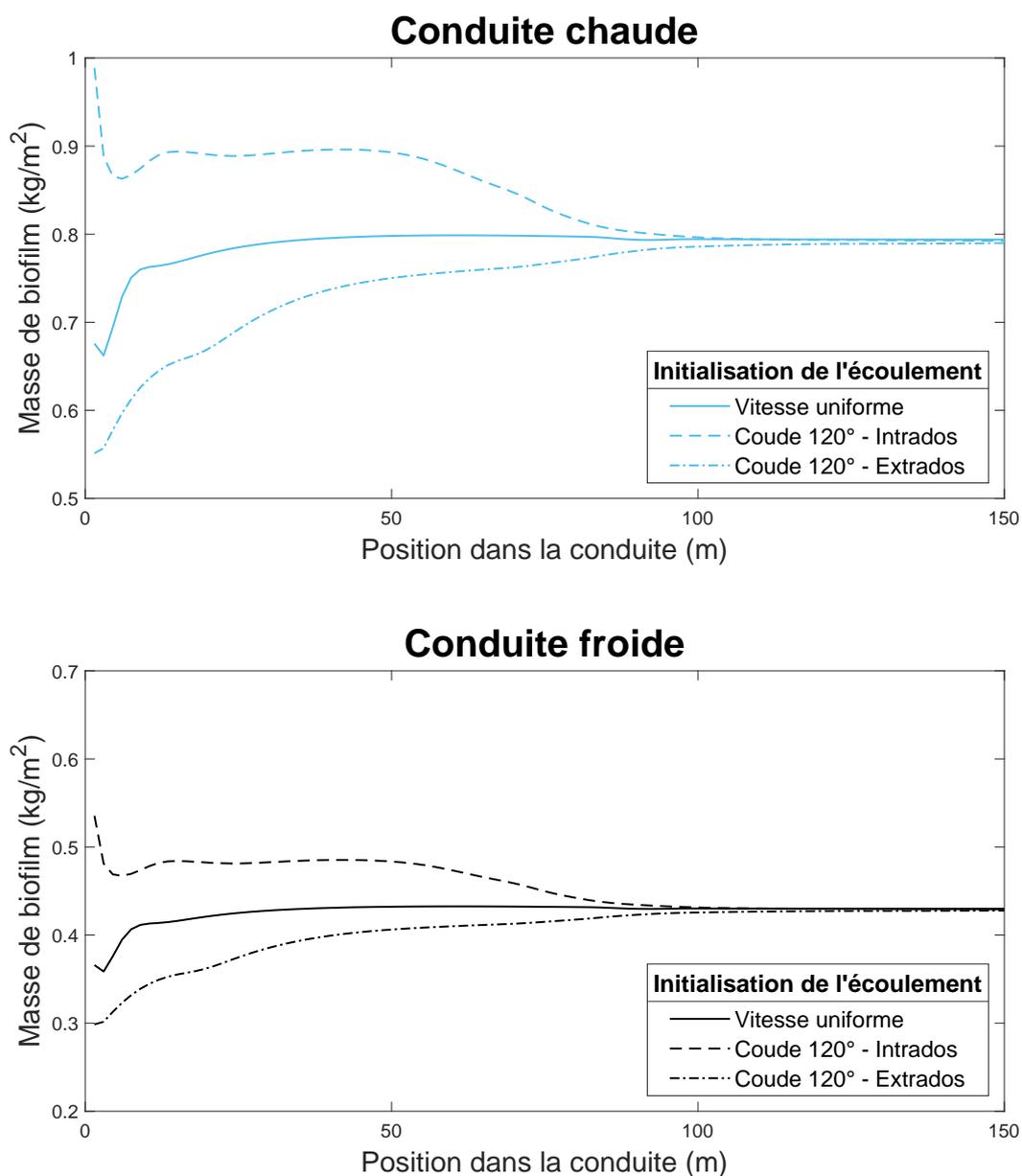


FIGURE 8.13 – Masse finale de biofilm par unité de surface en fonction de l'initialisation de l'écoulement dans la conduite chaude (haut) et la conduite froide (bas)

8.2.5 Simulation de la variation de température au cours d'une année

Au cours d'une année, les changements de température en fonction des saisons impliquent des variations de température de la source froide. Des relevés montrent que sur un cas d'étude d'une rivière française, les conditions météorologiques provoquent une augmentation de 15°C de la température de purge de la source froide entre le moment le plus froid (hiver) et le moment le plus chaud (été) de l'année. La variation de la température sur l'année suit la forme d'une sinusoïde. Nous avons appliqué ces données dans les simulations. Les conditions environnementales des simulations sont résumées dans le Tableau 8.15.

TABLE 8.7 – Conditions environnementales choisies pour effectuer les simulations des parties du circuit de refroidissement sur un an avec variation saisonnière de température

| Conditions environnementales | |
|---|-----|
| Température chaude min (°C) | 25 |
| Température chaude max (°C) | 40 |
| Température froide min (°C) | 15 |
| Température froide max (°C) | 30 |
| Quantité de substrat - DBO (10 ⁻³ kg/m ³) | 1,0 |

La courbe d'évolution de la température de la purge du circuit de refroidissement est présentée à la Figure 8.14. La température de purge correspond à la température froide du circuit, c'est-à-dire à la température de l'eau après qu'elle est passée dans la tour aéroréfrigérante et qu'elle a été refroidie. La température est donc stable et représente le fonctionnement du circuit en régime permanent.

La Figure 8.15 présente les tracés des courbes de la masse de biofilm par unité de surface pour les différentes parties du circuit de refroidissement pendant 1 an en tenant compte des variations saisonnières de température décrites précédemment. Cette figure présente le cas d'évolution d'une masse de biofilm établi sans la période d'incubation et sans le régime transitoire. Comme précédemment, pour chaque partie du circuit, la valeur de masse de biofilm par mètre carré est moyennée sur l'ensemble des compartiments de la partie et pondérée par la surface de chaque compartiment.

La quantité de masse finale de biofilm suit le même ordre qu'observé dans les autres simulations et suit les valeurs de la température de chaque élément : la masse la plus importante se développe dans les garnissages et la conduite chaude et la masse la plus faible dans la conduite froide. Les courbes de masse de biofilm suivent l'évolution de la température avec un déphasage plus ou moins important

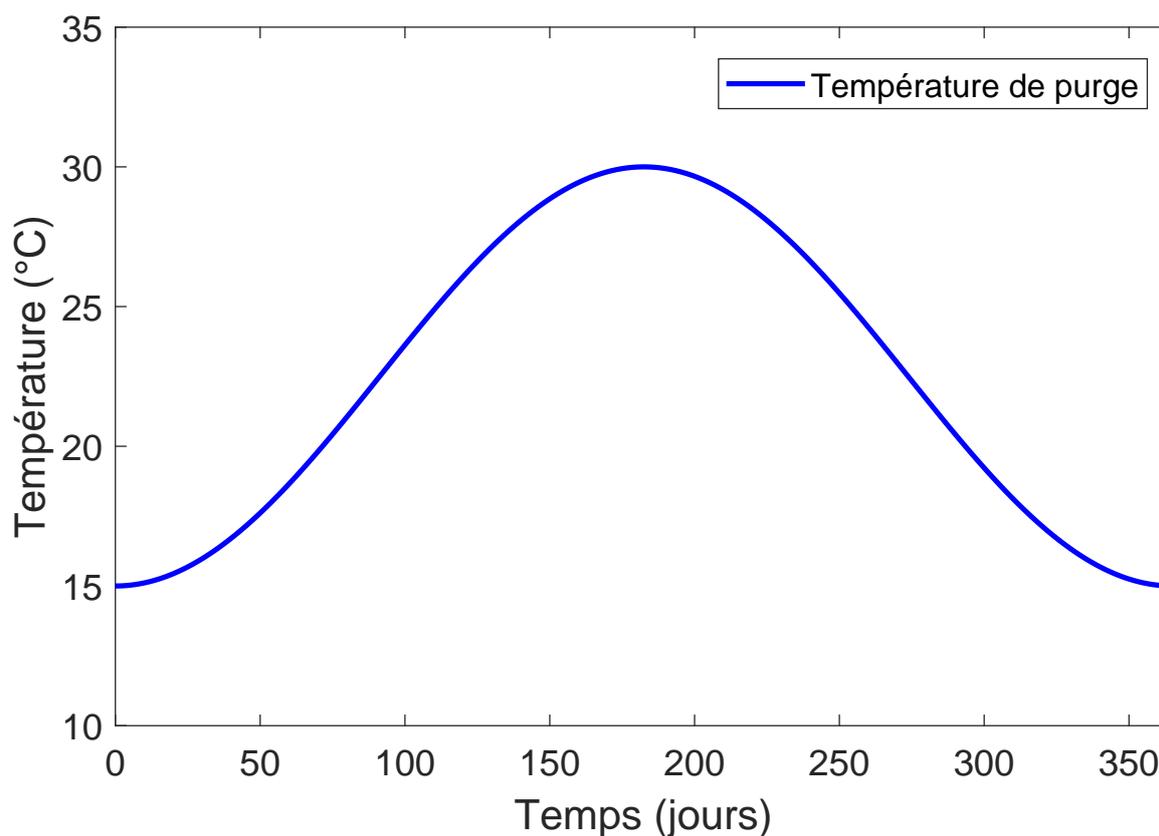


FIGURE 8.14 – Hypothèse de variation de la température de purge du circuit de refroidissement sur un an

selon la partie du circuit dû à la réponse hydrodynamique du système (période transitoire du modèle de croissance du biofilm). Ainsi le bassin froid et le garnissage présentent une inertie de variation plus importante donc un déphasage plus grand par rapport à la courbe de température. Cependant, il est possible d'observer que la courbe de la masse de biofilm dans la conduite chaude présente un palier pendant la période la plus chaude de l'année (entre le jour 140 et le jour 240). Ce palier est dû au dépassement de la température limite de développement du biofilm : au-delà de 39,25 °C, l'augmentation de la température provoque une très forte chute de la vitesse de croissance du biofilm et au-delà de 46,35 °C, la vitesse de croissance devient nulle et le biofilm meurt. La température chaude maximale étant de 40°C, la croissance de biofilm dans la conduite chaude atteint donc un palier.

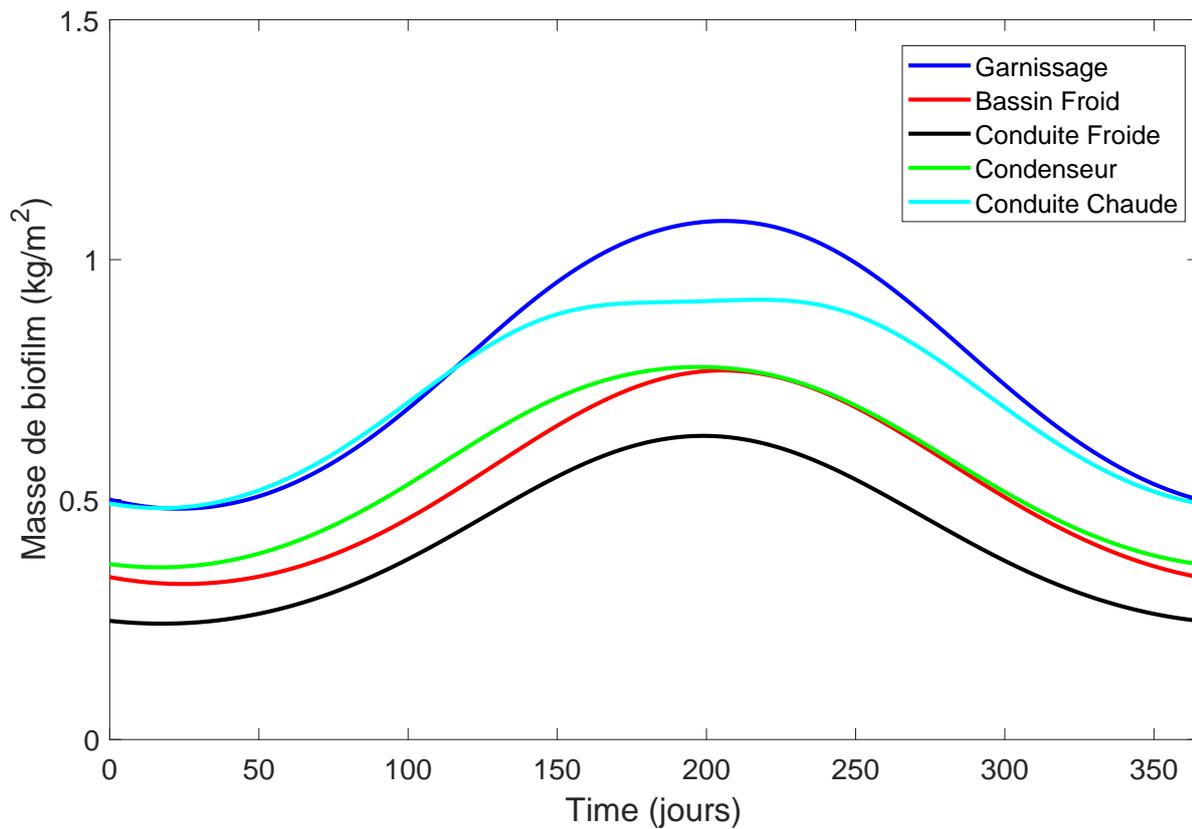


FIGURE 8.15 – Évolution de la masse de biofilm établi par unité de surface dans les différentes parties du circuit de refroidissement pendant un an en tenant compte des variations de température saisonnières

8.2.6 Simulation de la qualité d'eau

La qualité d'eau de la source froide peut varier au cours du temps de manière cyclique suivant les saisons (e.g. étiage, fontes des neiges, activités humaines) ou en raison d'évènements ponctuels (e.g. crues, sécheresses). Durant ces périodes la concentration en substrat varie dans l'environnement. Des relevés sur le cas test d'une rivière française donnent des gammes d'évolution de la DBO entre 0,5 et $1,5 \cdot 10^{-3} \text{ kg/m}^3$. Les paramètres des simulations sont présentés dans le Tableau 8.8.

