



**COmité de DEveloppement du
GÉnie des Procédés en Rhône-Alpes Auvergne**

Siège : LGP2 / Grenoble INP-Pagora
461, rue de la Papeterie – CS 10065
38402 Saint-Martin-d'Hères Cedex

Tél : 33 (0)4 76 82 69 00

Fax : 33 (0)4 76 82 69 33

E-mail : codegepra@pagora.grenoble-inp.fr

Site web: <http://pagora.grenoble-inp.fr/codegepra>

Association régie par la loi de 1901

Centre SPIN - Mines Saint-Etienne

*Simulation numérique par la Méthode des Eléments Discrets du mélange
de particules dans un réacteur conique à vis*

Journée scientifique du CODEGEPRAs

Le Génie des Procédés en Rhône-Alpes Auvergne

Jeudi 15 Novembre 2018

Mines de Saint-Etienne / Centre SPIN

Saint-Etienne

Cette journée est parrainée par la SFGP et soutenue financièrement par MINES Saint-Etienne.





Association régie par la loi de 1901

**COmité de DEveloppement du
GEnie des Procédés en Rhône-Alpes Auvergne**

Siège : LGP2 / Grenoble INP-Pagora
461, rue de la Papeterie – CS 10065
38402 Saint-Martin-d'Hères Cedex

Tél : 33 (0)4 76 82 69 00

Fax : 33 (0)4 76 82 69 33

E-mail : codegepra@pagora.grenoble-inp.fr

Site web: <http://pagora.grenoble-inp.fr/codegepra>

Avant Propos / Remerciements

Après Grenoble (2003, 2010, 2016), Saint Etienne (2005, SFGP 2007, 2012), Chambéry (2006, 2011, 2017), Lyon (2009, SFGP 2013, 2014) et Clermont Ferrand (2015), la journée scientifique du CODEGEPRA revient à Saint-Etienne dans les locaux de l'Ecole des Mines de Saint-Etienne et du Centre SPIN. Cette année a été marquée par la participation active du CODEGEPRA à l'organisation du « 1^{er} Workshop Rhéologie et traitement biologique des eaux et des déchets » qui s'est tenu sur Grenoble le 19 juin 2018. Initié par deux laboratoires Marseillais (CEREGE et M2P2) et un laboratoire grenoblois (LRP), l'objectif de cette journée de présentations et d'échanges était de rassembler des chercheurs académiques et des industriels afin d'identifier les verrous de la mise en œuvre de ces procédés liés à des milieux aux comportements rhéologiques complexes. Un bilan de ce workshop, dont il est à noter la forte présence industrielle, est disponible sur le site du CODEGEPRA. Un prix poster a été décerné par le CODEGEPRA à cette occasion. Notre journée annuelle promet également d'être à nouveau dense et riche tant les domaines d'application du Génie des Procédés sont variés. Etant accueilli à Mines Saint-Etienne, la thématique des solides divisés et des poudres est à l'honneur au travers des deux conférences plénières sur « Génie des Procédés, Poudres et Solides Divisés, Technologies et Simulations Numériques" qui lanceront la journée avec deux regards croisés, industriel et académique. Jacques Grollemund (R&D Process - Elkem Silicones – Saint Fons) abordera "La technologie des poudres chez Elkem Silicones" et Sylvain Martin (Mines Saint-Etienne / Centre SPIN – Saint-Etienne) présentera "Simulation numérique des poudres : vers les systèmes réels à l'échelle du procédé". Deux sessions de "short" communications orales présentant les travaux des doctorants et post doctorants dans toutes les thématiques d'application du Génie des Procédés encadreront la séance posters illustrant ces communications et permettant de poursuivre les échanges de façon conviviale autour d'un buffet. L'assemblée générale de l'association et la remise du prix de thèse 2018 à Marion Serres (LGPC et LP) et des prix communication/poster viendront compléter cette journée qui, avec plus de 50 inscrits et 25 communications, se présente donc une fois encore sous les meilleurs auspices. Je tiens donc à remercier l'ensemble des participants car ils sont les acteurs de cette journée. J'adresse un remerciement plus particulier aux chercheurs et enseignants-chercheurs permanents présents d'avoir, dans nos agendas très contraints, pris le temps de venir et sollicité leurs doctorants. Que dire de nos deux conférenciers pléniers, Jacques Grollemund et Sylvain Martin qui ont eu en plus une présentation à préparer : un grand merci à vous deux. Cette journée voit aussi le départ du Conseil d'Administration de Christian Jallut (LAGEPP) et Pierre-Xavier Thivel (LEPMI), deux piliers présents depuis la création de notre association. Un énorme merci à vous deux pour votre forte implication sans faille durant toutes ces années. Mes remerciements chaleureux vont également à nos soutiens et sponsors : l'Ecole des Mines de Saint-Etienne et le Centre SPIN via son Directeur, Jean-Michel Herri, qui en plus de nous accueillir, nous soutiennent financièrement.

Marc Arousseau
Président du CODEGEPRA

Journée scientifique du CODEGEPRA 2018
15 Novembre 2018
Ecole des Mines de Saint-Etienne / Centre SPIN - Saint-Etienne

Sommaire

Programme.....	1
Résumés des conférences plénières.....	3
Liste et résumés des « short » communications orales / posters.....	9
Résumé de la thèse de Marion Serre, prix de thèse CODEGEPRA 2018.....	37

Journée scientifique du CODEGEPRA 2018
15 Novembre 2018
Ecole des Mines de Saint-Etienne / Centre SPIN - Saint-Etienne

Programme

9h30 Accueil

10h00 Conférences plénières

Génie des Procédés, Poudres et Solides Divisés, Technologies et Simulations Numériques

Jacques Grollemund (R&D Process - Elkem Silicones – Lyon)

Sylvain Martin (Mines Saint-Etienne / Centre SPIN – Saint-Etienne)

11h00 Communications orales (doctorants et post-doctorants)

11h30 Pause café - posters

11h45 Communications orales (doctorants et post-doctorants)

13h00 Buffet et séance posters

14h30 Remise du prix de thèse 2018 à Marion Serres (LGPC)

15h00 Communications orales (doctorants et post-doctorants)

15h45 Pause café - poster

16h00 AG du CODEGEPRA

16h30 Remise des prix poster/communication orale

16h45 Fin de la journée

Résumés des conférences plénières

"Génie des Procédés, Poudres et Solides Divisés, Technologies et Simulations Numériques"

"La technologie des poudres chez Elkem Silicones"

Jacques Grollemund

R&D Process - Elkem Silicones – Saint Fons

"Simulation numérique des poudres : vers les systèmes réels à l'échelle du procédé"

Sylvain Martin

Mines Saint-Etienne / Centre SPIN – Saint-Etienne

La technologie des poudres chez Elkem Silicones

GROLLEMUND Jacques – responsable de la coordination de projets au sein de la R&D
jacques.grollemund@elkem.com

ELKEM SILICONES - 55 Rue des frères Perret – 69190 SAINT FONTS

Résumé

Elkem Silicones met en œuvre et en forme des solides divisés au sein de ses unités de fabrication.

La présentation démarrera sur un rappel de la difficulté à caractériser les solides divisés et sur les domaines concernés par la technologie des poudres.

Les principaux solides mis en œuvre (silicium, certaines silices et des carbonates) sont présentés pour mettre en évidence les caractéristiques principales.

Elkem Silicones est en particulier concerné par les domaines ci-après :

- Sécurité : explosion de poussière et hygiène
- Mise en œuvre :
 - Stockage du silicium : impact des variations granulométriques sur les écoulements (risque d'avalanche, etc...)
 - Transferts : les divers types de transfert (pneumatiques, mécaniques et gravitaires)
 - Mélange de catalyseurs
 - Fluidisation du silicium : impact de la granulométrie
- Mise en forme : broyage & séparation du Silicium (et Ferrosilicium)
- Réaction :
 - Fonctionnalisation de la silice : phénomène physico chimique mis en œuvre (le procédé ne sera pas développé)
 - Réaction de formation des chlorosilanes en lit fluidisé : phénomènes pris en compte dans le procédé

Chacun des domaines fera l'objet de quelques transparents pour présenter :

- Quels sont les enjeux associés
- Quelles sont les méthodes et connaissances qui sont nécessaires pour définir ou dimensionner les équipements

La conclusion de l'exposé portera sur l'intérêt de développer/maintenir nos connaissances sur les poudres en interne et l'intérêt des collaborations avec des universités ou entreprises sous-traitantes.

Simulation numérique des poudres : vers les systèmes réels à l'échelle du procédé

MARTIN Sylvain^a, Enseignant – chercheur à Ecole des Mines de Saint-Etienne - Centre SPIN
sylvain.martin@emse.fr

^aMines Saint-Etienne, Univ Lyon, CNRS, UMR 5307 LGF, Centre SPIN, F - 42023 Saint-Etienne France

Résumé

La simulation numérique représente un enjeu stratégique pour comprendre, interpréter et prédire le comportement des milieux granulaires dans les procédés. Elle permet de faire le lien entre une description physique, à l'échelle du grain, et le comportement macroscopique à l'échelle du procédé. La représentation quantitative des systèmes réels à l'échelle industrielle reste cependant limitée par plusieurs verrous :

- L'impossibilité de représenter la totalité des grains présents dans les procédés en raison de la puissance limitée des calculateurs,

- La nécessité de calibrer les modèles, souvent très simplistes, à une échelle d'observation très petite (le contact entre deux grains, l'interface entre un grain et un fluide...).

Après une présentation générale du contexte et des différentes stratégies possibles, un exemple d'application sera présenté avec la mise en œuvre de la DEM pour simuler le mélangeage de poudres dans un mélangeur industriel.

Liste des « short » communications orales / posters

- P1.** "Modélisation de l'effet des impuretés de l'acide phosphorique sur la qualité physique des engrais phosphate d'ammonium", **LEBBAR N. et al.**, Mines Saint-Etienne, Univ Lyon, CNRS – LGF / Centre SPIN, Laboratory of Physic and Chemistry of Materials - Sciences Faculty El Jadida (Maroc), Laboratoire de Chimie Organique Appliquée - Sciences and technologies Faculty Fès (Maroc) et Fertilizer Laboratory - Direction of research and developpement - OCP group SA (Maroc)
- P2.** "Comparaison d'adsorbants alternatifs pour le traitement de l'H₂S dans le biogaz", **GASQUET V. et al.**, Univ Lyon, INSA Lyon - DEEP
- P3.** "Introduction d'un nouveau critère d'appréciation de l'activité sonochimique dans un milieu hétérogène", **BARCHOUCI A. et al.**, Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP - LRP et Univ. Grenoble Alpes, CNRS - CERMAV
- P4.** "Development of a NO_x and NH₃ sensor for automotive exhaust applications and control of industrial process", **NEMATBAKHSI ABKENAR G. et al.**, Mines Saint-Etienne, Univ Lyon, CNRS - LGF / Centre SPIN
- P5.** "Identification de descripteurs pour un développement optimisé de catalyseurs. Application en aromatisation du n-heptane", **SAID-AIZPURU O. et al.**, IFP Energies Nouvelles – Site de Lyon et Univ Lyon, Université Claude Bernard Lyon 1, CNRS - IRCELYON
- P6.** "Etude hydrodynamique d'un écoulement gaz-liquide dans une mousse solide : caractérisation des interfaces", **BUSSER T. et al.**, Univ. Lyon, ENS de Lyon, Univ Claude Bernard, CNRS - Laboratoire de Physique, CPE Lyon, UCBL, Univ.Lyon - LGPC et IFP Energies Nouvelles – Site de Lyon
- P7.** "Prediction of transfer performances in trickle bed reactors using CFD simulations", **BOURAS H. et al.**, IFP Energies Nouvelles - Etablissement de Lyon et Univ. Lyon, CNRS, CPE Lyon UCBL – LGPC
- P8.** "Identification and prediction of precursors leading to Co based Fischer-Tropsch catalyst deactivation: a multi-scale approach", **KOCIC S. et al.**, IFP Energies Nouvelles - Site de Lyon
- P9.** "Cristallisation à l'équilibre et hors équilibre d'hydrates mixtes de gaz : Mesures PVT_x et modélisation thermodynamique", **MAGHSOODLOO S. et al.**, Mines Saint-Etienne, Univ Lyon, CNRS - LGF / Centre SPIN
- P10.** "Formulation intégrale de modèles multi-échelles pour l'optimisation de procédés photo-réactifs solaires", **GATTEPAILLE V. et al.**, Université Clermont Auvergne, CNRS, Sigma Clermont - Institut Pascal
- P11.** "Kinetic and mechanistic aspects of the dehydration of CaSO₄·2H₂O", **PRETURLAN J. et al.**, Mines Saint-Etienne, Univ Lyon, CNRS - LGF / Centre SPIN et Saint-Gobain (Aubervilliers)
- P12.** "Caractérisation du stress hydromécanique local par analyse expérimentale et numérique de l'hydrodynamique dans des conditions opératoires de « fermentation sombre », **DANICAN A. et al.**, Université Clermont Auvergne, CNRS, SIGMA Clermont - Institut Pascal et Université Clermont Auvergne - LABEX IMobS3
- P13.** "Modélisation CFD d'un nouveau type de réacteur pour le couplage synergique de catalyse hybride", **VIOLET L. et al.**, Univ.Lyon, CNRS, CPE Lyon, UCBL – LGPC

- P14.** "Filtration électrostatique pour la filtration des nano et microparticules de l'air intérieur", **CHEN L. et al.**, Univ. Grenoble Alpes, Univ. Savoie Mont-Blanc, CNRS – LOCIE
- P15.** "Effets des superplastifiants de types polycarboxylates et de l'acide citrique sur l'hydratation et la rhéologie des ciments sulfoalumineux-bélitique", **BELHADI R. et al.**, Mines Saint-Etienne, Univ Lyon, CNRS - LGF / Centre SPIN
- P16.** "Effets thermodynamiques sur la vitesse dans les réactions de polyoléfine en phase gaz", **KARDOUS S. et al.**, Université Claude Bernard Lyon1, CNRS, CPE Lyon – LAGEP et Université Claude Bernard Lyon1, CPE Lyon – C2P2
- P17.** "Morphological Study of Cyclopentane Hydrates in Brine Solutions for Desalination Application", **HO-VAN S. et al.**, Mines Saint-Etienne, Univ Lyon, CNRS - LGF / Centre SPIN et Oil Refinery and Petrochemistry Department, Hanoi University of Mining and Geology (Viet Nam)
- P18.** "Air injection in a yield stress Fluid", **HOJEIJ A. et al.**, Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP – LRP et Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, LEGI
- P19.** "Spectroscopie Raman des solutions aqueuses contenant des carbohydrates et polyols", **DUMOUILLA V. et al.**, ROQUETTE FRERES (Lestrem, France) et Université Clermont Auvergne, CNRS, Sigma Clermont - Institut Pascal
- P20.** "Modélisation de batteries à circulation au vanadium tout-solide", **POULET ALLIGAND K. et al.**, Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, LEPMI
- P21.** "Simulation par la méthode SPH du problème de Stefan 1D et 2D : conduction thermique et changement de phase solide/liquide", **GEARA S. et al.**, Mines Saint-Etienne, Univ Lyon, CNRS - LGF / Centre SPIN
- P22.** "Experimental Evidences of Interaction of Gas-Water-Oil Flow Pattern with Gas Hydrate Formation Kinetics and Pipeline Plugging", **ALMEIDA V. et al.**, Mines Saint-Etienne, Univ Lyon, CNRS - LGF / Centre SPIN et TOTAL S.A.– CSTJF (Pau, France)
- P23.** "Caractérisation d'un milieu poreux pour un procédé de dépollution des sols l'extraction Multiphasique (MPE) ", **LAAFAR A. et al.**, Univ Lyon, INSA Lyon – DEEP et Univ Lyon, ENISE Saint-Etienne – LTDS
- P.24** "Kinetic modeling of lignin catalytic hydroconversion in a semi-batch reactor", **PU J. et al.**, Univ Lyon, Université Claude Bernard Lyon 1, CNRS – LAGEP et Univ Lyon, Université Claude Bernard Lyon 1, CNRS - IRCELYON
- P.25** "Vieillissement de papiers Kraft et corrélation entre différentes propriétés", **BARNET A. et al.**, Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP - LGP2

P1. Modélisation de l'effet des impuretés de l'acide phosphorique sur la qualité physique des engrais phosphate d'ammonium

LEBBAR Nacira^{a,c}, Mehdi KHOULOUD^c, Mohammed EL ASRI^b, Elmouloudi SABBAR^a, Essaid BILAL^{c,d}

^aLaboratory of Physic and Chemistry of Materials, Sciences Faculty El Jadida, Maroc

^bLaboratoire de Chimie Organique Appliquée, Sciences and technologies Faculty Fès, Maroc

^cFertilizer Laboratory, Direction of research and développement, OCP group SA, Maroc

^dEcole des Mines de Saint Etienne, Centre SPIN, CNRS UMR 5600, F42023 St. Etienne, France

La surveillance des propriétés physiques des engrais présente beaucoup d'intérêt à différents niveaux. Tous les problèmes liés au comportement des granulés (ségrégation, épandage, granulation, dureté ...) nécessitent une meilleure caractérisation des engrais pour les comprendre et/ou les prédire. La communauté scientifique est amenée à développer diverses approches de modélisation pour, d'une part, comprendre la dynamique des impuretés provenant de l'acide phosphorique lors de la fabrication des engrais et, d'autre part, évaluer l'efficacité des mesures et suivi des données de la production et des fluctuations de la qualité physique des engrais. Nous avons collecté et suivi pendant plusieurs mois les données des lignes de production d'engrais phosphatés (MAP). L'objectif de ce travail est de comprendre, à travers la modélisation en appliquant l'approche du réseau de neurones artificiels (ANN), l'effet des impuretés d'acide phosphorique sur la qualité physique des engrais tels que le rendement de granulation, la taille des grains et le diamètre moyen des granulés D50. Des modèles ont été construits en utilisant la régression linéaire multiple (MLR) et l'analyse en composantes principales (ACP).

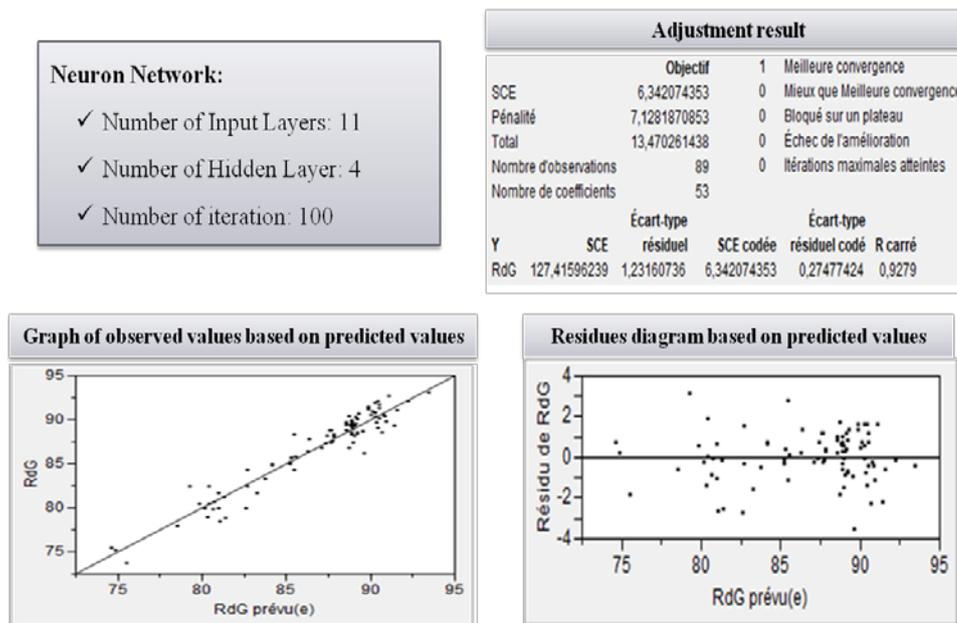


Figure 1. Résultats d'ajustement du modèle de réseau neuronal

La modélisation des réseaux neuronaux pour le système non linéaire nous a permis de prédire les conditions optimales futures et de prévoir le meilleur profil d'acide phosphorique à 54% permettant une bonne granulation des engrais phosphatés monoammoniques (MAP). Le coefficient de détermination $R^2 = 92,79\%$ est significatif. Cette valeur donne une bonne compatibilité entre les valeurs expérimentales et prédites du modèle adapté.

Cette étude nous a permis de représenter et de développer une spécification du modèle à déployer tout en respectant les points clés suivants directement liés au processus de fabrication des engrais à l'échelle industrielle :

- Maîtrise de l'échantillonnage de bases de données ;
- Prédire les obstacles liés aux paramètres de performance de production ;
- Prédire la variation et la diversité du profil acide fréquentatif ;
- Réaliser les prévisions les plus précises possibles ;
- Adapter le modèle à chaque type d'engrais.

P2. Comparaison d'adsorbants alternatifs pour le traitement de l'H₂S dans le biogaz

GASQUET Valentine^a, KIM Boram^a, BENBELKACEM Hassen^a

^a Univ Lyon, INSA Lyon, DEEP (Déchets Eau Environnement Pollutions), EA 7429, 69621 Villeurbanne cedex, France

Résumé

Dans l'objectif de traiter l'hydrogène sulfuré (H₂S) présent dans le biogaz (étape essentielle avant sa valorisation), l'adsorption sur charbon actif imprégné est une solution largement utilisée par les industriels. Ce type de matériau possède une grande surface spécifique du fait d'une porosité fortement développée. Celle-ci permet une meilleure adsorption grâce au grand nombre de sites actifs présents à la surface du matériau. Par ailleurs, une adsorption chimique a également lieu lorsqu'un film aqueux se développe à la surface du charbon, permettant de transformer l'H₂S en soufre natif (Bagreev and Bandosz, 2001). Afin de s'inscrire dans l'économie circulaire et économiser des ressources naturelles, il a été pensé d'utiliser des matériaux alternatifs de nature proche des adsorbants traditionnels pour éliminer l'H₂S du biogaz. En effet, de nombreuses études ont récemment montré, le plus souvent à l'échelle du laboratoire, l'intérêt de l'utilisation de mâchefers d'ISDND (Fontseré Obis et al., 2017), de biochars (Sahota et al.) ou de boues d'épuration incinérées (Polruang et al., 2017) pour le traitement du biogaz. Néanmoins, tous les matériaux alternatifs, potentiels adsorbants, n'ont pas encore été étudiés, qui plus est à l'échelle pilote/terrain avec un biogaz réel. Le travail présenté a donc pour objectif d'évaluer l'efficacité d'adsorption d'H₂S des différents matériaux de type résidus thermiques.

Dans le cas de cette étude, quatre différents types de résidus thermiques ont été sélectionnés. Les essais ont été effectués à partir d'un biogaz réel. Sa composition est suivie en temps réel grâce à un spectromètre laser infrarouge (analyseur ProCeas[®] d'ap2e). Les essais sont effectués sur deux réacteurs en parallèle de 250 cm³ environ. Les matériaux sont caractérisés avant et après leur utilisation comme adsorbant afin de déterminer leurs surfaces spécifiques, leurs compositions élémentaires, pH, etc. La comparaison des résidus de traitement thermique permet de faire ressortir ceux étant les plus efficaces comme adsorbants ainsi que de mettre en évidence les mécanismes réactionnels qui ont lieu lors de l'adsorption de l'H₂S.