TABLE 8.8 – Conditions environnementales choisies pour effectuer les simulations des parties du circuit de refroidissement avec différentes qualités d'eau

| Conditions environnementales | |
|---|-----|
| Température chaude (°C) | 33 |
| Température froide (°C) | 23 |
| Quantité de substrat - DBO min (10^{-3} kg/m ³) | 0,5 |
| Quantité de substrat - DBO max (10^{-3} kg/m ³) | 1,5 |

La Figure 8.16 présente les tracés des courbes de la masse de biofilm par unité de surface pour les différentes parties du circuit en fonction de la concentration en substrat dans la source froide (DBO). La valeur considérée est la masse de biofilm à l'équilibre (la période d'incubation et le régime transitoire ne sont pas pris en compte) et pour chaque partie du circuit, la valeur de masse de biofilm par mètre carré est moyennée sur l'ensemble des compartiments de la partie et pondérée par la surface de chaque compartiment.

Pour chaque quantité de substrat, la masse finale de biofilm suit les valeurs de la température de chaque partie du circuit. Le modèle de croissance du biofilm ayant pour hypothèse une cinétique biologique d'ordre 1, la dépendance en concentration de substrat est linéaire : plus la concentration est élevée plus la masse finale de biofilm par unité de surface est importante. L'influence de la quantité de substrat dans l'eau sur la masse finale de biofilm est donc plus importante que la température est elle-même proche de la température optimale de développement du biofilm.

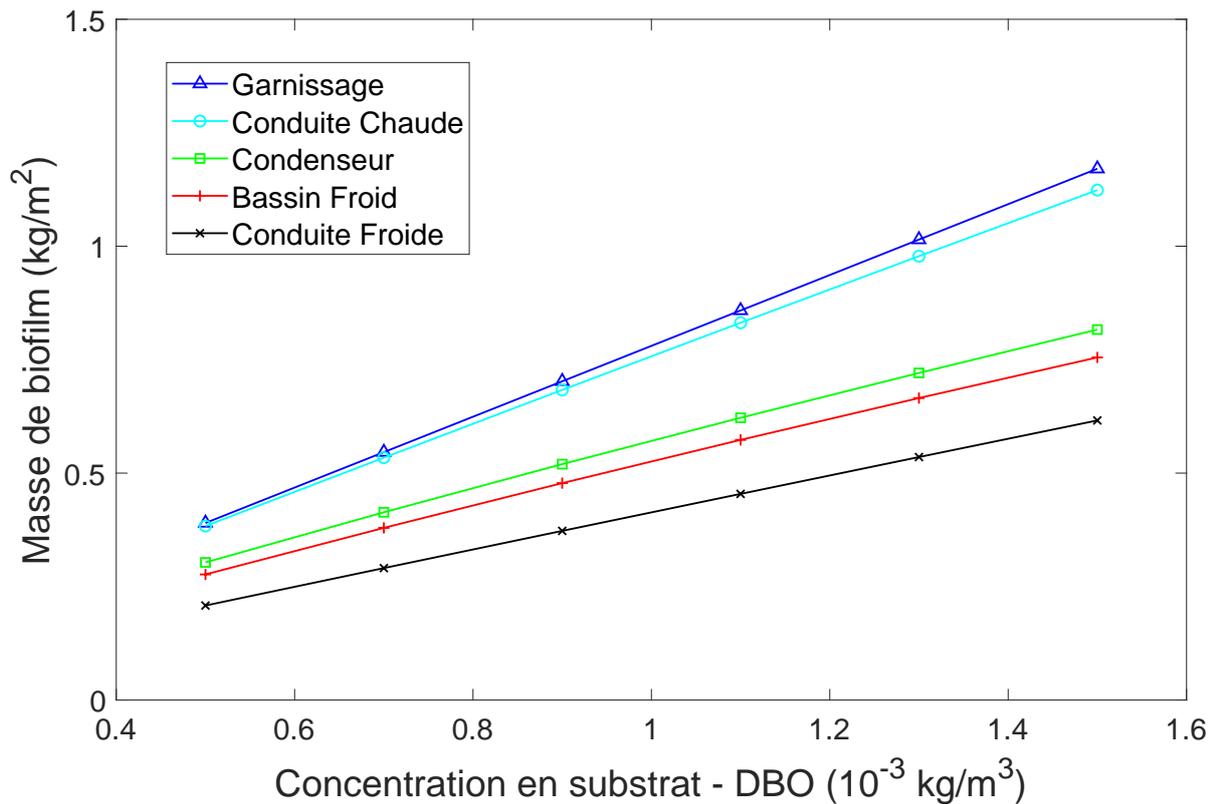


FIGURE 8.16 – Évolution de la masse finale de biofilm par unité de surface dans les différentes parties du circuit de refroidissement pour différentes qualités d'eau

8.3 Discussions et perspectives du modèle

8.3.1 Retombées du modèle : utilisation de la modélisation du biofilm

Le modèle conçu donne comme résultat la masse de biofilm par mètre carré pour les différentes parties du circuit. La masse totale de biofilm est obtenue en multipliant la masse par unité de surface par la surface active de la zone de la partie étudiée. Pour les tubes de condenseur, et les conduites en béton, la surface active correspond à la totalité de la surface interne de la conduite ; pour le bassin froid, la surface correspond à la surface du fond, des parois et des obstacles (e.g. piliers, château d'eau central) ; pour le garnissage, la surface correspond à la surface solide disponible pondérée par le taux de mouillage.

Les résultats du modèle peuvent être étudiés au cours du temps pour obtenir l'évolution de la croissance du biofilm et elle peut aussi être étudiée spatialement dans chaque zone et dans chaque compartiment de chaque zone. Le modèle peut donc donner une cartographie de la quantité de biofilm déposée au cours du temps dans l'ensemble du circuit. Il existe trois niveaux de détails :

- cartographie de la quantité de biofilm par partie du circuit (condenseur, conduites chaude et froide, garnissage et bassin froid),

- cartographie de la quantité de biofilm par zone (e.g. le bassin est divisé en quatre zones, le garnissage en cinq zones selon le profil de température, les conduites en deux zones selon la turbulence établie ou non),
- cartographie de la quantité de biofilm par compartiment (e.g. nombre de RPA en série dans les cascades, nombre de RPA avec rétro-mélange dans les zones du bassin).

La précision de la cartographie va dépendre du raffinement du découpage en zones et en compartiments : le nombre de RPA dans les cascades ou dans les zones du bassin va donc déterminer la résolution spatiale du modèle. Les informations pour chaque niveau de précision peuvent être obtenues en adaptant la routine de post-traitement des données. La précision de la cartographie doit être adaptée en fonction de l'utilisation souhaitée des résultats obtenus (étude de recherche et développement).

La modélisation de la quantité de masse de biofilm au cours du temps peut permettre à l'exploitant de mieux planifier les campagnes de traitement des circuits de refroidissement. À terme, le modèle peut aussi aider à prévoir les maintenances si l'encrassement devient critique. L'étude de sensibilité du modèle à la température du milieu et à la qualité d'eau peut permettre de prédire le fonctionnement normal d'un circuit, mais aussi les phénomènes exceptionnels tels que les crues ou les périodes de sécheresse. La rapidité de calcul du modèle (moins de dix minutes pour le circuit complet sur un an) permet de simuler un grand nombre de cas prévisionnels, mais aussi de faire des simulations tenant compte en temps réel de l'évolution des phénomènes tels que les facteurs environnementaux ou les conditions hydrodynamiques.

Les résultats du modèle peuvent aussi servir pour les travaux de recherche et de développement de nouvelles géométries de circuit de refroidissement. La paramétrisation du modèle permet d'observer l'influence des conditions hydrodynamiques sur l'encrassement et donc de tester des modifications de l'écoulement. Par exemple, une réduction des zones mortes dans le bassin peut augmenter le taux de cisaillement dans ces zones et réduire la masse de biofilm formée. Dans les garnissages, une utilisation directe du modèle sans modification des paramètres hydrodynamiques peut permettre de déterminer la quantité optimale de garnissage pour limiter l'encrassement tout en assurant un transfert thermique suffisant. Dans un second temps, une étude hydrodynamique du garnissage permettrait d'alimenter le modèle compartimental pour de nouvelles géométries à tester et ainsi d'évaluer leur prédisposition à l'encrassement. Une seule étude hydrodynamique préliminaire fournit les informations pour le modèle compartimental, qui ensuite permet de balayer un plan d'expérience très large des conditions opératoires.

8.3.2 Limites du modèle compartimental

Tout d'abord le modèle compartimental développé et utilisé ici a pour objectif de montrer l'intérêt de la modélisation compartimentale pour étudier l'influence de l'hydrodynamique sur les phénomènes d'encrassement. Le modèle permet effectivement de simuler les quantités de biofilm et l'influence des écoulements sur le développement du biofilm. Cependant, l'encrassement réel d'un circuit de refroidissement est plus complexe car de nature multiple : biologique, physique et chimique. De plus, si le modèle prédit la croissance du biofilm, les simulations ne tiennent pas compte de la présence éventuelle de substances biocides, qui sont généralement utilisées lors de l'exploitation des circuits de refroidissement industriels.

Différentes hypothèses ont été nécessaires afin de construire le modèle compartimental. Une première limitation de ce modèle est sa dépendance aux résultats de la caractérisation hydrodynamique. La construction du modèle et la détermination des compartiments sont basées sur l'hydrodynamique. Une fois la structure du modèle et les compartiments construits, les informations sur l'hydrodynamique alimentent aussi le modèle pour le calcul des flux entre les compartiments et les paramètres de chaque compartiment (e.g. contrainte de cisaillement, vitesse du fluide). La caractérisation hydrodynamique doit donc être complète et validée afin que le modèle compartimental soit valable. Pour le modèle développé, l'hydrodynamique a fait l'objet d'un travail complet présenté dans la Partie II. L'étude hydrodynamique complète n'est nécessaire qu'une seule fois pour la construction et la détermination des paramètres du modèle compartimental. Cependant, la caractérisation hydrodynamique devra être modifiée si la géométrie ou tout autre critère influençant fortement l'hydrodynamique est changé.

Le modèle compartimental a été construit de manière à représenter l'hydrodynamique dans le circuit de refroidissement. Les différents réseaux de compartiments représentés par des réacteurs idéaux permettent la résolution des équations cinétiques et le transport des espèces entre les compartiments. Dans ce modèle, seules les espèces présentes dans la phase liquide sont transportées : le biofilm formé sur la surface est considéré comme une phase différente et donc il n'est pas transporté entre les compartiments. Le modèle ne tient donc pas compte du biofilm détaché transporté entre les compartiments qui pourrait se fixer et se développer ailleurs dans le circuit. Lorsque la quantité de biofilm diminue en paroi en raison des conditions environnementales (e.g. forte augmentation de température qui dépasse la température limite) cette quantité de biofilm perdue est considérée comme relâchant du substrat selon l'inverse de l'équation cinétique de croissance du biofilm. Or, des études microbiologiques ont démontré l'existence de microorganismes sous différentes formes pouvant se détacher d'un biofilm et être transportés pour coloniser de nouvelles surfaces. Pour l'étude d'un biofilm plus spécifique, ce transport pourra être pris en compte en adaptant légèrement le modèle.

Une autre hypothèse forte dans le modèle compartimental se situe au niveau de la modélisation des garnissages. Il tient compte du transfert thermique dans la tour aéroréfrigérante uniquement sous forme de gradient de température. La quantité d'eau évaporée est modélisée comme un prélèvement d'un débit équivalent au pied de la tour et non comme un phénomène continu le long du garnissage. Cette hypothèse peut avoir une influence sur la concentration des espèces chimiques dans la tour. En effet, dans les garnissages, la quantité d'eau évaporée ne transporte pas d'espèces chimiques et donc provoque localement une concentration des espèces et une variation du pH. La part du débit évaporée ne représente que $0,5 \text{ m}^3/\text{s}$ sur les $17,25 \text{ m}^3/\text{s}$ injectés en haut de la tour aéroréfrigérantes soit 3 % du débit total. La surconcentration étant faible et le pH n'intervenant pas dans le modèle de croissance du biofilm, cette hypothèse est valide pour le modèle compartimental de croissance du biofilm. Cependant, la surconcentration et surtout l'évolution du profil de pH le long des garnissages devront être implémentées pour modéliser des phénomènes plus sensibles au pH telle que la précipitation du calcaire.