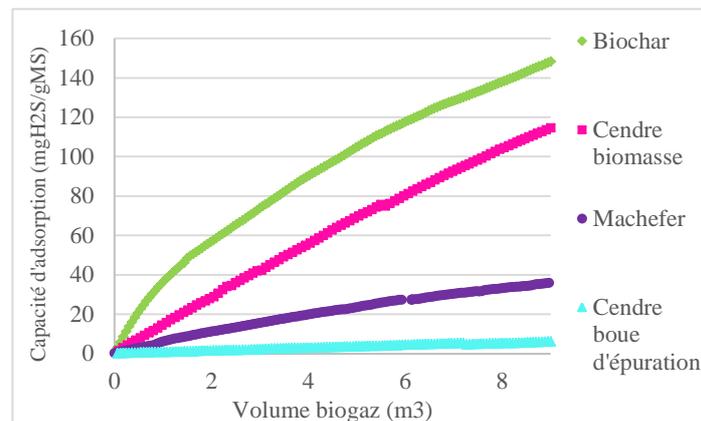


Figure 1 : Évolution de la capacité d'adsorption en fonction du volume de biogaz passé dans la colonne

Bibliographie

- Bagreev, A., and Bandosz, T.J. (2001). H₂S adsorption/oxidation on unmodified activated carbons: importance of prehumidification. *Carbon* 39, 2303–2311.
- Fontseré Obis, M., Germain, P., Bouzahzah, H., Richioud, A., and Benbelkacem, H. (2017). The effect of the origin of MSWI bottom ash on the H₂S elimination from landfill biogas. *Waste Manag.* 70, 158–169.
- Polruang, S., Banjerdkij, P., and Sirivittayapakorn, S. (2017). Use of Drinking Water Sludge as Adsorbent for H₂S Gas Removal from Biogas.
- Sahota, S., Kumar Vijay, V., Subbarao, P.M.V., Chandra, R., Ghosh, P., Shah, G., Kapoor, R., Vijay, V., Koutu, V., and Shekhar Thakur, I. Characterization of leaf waste based biochar for cost effective hydrogen sulphide removal from biogas. *Bioresour. Technol.*

P3. Introduction d'un nouveau critère d'appréciation de l'activité sonochimique dans un milieu hétérogène

BARCHOUCHI ^{a,1}, BOISSEAU S. ^b, GONDREXON N. ^a, BAUP S. ^a

^a Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, LRP, 38000 Grenoble, France

^b Univ. Grenoble Alpes, CNRS, CERMAV, 38000 Grenoble, France

Les ultrasons, de basse ou de haute fréquence, sont souvent utilisés en milieu hétérogène, mais leur action est modifiée par rapport à un milieu homogène. En effet, selon la nature de l'hétérogénéité, il est possible de noter une amélioration de l'activité ultrasonore par l'introduction d'une source de nucléation pour les bulles de cavitation, moteur des effets physicochimiques des ultrasons. A contrario, certains auteurs ont remarqué une dégradation de leur activité, du fait de la modification du cycle de vie des bulles de cavitation ou par l'atténuation de l'onde ultrasonore [1-4].

L'objectif de ce travail est d'étudier l'impact de cette hétérogénéité sur l'activité ultrasonore, en particulier l'activité sonochimique. Deux types de réacteurs sont utilisés dans ce travail, un fonctionnant à basse fréquence (20 kHz) et l'autre à haute fréquence (376, 575, 858 ou 1135 kHz). La caractérisation de l'activité ultrasonore a été réalisée par calorimétrie, par dosimétrie du KI, ainsi que par sonochimiluminescence induite du luminol [5]. Les solides divisés modèles utilisés pour simuler l'hétérogénéité du milieu sont des billes de verre de différents diamètres ($8 \cdot 10^{-3}$ - 6 mm), testées à différentes concentrations (de 0,5 à 5 g/L) et supposées inertes chimiquement.

La vitesse de formation de I_3^- à partir de l'oxydation de KI a servi de grandeur pour évaluer l'activité chimique du milieu sonifié. L'utilisation de billes de verre de taille et de concentrations différentes a conduit à introduire le critère de surface développée au sein du milieu. Il apparaît clairement que pour l'ensemble des résultats obtenus (Figure.1), l'activité sonochimique diminue au-delà d'une valeur seuil de cette surface (de l'ordre $1,5 \cdot 10^{-2} \text{ m}^2$), alors que la mesure de l'énergie ultrasonore transmise au milieu par calorimétrie n'est quant à elle pas affectée. Cette observation est également faite pour l'ensemble des fréquences étudiées.

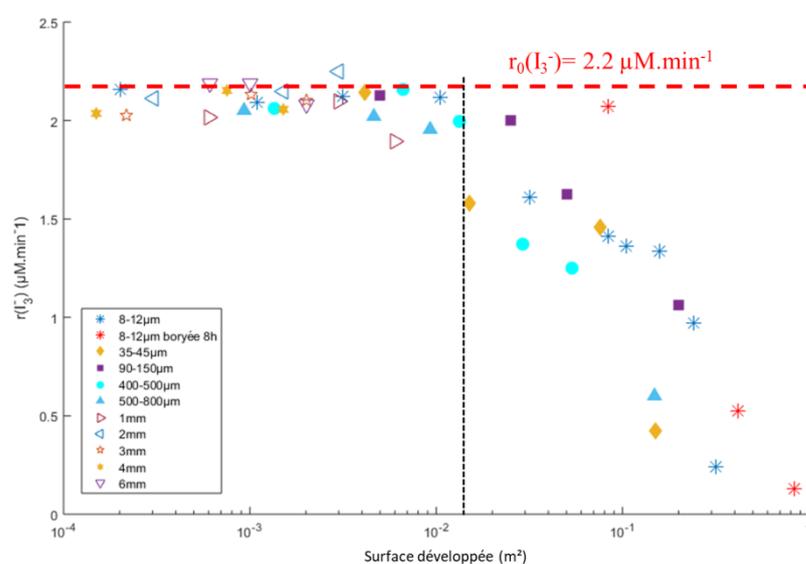


Figure 2 : Influence de la surface développée sur l'activité sonochimique des ultrasons ($f = 575 \text{ kHz}$, $P_{vol} = 96 \pm 5 \text{ W/L}$)

Il semble donc que ce critère, non référencé dans la littérature, puisse être utilisé pour qualifier l'activité sonochimique dans un milieu hétérogène induit par des billes de verre. La question se pose désormais de savoir si un tel critère peut être utilisé pour d'autres types de particules (morphologie, densité, ...).

Références

- [1]. Koda S., T. Kimura, T. Kondo et H. Mitome, 2003, *Ultrasonics Sonochemistry*, **10**, 149-156.
- [2]. Keck A., E. Gilbert et R. Köster, 2002, *Ultrasonics*, **40**, 661-665.
- [3]. Her N., J-S. Park, Y. Yoon, 2011, *Chemical Engineering Journal*, **166**, 184-190.
- [4]. Atkinson C. M., Kytömaa H. K., 1992, *Int. J. Multiphase Flow*, **18**(4), 577-592.
- [5]. Tuziuti T., Yasui K., Sivakumar M. et Iida Y., 2005, *J. Phys. Chem. A*, **109**, 4869-472.

¹Auteur à qui la correspondance devra être adressée : ayoub.barchouchi@univ-grenoble-alpes.fr

P4. Development of a NO_x and NH₃ sensor for automotive exhaust applications and control of industrial process

NEMATBAKHSH ABKENAR Gita^{a*}, VIRICELLE Jean-Paul^a, RIEU Mathilde^a, BREUIL Philippe^a

^aMines Saint-Etienne, Univ Lyon, CNRS, UMR 5307 LGF, Centre SPIN, F - 42023 Saint-Etienne, France
Ecole des mines de Saint-Étienne, 158 Cours Fauriel, CS62362, 42023, Saint-Étienne, France

Abstract

According to new European driving cycle, while the vehicular emissions of NO_x and CO have decreased over the past years, ammonia emissions have considerably increased. Among all NO_x reduction approaches that have been developed, selective catalyst reduction (SCR) system using ammonia as a reductant is one the most reliable ways to control the NO_x emissions from diesel engine vehicles and trucks. In order to optimize the conversion rates of NO_x and to prevent inducing excessive NH₃ to the air, an NH₃ and NO_x sensor is required to control the SCR system. Ivan Romanytsia et al. in 2015 have developed three-electrode mixed-potential selective NO₂ sensors. Based on this study, we aim to develop sensors for selective detection of both NO_x and NH₃ for the exhaust of automotive. In this work, mixed potential gas sensors are fabricated by using two sensing materials of Au and Au-V₂O₅ as working electrodes, YSZ as electrolyte and platinum as reference and counter electrode. In order to evaluate the performance of the fabricated planar sensors, the response to different pollutant gases such as CO, NH₃, NO₂ and NO in respective amounts of 100, 20, 100 and 100 ppm are studied in a base gas composed of 12% O₂ and 1.5% H₂O, balanced with N₂. The sensor signal (ΔV_{ref}) is the difference of potential between the reference (Pt) and the working electrode. In order to take into account irreproducibility of the sensors due to fabrication process, all tests are reproduced with two sensors (A and B). Since NO₂ is an oxidizing gas, the galvanostatic mode can only produce the electro-chemical reduction of NO₂ at working electrode. Figure 1a shows the variations of the potential at 450 °C for different gases by applying a polarization current of 25nA from working to counter electrode. In these conditions, the responses to other interfering gases such as CO and NH₃ are removed while there is relatively a good selectivity towards NO₂. Concerning ammonia gas sensors, Au-V₂O₅ working electrodes displayed a high sensitivity to NH₃ as well as fast response and recovery times at 600 °C (figure 1b). In order to achieve an integrated NO_x and ammonia sensor, which works simultaneously at the same temperature, further investigations are needed.

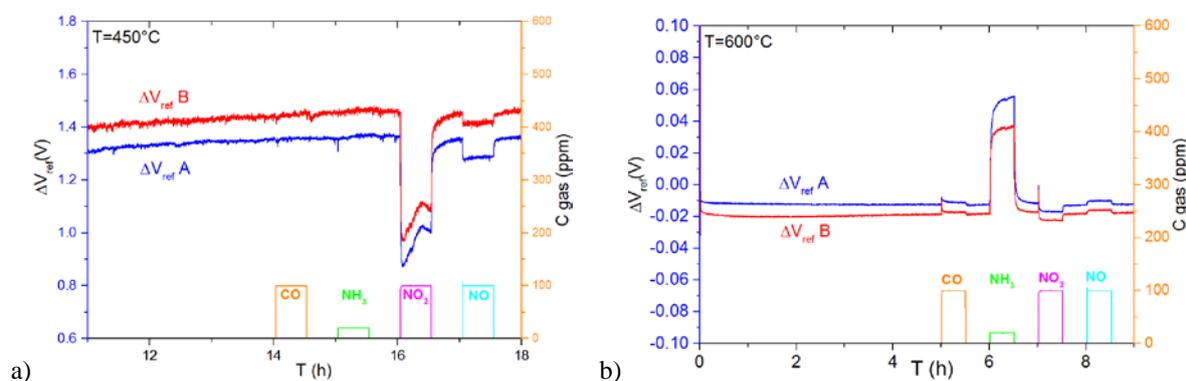


Figure 1. Response of the (a) Au sensors at 450°C with $I=25$ nA and (b) Au-V₂O₅ sensors at 600°C for pulses of CO (100 ppm), NH₃ (20 ppm), NO₂ (100 ppm) and NO (100 ppm) in base gas (12% O₂, 1.5% H₂O, balance N₂).

References

- I. Romanytsia, J.P. Viricelle, Ph. Vernoux and C. Pijolat (2015): Application of advanced morphology AuX (X=YSZ, ZrO₂) composites as sensing electrode for solid state mixed-potential exhaust NO_x sensor. *Sensors and Actuators B: Chemical* 207, 391-397.
- Hertel T., H. Over, H. Bludau, M. Gierer et G. Ertl, 1994a, *Surf. Sci.* 301, 1.
- L. Dai, Y. Liu, W. Meng, G. Yang, H. Zhou, et al. (2016): Ammonia sensing characteristics of La₁₀Si₂MgO₂₆-based sensors using In₂O₃ sensing electrode with different morphologies and CuO reference electrode. *Sensors and Actuators B: Chemical* 228, 716-724.

* gita.nematbakhsh@emse.fr

P5. Identification de descripteurs pour un développement optimisé de catalyseurs. Application en aromatisation du n-heptane.

SAID-AIZPURU Olivier^a, DANDEU Aurélie^a, ALLAIN Florent^a, DIEHL Fabrice^a, FARRUSSENG David^b et JOLY Jean-François^{a*}

^aIFP Energies Nouvelles – Site de Lyon
Rond-point de l'échangeur de Solaize, 69360 Solaize
^bIrcelyon
2 Avenue Albert Einstein, 69100 Villeurbanne

Résumé

Le procédé de reformage catalytique du naphtha permet d'enrichir un mélange d'hydrocarbures légers en composés à haut indice d'octane. L'enjeu principal est de favoriser les réactions de transformation de paraffines linéaires en aromatiques. Les catalyseurs employés se présentent sous la forme de nanoparticules de platine (généralement associées à d'autres métaux) supportées sur une alumine gamma chlorée. Ces systèmes associent ainsi des sites métalliques propices au transfert d'hydrogène avec des sites acides exprimés à la surface du support et l'interaction entre ces sites est un facteur crucial influant sur la sélectivité du système réactionnel. Il existe donc un lien très étroit entre la formulation du catalyseur et les performances globales de ce procédé.

L'objectif d'ensemble consiste à étudier la possibilité de développer un modèle cinétique qui permette d'orienter le développement de nouveaux catalyseurs. Dans une perspective plus lointaine, le remplacement de certains paramètres d'un modèle cinétique, traditionnellement ajustés sur des données expérimentales, par des propriétés mesurées ou calculées pour le catalyseur, est considéré comme un pas en avant vers la conception de modèles prédictifs pour la conception de nouvelles phases actives. Ce sont ces propriétés physico-chimiques, participant directement au dimensionnement du procédé, que l'on qualifie de descripteurs catalytiques.

La démarche envisagée revient à étudier la relation entre la structure et l'activité catalytique d'un ensemble d'une trentaine de catalyseurs de reformage catalytique. Ces solides présentent des teneurs variables en chlore et en platine et ont été spécifiquement choisis afin d'exprimer différentes distances inter-sites. La stratégie d'étude comprend trois temps :

1. Caractériser l'activité de ces catalyseurs sur trois systèmes simplifiés que sont l'aromatisation du n-heptane, la déshydrogénation du méthylcyclohexane ainsi que l'isomérisation du 3,3-diméthylbutène.
2. Étudier l'effet d'une variation de formulation catalytique sur les valeurs des constantes cinétiques d'un modèle d'aromatisation du n-heptane.
3. Rechercher des corrélations entre propriétés physico-chimiques du catalyseur et constantes cinétiques afin de les utiliser en tant que paramètres d'entrée d'un modèle de reformage du n-heptane.

Les tests catalytiques envisagés sont donc nombreux et ont pour fonction de mettre en évidence des variations d'activité chimique intrinsèque liées à des différences de formulation de la phase active. Ces contraintes justifient l'utilisation d'outils d'Expérimentation Haut Débit (EHD) permettant d'effectuer des tests parallélisés dans des lits fixes miniatures. Les travaux en cours consistent à mettre au point des protocoles de tests catalytiques sur une unité EHD qui fourniront les résultats expérimentaux nécessaires à cette étude.

* Auteur/s à qui la correspondance devrait être adressée : olivier.said-aizpuru@ifpen.fr;

P6. Etude hydrodynamique d'un écoulement gaz-liquide dans une mousse solide : caractérisation des interfaces

BUSSER Thomas^a, SERVEL Marion^{a, b, c}, PASCAL Barbara^a, PUSTELNIK Nelly^a, VIDAL Valérie^a, PHILIPPE Régis^b

^a Univ. Lyon, ENS de Lyon, Univ Claude Bernard, CNRS, Laboratoire de Physique
46 Allée d'Italie, 69364 Lyon, France

^b Laboratoire de Génie des Procédés Catalytiques, CNRS UMR 5285, CPE Lyon, UCBL, Univ.Lyon
43 bd du 11 novembre 1918, 69616 Villeurbanne, France.

^c IFPEN - IFP Energies nouvelles
Rond-point de l'échangeur de Solaize, 69360 Solaize, France

Résumé

Les écoulements multiphasiques en milieu poreux sont très répandus en génie des procédés (optimisation de procédés catalytiques, procédés de filtrations) [Tourvieille et al., 2015] mais aussi en géophysique par exemple pour l'exploitation de ressources fossiles (récupération assistée du pétrole, exploitation des hydrates de gaz) [Newman et al., 2008]. Dans toutes ces applications, les interfaces de contact entre les différentes phases jouent un rôle crucial sur l'écoulement et les réactions chimiques possiblement associées. Leur position et leur dynamique restent cependant très difficiles à quantifier. Dans ce contexte multidisciplinaire, cette étude porte sur la caractérisation de l'hydrodynamique d'un écoulement « 2D » à co-courant de gaz et de liquide dans une mousse solide à cellules ouvertes (Fig. 1). Nous présenterons plusieurs méthodes d'analyse d'images développées pour caractériser la position des phases gaz et liquide dans le milieu poreux (Fig. 1d). Le but de ce travail est de quantifier les aires d'interfaces entre les phases liquide et gaz et leurs mouvements en fonction des paramètres imposés (débits de gaz et de liquide, configuration horizontale ou verticale de l'écoulement). On s'attachera en particulier à la recherche d'une optimisation du contact gaz-liquide-matrice poreuse.

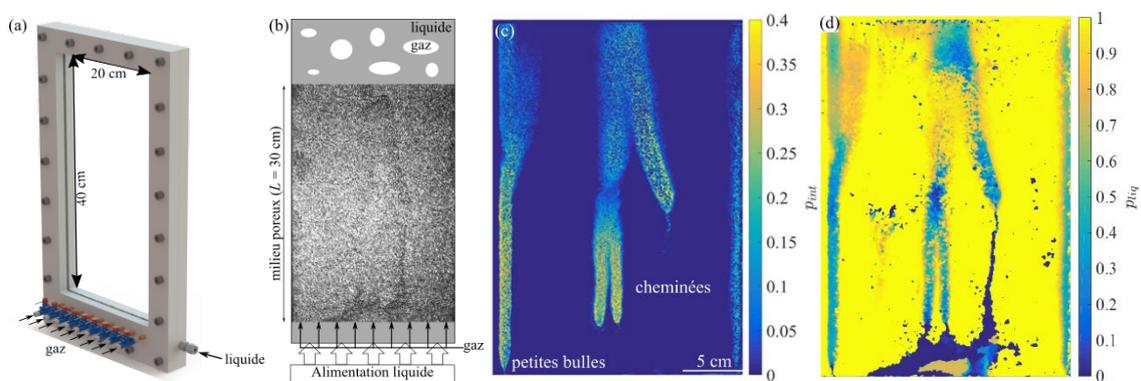


Figure 1 : (a) Vue globale du dispositif 2D. (b) Schéma simplifié et photo illustrant l'écoulement multiphasique. (c) Cartographie du mouvement d'interfaces. (d) Carte de probabilité du passage de la phase liquide.

Références

- Tourvieille J.-N., Philippe R., de Bellefon C. Milli-channel with metal foams under an applied gas-liquid periodic flow: External mass transfer performance and pressure drop. Chem. Eng. J. 2015, 267 : 332-346
Newman K.R et al.. Active methane venting observed at giant pockmarks along the U.S. mid-Atlantic shelf break. Earth and Planetary Science Letters 2008, 267: 341-352

P7. Prediction of transfer performances in trickle bed reactors using CFD simulations

BOURAS Hanane^a, HAROUN Yacine^a, FOURATI Manel^a, AUGIER Frédéric^a, PHILIPPE Régis^b et FONGARLAND Pascal^b

^aIFP Energies Nouvelles, Etablissement de Lyon

Rond-point Echangeur Solaize, F-69360 Solaize, France

^bUniv. Lyon, LGPC, UMR 5285 CNRS-CPE lyon UCBL

43 Boulevard 11 Novembre 1918, F-69616 Villeurbanne, France

Abstract

Trickle-bed reactors are widely used in various industries (petrochemicals, refining etc.). In this type of reactors, gas and liquid flow co-currently downward through a packed catalyst bed, in trickle flow regime. The transfer phenomena and thus the performances of such reactors are linked to the hydrodynamics, more specifically to flow regime, phases distribution and patterns, catalyst wetting etc. Therefore, it is crucial to simulate and track accurately the fluid-fluid interface if one wants to predict mass transfer coefficients while understanding mass transfer mechanisms. Several numerical methods have been developed or implemented for this purpose, including the VOF "Volume Of Fluid" model used in this work. Despite numerous studies conducted on trickle-bed reactors, few contributions have been made towards the direct numerical simulation of gas-liquid flow in these reactors including mass transfer and catalytic reaction, (mass transfer, heat transfer, chemical reaction, heterogeneous catalysis etc.).

The aim of this work is to model and simulate the performances of trickle bed reactors on a representative catalyst loading. To achieve this purpose, a model has been built and first validated upon simple cases for which analytical solutions or experimental results are available. The two phase flow is modelled using the VOF method, which is then coupled with a concentration convection diffusion equation to solve for mass transfer. As a result, the characteristics of the liquid film flow are obtained such as the liquid film thickness as shown in figure 1, which is validated against experimental data from Tourvieille et al.. Moreover, the mass flux is computed at the interface and used to calculate the local and global mass transfer coefficient $k_L a$ in the liquid side. Figure 2 shows the evolution of the local mass transfer coefficient in comparison to the analytical solution given by Higbie, where we observe a good agreement with the analytical solution apart from local fluctuations inherent in the post-processing method.

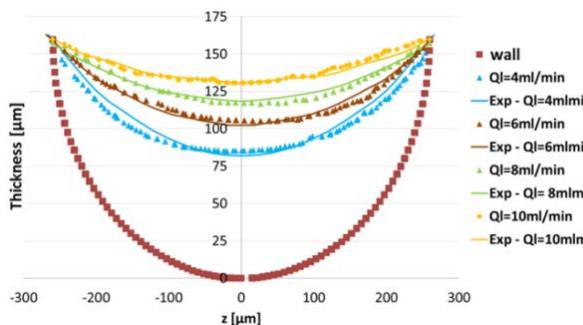


Figure 1. Liquid film thickness in an elliptical channel, Comparison between simulation (markers) and experimental results (Continuous lines) (Tourvieille et al. 2013) for four different liquid volume flow rate conditions

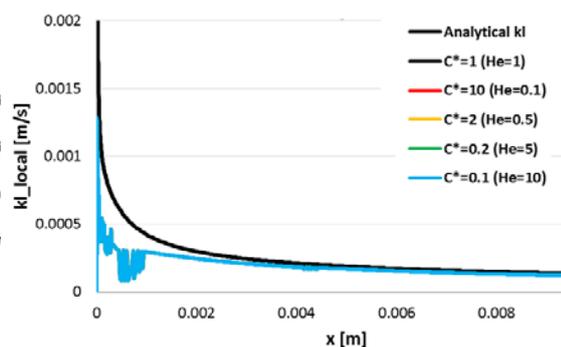


Figure 2. Local mass transfer coefficient for different He coefficients at the phases interface, comparison to the analytical solution (Higbie 1935), x represents the interface length

References

- Ubbink, O., and Issa, R., 1999. Journal of Computational Physics.
- Haroun, Y., Legendre, D., and Raynal, L., 2010. Chemical Engineering Science.
- Tourvieille, J.-N., Bornette, F., Philippe, R., Vandenberghe, Q. and De Bellefon, C., 2013. Chem. Eng. Journal.
- Higbie, R., 1935. Trans. AIChE.

P8. Identification and prediction of precursors leading to Co based Fischer-Tropsch catalyst deactivation: a multi-scale approach

KOCIC Stefan^a, SCHWEITZER Jean-Marc^a, RAYBAUD Pascal^b, VALERO Manuel Corral^{b,*}

^aProcess Design and Modeling Division

^bCatalysis and Separation Division

^{a,b}IFP Energies nouvelles, Rond-point de l'échangeur de Solaize, BP 3, 69360 Solaize, France

Abstract

Loss of catalyst activity and selectivity with time-on-stream are one of the greatest limitations for efficient industrial use of Cobalt based Fischer-Tropsch (FT) catalysis. Despite much work on this area, there is still a lack of consensus about the origin of catalyst deactivation considering the difficulties in performing experimental analysis of air-sensitive Co catalysts covered with waxes. The most common hypotheses for catalyst deactivation are oxidation and carbonization of the active phase. Clearly, in order to optimize the efficiency of the overall process, one needs to identify the stability and the structure of $C_xH_yO_z$ intermediates on the experimentally inaccessible surface, as well as the kinetics towards those deleterious species. Such knowledge requires the molecular description of the surface of catalyst that can only be obtained, in case of FT catalysts, using *ab-initio* methods. Thus, we use Density Functional Theory (DFT) to test strategically some of the hypothesis evoked in the literature, and specifically those that implicate deposition of carbon and oxygen, in accordance with long-term deactivation studies. We present the Gibbs free energy change of the deposition of different $C_xH_yO_z$ surface intermediates on the Co(111) surface at FT reaction conditions. Our calculations infer, as invoked in experimental works in the literature, that small branched hydrocarbon species (C_xH_y) may be coke precursors. Moreover, although preferentially present in the form of $C_xH_yO_z$ surface species, high oxygen content on the catalyst surface seems not to be favorable at FT conditions, suggesting that deactivation by water-induced oxidation of active sites is less favored than deactivation by carbon. Lastly, we propose a methodology to improve an existing micro-kinetic model with *ab-initio* based results in order to predict deactivation and optimize operating conditions.