8.3.3 Perspectives du modèle

De nombreuses perceptives peuvent être proposées pour le modèle compartimental de prédiction de l'encrassement des circuits de refroidissement sous forme de biofilm.

Dans un premier temps, des études futures peuvent être envisagées sans modifier la structure du modèle. L'approche de modélisation compartimentale est un outil très modulable dans lequel de nombreux types de phénomènes peuvent être implémentés. En considérant le même modèle biologique, des simulations peuvent être réalisées afin de simuler l'ajout d'un traitement contre les biofilms. Il suffit de coder une équation représentant l'action locale du traitement sur le biofilm dans la partie réactive du modèle : cela peut se faire en recalculant les paramètres du modèle de biofilm proposé ici afin de modifier la dynamique de croissance du biofilm ou en ajoutant une équation supplémentaire de dégradation du biofilm. Il sera ainsi possible de simuler les effets des traitements sur l'ensemble du circuit et, par exemple, comparer l'efficacité de plusieurs traitements différents ou mieux dimensionner une campagne de réduction de l'encrassement. Ces implémentations nécessitent des études biologiques spécifiques pour obtenir les mécanismes et les cinétiques biologiques.

Pour simuler l'ensemble de l'encrassement et ainsi avoir une représentation plus fidèle de la réalité dans les circuits de refroidissement, il est possible d'ajouter de nouveaux phénomènes bio-physico-chimiques sans modifier la structure du modèle. Dans un premier temps, le plus intéressant serait d'ajouter une équation pour la précipitation du tartre et une équation pour le dépôt de particules ou de matières en suspension. Pour la précipitation du tartre, le code CooliSS développé par EDF permet de modéliser la précipitation du tartre en tenant compte des contraintes environnementales

et de l'utilisation de traitements (Alos-Ramos *et al.*, 2008; Marconnet *et al.*, 2014). Dans ces deux cas, le modèle peut être adapté facilement en ajoutant de nouvelles quantités transportées (e.g. quantité de MES, concentration en ions responsables de la formation du tartre) et une équation de réaction pour chaque phénomène. Ces ajouts rendraient la modélisation de l'encrassement plus fidèle à la réalité, l'encrassement des circuits n'étant pas uniquement biologique.

Des nouveaux développements peuvent permettre de s'affranchir des limitations et des hypothèses évoquées précédemment. Ces améliorations peuvent rendre le modèle encore plus transposable à davantage de systèmes industriels et de types d'écoulements. De tels changements nécessitent cependant une modification de la structure même du modèle compartimental. L'ajout du transfert thermique et de l'évaporation dans les garnissages ajoute un nouvel objectif au modèle. Le modèle compartimental peut être capable d'évaluer les performances des garnissages moyennant une modification du modèle et une caractérisation hydrodynamique tenant compte de l'évaporation et du transfert thermique.

Enfin, la méthodologie développée et son application au circuit de refroidissement est une preuve de fonctionnement de la méthode compartimentale pour l'étude de l'influence de l'hydrodynamique sur les phénomènes bio-physico-chimiques. Cet exemple d'application de la méthode compartimentale en fait un outil adapté pour la modélisation des écoulements dans de nombreux cas industriels.

8.4 Conclusion

Grâce à la caractérisation hydrodynamique effectuée dans la Partie II, il a été possible de construire les compartiments pour chaque partie du circuit de refroidissement. Le modèle de croissance de biofilm développé au Chapitre 7 a ensuite été implémenté dans le modèle compartimental. Le modèle compartimental ainsi créé peut simuler la quantité de biofilm dans les cinq parties du circuit : le garnissage, le bassin froid, la conduite froide, le condenseur et la conduite chaude (Figure 8.17). La masse de biofilm par unité de surface a ainsi été obtenue et analysée pour ces différentes parties du circuit et une cartographie de l'encrassement biologique a pu être proposée. La majeure partie du biofilm se développe dans les zones chaudes donc dans le condenseur, le garnissage et la conduite chaude. Une étude de sensibilité a été menée sur l'influence des paramètres hydrodynamiques dans le garnissage, le bassin froid et les conduites. Les conditions environnementales telles que la température de l'eau dans le milieu et la qualité de l'eau ont aussi été étudiées pour comprendre l'influence de telles conditions sur le biofilm. Le biofilm se développe plus facilement en été lorsque la température de l'eau est élevée et lorsque l'eau est chargée en matière organique. De nombreuses pistes d'amélioration du modèle et des perspectives pour les travaux de recherche futurs ont été évoquées afin de mieux prédire encore

l'encrassement des circuits de refroidissement. Enfin, cette étude a prouvé la pertinence de l'approche compartimentale pour l'étude et la modélisation de l'hydrodynamique et son influence sur les divers phénomènes physico-chimiques dans les systèmes industriels.

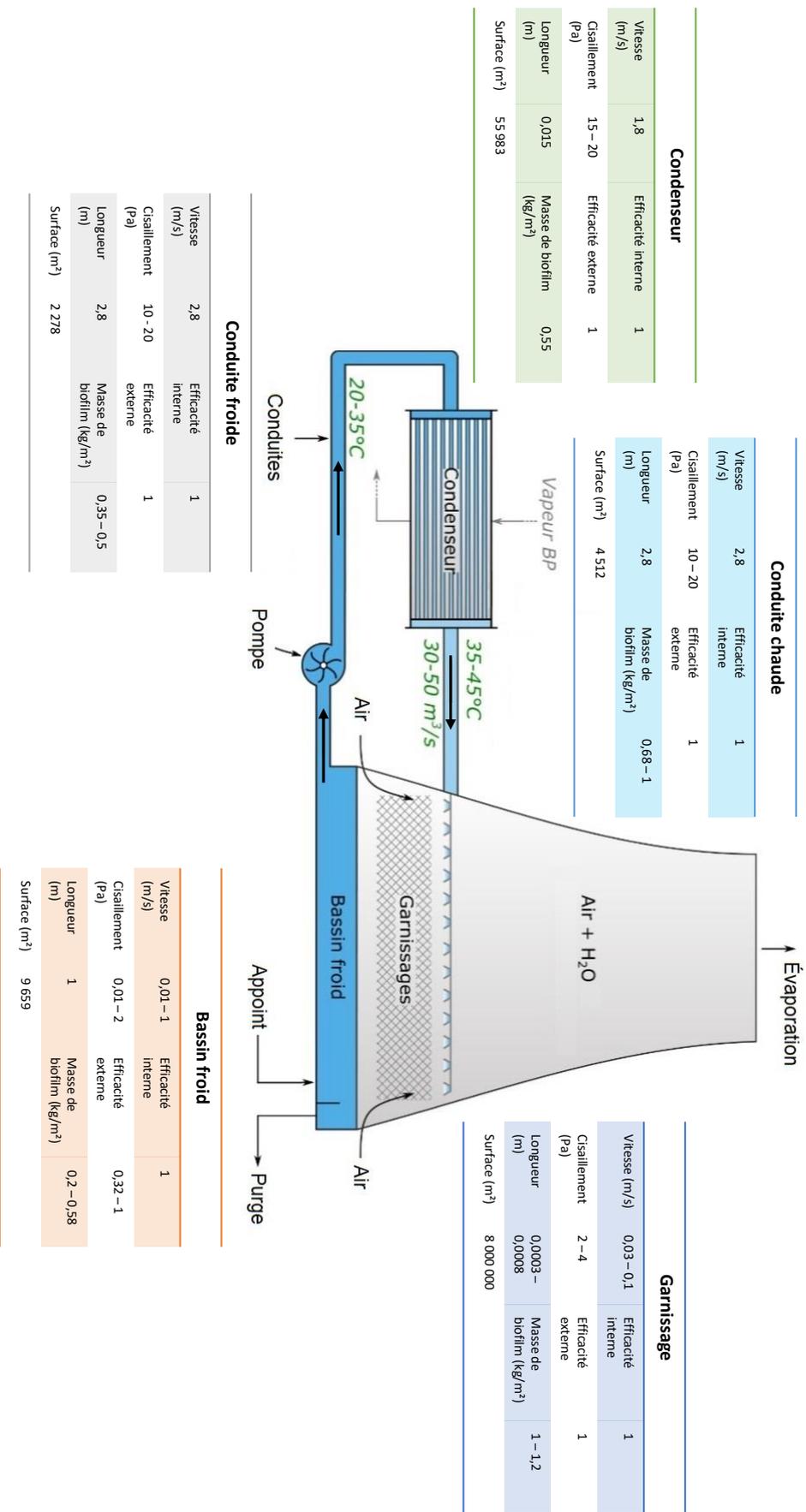


FIGURE 8.17 – Cartographie des conditions hydrodynamiques et de la quantité de biofilm obtenue par le modèle compartimental pour les différentes parties du circuit (Température Froide = 23 °C, Température Chaude = 33 °C et DBO = $1,0 \cdot 10^{-3}$ kg/m³)

Conclusion et perspectives

Synthèse des résultats

L'étude de l'influence de l'hydrodynamique sur l'encrassement des circuits de refroidissement industriels est une problématique pluridisciplinaire. L'encrassement est un enjeu majeur pour l'exploitation des circuits et le refroidissement industriel provoquant une perte d'efficacité de refroidissement et donc une baisse de rendement du procédé. Des traitements chimiques peuvent être utilisés afin de le maîtriser et de réduire cette perte d'efficacité de refroidissement. La compréhension et la maîtrise de l'encrassement sont donc à la fois des enjeux économiques pour limiter la perte d'efficacité des installations, environnementaux pour contrôler et limiter l'usage des traitements, ainsi que technologiques pour la compréhension et le design des futurs éléments des circuits. Dans ce cadre, le sujet de cette thèse, c'est-à-dire la caractérisation des écoulements dans les différentes parties des circuits de refroidissement et la construction d'un modèle de l'influence de l'hydrodynamique sur cet encrassement, représentait des verrous et des enjeux scientifiques importants (e.g. acquisition de connaissances dans de nombreux domaines, développement méthodologique).

Nous avons réalisé une étude bibliographique des phénomènes d'encrassement physiques, chimiques et biologiques qui a mis en avant leur dépendance à la mécanique des fluides. Les différentes phases de développement du dépôt sur les surfaces sont soumises à l'influence de l'hydrodynamique : transport des éléments dans le circuit, apport des espèces chimiques ou biologiques à la surface, forces de frottement fluide à la paroi. C'est pourquoi la caractérisation hydrodynamique des circuits de refroidissement et la modélisation des effets de l'écoulement sur le développement de l'encrassement ont fait l'objet d'un travail de recherche approfondi. L'étude des outils de modélisation de l'hydrodynamique couplée à des phénomènes bio-physico-chimiques disponibles dans la littérature a mis en évidence l'intérêt de l'approche compartimentale. En effet, cette approche de modélisation est une méthodologie hybride qui permet de rassembler les avantages des méthodes de modélisation à l'échelle locale (e.g. Mécanique des Fluides Numérique) et à l'échelle du système (modélisation systémique); cette approche de modélisation a fait l'objet d'une revue qui constitue une partie de l'étude bibliographique de cette thèse (Jourdan *et al.*, 2019). Devant la diversité des géométries et donc des écoulements supposés dans les différentes parties du circuit de refroidissement, la méthode compartimentale a été choisie comme étant la plus adaptée pour modéliser l'encrassement dans ce type

de circuit ; l'approche systémique n'étant pas assez précise pour les buts recherchés et l'approche de MFN étant impossible à mettre en œuvre pour des systèmes aussi grands et complexes.

Une fois la méthodologie de modélisation identifiée, nous avons procédé à la caractérisation des écoulements dans les parties du circuit de refroidissement : les conduites cylindriques, les tubes du condenseur, le bassin froid et le garnissage. Une analyse bibliographique approfondie a permis d'identifier les informations déjà disponibles et des méthodes de caractérisation des écoulements :

- Pour les conduites cylindriques et les tubes du condenseur, une caractérisation analytique fut possible grâce aux corrélations disponibles dans la littérature lorsque la turbulence est établie. Dans les zones de transition à l'entrée des conduites, des simulations de MFN ont été effectuées pour déterminer le profil de vitesse et de contrainte de cisaillement.
- Pour le bassin froid, la MFN semble le meilleur outil disponible pour l'étude des écoulements. Une cartographie des champs de vitesses du fluide a été dressée pour une géométrie de bassin. Les valeurs des contraintes de cisaillement en paroi et sur les obstacles ont été calculées.
- Pour les garnissages, de nombreuses études portent sur les performances et les phénomènes de transfert, mais il n'existait que très peu de travaux et d'informations sur l'hydrodynamique locale. De plus, les garnissages des tours aéroréfrigérantes sont particuliers (canaux verticaux, matériau PVC) alors que les informations disponibles se rapportent à des garnissages utilisés généralement dans d'autres domaines du Génie des Procédés (e.g. distillation, transfert de matière). C'est pourquoi nous avons entrepris un travail de visualisation et de caractérisation spécifique pour les garnissages.

Ainsi, nous avons conçu, construit et exploité au LRGP un dispositif expérimental représentatif des écoulements d'eau et d'air dans les garnissages des tours aéroréfrigérantes. Des méthodes de visualisation ont été adaptées au dispositif afin d'observer et de mesurer les grandeurs caractéristiques des écoulements dans les garnissages. Les observations ont montré que sur les garnissages de type feuille, l'essentiel des écoulements se fait sous forme de films ruisselants sur les parois des canaux et le reste sous forme de gouttes tombant entre les canaux verticaux. Les mesures ont permis de déterminer des distributions de valeurs pour le taux de mouillage et l'épaisseur des films ruisselants pour une large gamme de conditions opératoires de la tour aéroréfrigérante (taux d'arrosage et vitesse d'air).

Afin de compléter la caractérisation des écoulements dans les garnissages, des simulations de MFN ont été réalisées. Peu d'informations sont disponibles dans la littérature et peu de travaux portant sur les simulations de ce type d'écoulement ont été réalisés sur des garnissages à paroi verticale. Après comparaison de deux approches de simulations, la méthode VOF a été sélectionnée afin de tenir compte des forces de tensions superficielles liquide/solide. Les simulations de MFN procurent les informations

complémentaires manquantes à la caractérisation expérimentale : taux de rétention liquide, aire interfaciale, vitesse superficielle du film ruisselant. Ces simulations permettent aussi d'étudier les conditions expérimentales et les paramètres de simulations : taux d'arrosage, caractéristiques de la surface solide (angle de contact solide).

Grâce aux travaux de caractérisation hydrodynamique, les grandeurs représentatives des écoulements ont été déterminées pour les différentes parties du circuit : vitesses, contraintes de cisaillement en paroi, taux de mouillage pour les garnissages.

À partir des données hydrodynamiques obtenues, il fut possible de construire un modèle compartimental de l'influence de l'hydrodynamique sur l'encrassement biologique. La première étape était la création du modèle de développement du biofilm. Le choix s'est porté sur la création d'un modèle basé sur des données disponibles dans la littérature adapté aux circuits de refroidissement utilisant de l'eau brute naturelle. L'équation proposée tient compte des données hydrodynamiques à travers l'utilisation de critères d'efficacité : un critère quantifiant l'importance du transfert de matière interne dans le biofilm et un second critère quantifiant l'influence du transfert de matière à l'interface fluide/biofilm. Le modèle tient compte des conditions opératoires à travers l'étude de l'influence de la température et de l'influence de la concentration en substrat dans l'eau. Le modèle de croissance du biofilm dépend aussi de la contrainte de cisaillement qui va influencer l'arrachement de la biomasse à la surface du biofilm : plus la contrainte de cisaillement est importante, plus la quantité arrachée est élevée. Ce modèle proposé est ainsi transposable à la totalité du circuit de refroidissement et à de nombreuses conditions opératoires. Pour les conditions manquantes (e.g. les faibles valeurs de la contrainte de cisaillement), le modèle peut être extrapolé.

Finalement, la caractérisation hydrodynamique permet la construction du modèle compartimental pour chacune des parties du circuit dans lesquelles l'équation du modèle biologique a été implémentée. Le modèle final permet la cartographie des zones les plus propices à l'encrassement. Ainsi, les zones chaudes comme les tubes de condenseur, le garnissage ou la conduite chaude présentent la masse la plus importante de biofilm déposée par mètre carré. La surface très importante du garnissage en fait la zone où le dépôt total de matière est le plus grand. Le modèle a aussi permis de simuler le dépôt de biofilm en fonction des conditions environnementales.

Les résultats du modèle peuvent être étudiés au cours du temps pour obtenir l'évolution de la croissance du biofilm. Elle peut être aussi étudiée spatialement dans chaque zone et dans chaque compartiment de chaque zone. Le modèle peut donc donner une cartographie de la quantité de biofilm déposée au cours du temps dans l'ensemble du circuit. Il existe trois échelles (niveaux de détails) :

- cartographie de la quantité de biofilm par partie du circuit (condenseur, conduites chaude et froide, garnissage et bassin froid),

- cartographie de la quantité de biofilm par zone (e.g. le bassin est divisé en quatre zones, le garnissage en cinq zones selon le profil de température, les conduites en deux zones selon la turbulence établie ou non),
- cartographie de la quantité de biofilm par compartiment (e.g. nombre de RPA en série dans les cascades, nombre de RPA avec rétro-mélange dans les zones du bassin).

La précision de la cartographie dépend du raffinement du découpage en zones et en compartiments : le nombre de RPA dans les cascades ou dans les zones du bassin détermine donc la résolution spatiale du modèle. Les informations pour chaque niveau de précision peuvent être obtenues en adaptant le post-traitement des données. La précision de la cartographie doit être adaptée en fonction de l'utilisation souhaitée des résultats obtenus.

La modélisation de la quantité de masse de biofilm au cours du temps peut permettre à l'industriel de mieux planifier les campagnes de traitement limitant l'encrassement des circuits de refroidissement (e.g. traitement biocide). À terme, le modèle peut aussi aider à gérer la maintenance des installations. L'étude de sensibilité du modèle à la température du milieu et à la qualité d'eau peut permettre de prédire le fonctionnement normal d'un circuit, mais aussi les cas exceptionnels tels que les crues ou les périodes de sécheresse. La rapidité de calcul du modèle (moins de dix minutes pour le circuit complet pour représenter un an d'évolution de l'encrassement) permet de simuler un grand nombre de cas prévisionnels, mais aussi de faire des simulations tenant compte de l'évolution en temps réel des paramètres et des conditions étudiés, permettant ainsi la gestion en ligne du circuit.

Les résultats du modèle peuvent aussi servir pour les travaux de recherche et de développement de nouvelles géométries de circuit de refroidissement. La paramétrisation du modèle permet d'observer l'influence des conditions hydrodynamiques sur l'encrassement et donc de tester des modifications de l'écoulement. Par exemple, une réduction des zones mortes dans le bassin peut augmenter le taux de cisaillement dans ces zones et réduire la masse de biofilm formée. Dans les garnissages, une utilisation directe du modèle sans modification des paramètres hydrodynamiques peut permettre de déterminer le volume optimal de garnissage pour limiter l'encrassement tout en assurant un transfert thermique suffisant.

Discussion et perspectives

Les résultats obtenus permettent à court terme de mieux connaître le comportement hydrodynamique des parties du circuit de refroidissement. Cette connaissance est importante pour améliorer le fonctionnement du circuit : position des points de prélèvements, injections des traitements (e.g.

traitements biocides, antitartre), connexions entre les parties du circuit de refroidissement. Dans le cas du garnissage, des paramètres hydrodynamiques tels que le taux de mouillage, la rétention liquide et l'aire interfaciale donnent des informations sur l'efficacité du corps d'échange pour le transfert thermique. Dans un second temps, ces données seraient utiles pour la conception et l'étude des circuits de refroidissement du futur et, par exemple, de nouvelles géométries de garnissages assurant un meilleur mouillage et donc un meilleur transfert. Une étude hydrodynamique de nouvelles géométries innovantes permettrait d'alimenter le modèle compartimental et d'évaluer leur prédisposition à l'encrassement avec la possibilité de suivre un plan d'expérience très large des conditions opératoires.

Afin de compléter les résultats obtenus, il est possible de poursuivre la caractérisation hydrodynamique du circuit de refroidissement. Une première étape serait de caractériser l'hydrodynamique dans les autres types de garnissages (hybrides et grilles) à l'aide du dispositif expérimental en reprenant et en adaptant les méthodes expérimentales que nous avons utilisées pour le garnissage feuille. Des simulations de MFN pourraient aussi être réalisées sur ces autres géométries de garnissage en utilisant l'approche VOF et les paramètres utilisés dans la thèse. De plus, en utilisant le même dispositif expérimental pour compléter l'étude du ruissèlement des films liquide, des systèmes de suivi de particules (PIV ou PTV) pourrait être adaptés au dispositif pour mesurer expérimentalement les vitesses superficielles.

D'autre part, ce dispositif pourrait aussi être utilisé afin d'évaluer les performances thermiques des garnissages : cela pourrait permettre de valider les spécifications du corps d'échange en laboratoire (échelle pilote). Les sondes de température et d'humidité déjà installées sur le dispositif permettent de réaliser des études de transfert thermique. Ces mesures thermiques en laboratoire pourraient remplacer celles réalisées actuellement à plus grande échelle sur des dispositifs plus complexes et plus coûteux. De plus, l'étude du transfert de matière est aussi réalisable sur le dispositif expérimental. La caractérisation de manière complémentaire du transfert thermique et du transfert de matière pourrait donc permettre, à terme, de valider les garnissages existants mais aussi de concevoir et de proposer de nouveaux garnissages plus efficaces et plus performants pour les tours aéroréfrigérantes.

Le modèle de prédiction de l'encrassement sous forme de biofilm dans les circuits de refroidissement développé nous a permis de montrer que l'approche compartimentale est adaptée à la modélisation de l'influence de l'hydrodynamique sur l'encrassement. Plusieurs perspectives peuvent être envisagées pour poursuivre les travaux menés sur ce modèle compartimental. En considérant le même modèle biologique, des simulations peuvent être réalisées afin de simuler l'ajout d'un traitement contre les biofilms. Il serait ainsi possible de simuler les effets des traitements sur l'ensemble du circuit et, par exemple, de comparer l'efficacité de plusieurs traitements différents, ou de mieux dimensionner une

campagne de réduction de l'encrassement en prédisant la quantité de biofilm développée dans les différents scénarios souhaités. Ces implémentations nécessitent des études biologiques spécifiques pour obtenir les mécanismes et les cinétiques biologiques. Pour obtenir la caractérisation correspondant à un type de biofilm précis, des études microbiologiques spécifiques doivent être menées afin d'obtenir les cinétiques de croissance des microorganismes dans les diverses situations industrielles et leur sensibilité aux paramètres environnementaux. Une fois ces modèles obtenus, il est facile de les inclure facilement dans le modèle compartimental qui est un outil modulable dans lequel de nombreux types de modèles peuvent être implémentés. Le modèle compartimental créé pourra donc servir de bases à de nombreuses études futures pour l'exploitation des circuits ou le développement de nouvelles géométries.

La structure du modèle compartimental permet d'implémenter le modèle d'encrassement souhaité. Pour simuler l'ensemble de l'encrassement et ainsi avoir une représentation plus fidèle de la réalité dans les circuits de refroidissement, il serait intéressant d'ajouter l'encrassement par précipitation du tartre ainsi que le dépôt de particules. Enfin, l'approche compartimentale appliquée au circuit de refroidissement est une preuve de fonctionnement de la méthode pour l'étude de l'influence de l'hydrodynamique sur les phénomènes bio-physico-chimiques. Cet exemple d'application de la méthode compartimentale en fait un outil adapté pour la modélisation des écoulements dans de nombreux cas industriels.

Le travail réalisé pendant cette thèse ouvre donc plusieurs perspectives de poursuite de l'étude des garnissages industriels des tours aéroréfrigérantes à l'aide des méthodes développées et mises en place. Cette meilleure connaissance des garnissages pourrait aussi participer au développement de nouveaux garnissages. Le modèle d'encrassement des circuits de refroidissement développé au cours de la thèse et présenté dans ce manuscrit peut aussi ouvrir des pistes de recherche et de développement. Avec l'ajout de modèles d'encrassements différents et l'apport d'études biologiques complémentaires, le modèle compartimental proposé pourrait s'adapter à des circuits différents et des conditions supplémentaires. La méthodologie mise en place et le travail réalisé sur l'approche de modélisation compartimentale pourraient aussi être transposés au delà de la seule application du refroidissement industriel et être utilisés pour d'autres application en Génie des Procédés.