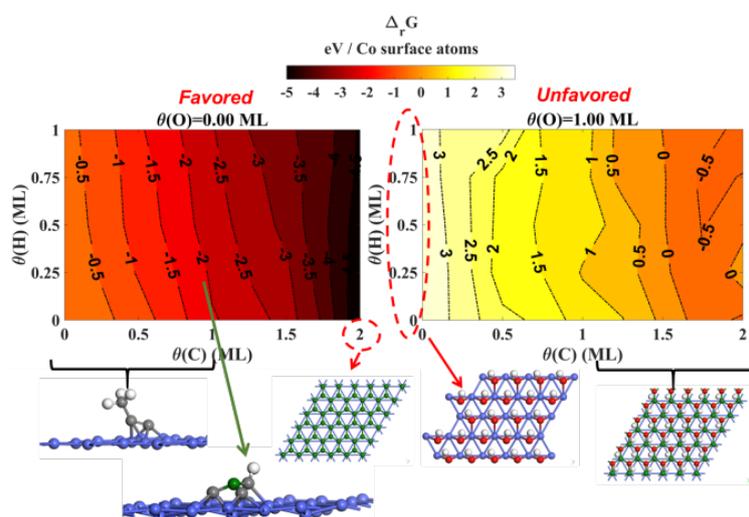


Figure 1. $\Delta_r G$ of $C_xH_yO_z$ deposition on Co(111) at $T = 473$ K, $P = 20$ bar, $H_2/CO = 2$ and $\alpha = 0.9$

References

- Saib, A. M et al., Catal. Today 2010, 154 (3-4), 271–282.
Corral Valero, M.; Raybaud, P. J. of Phys. Chem. C 2014, 118 (39), 22479–22490.
Visconti, C. G et al. Top. Catal. 2011, 54 (13-15), 786.

*Corresponding author: manuel.corral-valero@ifp.fr

P9. Cristallisation à l'équilibre et hors équilibre d'hydrates mixtes de gaz : Mesures PVTx et modélisation thermodynamique

MAGHSOODLOO Saheb², BOUILLOT Baptiste, DOUZET Jérôme, HO-VAN Son, HERRI Jean-Michel

Ecole des Mines de Saint-Etienne, SPIN, CNRS 5307, LGF, F-42023 Saint-Etienne, France

Résumé

Dans ce travail, afin d'étudier la formation à l'équilibre et hors équilibre des hydrates mixtes de gaz, deux procédures de formation, rapide et lente, ont été appliquées à des mélanges de CH_4 - C_2H_6 - C_3H_8 - $n\text{C}_4\text{H}_{10}$ - CO_2 - N_2 . L'objectif de ces deux procédures est d'examiner les effets cinétiques de la vitesse de cristallisation sur l'état final, soit dans des conditions dynamiques habituelles (formation rapide) soit en régime permanent (formation lente). Contrairement à la plupart des données de la littérature, qui fournissent uniquement des données de température-pression-composition gaz (PTY), cette étude fournit également la composition, le volume, la capacité de stockage, la densité de la phase hydrate, ou encore le nombre d'hydratation et la conversion d'eau. Les résultats montrent que, lors d'une cristallisation rapide, le volume d'hydrate augmente de 2% à 69% selon le mélange gazeux. De plus, la capacité de stockage diminue avec l'augmentation de la vitesse de cristallisation (Figure 1). En outre, un modèle thermodynamique, basé sur la méthode classique de van der Waals et Platteuw avec le potentiel de Kihara, a été utilisé. Un nouvel ensemble de paramètres Kihara pour le propane, basé sur une cristallisation lente, a été obtenu avec succès et comparé à la littérature. Les données sur la phase hydrates étant rares dans la littérature, ces dernières ont été collectées, et comparées au modèle thermodynamique précédent. Cela permet de mettre en évidence la capacité de la simulation à prédire la composition de la phase hydrate. Bien que ces outils soient intéressants pour prédire les équilibres de phase des molécules légères, ils deviennent moins fiables lorsque des transitions de phase se produisent (coexistence de structures) ou lorsque des molécules plus lourdes sont impliquées. Une analyse par spectroscopie RAMAN a d'ailleurs mis en évidence la coexistence de structures I et II pour un gaz riche en CO_2 à partir d'un mélange $\text{CO}_2/\text{C}_3\text{H}_8$. Pour conclure, la vitesse de cristallisation influence significativement le procédé de formation d'un hydrate mixte. L'utilisation d'un flash thermodynamique, combinant thermodynamique et bilan de masse, montre bien qu'une cristallisation lente est nécessaire pour satisfaire l'équilibre thermodynamique, et donc augmenter la capacité de stockage, et optimiser les procédés hydrate.

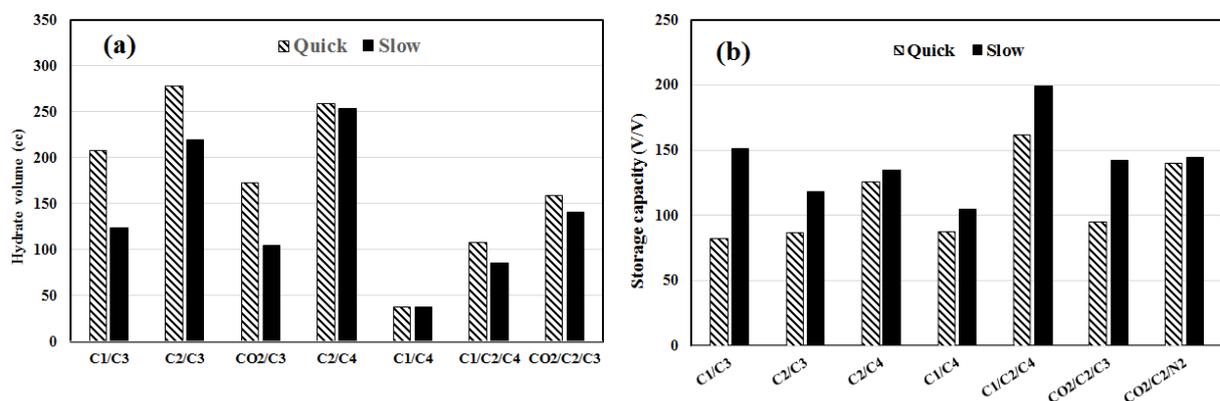


Figure 1. Hydrate phase properties at final state according to the different rates of crystallization: a) hydrate volume, b) storage capacity

² Auteur correspondant : saheb.m@emse.fr

P10. Formulation intégrale de modèles multi-échelles pour l'optimisation de procédés photo-réactifs solaires

GATTEPAILLE Victor^a, DAUCHET Jérémie^a, GROS Fabrice^a, ROUDET Matthieu^a, SUPPLIS Caroline^a et CORNET Jean-François^a

^aUniversité Clermont Auvergne, CNRS, Sigma Clermont, Institut Pascal,
F-63000 Clermont-Ferrand Cedex

Résumé

La production de vecteurs énergétiques solaires (hydrogène, gaz de synthèse, méthane, méthanol,...) ne deviendra une réalité industrielle que lorsque les procédés photo-réactifs correspondants dépasseront une efficacité thermodynamique de 10%. Il faut pour cela innover dans la conception du procédé à grande échelle ainsi qu'optimiser son dimensionnement. Ce procédé étant limité par le transfert radiatif [1] un travail de modélisation à différentes échelles de ce transfert est donc nécessaire pour espérer approcher un jour les optimums thermodynamiques que nous savons aujourd'hui calculer (autour de 20% pour les photobioréacteurs, 40% pour les cellules photo-électrochimiques). Les grandeurs clés à calculer sont classiquement évaluées en plusieurs étapes, auxquelles on peut associer plusieurs échelles [2]. Le principal objectif du travail présenté consiste alors à rechercher une formulation intégrale directe du problème complet en imbriquant les modèles aux différentes échelles. Il s'agit donc de ne plus calculer nos grandeurs d'intérêt (productivité du réacteur et/ou vitesse d'absorption du rayonnement, voir figure 1) via un processus séquentiel calculant des grandeurs intermédiaires, représentant les échelles intermédiaires, mais de proposer une méthode calculant directement les performances du procédé en traversant toutes les échelles (soit toutes nos intégrales). Un premier algorithme est ici proposé pour le calcul d'un cas simple représentant un photobioréacteur plan exposé au soleil (avec ou sans tracking) rempli de micro-algues. Les résultats obtenus pour la production annuelle en biomasse de l'installation en un seul calcul de Monte Carlo (incluant le calcul des sensibilités) ont été validés par l'approche séquentielle et permettent d'obtenir des temps de calcul divisés par 100.

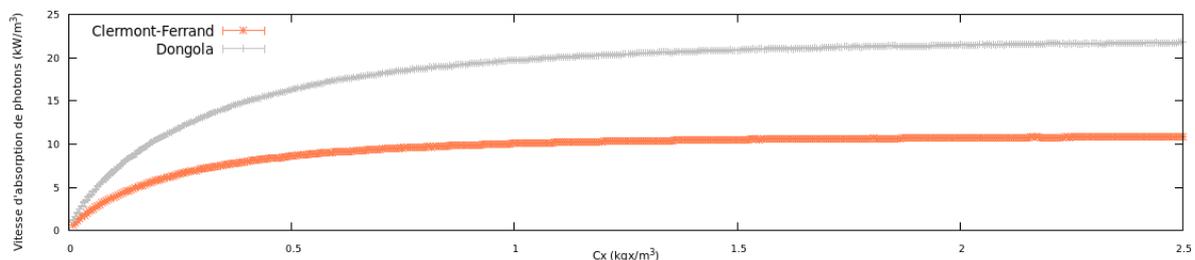


Figure 3. Vitesses d'absorption du rayonnement de photobioréacteurs situés à Dongola et Clermont-Ferrand en fonction de leur concentration en micro-organismes.

Références

- [1] Alberto E. Cassano, Carlos A. Martin, Rodolfo J. Brandi, and Orlando M. Alfano. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 34(7):2155–2201, 1995.
- [2] Ghiles Dahi. PhD Thesis, Université Blaise Pascal Clermont-Ferrand II, 2016.
- [3] Jérémie Dauchet, Stéphane Blanco, Jean-François Cornet, Mouna El Hafi, Vincent Eymet, and Richard Fournier. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 128:52–59, 2013.
- [4] J. Delatorre, G. Baud, J.J. Bézian, S. Blanco, C. Caliot, J.F. Cornet, C. Coustet, J. Dauchet, M. El Hafi, V. Eymet, R. Fournier, J. Gautrais, O. Gourmel, D. Joseph, N. Meilhac, A. Pajot, M. Paulin, P. Perez, B. Piaud, M. Roger, J. Rolland, F. Veynandt, and S. Weitz. *Solar Energy*, 103:653–681, 2014.

P11. Kinetic and mechanistic aspects of the dehydration of $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

PRETURLAN João G. D.^{a,b}, VIEILLE Laetitia^a, QUILIGOTTI Sara^b, FAVERGEON Loïc^a

^aMines Saint-Etienne, SPIN, UMR 5307 LGF, Univ Lyon, F-42023 Saint-Etienne France

^bSaint-Gobain Recherche, 93 quai Lucien Lefranc, F-93000 Aubervilliers France

Abstract

Gypsum is the mineralogical term used to describe materials that are mainly constituted of calcium sulfate dihydrate ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$). These materials can be obtained either from natural or synthetic sources and are of paramount importance for modern construction material industry because they represent the main raw materials to produce plaster. This product is widely employed to manufacture gypsum wallboards and serves as an additive for other construction materials (e.g. cements). The production process of plaster consists in partially dehydrate gypsum in calcination furnaces, large-scale heterogeneous industrial reactors, to obtain calcium sulfate hemihydrate ($\text{CaSO}_4 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$), which is the main constituent of plaster. (Kuntze, 2015) In order to better understand the functioning of these industrial reactors and to be able to propose improvements in this matter, it is mandatory to better understand the thermodynamics of the $\text{CaSO}_4\text{-H}_2\text{O}$ system and the reaction mechanism for each chemical transformation taking place during the calcination process.