Bibliographie

- N. AFZAL, A. SEENA SEENA et A. BUSHRA : Power law velocity profile in fully developed turbulent pipe and channel flows. *Journal of Hydraulic Engineering*, 133(9):1080–1086, 2007.
- O. ALOS-RAMOS, K. SHAKOURZADEH, C. THOMAS, J.M. LACOMBE, D. VERMEEREN et S. SOREAU : Cooliss (cooling circuit simulation software) : a computer program to simulate the water chemistry in recirculating cooling water circuits. *Conference at the Nuclear Plant Chemistry (NPC) Conference, Berlin, Germany, 2008*.
- L. ANGERMANN : *Numerical simulations - Examples and applications in computational fluid dynamics*. InTech, 2010. ISBN 978-953-307-153-4.
- A. ATAKI et H.-J. BART : Experimental and CFD simulation study for the wetting of a structured packing element with liquids. *Chemical Engineering and Technology*, 29(3):336–347, 2006.
- J. AZEREDO, N. AZEVEDO, R. BRIANDET, N. CERCA, T. COENYE, A.R. COSTA, M. DESVAUX, G. DI BONAVENTURA, M. HEBRAUD, Z. JAGLIC, M. KACANIOVA, S. KNOCHER, A. LOURENCO, F. MERGULHAO, R.L. MEYER, G. NYCHAS, M. SIMOES, O. TRESSE et C. STERNBERG : Critical review on biofilm methods. *Critical reviews in microbiology*, 43(3):313–351, 2017.
- R. BILLET et M. SCHULTES : Prediction of mass transfer columns with dumped and arranged packings : Updated summary of the calculation method of billet and schultes. *Chemical Engineering Research and Design*, 77(6):498–504, 1999.
- N. BLAIN, A. BELAUD et M. MIOLANE : Development and validation of a cfd model for numerical simulation of a large natural draft wet cooling tower. *Applied Thermal Engineering*, 105:953–960, 2016.
- P. BLAZY, E.A. JDID et J.L. BERSILLON : Décantation aspects théoriques. *Techniques de l'ingénieur*, (J3450), 1999.
- C. BOURILLOT : Teferi, numerical model for calculating the performance of an evaporative cooling tower. *Electric Power Research Institute, Special Report CS-3212 SR*, 1983.
- J.U. BRACKBILL, D.B. KOTHE et C. ZEMACH : A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100(2):335–354, 1992.
- J.L. BRAVO, J.A. ROCHA et J.R. FAIR : Mass transfer in gauze packing. *Hydrocarbon Processing*, pages 91–95, 1985.
- J. BUFFINGTON : The legend of a. f. shields. *Journal of Hydraulic Engineering*, 125(4):376–387, 1999.
- C. CARUYER, J.P. MINIER, M. GUINGO et C. HENRY : A stochastic model for particle deposition in turbulent flows and clogging effects. *Advances in Hydroinformatics : SIMHYDRO 2014*, pages 597–612, 2015.
- J.C. CHARPENTIER : Recent progress in two phase gas-liquid mass transfer in packed bed. *Chemical Engineering Journal*, 11:161–181, 1976.
- J.C. CHARPENTIER, C. PROST et P. LE GOFF : Ecoulement ruisselant de liquide dans une colonne à garnissage : détermination des vitesses et des débits relatifs des films, des filets et des gouttes. *Chimie et Industrie, Génie Chimique*, 100(5):1021–1034, 1968.

- N. CHHIM, C. KHARBACHI, T. NEVEUX, C. BOUTELEUX, S. TEYCHENÉ et B. BISCANS : Inhibition of calcium carbonate crystal growth by organic additives using the constant composition method in conditions of recirculating cooling circuits. *Journal of Crystal Growth*, 472:35–45, 2017.
- S.H. CHIEN, M.K. HSIEH, H. LI, J. MONNELL, D. DZOMBAK et V. VIDIC : Pilot-scale cooling tower to evaluate corrosion, scaling, and biofouling control strategies for cooling system makeup water. *Review of scientific instruments*, 83:024101, 2012.
- W.C. CHIEN, C.C. LEE et C.Y. TAI : Heterogeneous nucleation rate of calcium carbonate derived from induction period. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 46:6435–6441, 2007.
- T.H. CHILTON et A.P. COLBURN : Mass transfer (absorption) coefficients - prediction from data on heat transfer and fluid friction. *Industrial and Engineering Chemistry*, 26(11):1183–1187, 1936.
- J CLIMENT, L. BASIERO, R. MARTINEZ-CUENCA, J.G. BERLANGA, B. JULIAN-LOPEZ et S. CHIVA : Biological reactor retrofitting using CFD-ASM modelling. *Chemical Engineering Journal*, 348:1 – 14, 2018.
- CODE_SATURNE : CODE_SATURNE Documentation 6.1. <https://www.code-saturne.org/cms/sites/default/files/docs/6.1/theory.pdf>, 2019.
- C.F. COLEBROOK : TURBULENT FLOW IN PIPES, WITH PARTICULAR REFERENCE TO THE TRANSITION REGION BETWEEN THE SMOOTH AND ROUGH PIPE LAWS. *Journal of the Institution of Civil Engineers*, 11(4):133–156, 1939.
- P. COSTE : A LARGE INTERFACE MODEL FOR TWO-PHASE CFD. *Nuclear Engineering and Design*, 255:38–50, 2013.
- P.V. DANCKWERTS : CONTINUOUS FLOW SYSTEMS. DISTRIBUTION OF RESIDENCE TIMES. *Chemical Engineering Science*, 2(1):1–13, 1953.
- P.V. DANCKWERTS : *Gas-Liquid Reactions*. MCGRAW-HILL BOOK CO., NEW-YORK, 2016.
- D. DAWSON ET O. TRASS : MASS TRANSFER AT ROUGH SURFACES. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15(7):1317–1336, 1972.
- W. DIETRICH : SETTLING VELOCITY OF NATURAL PARTICLES. *Water Resources Research*, 18(6):1615–1626, 1982.
- R. DUDDU, D.L. CHOPP ET B. MORAN : A TWO-DIMENSIONAL CONTINUUM MODEL OF BIOFILM GROWTH INCORPORATING FLUID FLOW AND SHEAR STRESS BASED DETACHMENT. *Biotechnology and Bioengineering*, 103(1):92–104, 2009.
- C. DUPRAT : *Instabilités d'un film liquide en écoulement sur une fibre verticale*. THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PARIS 6, 2009.
- M. DUPUY, A. XAYASENH ET H. DUVAL : ANALYSIS OF NON-BROWNIAN PARTICLE DEPOSITION FROM TURBULENT LIQUID-FLOW. *AIChE Journal*, 62(3):891–904, 2016.
- J.S. ECKERT : SELECTING THE PROPER DISTILLATION COLUMN PACKING. *Chemical Engineering Progress*, 66(3), 1970.
- J. ERENS : *N4: Cooling Towers*. VDI HEAT ATLAS SECOND EDITION, 2010. ISBN 978-3-540-77876-9.
- F-G. FAN ET G. AHMADI : ANALYSIS OF PARTICLE MOTION IN THE NEAR-WALL SHEAR LAYER VORTICES-APPLICATION TO THE TURBULENT DEPOSITION PROCESS. *Journal of Colloid and Interface Science*, 172:263–277, 1995.

- R.A. FORD ET C.A. FOORD : LASER-BASED FLUORESCENCE TECHNIQUES FOR MEASURING THIN LIQUID FILM. *Wear*, 51:289–297, 1978.
- M. FOURATI : *Modélisation par une approche à deux fluides des écoulements gaz liquide à contre-courant dans les colonnes à garnissages*. THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE, 2012.
- T. FUKANO : MEASUREMENT OF TIME VARYING THICKNESS OF LIQUID FILM FLOWING WITH HIGH SPEED GAS FLOW BY A CONSTANT ELECTRIC CURRENT METHOD. *Nuclear Engineering and Design*, 184:363–377, 1998.
- G. FULFORD : THE FLOW OF LIQUIDS IN THIN FILMS. *Advances in Chemical Engineering*, 5:151–236, 1964.
- D. GAO, N.B. MORLEY ET V. DHIR : NUMERICAL SIMULATION OF WAVY FALLING FILM FLOW USING VOF METHOD. *Journal of Computational Physics*, 192:624–642, 2003.
- S. GARCIA ET A. TRUEBA : INFLUENCE OF THE REYNOLDS NUMBER ON THE THERMAL EFFECTIVENESS OF TUBULAR HEAT EXCHANGER SUBJECTED TO ELECTROMAGNETIC FIELD-BASED ANTIFOULING TREATMENT IN AN OPEN ONCE-THROUGH SEAWATER COOLING SYSTEM. *Applied Thermal Engineering*, 140:531–541, 2018.
- H.R. GOSHAYSHI ET J.F. MISSENDEN : THE INVESTIGATION OF COOLING TOWER PACKING IN VARIOUS ARRANGEMENTS. *Applied Thermal Engineering*, 20:69 – 80, 2000.
- D.W. GREEN ET J.H. PERRY : *Perry's Chemical Engineers' Handbook, Eighth Edition*. THE MCGRAW-HILL COMPANIES, INC., 2007.
- D. GSTOEHL, J.F. ROQUES, P. CRISINEL ET J.R. THOME : MEASUREMENT OF FALLING FILM THICKNESS AROUND A HORIZONTAL TUBE USING A LASER MEASUREMENT TECHNIQUE. *Heat Transfer Engineering*, 25(8):28–34, 2004.
- C. GUALTIERI, A. ANGELOUDIS, F. BOMBARDELLI, S. JHA ET T. STOESSER : ON THE VALUES FOR THE TURBULENT SCHMIDT NUMBER IN ENVIRONMENTAL FLOWS. *Fluids*, 2(2):17–44, 2017.
- M. GUNGO ET J.P. MINIER : A STOCHASTIC MODEL OF COHERENT STRUCTURES FOR PARTICLE DEPOSITION IN TURBULENT FLOWS. *Physics of fluids*, 20(5), 2008.
- S. E. HAALAND : SIMPLE AND EXPLICIT FORMULAS FOR THE FRICTION FACTOR IN TURBULENT PIPE FLOW. *Journal of Fluids Engineering*, 105(1):89–90, 1983.
- R. HALLERMEIER : TERMINAL SETTLING VELOCITY OF COMMONLY OCCURRING SAND GRAINS. *Sedimentology*, 28(6):859–865, 1981.
- Y. HAN ET N. SHIKAZONO : MEASUREMENT OF THE LIQUID FILM THICKNESS IN MICRO TUBE SLUG FLOW. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 30(5):842–853, 2009.
- Y. HAROUN, D. LEGENDRE ET L. RAYNAL : DIRECT NUMERICAL SIMULATION OF REACTIVE ABSORPTION IN GAS-LIQUID FLOW ON STRUCTURED PACKING USING INTERFACE CAPTURING METHOD. *Chemical Engineering Science*, 65:351–356, 2010.
- Y. HAROUN, L. RAYNAL ET P. ALIX : PREDICTION OF EFFECTIVE AREA AND LIQUID HOLD-UP IN STRUCTURED PACKINGS BY CFD. *Chemical Engineering Research and Design*, 92:2247–2254, 2014.
- Y. HAROUN, L. RAYNAL ET D. LEGENDRE : MASS TRANSFER AND LIQUID HOLD-UP DETERMINATION IN STRUCTURED PACKING BY CFD. *Chemical Engineering Science*, 75:342–348, 2012.

- P. HARTMANN, F. BORDERT, CHEVALIER C., J-L. COLIN ET M. KHALANSKI : *Centrales Nucléaires et Environnement*. EDF, 2014. ISBN 978-2759809134.
- C.W. HIRT ET B.D. NICHOLS : VOLUME OF FLUID (VOF) METHOD FOR THE DYNAMICS OF FREE BOUNDARIES. *Journal of Computational Physics*, 39:202, 1981.
- F. HJULSTROM : STUDIES IN THE MORPHOLOGICAL ACTIVITY OF RIVERS AS ILLUSTRATED BY THE RIVER FYRIS. *Bulletin of the Geological Institution of the University of Upsala*, (25 :221528), 1935.
- H. HORN ET S. LACKNER : MODELING OF BIOFILMS : A REVIEW. *Advances in Biochemical Engineering / Biotechnology*, 146:53–76, 2014.
- R. HREIZ, O. POTIER, J. WICKS ET J.M. COMMENGE : CFD INVESTIGATION OF THE EFFECTS OF BUBBLE AERATOR LAYOUTS ON HYDRODYNAMICS OF AN ACTIVATED SLUDGE CHANNEL REACTOR. *Environmental Technology*, 40(20):2657–2670, 2019.
- J. HU, X. YANG, J. YU ET G. DAI : CARBON DIOXIDE ABSORPTION AND INTERFACIAL MASS TRANSFER ACROSS VERTICALLY CONFINED FREE LIQUID FILM-A NUMERICAL INVESTIGATION. *Chemical Engineering and Processing*, 111:46–56, 2017.
- L. HUANG, A. HWANG ET J. PHILLIPS : EFFECT OF TEMPERATURE ON MICROBIAL GROWTH RATE-MATHEMATICAL ANALYSIS : THE ARRHENIUS AND EYRING-POLANYI CONNECTIONS. *Journal of Food Science*, 76(8):553–560, 2011.
- IEA : WORLD ENERGY OUTLOOK 2018. 2018.
- I. ILIUTA, C.F. PETRE ET F. LARACHI : HYDRODYNAMIC CONTINUUM MODEL FOR TWO-PHASE FLOW STRUCTURED-PACKING-CONTAINING COLUMNS. *Chemical Engineering Science*, 59:879–888, 2004.
- N. JOURDAN, T. NEVEUX, O. POTIER, M. KANNICHE, J. WICKS, I. NOPENS, U. REHMAN ET Y. LE MOULLEC : COMPARTMENTAL MODELLING IN CHEMICAL ENGINEERING : A CRITICAL REVIEW. *Chemical Engineering Science*, 115196:1–20, 2019.
- T. KAMEI ET A. SERIZAWA : MEASUREMENT OF 2-DIMENSIONAL LOCAL INSTANTANEOUS LIQUID FILM THICKNESS AROUND SIMULATED NUCLEAR FUEL ROD BY ULTRASONIC TRANSMISSION TECHNIQUE. *Nuclear Engineering and Design*, 184:349–362, 1998.
- P. KAPITZA : WAVE FLOW OF THIN LAYERS OF A VISCOUS LIQUID. in *Collected papers of P.L Kapitza, vol.2, by D. ter Haar, 1965, 1949.*
- J. KHAN, M. YAQUB ET S.M. ZUBAIR : PERFORMANCE CHARACTERISTICS OF COUNTER FLOW WET COOLING TOWERS. *Energy Conversion and Management*, 44(13):2073–2091, 2003.
- J. KHAN ET S.M. ZUBAIR : A STUDY OF FOULING AND ITS EFFECTS ON THE PERFORMANCE OF COUNTER FLOW WET COOLING TOWERS. *Journal of Process Mechanical Engineering*, 218(1):43–51, 2004.
- N.H. KIM ET R.L. WEBB : PARTICULATE FOULING OF WATER IN TUBES HAVING A TWO-DIMENSIONAL ROUGHNESS GEOMETRY. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 34(11):2727–2738, 1991.
- J. KLOPPERS ET D. KROGER : LOSS COEFFICIENT CORRELATION FOR WET-COOLING TOWER FILLS. *Applied Thermal Engineering*, 23:2201 – 2211, 2003.
- Q.J. KONG, X.Y. ZHAO, D.Q. XIE, B. ZHANG ET P. WANG : EXPERIMENTAL INVESTIGATION OF THE HEAT AND MASS TRANSFER PHENOMENA IN A COUNTERFLOW WET COOLING TOWER WITH FOAM CERAMIC PACKING. *International Journal of Mechanical & Mechatronics Engineering*, 10(1):1 – 11, 2018.

- A. LASSAUCE, P. ALIX, L. RAYNAL, A. ROYON-LEBEAUD ET Y. HAROUN : PRESSURE DROP, CAPACITY AND MASS TRANSFER AREA REQUIREMENTS FOR POST-COMBUSTION CARBON CAPTURE BY SOLVENTS. *Oil and Gas Science and Technology - Rev. IFP Energies Nouvelles*, 69(6):1021–1034, 2014.
- J. LAURENT, P. BOIS, M. NUEL ET A. WANKO : SYSTEMIC MODELS OF FULL-SCALE SURFACE FLOW TREATMENT WETLANDS : DETERMINATION BY APPLICATION OF FLUORESCENT TRACERS. *Chemical Engineering Journal*, 264:389 – 398, 2015.
- J.E. LAURNAT, T.J. HANRATTY ET J.C. DALLMAN : PRESSURE DROP AND FILM HEIGHT MEASUREMENTS FOR ANNULAR GAS-LIQUID FLOWS. *International Journal of Multiphase Flow*, 10(3):341–356, 1984.
- Y. LE MOULLEC, O. POTIER, C. GENTRIC ET J.P. LECLERC : FLOW FIELD AND RESIDENCE TIME DISTRIBUTION SIMULATION OF A CROSS-FLOW GAS-LIQUID WASTEWATER TREATMENT REACTOR USING CFD. *Chemical Engineering Science*, 63(9):2436–2449, 2008.
- Y. LE MOULLEC, O. POTIER, C. GENTRIC ET J.P. LECLERC : ACTIVATED SLUDGE PILOT PLANT : COMPARISON BETWEEN EXPERIMENTAL AND PREDICTED CONCENTRATION PROFILES USING THREE DIFFERENT MODELLING APPROACHES. *Water Research*, 45(10):3085–3097, 2011.
- S. LEEPER : WET COOLING TOWERS : RULE-OF-THUMB DESIGN AND SIMULATION. *EG and G Idaho, Inc., Idaho Falls, ID (United States)*, 1981.
- M. LEMOUARI, M. BOUMAZA ET A. KAABI : EXPERIMENTAL ANALYSIS OF HEAT AND MASS TRANSFER PHENOMENA IN A DIRECT CONTACT EVAPORATIVE COOLING TOWER. *Energy Conversion and Management*, 50:1610 – 1617, 2009.
- M. LEMOUARI, M. BOUMAZA ET A. KAABI : EXPERIMENTAL INVESTIGATION OF THE HYDRAULIC CHARACTERISTICS OF A COUNTER FLOW WET COOLING TOWER. *Energy*, 36:5818 – 5823, 2011.
- O. LEVENSPIEL : *Chemical Reaction Engineering*. WILEY, 1998. ISBN 978-0-471-25424-9.
- S. LI ET G.H. CHEN : MODELING THE ORGANIC REMOVAL AND OXYGEN CONSUMPTION BY BIOFILMS IN AN OPEN-CHANNEL FLOW. *Water Science and Technology*, 30(2):53–61, 1994.
- W. LI, K. ZHOU, R.M. MANGLIK, G.Q. LI ET A.E. BERGLER : INVESTIGATION OF CaCO₃ FOULING IN PLATE HEAT EXCHANGERS. *Heat and Mass Transfer*, 52(11):2401–2414, 2016.
- X. LI, H. GURGENCI, Z. GUAN, X. WANG ET L. XIA : A REVIEW OF THE CROSSWIND EFFECT ON THE NATURAL DRAFT COOLING TOWERS. *Applied Thermal Engineering*, 150:250 – 270, 2019.
- C. LOPEZ-GALINDO, J.F. CASANUEVA ET E. NEBOT : EFFICACY OF DIFFERENT ANTIFOULING TREATMENTS FOR SEAWATER COOLING SYSTEMS. *Biofouling*, 26(8):923–930, 2012.
- Q. LU, N.V. SURYANARAYANA ET C. CHRISTODOULU : FILM THICKNESS MEASUREMENT WITH AN ULTRASONIC TRANSDUCER. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 7:354–361, 1993.
- S.V. MAKARYTCHEV, T.A.G. LANGRISH ET R.G.H. PRINCE : THICKNESS AND VELOCITY OF WAVY LIQUID FILMS ON ROTATING CONICAL SURFACES. *Chemical Engineering Science*, 56:77–87, 2001.
- T.S. MARAIS, R.J. HUDDY, S.L. HARRISON ET R.P. VAN HILLE : DEMONSTRATION OF SIMULTANEOUS BIOLOGICAL SULPHATE REDUCTION AND PARTIAL SULPHIDE OXIDATION IN A HYBRID LINEAR FLOW CHANNEL REACTOR. *Journal of Water Process Engineering*, 34:101143, 2020.
- C. MARCONNET, S. RAPENNE, C. ROUSSEAU, K. SHAKOURZADEH, E. DEMAY ET O. ALOS-RAMOS : COOLISS A MODELING TOOL FOR SCALING PREDICTION IN CONDENSER COOLING CIRCUITS WITH COOLING TOWERS. *Conference at the Cooling Technology Institute (CTI) Annual Conference, Houston, Texas, 2014*.

- K MCKELVEY ET M BROOKE : *The industrial cooling tower, with special reference to the design, construction, operation and maintenance of water cooling towers.* ELSEVIER PUBLISHING CO., AMSTERDAM, 1959. ISBN 978-0-471-25424-9.
- L.F. MELO ET M.J. VIERA : PHYSICAL STABILITY AND BIOLOGICAL ACTIVITY OF BIOFILMS UNDER TURBULENT FLOW AND LOW SUBSTRATE CONCENTRATION. *Bioprocess Engineering*, 20:363–368, 1999.
- N. MENECEUR, K. KHOUNFAIS, S. BOULAHROUZ ET A. ATIA : NUMERICAL AND EXPERIMENTAL STUDIES OF HEAT AND MASS TRANSFER PROCESS THROUGH PACKING ZONE IN A COUNTER-FLOW WET COOLING TOWER. *International Journal of Mechanical & Mechatronics Engineering*, 17(6):111 – 119, 2018.
- F. MERKEL : EVAPORATIVE COOLING. *Zeits Vereindeutscher Ingenieure*, 70(4):123–128, 1926.
- P.W. MOHR ET S. KRAWIEC : TEMPERATURE CHARACTERISTICS AND ARRHENIUS PLOTS FOR NOMINAL PSYCHROPHILES, MESOPHILES AND THERMOPHILES. *Journal of General Microbiology*, 121:311–317, 1980.
- J. MORCHAIN, J-C. GABELLE ET A. COCKX : A COUPLED POPULATION BALANCE MODEL AND CFD APPROACH FOR THE SIMULATION OF MIXING ISSUES IN LAB-SCALE AND INDUSTRIAL BIOREACTORS. *AIChE Journal*, 60(1):27–40, 2014.
- E. MORGENROTH : *Modelling Biofilms.* EDITED BY M. HENZE, M.C.M. VAN LOOSDRECHT, G.A. EKAMA AND D. BRDJANOVIC - IWA PUBLISHING, 2008. ISBN 978-1-843-39188-3.
- K.R. MORISON, Q.A.G. WORTH ET O'DEA N.P. : MINIMUM WETTING AND DISTRIBUTION RATES IN FALLING FILM EVAPORATORS. *Food and Bioproducts Processing*, 84(4):302–310, 2006.
- G.A. MORRIS ET J. JACKSON : ABSORPTION TOWERS. *London*, 1953.
- C.E. MORTON, R.C. BAKER ET I.M. HUTCHINGS : MEASUREMENT OF LIQUID FILM THICKNESS BY OPTICAL FLUORESCENCE AND ITS APPLICATION TO AN OSCILLATING PISTON POSITIVE DISPLACEMENT FLOWMETER. *Measurement Science and technology*, 22:125403, 2011.
- A.A. MOUZA, N.A. VLACHOS, S.V. PARAS ET A.J. KARABELAS : MEASUREMENT OF LIQUID FILM THICKNESS USING A LASER LIGHT ABSORPTION METHOD. *Experiments in Fluids*, 28:355–359, 2000.
- H. MULLER-STEINHAGEN : *C4 : Fouling of heat exchangers surfaces.* VDI HEAT ATLAS SECOND EDITION, 2010. ISBN 978-3-540-77876-9.
- E. NEBOT, J.F. CASANUEVA, T. CASANUEVA, M.M. FERNANDEZ-BASTON ET D. SALES : IN SITU EXPERIMENTAL STUDY FOR THE OPTIMIZATION OF CHLORINE DOSAGE IN SEAWATER COOLING SYSTEMS. *Applied Thermal Engineering*, 26:1893–1900, 2006.
- E. NEBOT, J.F. CASANUEVA, T. CASANUEVA ET D. SALES : MODEL FOR FOULING DEPOSITION ON POWER PLANT STEAM CONDENSERS COOLED WITH SEAWATER : EFFECT OF WATER VELOCITY AND TUBE MATERIAL. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 50:3351–3358, 2007.
- S. NEGNY, M. MEYER ET M. PREVOST : STUDY OF A LAMINAR FALLING FILM FLOWING OVER A WAVY WALL COLUMN - PART I. NUMERICAL INVESTIGATION OF THE FLOW PATTERN AND THE COUPLED HEAT AND MASS TRANSFER. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 44(11):2137–2146, 2001A.
- S. NEGNY, M. MEYER ET M. PREVOST : STUDY OF A LAMINAR FALLING FILM FLOWING OVER A WAVY WALL COLUMN - PART II. EXPERIMENTAL VALIDATION OF HYDRODYNAMIC MODEL. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 44(11):2147–2154, 2001B.