In this context, one of the objectives of the present work is to increase the current understanding about the reactivity of calcium sulfate dihydrate, clarify remaining questions on reaction kinetics, and propose a kinetic-geometric model of the transformation of this material. In order to perform this, the dehydration of a highly pure calcium sulfate dihydrate powder was monitored using thermogravimetric analysis under isotherm and isobaric conditions. This was performed in order to obtain kinetic and reaction rate curves. Temperature ranging from 86°C to 110°C and water vapor partial pressure ranging from of 10 hPa to 60 hPa were investigated. Morphological and textural characterizations of the solids were also employed to understand the way of transformation. Based on this knowledge, a kinetic nucleation-growth model was then proposed and applied to the experimental data in order to obtain kinetic parameters for nucleation and growth. A growth mechanism was written and the change of kinetic parameters with temperature and water vapor partial pressure was explained. (Mampel, 1940; Helbert et al., 2004; Pijolat et al., 2011)

References

- Kuntze, R.A., 2009, Gypsum: connecting science and technology. ASTM, USA.
Mampel, K.L., Z. Physikal. Chem. Abt. A., 1940, 187, 235-249
Helbert, C. et al., Chemical Eng. Sci., 2004, 59, 1393-1401
Pijolat, M., L. Favregeon, M. Soustelle, Thermochem. Acta, 2011, 525.

P12. Caractérisation du stress hydromécanique local par analyse expérimentale et numérique de l'hydrodynamique dans des conditions opératoires de « fermentation sombre »

DANICAN Amaury^{a*}, B. CHEZEAU^{a,b}, Jean-Pierre FONTAINE^a, Christophe VIAL^a

^a Université Clermont Auvergne, CNRS, SIGMA Clermont, Institut Pascal, F-63000 CLERMONT-FERRAND, France

^b Université Clermont Auvergne, LABEX IMobS3, F-63000 CLERMONT-FERRAND, France.

Résumé

L'utilisation des énergies fossiles pour le développement industriel et les activités humaines est massive et ne cesse d'augmenter avec la croissance démographique. Cela entraîne un besoin crucial de nouvelles sources d'énergie renouvelables afin de répondre à la demande et de prévenir les problèmes de pollution tels que le changement climatique. C'est dans ce cadre que nous nous intéressons au processus de fermentation sombre visant à produire de l'hydrogène gazeux et des acides gras volatils en convertissant des substrats organiques par des voies métaboliques complexes. Ce procédé doit être optimisé grâce à l'étude de la structure de l'écoulement au sein du réacteur ainsi que les transferts de masse et de chaleur qui y ont lieu. Un processus optimal nécessite un milieu réactionnel homogène avec un taux de cisaillement limité pour assurer la croissance des micro-organismes, nécessaires à la réaction de fermentation, afin d'atteindre la meilleure productivité possible tout en ayant un apport de puissance mécanique faible pour maintenir la durabilité économique.

Une précédente étude a montré que la production et le rendement en biohydrogène pourraient être décrits par un paramètre unique, le nombre de Reynolds sans dimension Re , et dépendraient donc de la vitesse d'agitation N et de la viscosité μ du digestat. L'objectif ici est donc d'analyser le flux local dans les conditions d'agitation et de mélange de la fermentation sombre. Pour cela un outil numérique basé sur la CFD (*Computational Fluid Dynamics*) a été utilisé. Il est basé sur les équations de Navier-Stokes, et permet une analyse de l'écoulement en 3D dans le réacteur en prenant en compte tous les phénomènes physiques impliqués. Ces résultats seront validés par la méthode 2D-PIV (*Particle Image Velocimetry*) qui donne accès au champ de vitesse eulérien sur un plan du réacteur, duquel découlera d'autres paramètres hydromécaniques, comme par exemple, l'énergie cinétique de turbulence.

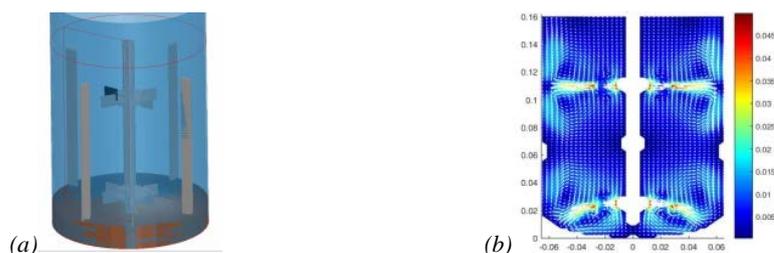


Figure 1. Modélisation d'un bioréacteur de 2L (a) avec le champ de vitesse obtenu à 40 RPM pour de l'eau (b)

Références

Trad, Z., Vial, Ch., Fontaine, J.-P., Larroche, Ch., 2017. Mixing and liquid-to-gas mass transfer under digester operating conditions. *Chemical Engineering Science*, 170, 606–627.

Chezeau B., Vial C. (2018). Combined effects of digestate viscosity and agitation conditions on the fermentative biohydrogen production, (submitted) *Biochemical Engineering Journal*.

* Auteur à qui la correspondance devrait être adressée : Polytech Clermont-Ferrand, Université Clermont-Auvergne, Institut Pascal, Campus Universitaire des Cézeaux, 4 Avenue Blaise Pascal, 63178 Aubière.
Adresse e-mail : amaury.danican@etu.uca.fr.

P13. Modélisation CFD d'un nouveau type de réacteur pour le couplage synergique de catalyse hybride

VIOLET Léo^a, FREY Myriam^a, SEYIDOVA Laman^a, RICHARD Dominique^a et FONGARLAND Pascal^a

^aLaboratoire de génie des procédés catalytiques UMR 5285 CNRS - CPE Lyon - Univ.Lyon
43 boulevard du 11 Novembre 1918, F-69100 Villeurbanne, France

Résumé

L'utilisation des enzymes en chimie fine fait l'objet de très nombreuses recherches. Parmi ces travaux a récemment émergé le concept de catalyse hybride : le couplage de la catalyse chimique conventionnelle à la catalyse enzymatique^{1,2}. Le projet GLYCYBRIDE, dont est issu cette étude, a pour but la transformation du glycérol en produit à plus haute valeur ajoutée par l'intermédiaire de la catalyse hybride.

Notre objectif est la conception d'un réacteur permettant la mise en œuvre du système hybride tri-phasique. Le challenge principal repose sur les conditions optimales de réaction (température, hydrodynamique, concentration en substrat) qui diffèrent entre les différentes formes de catalyse. Le design du réacteur (Fig.1) doit ainsi permettre le maintien d'une certaine hétérogénéité entre les différentes zones réactives, tout en assurant un transfert suffisant entre ces dernières.

La modélisation CFD du réacteur³ qui sera utilisé constitue une première partie de cette étude. L'étude du transfert de matière, de l'hydrodynamique, des temps de mélange et des échanges thermique pour un système non réactif liquide-solide est d'abord effectuée. La modélisation a permis la validation du concept et du design du réacteur (Fig.1), i.e. des conditions opératoires hétérogènes entre différentes zones.

Tout d'abord concernant l'hydrodynamique : la zone supérieure contient le catalyseur hétérogène et les conditions d'écoulement doivent assurer un excellent transfert gaz-liquide-solide (pour une réaction d'oxydation du glycérol par exemple), tandis que la zone inférieure contient les enzymes supportées, dont les problématiques de *leaching* nécessitent des conditions d'écoulement modérées. Les résultats CFD, en particulier l'étude des champs de vitesses, indiquent d'excellentes conditions d'écoulement pour les deux zones. La caractérisation expérimentale des temps de mélange par conductimétrie, ainsi que des champs de vitesse par *Particle Image Velocimetry* (PIV) permettent de valider le modèle CFD.

Les aspects thermiques sont également étudiés. En effet la catalyse enzymatique nécessite là aussi des conditions plus douces : dans le cas de notre système expérimental modèle, 80°C et 60°C sont les conditions de synthèse optimales respectives pour les catalyses hétérogènes et enzymatiques. Le réacteur possède deux systèmes double enveloppe-serpentin, un pour la zone inférieure et un pour la zone supérieure. La CFD démontre qu'il est bien possible d'obtenir deux zones distincts en termes de température, l'écart maximal observé ne dépasse pas actuellement 12°C et devra être optimisé.

L'étude CFD du système solide-liquide-gaz, et notamment du transfert de l'O₂, ainsi que l'ajout d'une cinétique surfacique simplifiée pour chaque catalyse constituera la suite de ces travaux.

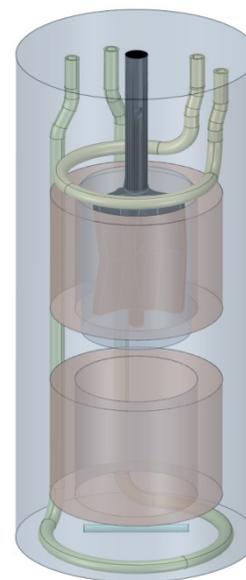


Figure 4. Schéma simplifié du réacteur de catalyse hybride

Références

- 1 O. Långvik, T. Saloranta, D. Y. Murzin and R. Leino, ChemCatChem, 2015, 7, 4004–4015.
- 2 F. R. Bisogno, M. G. López-Vidal and G. de Gonzalo, Adv. Synth. Catal., 2017, 359, 2026–2049.
- 3 V. Santos-Moreau, L. Brunet-Errard and M. Rolland, Chem. Eng. J., 2012, 207–208, 596–606.

P14. Filtration électrostatique pour la filtration des nano et microparticules de l'air intérieur

CHEN Longwen, GONZE Evelyne, GONTHIER Yves, ONDARTS Michel

Univ. Grenoble-Alpes, Univ. Savoie Mont-Blanc, CNRS, LOCIE
73000 Chambéry, France

Résumé

Ce travail de recherche concerne le développement d'un procédé de filtration électrostatique pour le traitement de l'air intérieur. Ce procédé est destiné à remplacer les filtres HEPA dans la ventilation ou à être utilisé comme épurateur autonome. L'étage d'ionisation est constitué de 4 ou 8 aiguilles portées à haute tension négative (-5 à -7 kV) et à très faible intensité (< 1 μA). Ces aiguilles émettent des ions négatifs en forte concentration (10^6 à 10^7 ions. cm^{-3}) qui chargent les particules par diffusion Brownienne. Les particules passent au travers d'un étage de collecte (champ électrique) et sont retenues sur des électrodes collectrices.

L'efficacité fractionnelle en nombre est mesurée dans la gamme allant de 10 nm à 20 μm grâce à un aérosol de NaCl (figure 1). L'étude paramétrique porte sur la géométrie (longueur du collecteur, position des aiguilles), les conditions opératoires (polarité du collecteur, tension d'ionisation et de collecte, débit) et environnementales (humidité, concentration en particules). L'efficacité de collecte du procédé est comparée à celle d'un électrofiltre fil-plaque à double étage classique, noté ESP.

Les conditions optimales parmi celles testées sont : l'utilisation de 8 aiguilles disposées au centre de la canalisation dont le matériau est conducteur et relié à la masse ; la tension d'ionisation de -7 kV associée à une tension de collecte de +5 kV ; un collecteur de 20 cm de long ; une vitesse de l'air de $0,75 \text{ m.s}^{-1}$. Dans ces conditions, le procédé permet d'atteindre de très bonnes efficacités compatibles avec l'application visée, (> 96% pour les particules les plus pénétrantes à 0,3 μm) avec une faible production d'ozone (<9 ppbv) (tableau 1). Il faut noter cependant la plus faible efficacité du procédé vis-à-vis des nanoparticules inférieures à environ 40 nm.

Cette étude expérimentale est complétée par une modélisation numérique du collecteur sous FLUENT utilisant un modèle de turbulence k- ϵ (figure 2) le modèle de charge par diffusion de White.

Tableau 1 : Récapitulatif de la performance des trois procédés pour une même tension d'ionisation.

	Tension d'ionisation (kV)	Intensité (μA)	Densité d'énergie (J.L^{-1})	O ₃ (ppbv)	Efficacité (%)		
					10-25 nm	30-300 nm	> 300 nm
4 aiguilles	-5	0,5	$2,5 \cdot 10^{-4}$	Non détecté	69	89	85
8 aiguilles	-5	1	$5,0 \cdot 10^{-4}$	< 5	94	99	94
ESP	-5	700	0,35	830	> 99	> 99	> 99

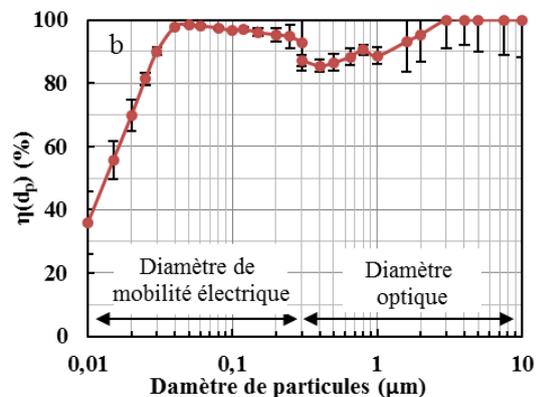


Figure 1. Efficacité fractionnelle pour 8 aiguilles (-6 kV, 1 m.s^{-1})

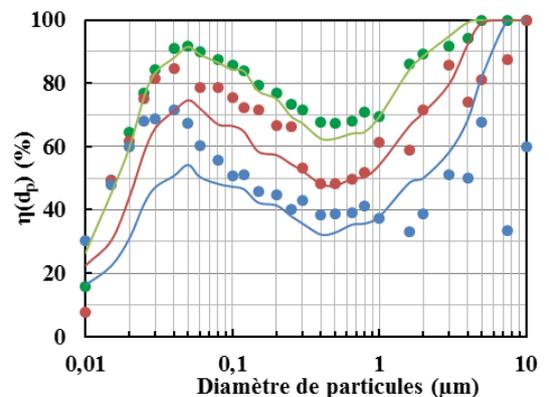


Figure 2. Influence de la longueur du collecteur pour 4 aiguilles (expérimental et modèle) (-5 kV, 1 m.s^{-1})

P15. Effets des superplastifiants de types polycarboxylates et de l'acide citrique sur l'hydratation et la rhéologie des ciments sulfoalumineux-bélitique

BELHADI Rachid*, GOVIN Alexandre et GROSSEAU Philippe

Mines Saint-Etienne, Univ Lyon, CNRS, UMR 5307 LGF, Centre SPIN, Département PMMG

F-42023 Saint-Etienne, France

Résumé

Le ciment sulfoalumineux-bélitique (CSA) est une alternative écologique du ciment Portland ordinaire (OPC). La ye'elinite (C_4A_3S) et la bélite (C_2S) sont les phases majoritaires de ce ciment. En présence d'anhydrite ($C\bar{S}$) et d'eau, la principale phase hydratée des CSA est l'ettringite ($C_6A_3S_3H_{32}$). Les CSA se caractérisent par une prise rapide et une perte de maniabilité qui limitent leur utilisation à des applications spécifiques. Grâce à leur pouvoir dispersif, les superplastifiants de types polycarboxylate éthers (PCE) sont utilisés pour améliorer la maniabilité des CSA. L'acide citrique est un retardateur d'hydratation qui permet d'améliorer l'effet du PCE et de maintenir la maniabilité des CSA au cours du temps. Néanmoins, une adsorption compétitive entre l'acide citrique et le PCE risque d'affecter le pouvoir dispersif de ce dernier.

Le but de ce travail est de comprendre l'effet de la structure du PCE sur son pouvoir dispersif et d'étudier l'effet de la combinaison de l'acide citrique et du PCE sur la rhéologie et l'hydratation des CSA. Trois superplastifiants (PCE1, PCE2 et PCE3) ont été testés. Des mesures de prise par Vicat ont été réalisées. L'étude de la rhéologie a été menée par des essais d'étalement à l'aide d'un mini-cône, à partir desquels le seuil d'écoulement est calculé. Finalement, des mesures d'adsorption ont été réalisées pour expliquer les différents comportements des PCEs et de l'acide citrique dans les CSA. Pour un dosage de 0.2%, le PCE1 présente le meilleur pouvoir dispersif suivi par le PCE2. Le PCE3 possède le plus faible pouvoir dispersif à cause de ses courtes chaînes latérales. Contrairement aux PCEs, qui présentent une perte de maniabilité rapide au cours du temps, l'acide citrique améliore peu la fluidité initiale mais la maintient au cours du temps grâce à son pouvoir retardateur d'hydratation. En combinant l'acide citrique et le PCE1 (ou PCE2), il est possible d'améliorer, à la fois, la fluidité au jeune âge et le maintien de la maniabilité au cours du temps. L'efficacité du PCE1 est expliquée par sa meilleure adsorption, (35% à 8 min d'hydratation) par rapport au PCE2 (29%) et au PCE3 (22%). En outre, en présence d'acide citrique, la quantité adsorbée du PCE1 (PCE2) diminue jusqu'à 10% (4%) alors que celle de l'acide citrique diminue légèrement de 97% à 87% en présence du PCE1. Malgré la diminution de la quantité de PCE adsorbée en présence d'acide citrique, une amélioration de maniabilité est observée. Dans ce cas, l'acide citrique, en retardant le processus d'hydratation, réduit la quantité d'hydrates formée et de PCE piégé dans ces hydrates, ces derniers étant non efficaces. Les répulsions stériques induites par l'adsorption des PCEs s'en voient alors améliorer.

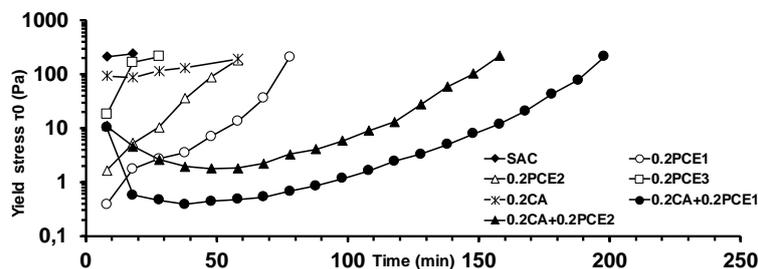


Figure 5. Evolution du seuil d'écoulement en fonction du temps

* BELHADI Rachid : rachid.belhadi@emse.fr

P16. Effets thermodynamiques sur la vitesse dans les réactions de polyoléfine en phase gaz

KARDOUS Sabine^{a*}, SHEIBAT-OTHMAN Nida^a, MCKENNA Timothy^b

^aLaboratoire d'Automatique et de Génie des Procédés (LAGEP),
Université Claude Bernard Lyon1, CNRS, CPE-69100, Villeurbanne, France

^bChimie Catalyse Polymère et Procédés (C2P2),
Université Claude Bernard Lyon1, CPE-69100, Villeurbanne, France

Résumé

Les polymères sont des produits irremplaçables dans la vie moderne. Parmi les grandes familles de polymères, le polyéthylène (PE) est le plus employé au monde. Il peut être produit en solution ou en suspension en présence de solvants, ou en phase gaz. Les procédés en phase gaz sont plus propres et moins consommateurs d'énergie, mais ils sont limités dans leur productivité par la nature très exothermique de la réaction. Afin de pallier à ce problème, beaucoup de procédés fonctionnent en « mode condensé » où un composé liquide tel que l'isopentane est injecté dans le réacteur et la chaleur de vaporisation et la capacité calorifique de ce composé inerte absorbent une bonne partie de la chaleur de la réaction. Cependant, la présence de ces composés a un impact mal connu sur l'absorption du monomère par le polymère, et donc sur la vitesse/dynamique de la réaction et la sécurité en production. Nous étudions l'effet de ces composés sur la solubilité de l'éthylène dans la phase polymère et par conséquent sur la vitesse de la réaction. Un modèle combiné cinétique et thermodynamique du procédé de polymérisation d'éthylène en phase gaz, dans un réacteur à lit fluidisé est proposé. Le modèle thermodynamique est basé sur l'équation d'État de Sanchez-Lacombe, qui s'est avérée avoir d'excellentes capacités de prédiction dans le domaine des polymères [1]. Les prédictions du modèle thermodynamique sont comparées aux données expérimentales tirées de la littérature et un bon accord est obtenu. On a constaté que ce modèle donnait des résultats de solubilité plus précis et plus corrects que ceux donnés par la loi d'Henry. En intégrant ce modèle dans le modèle cinétique, nous montrons l'effet de composés condensés sur des paramètres tels que la température du réacteur et la concentration des différentes espèces présentes dans le réacteur, et surtout, l'augmentation de la vitesse de polymérisation. Ces observations ont été validées à l'aide de données expérimentales tirées de la littérature et de notre groupe [2]. Le modèle proposé devrait constituer un outil puissant pour la compréhension fondamentale de la polymérisation des polyoléfines en phase gaz. Il devrait être employé afin d'optimiser la transition entre les grades du PE, à savoir réduire les déchets (produits Off-Spec) et minimiser l'énergie et le temps au cours de la transition.

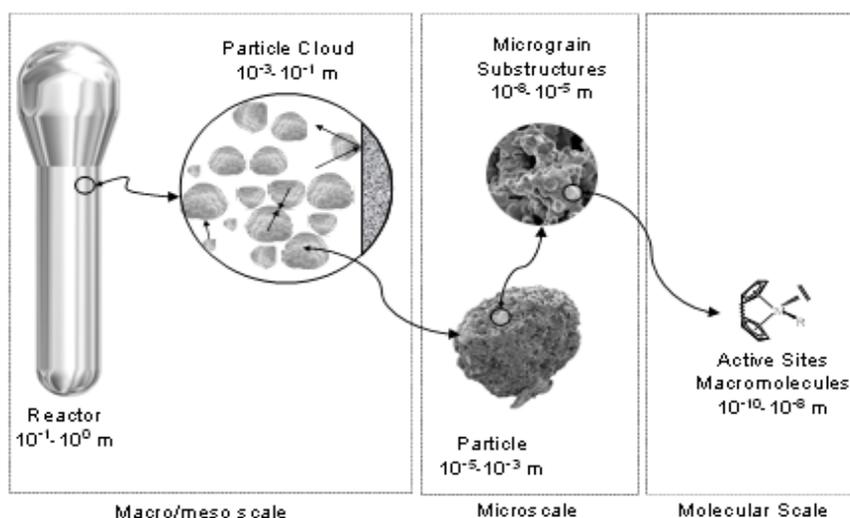


Figure 6. Les différentes échelles dans un procédé de polymérisation des oléfines dans un réacteur à lit fluidisé.

* sabrine.kardous@univ-lyon1.fr

P17. Morphological Study of Cyclopentane Hydrates in Brine Solutions for Desalination Application

HO-VAN Son^{a,b*}, BOUILLOT Baptiste^{a*}, DOUZET Jérôme^a, CAMEIRAO Ana^a, GARCIA Daniel^a,
MAGHSOODLOO-BABAKHANI^a, HERRI Jean-Michel^a

^a SPIN Center, Ecole des Mines de Saint-Etienne, SPIN, CNRS 5307, LGF, F-42023, Saint-Etienne, France;

^bOil Refinery and Petrochemistry Department, Hanoi University of Mining and Geology,
Duc Thang, Bac Tu Liem, Hanoi, Viet Nam

Abstract

Cyclopentane hydrates (CPH) is considered as a candidate for desalination due to its low operating required energy. In order to design such desalination plant, it is crucial to understand both the thermodynamics of crystallization of CPH, as well as the kinetics in the presence of diverse salts. While thermodynamics has been studied prior to this study (Ho-Van et al 2018), the present work focuses on kinetics and morphology of CPH in pure as well as saline water. Different brine solutions of Na₂SO₄, NaCl, NaCl-MgCl₂, or NaCl-KCl-MgCl₂ are considered at different concentrations (3.5% and 5% mass fraction) and at different subcoolings (2.5°C, 3.5°C, and 4.3°C). A small horizontal vessel (flat cylinder shaped: inner volume ≈ 1.23 ml, height 4 mm, diameter 19.8 mm) was used under a microscopy without agitation.