- T. NEVEUX, M. BRETAUD, N. CHHIM, K. SHAKOURZADEH ET S. RAPENNE : PILOT PLANT EXPERIMENTS AND MODELING OF CaCO₃ GROWTH INHIBITION BY THE USE OF ANTISCALANT POLYMERS IN RECIRCULATING COOLING CIRCUITS. *Desalination*, 397:43–52, 2016.
- F. NORDMANN : GESTION INDUSTRIELLE DE L'EAU POUR LA PRODUCTION D'ÉNERGIE NUCLÉAIRE. *Techniques de l'ingénieur*, (w9200), 2008.
- T. OHYAMA, K. ENDOH, A. MIKAMI ET Y.H. MORI : OPTICAL INTERFEROMETRY FOR MEASURING INSTANTANEOUS THICKNESS OF TRANSPARENT SOLID AND LIQUID FILMS. *Review of Scientific Instruments*, 59:2018, 1988.
- I. OPRIS, V-E. CENUSA ET G. DARIE : A DIMENSIONING METHODOLOGY FOR A NATURAL DRAFT WET COOLING TOWER. *TEM Journal*, 6(2):294–302, 2017.
- H. OZMEN-CAGATAY ET S. KOCAMAN : DAM-BREAK FLOW IN THE PRESENCE OF OBSTACLE : EXPERIMENT AND CFD SIMULATION, ENGINEERING APPLICATIONS OF COMPUTATIONAL FLUID MECHANICS. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, 5(4):541–552, 2011.
- A. PAVLENKO, N. PECHERKIN, V. CHEKHOVICH ET O. VOLODIN : HYDRODYNAMICS IN FALLING LIQUID FILMS ON SURFACES WITH COMPLEX GEOMETRY. *Microgravity Science and Technology*, 21(1):207–213, 2009.
- P.C. PEDERSEN, Z. CAKARESKI ET J.C. HERMANSON : ULTRASONIC MONITORING OF FILM CONDENSATION FOR APPLICATIONS IN REDUCED GRAVITY. *Ultrasonics*, 38:486–490, 2000.
- A. PERRIN, P. HERBELIN, F.P.A. JORAND, S. SKALI-LAMI ET L. MATHIEU : DESIGN OF A ROTATING DISK REACTOR TO ASSESS THE COLONIZATION OF BIOFILMS BY FREE-LIVING AMOEBAE UNDER HIGH SHEAR RATES. *Biofouling*, 34(4):368–377, 2018.
- C.F. PETRE, F. LARACHI, I. ILIUTA ET B.P.A. GRANDJEAN : PRESSURE DROP THROUGH STRUCTURED PACKINGS : BREAKDOWN INTO THE CONTRIBUTING MECHANISMS BY CFD MODELING. *Chemical Engineering Science*, 58:163–177, 2003.
- B.M. PEYTON : EFFECTS OF SHEAR STRESS AND SUBSTRATE LOADING RATE ON PSEUDOMONAS AERUGINOSA BIOFILM THICKNESS AND DENSITY. *Water Research*, 30(1):29–36, 1996.
- C. PICIOREANU, M.C. VAN LOOSDRECHT ET J.J. HEIJNEN : EFFECT OF DIFFUSIVE AND CONVECTIVE SUBSTRATE TRANSPORT ON BIOFILM STRUCTURE FORMATION : A TWO-DIMENSIONAL MODELING STUDY. *Biotechnology and Bioengineering*, 69(5):504–515, 2000.
- M.M. PINHEIRO, L.F. MELO, T.R. BOTT, J.D. PINHEIRO ET L. LEITAO : SURFACE PHENOMENA AND HYDRODYNAMIC EFFECTS ON THE DEPOSITION OF PSEUDOMONAS FLUORESCENS. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 66:63–67, 1988.
- M. POPOVAC ET K. HANJALIC : COMPOUND WALL TREATMENT FOR RANS COMPUTATION OF COMPLEX TURBULENT FLOWS AND HEAT TRANSFER. *Flow Turbulence Combust*, 78:177–202, 2007.
- O. POTIER, J.P. LECLERC ET M.N. PONS : INFLUENCE OF GEOMETRICAL AND OPERATIONAL PARAMETERS ON THE AXIAL DISPERSION IN AN AERATED CHANNEL REACTOR. *Water Research*, 39(18):4454–4462, 2005.
- L. PRADES, A.D. DORADO, J. CLIMENT, X. GUIMERA, S. CHIVA ET X. GAMISANS : CFD MODELING OF A FIXED-BED BIOFILM REACTOR COUPLING HYDRODYNAMICS AND BIOKINETICS. *Chemical Engineering Journal*, 313:680–692, 2017.

- B.A. QURESHI ET S.M. ZUBAIR : A COMPLETE MODEL OF WET COOLING TOWERS WITH FOULING IN FILLS. *Applied Thermal Engineering*, 26(16):1982 – 1989, 2006.
- M. RAHMATI, S.R. ALAVI ET M.R. TAVAKOLI : INVESTIGATION OF HEAT TRANSFER IN MECHANICAL DRAFT WET COOLING TOWERS USING INFRARED THERMAL IMAGES : AN EXPERIMENTAL STUDY. *International Journal of refrigeration*, 88:229 – 238, 2018.
- L. RAYNAL, C. BOYER ET J.P. BALLAGUET : LIQUID HOLDUP AND PRESSURE DROP DETERMINATION IN STRUCTURED PACKING WITH CFD SIMULATIONS. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 82:871–879, 2004.
- L. RAYNAL ET A. ROYON-LEBEAUD : A MULTI-SCALE APPROACH FOR CFD CALCULATIONS OF GAS-LIQUID FLOW WITHIN LARGE SIZE COLUMN EQUIPPED WITH STRUCTURED PACKING. *Chemical Engineering Science*, 62:7196–7204, 2007.
- H.C. REUTER, D.J. VILJOEN ET D.G. KROGER : A METHOD TO DETERMINE THE PERFORMANCE CHARACTERISTICS OF COOLING TOWER SPRAY ZONES. *Proceedings of the 14th International Heat Transfer Conference*, 2010.
- O. REYNOLDS : ON THE DYNAMICAL THEORY OF INCOMPRESSIBLE VISCOUS FLUIDS AND THE DETERMINATION OF THE CRITERION. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 186: 123–164, 1895.
- B.E. RITTMANN : THE EFFECT OF SHEAR STRESS ON BIOFLM LOSS RATE. *Biotechnology and Bioengineering*, 24:501–506, 1982.
- B.E. RITTMANN ET P.L. MCCARTY : MODEL OF STEADY-STATE-BIOFILM KINETICS. *Biotechnology and Bioengineering*, 21:2343–2357, 1980.
- J.A. ROCHA, L.B. BRAVO ET J.R. FAIR : DISTILLATION COLUMNS CONTAINING STRUCTURED PACKINGS : A COMPREHENSIVE MODEL FOR THEIR PERFORMANCE. 1. HYDRAULIC MODELS. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 32:641–651, 1993.
- RTE : BILAN ÉLECTRIQUE 2019. *rte-france.com*, 2019.
- G. SCACCHI, G. BOUCHY, J.F. FOUCAUT, O. ZAHRAA ET R. FOURNET : *Cinétique et catalyse (2eme Ed. COLL. GÉNIE DES PROCÉDÉS DE L'ÉCOLE DE NANCY, ED. LAVOISIER, 2011. ISBN 978-2-743-01928-0.*
- D. SEBASTIA-SAEZ, S. GU, P. RANGANATHAN ET K. PAPADIKIS : MESO-SCALE CFD STUDY OF THE PRESSURE DROP, LIQUID HOLD-UP, INTERFACIAL AREA AND MASS TRANSFER IN STRUCTURED PACKING MATERIALS. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 42:388–399, 2015.
- R. SEGEV, D. HASSON ET R. SEMIAT : RIGOROUS MODELING OF THE KINETICS OF CALCIUM CARBONATE DEPOSIT FORMATION. *AIChE Journal*, 58(4):1222–1229, 2012.
- P. SHAHALI, M. RAHMATI, S.R. ALAVI ET A. SEDAGHAT : EXPERIMENTAL STUDY ON IMPROVING OPERATING CONDITIONS OF WET COOLING TOWERS USING VARIOUS RIB NUMBERS OF PACKING. *International Journal of refrigeration*, 65:80 – 91, 2016.
- C. SHEN, C. CIRONE, A.M. JACOBI ET X. WANG : FOULING OF ENHANCED TUBES FOR CONDENSERS USED IN COOLING TOWER SYSTEMS : A LITERATURE REVIEW. *Applied Thermal Engineering*, 79:74–87, 2015.
- A.F. SHIELDS, W. P. OTT ET J.C. VAN UCHELEN : APPLICATION OF SIMILARITY PRINCIPLES AND TURBULENCE RESEARCH TO BED-LOAD MOVEMENT. *Hydrodynamics Laboratory Publications, California Institute of Technology*, 167, 1936.

- V.Y. SHKADOV : WAVE FLOW REGIMES OF A THIN LAYER OF VISCOUS FLUID SUBJECT TO GRAVITY. *Fluid Dynamics*, 2(1):29–34, 1967.
- K. SINGH ET R. DAS : AN EXPERIMENTAL AND MULTI-OBJECTIVE OPTIMIZATION STUDY OF A FORCED DRAFT COOLING TOWER WITH DIFFERENT FILLS. *Energy Conversion and Management*, 111:417 – 430, 2016.
- S. SINKUNAS : ANALYSIS OF LAMINAR LIQUID FILM FLOWING DOWN A VERTICAL SURFACE. *Fourth International Conference on CFD in the Oil and Gas, Metallurgical & Process Industries*, 2005.
- A.E. SMART ET R.A. FORD : MEASUREMENT OF THIN LIQUID FILMS BY A FLUORESCENCE TECHNIQUE. *Wear*, 29:41–47, 1974.
- J. SMREKAR, J. OMAN ET B. SIROK : IMPROVING THE EFFICIENCY OF NATURAL DRAFT COOLING TOWERS. *Energy conversion and management*, 47:1086 – 1100, 2006.
- Z. SOLOMENKO : *Two-phase flows over complex surfaces : towards bridging the gap between computations and experiments with application to structured packings*. THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE LYON, 2016.
- Z. SOLOMENKO, P.D.M. SPELT ET P. ALIX : A LEVEL-SET METHOD FOR LARGE-SCALE SIMULATIONS OF THREE-DIMENSIONAL FLOWS WITH MOVING CONTACT LINES. *Journal of Computational Physics*, 348: 151–170, 2017.
- J.N. SOUZA, L.F. MELO ET A.L. COSTA : GRAPH-BASED NETWORK MODELING AND SIMULATION OF CONDENSERS IN ONCETHROUGH COOLING WATER SYSTEM UNDER THE EFFECT OF BIOFOULING FORMATION. *Applied Thermal Engineering*, 165:114577, 2020.
- P. STAHL ET P.R. VON ROHR : ON THE ACCURACY OF VOID FRACTION MEASUREMENTS BY SINGLE-BEAM GAMMA-DENSITOMETRY FOR GAS-LIQUID TWO-PHASE FLOWS IN PIPE. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 28(6):533–544, 2004.
- D. STROPKY, K. POUATCH, P. NOWAK, M. SALCUDEAN, P. PAGORIA, I. GARTSHORE ET J. YUAN : RTD (RESIDENCE TIME DISTRIBUTION) PREDICTIONS IN LARGE MECHANICALLY AERATED LAGOONS. *Water Science and Technology*, 55(11):29–36, 2007.
- I.W. SUTHERLAND : THE BIOFILM MATRIX - AN IMMOBILIZED BUT DYNAMIC MICROBIAL ENVIRONMENT. *Trends in microbiology*, 9(5):222–227, 2001.
- R. TERBLANCHE, H.C. REUTER ET D.G. KROGER : DROP SIZE DISTRIBUTION BELOW DIFFERENT WET-COOLING TOWER FILLS. *Applied Thermal Engineering*, 29:1552 – 1560, 2009.
- C.B. TIBIRICA, F.J. DO NASCIMENTO ET G. RIBATSKI : FILM THICKNESS MEASUREMENT TECHNIQUES APPLIED TO MICRO-SCALE TWO-PHASE FLOW SYSTEMS. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 34:463–473, 2010.
- V.C. TIDWELL ET R.J. GLASS : X RAY AND VISIBLE LIGHT TRANSMISSION FOR LABORATORY MEASUREMENT OF TWO-DIMENSIONAL SATURATION FIELDS IN THIN-SLAB SYSTEMS. *Water Ressources Research*, 30 (11):2873–2882, 1994.
- N. TONELLO, M. FERRAND ET Y. FOURNIER : IMPLEMENTATION OF A DRIFT FLUX MULTIPHASE MODEL FOR 3D DRAFT COOLING TOWER SIMULATIONS IN CODE SATURNE. *18th IAHR International Conference on Cooling Tower and Air Cooled Heat Exchanger, Lyon, France*, 2017.
- P. TRAMBOUZE, H. VAN LANDEGHEM ET J.P. WAUQUIER : *Les réacteurs chimiques - Conception, Calcul, Mise en oeuvre*. PUBLICATIONS DE L'INSTITUT FRANÇAIS DU PÉTROLE, 1984.

- A. TRUEBA, S. GARCIA, F.M. OTERO, L.M. VEGA ET E. MADARIAGA : INFLUENCE OF FLOW VELOCITY ON BIOFILM GROWTH IN A TUBULAR HEAT EXCHANGER-CONDENSER COOLED BY SEAWATER. *Biofouling*, 31 (6):527–534, 2015.
- R.E. TSAI, A.F. SEIBERT, R.B. ELDRIDGE ET G.T. ROCHELLE : A DIMENSIONLESS MODEL FOR PREDICTING THE MASS-TRANSFER AREA OF STRUCTURED PACKING. *AiChE Journal*, 57(5):1173–1184, 2011.
- P. VALLURI, O.K. MATAR, G.F. HEWITT ET M.A. MENDES : THIN FILM FLOWOVER STRUCTURED PACKINGS AT MODERATE REYNOLDS NUMBERS. *Chemical Engineering Science*, 60:1965–1975, 2005.
- J. VILLERMAUX : *Génie de la réaction chimique*. LAVOISIER, PARIS, 1993. ISBN 2-85206-759-5.
- N. WAKAO ET T. FUNAZKRI : EFFECT OF FLUID DISPERSION COEFFICIENTS ON PARTICLE TO FLUID MASS TRANSFER COEFFICIENTS IN PACKED BEDS. *Chemical Engineering Science*, 33:953–960, 1978.
- G.B. WALLIS : *One-dimensional two-phase flow*. MCGRAW-HILL, 1969. ISBN 978-0-48-684282-0.
- L.P. WANG ET M.R. MAXEY : SETTLING VELOCITY AND CONCENTRATION DISTRIBUTION OF HEAVY PARTICLES IN HOMOGENEOUS ISOTROPIC TURBULENCE. *Journal of Fluid Mechanics*, 256:27–68, 1993.
- Q. WANG ET T. ZHANG : REVIEW OF MATHEMATICAL MODELS FOR BIOFILMS. *Solid State Communications*, 150:1009–1022, 2010.
- O. WANNER, H.J. EBERL, E. MORGENROTH, D.R. NOGUERA, C. PICIOREANU, B.E. RITTMANN ET M.C.M. VAN LOOSDRECHT : *Mathematical Modeling of Biofilms*. IWA PUBLISHING, 2006. ISBN 978-1-843-39087-9.
- F.M. WHITE : *Fluid Mechanics*. MCGRAW-HILL, 2011. ISBN 978-0-07-352934-9.
- E. WICKLEIN, D. BATSTONE, J. DUCOSTE, J. LAURENT, A. GRIBORIO, J. WICKS, S. SAUNDERS, R. SAMSTAG, O. POTIER ET I. NOPENS : GOOD MODELLING PRACTICE IN APPLYING COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS FOR WWTP MODELLING. *Water Science and Technology*, 73(5):969–982, 2016.
- H. XIE, J. HU, C. WANG ET G. DAI : LIQUID FLOW TRANSITION AND CONFINED FREE FILM FORMATION ON A VERTICAL PLATE WITH AN OPEN WINDOW. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 92:174–183, 2018.
- Y. XU, S. PASCHKE, J.U. REPKE, J. YUAN ET G. WOZNY : PORTRAYING THE COUNTERCURRENT FLOW ON PACKINGS BY THREE-DIMENSIONAL COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS SIMULATIONS. *Chemical Engineering & Technology*, 31(10):1445–1452, 2008.
- A. YILMAZ : ANALYTICAL CALCULATION OF WET COOLING TOWER PERFORMANCE WITH LARGE COOLING RANGE. *Journal of Thermal Science and Technology*, 30(2):45–56, 2010.
- L. ZHAO ET L. CERRO : EXPERIMENTAL CHARACTERIZATION OF VISCOUS FILM FLOWS OVER COMPLEX SURFACES. *International Journal of Multiphase Flow*, 18(4):495–516, 1992.
- S. ZHIYAO, W. TINGTING, X. FUMIN ET L. RUIJIE : A SIMPLE FORMULA FOR PREDICTING SETTLING VELOCITY OF SEDIMENT PARTICLES. *Water Science and Engineering*, 1(1):37–43, 2008.
- M. ZHU, C.J. LIU, W.W. ZHANG ET X.G. YUAN : TRANSPORT PHENOMENA OF FALLING LIQUID FILM FLOW ON A PLATE WITH RECTANGULAR HOLES. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 49(22):11724–11731, 2010.
- S.M. ZUBAIR, A.K. SHEIKH, M.O. BUDAIR, M.U. HAQ, A. QUDDUS ET O.A. ASHIRU : STATISTICAL ASPECTS OF CaCO₃ FOULING IN AISI 316 STAINLESS-STEEL TUBES. *Journal of Heat Transfer*, 119 (3):581–588, 1997.

Annexe 1 - Liste des communications réalisées pendant la thèse

Publications dans des revues internationales avec comité de lecture

Nicolas JOURDAN, Thibaut NEVEUX, Olivier POTIER, Mohamed KANNICHE, Jim WICKS, Ingmar NOPENS, Usman REHMAN, Yann LE MOULLEC : Compartmental Modelling in chemical engineering : A critical review, *Chemical Engineering Science*, 210 : 115196, 2019

Conférences orales dans des congrès avec comité de sélection

Nicolas JOURDAN, Mohamed KANNICHE, Thibaut NEVEUX, Olivier POTIER : Numerical RTD as a tool for compartmental modeling of water basin, *8th International Conference on Tracers and Tracing Methods (TRACER 8)* - Da Nang (Vietnam), 2019

Nicolas JOURDAN, Mohamed KANNICHE, Thibaut NEVEUX, Olivier POTIER : Hydraulic characterization of water-air flows in cooling-tower packing, *19th IAHR International Conference on Cooling Towers and Heat Exchangers* - Washington (États-Unis), 2019

Nicolas JOURDAN, Mohamed KANNICHE, Thibaut NEVEUX, Olivier POTIER : Caractérisation hydrodynamique des écoulements eau-air dans les garnissages de tours aéroréfrigérantes, *17^{ème} congrès de la Société Française de Génie des Procédés (SFGP)* - Nantes (France), 2019

Posters dans des congrès avec comité de sélection

Nicolas JOURDAN, Mohamed KANNICHE, Thibaut NEVEUX, Olivier POTIER : Compartmental modeling of settling in cooling tower basin, *16^{ème} congrès de la Société Française de Génie des Procédés (SFGP)* - Nancy (France), 2017

Nicolas JOURDAN, Mohamed KANNICHE, Thibaut NEVEUX, Olivier POTIER : Hydraulic characterization of water-air flows in cooling-tower packing, *19th European Congress of Chemical Engineering (ECCE 12)* - Florence (Italie), 2019

Annexe 2 - Plan d'expérience réalisé sur le dispositif expérimental

Caractérisation des film ruisselants par contraste

TABLE 8.9 – Liste des conditions expérimentales utilisées pour la caractérisation des films ruisselants par méthode par contraste

| Taux d'arrosage ($\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$) | Température de l'eau ($^{\circ}\text{C}$) | Vitesse d'air (m/s) | F_a/F_e | Nombre de points | Nombre de vidéos par point | Fréquence d'acquisition (ips) |
|--|---|---------------------|-----------|------------------|----------------------------|-------------------------------|
| 10 | 20 | 0,58 | 0,25 | 4 | 3 | 400 |
| | | 1,23 | 0,53 | 4 | 3 | 400 |
| | | 1,88 | 0,80 | 4 | 3 | 400 |
| | | 2,52 | 1,09 | 4 | 3 | 400 |
| | 24 | 0,58 | 0,25 | 4 | 3 | 400 |
| | | 1,23 | 0,53 | 4 | 3 | 400 |
| | | 1,88 | 0,80 | 4 | 3 | 400 |
| | | 2,52 | 1,09 | 4 | 3 | 400 |
| | 28 | 0,58 | 0,25 | 4 | 3 | 400 |
| | | 1,23 | 0,53 | 4 | 3 | 400 |
| | | 1,88 | 0,80 | 4 | 3 | 400 |
| | | 2,52 | 1,09 | 4 | 3 | 400 |
| | 32 | 0,58 | 0,25 | 4 | 3 | 400 |
| | | 1,23 | 0,53 | 4 | 3 | 400 |
| | | 1,88 | 0,80 | 4 | 3 | 400 |
| | | 2,52 | 1,09 | 4 | 3 | 400 |
| 7,5 | | | 1,08 | 5 | 3 | 11 |
| 10 | 24 | 1,88 | 0,80 | 5 | 3 | 11 |
| 11,5 | | | 0,70 | 5 | 3 | 11 |

Caractérisation des taux de mouillage par fluorescence

TABLE 8.10 – Liste des conditions expérimentales utilisées pour la caractérisation des taux de mouillage par visualisation par fluorescence

| Taux d'arrosage ($\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$) | Température de l'eau ($^{\circ}\text{C}$) | Vitesse d'air (m/s) | Fa/Fe | Nombre de points | Nombre de vidéos par point | Fréquence d'acquisition (ips) |
|--|---|---------------------|---------|------------------|----------------------------|-------------------------------|
| 7,5 | | | 1,08 | 6 | 3 | 30 |
| 10 | 24 | 1,88 | 0,80 | 6 | 3 | 30 |
| 11,5 | | | 0,70 | 6 | 3 | 30 |

Annexe 3 - Conditions opératoires simulées par Mécanique des Fluides Numérique

TABLE 8.11 – Liste des conditions expérimentales utilisées pour les simulations de MFN des écoulements sur les garnissages

| Taux d'arrosage ($\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$) | Vitesse d'air (m/s) | F_a/F_e | Angle de contact (°) |
|--|-------------------------------|-----------|--------------------------------|
| 7,5 | 1,39 | 0,80 | 15 |
| | | | 30 |
| | | | 35 |
| | | | 40 |
| | | | 45 |
| 9 | 1,67 | 0,80 | 15 |
| | | | 30 |
| | | | 35 |
| | | | 40 |
| | | | 45 |
| 10 | 1,88 | 0,80 | 1 |
| | | | 15 |
| | | | 30 |
| | | | 35 |
| | | | 40 |
| 11,5 | 2,13 | 0,80 | 45 |
| | | | 15 |
| | | | 30 |
| | | | 35 |
| | | | 40 |
| 13 | 2,41 | 0,80 | 45 |
| | | | 15 |
| | | | 30 |

Résumé de la thèse :

Les circuits de refroidissement industriels à tour aéroréfrigérante humide utilisent de l'eau naturelle (rivière ou mer) pour évacuer la puissance thermique du procédé industriel. L'eau provenant de l'environnement contient des matières en suspension ainsi que des espèces chimiques et biologiques. Elle subit un échauffement dans le circuit de refroidissement et une concentration de ces espèces par évaporation d'eau. Ces circuits sont donc soumis à un encrassement chimique (e.g. tartre), biologique (e.g. biofilm) et/ou particulaire (e.g. dépôts de matières en suspension sur les surfaces). Les écoulements dans les différentes parties du circuit jouent un rôle prépondérant sur la formation des dépôts. L'objectif de ce travail est de caractériser les écoulements dans les différentes parties des circuits de refroidissement et d'en proposer une modélisation pour appréhender les phénomènes d'encrassement. Une étude bibliographique a orienté le choix vers l'approche compartimentale, permettant une modélisation hybride multi-échelle (locale et système) qui découpe un système complexe en compartiments spatialement répartis pour en représenter l'hydrodynamique. Le modèle compartimental peut être implémenté avec tout modèle phénoménologique dépendant de l'hydrodynamique. Pour le construire, il a été nécessaire de caractériser les écoulements dans les parties d'un cas d'étude de circuit de refroidissement : les tubes du condenseur, les conduites en béton de transport de l'eau, le garnissage de la tour aéroréfrigérante et le bassin froid. Un dispositif expérimental à l'échelle pilote d'une tour aéroréfrigérante a été construit pour étudier les écoulements gaz/liquide des garnissages. Des simulations de mécanique des fluides numérique mono et diphasique (Volume of Fluid avec prise en compte des angles de contact) ont été réalisées pour les garnissages et le bassin froid. Des corrélations de la littérature ont permis d'étudier les conduites et les tubes de condenseur. Pour chaque partie du circuit il a été possible de déterminer : les distributions de conditions hydrodynamiques, notamment : vitesse, cisaillement, taux de présence de phase, épaisseur d'eau. Les méthodes mises en place peuvent être étendues à l'étude de tous les types de garnissages industriels. Pour l'encrassement, un modèle de croissance de biofilm tenant compte des limitations au transfert de matière au sein et à l'extérieur du biofilm et de l'effet du cisaillement a été développé sur la base d'informations expérimentales de la littérature sur plusieurs dispositifs industriels et différentes conditions opératoires. Les données hydrodynamiques et le modèle de biofilm ont été assemblés dans le modèle compartimental, qui permet ainsi la simulation du dépôt de biofilm dans l'ensemble du circuit en fonction des conditions de fonctionnement. Le modèle compartimental est donc un outil adéquat pour la modélisation de l'influence de l'hydrodynamique sur l'encrassement des circuits industriels.

Thesis abstract :

Industrial cooling circuits with wet cooling towers use raw water (from rivers or sea) in order to remove residual heat from industrial processes. Raw water contains suspended matters, chemical and biological species. This water is heated in the circuit condenser and evaporation induces species concentration. That's why different kind of fouling can be observed in cooling circuits : particulate fouling, chemical reaction fouling and biofouling. Hydrodynamics in the different parts of the circuit strongly influence fouling deposition. This report aims to provide a complete characterization of the cooling circuit hydrodynamics and to model all the fouling phenomena. The Compartmental Modelling approach has been selected doing a critical review of the modelling approaches available in Chemical Engineering. Compartmental modeling is a multi-scale (local and system) approach dividing the studied system into spatially representative hydrodynamic compartments network. Different physico-chemical models can be patched into the compartmental model. To create the compartmental model, it was necessary to characterize the flow characteristics in the different parts of the circuit : condenser tubes, concrete pipes, cooling tower packing and cold water basin. A pilot-scale cooling tower experimental setup has been built to visualize and measure water flow into packing. Mono-phase and multi-phase (Volume of Fluid with solid/liquid contact angle model) Computational Fluid Dynamics simulations have been performed to study hydrodynamics in packing and in cold water basin. All the required information about hydrodynamics in the circuit have been obtained such as velocity, shear stress, phase fraction and water film thickness. The method processed in this work can also be used to characterize different industrial packing. A biofouling growth model has been created considering transport and transfer phenomena limitations into the biofilm and into the liquid bulk. The model has been built taking into account shear stress as main hydrodynamic parameter using experimental data from literature with different geometries and different operating conditions. Finally, the compartment model has been developed using data from hydrodynamic characterization and the biofouling model. This model can simulate and predict biofilm deposition in the different parts of the cooling circuit. The created compartmental model is a suitable approach to study the influence of hydrodynamics behavior on fouling in cooling circuits.