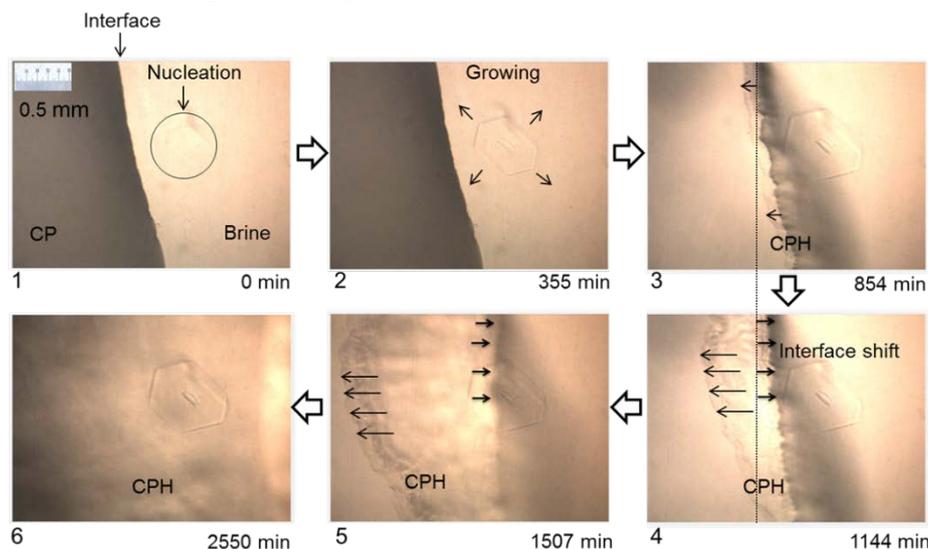


Figure 1. CPH crystallization mechanism in the presence of NaCl-KCl-MgCl₂ 5% at subcooling of 3.5°C

Results show that the CPH crystals morphology is approximately comparable at the same subcooling, while the dimension of the individual crystals drops significantly with increasing of subcooling, regardless the type of salts and their concentration. The crystallization mechanism was also discussed and explained (see Figure 1). The nucleation of a few crystals and their growth were detected. Moreover, a quick growth toward the CP phase and a slower growth into the water phase were observed as the different in the CP and water diffusion through the hydrate structure. An interface shift into the water phase was also witnessed due to the change in water phase volume and in the new phase property. The growth of the crystal interface remained somehow parallel to the liquid-liquid interface, without any obvious preferential direction. Therefore, we suspect that the limiting step in the crystallization process is the crystal growth itself, and that there is no limitation due to the diffusion. Finally, the hydrate-film formation rate is proportional to subcooling in any of the salt systems.

Références

- S. Ho-Van, B. Bouillot, J. Douzet, S. Maghsoodloo, J.-M. Herri, Experimental Measurement and Thermodynamic Modeling of Cyclopentane Hydrates with NaCl, KCl, CaCl₂ or NaCl-KCl Present, Am. Inst. Chem. Eng. J. (2018). doi:10.1002/aic.16067.
- S. Ho-Van, B. Bouillot, J. Douzet, S. Maghsoodloo Babakhani, J.-M. Herri, Implementing Cyclopentane Hydrates Phase Equilibrium Data and Simulations in Brine Solutions, Ind. Eng. Chem. Res. (2018). doi:10.1021/acs.iecr.8b02796.

* Auteur/s à qui la correspondance devrait être adressée: son.ho-van@emse.fr

P18. Air injection in a yield stress Fluid

HOJEIJ Ali^a, JOSSIC Laurent^a, SECHET Philippe^b and MAGNIN Albert^a

^aUniv. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, LRP, 38000 Grenoble, France

^bUniv. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, LEGI, 38000 Grenoble, France

Résumé

To allow a better understanding of pneumatic mixing of yield stress fluids, a pilot scale reactor was constructed and air injection in Carbopol solutions was performed at different flow rates, yield stresses and reactor geometric conditions. Focus was placed on the air cavity present at the injection point. Figure 1 represents the subsequent expansion and detachment of the cavity. Three key characteristics of the cavity were studied: its maximum diameter, frequency and its maximum volume. Finally, empirical equations were derived using dimensionless numbers to predict these 3 characteristics based on injection flow rate, geometry of the reactor and rheological properties of the fluid used. Figure 2 shows the agreement between experimental values of frequency and those predicted by the proposed equation.

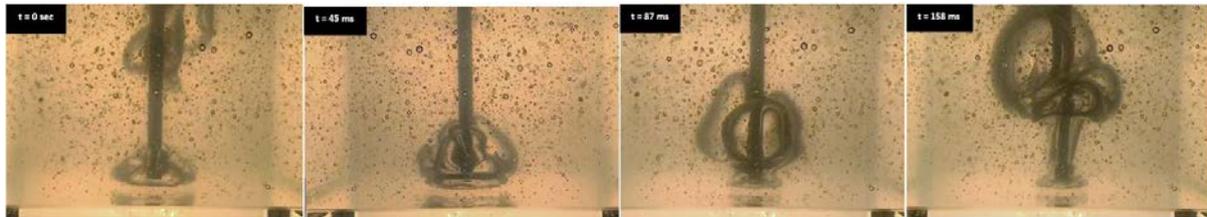


Figure 7: Formation and evolution of air cavity at the injection point

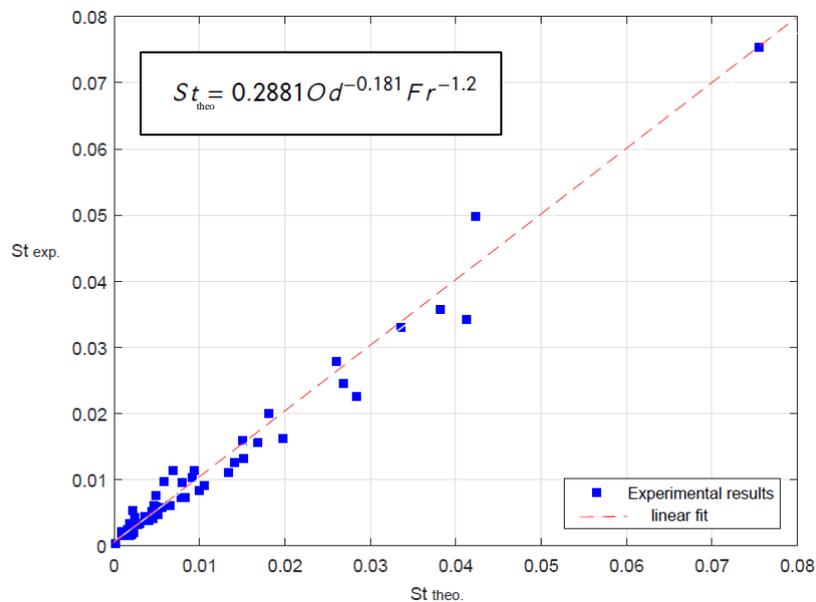


Figure 8: Agreement between experimental values of frequency and those predicted by the proposed equation.

P19. Spectroscopie Raman des solutions aqueuses contenant des carbohydrates et polyols

DUMOUILLA Vincent^{1,2}, DUSSAP Claude-Gilles²

TOURE Oumar¹, BOIT Baptiste¹

¹ ROQUETTE FRERES, Lestrem, France

² Université Clermont Auvergne, CNRS, Sigma Clermont, UMR 6602 Institut Pascal, F-63000 Clermont-Ferrand, France

Résumé

Les mélanges aqueux contenant des carbohydrates et des polyols sont quotidiennement utilisés dans l'industrie agro-alimentaire pour la formulation de produits alimentaires (e. g. boulangerie, desserts, boissons).

La connaissance des propriétés physico-chimiques de ces mélanges est nécessaire pour assurer le développement et l'optimisation des procédés de production. La spectroscopie Raman a été utilisée afin d'étudier le comportement de l'eau, des carbohydrates à l'état solide et des mélanges contenant des carbohydrates. La spectroscopie Raman apparait comme un outil prometteur pour quantifier les propriétés physico-chimiques (activités, propriétés de sorption, diffusivités...) à condition que l'information issue des spectres Raman soit correctement déconvoluée et interprétée de façon quantitative.

L'objectif de ce travail de recherche est d'utiliser la spectroscopie Raman pour étudier les interactions eau-carbohydrate, eau-polyol (particulièrement le phénomène d'hydratation). Dans ce travail, les spectres Raman des corps pur : eau, carbohydrates, polyols et des solutions binaires eau-carbohydrates, eau-polyols seront présentés et interprétés en présentant les interactions en solution.

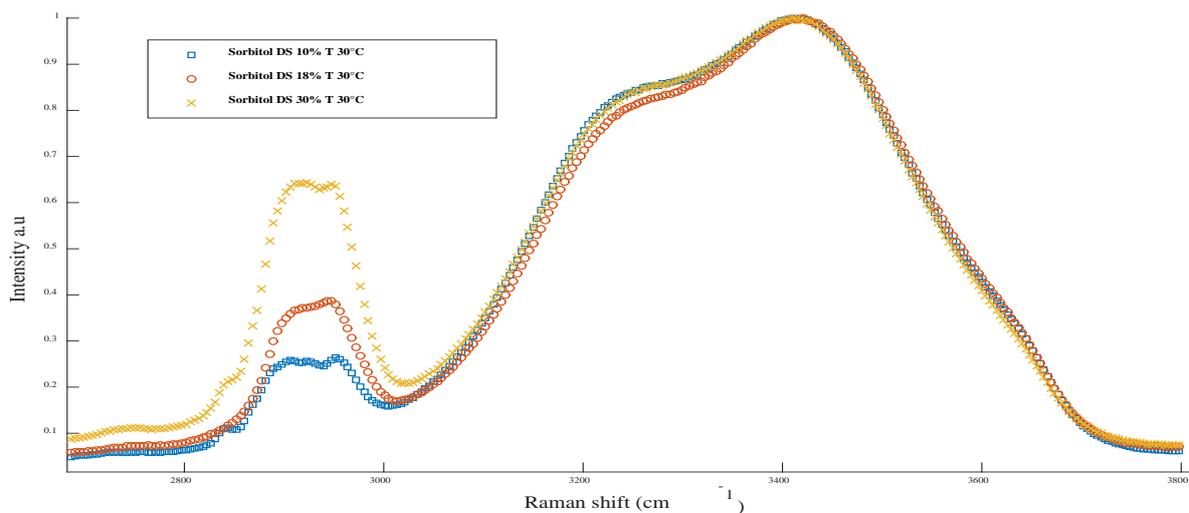


Figure 1. Spectres Raman de solutions aqueuses de Sorbitol à 10%, 18% et 30% de matière sèche

Références

- M. Magat (1934), J. Phys. Radium, 5 (7), 347-356
- M. Starzak and M. Mathlouthi (2003). Food Chemistry, 82(1), 3–22
- E. Wiercigrochet et al. (2017), Spectrochimica Acta, 185, 317–335.
- E. Palomäki et al (2016), International Journal of Pharmaceutics 71-82
- H. Hong et al (2010), Organic Process Research and Development 1209-1214
- M. Mathlouthi and D. V. Luu, (1980), Carbohydrate Research, 78(2), 225–233.

P20. Modélisation de batteries à circulation au vanadium tout-solide

POULET ALLIGAND Killian^a, DRUART Florence^a, BULTELL Yann^a, DESEURE Jonathan^a

^aUniv. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, LEPMI, 38000 Grenoble, France

Résumé

Dans un contexte de transition énergétique, la problématique du stockage de l'énergie électrique est primordiale pour pallier l'intermittence de la plupart des sources renouvelables (Yang et al., 2011). Les batteries à circulation (*redox flow batteries*, RFB) offrent à ce titre une réponse intéressante en permettant de découpler les aspects de stockage des aspects de puissance (Weber et al., 2011). Ainsi, dans les RFB, l'énergie est emmagasinée dans des électrolytes stockés dans des réservoirs (Figure 1), tandis que la puissance est assurée par une cellule indépendante des réservoirs d'électrolyte. De cette manière, la capacité de stockage de l'énergie peut être aisément ajustée par simple augmentation de la taille des réservoirs.

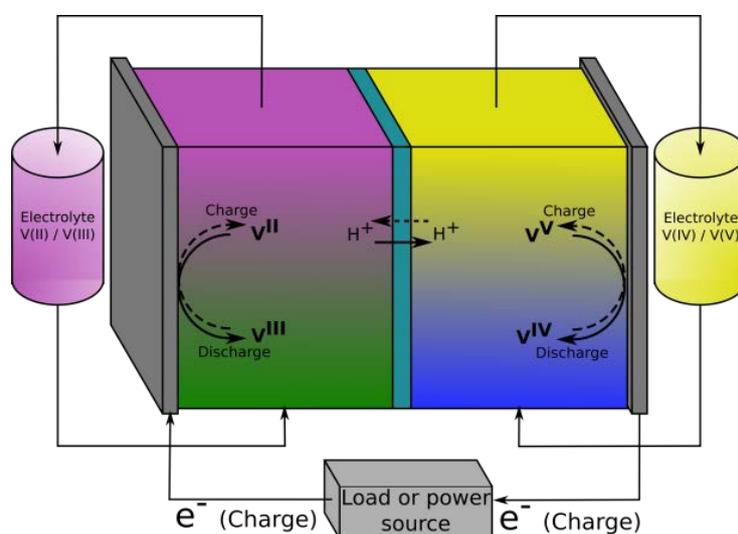


Figure 9: Schéma de principe d'une batterie à circulation au vanadium

Parmi toutes les combinaisons d'éléments possibles pour la conception de RFB, le vanadium est un candidat particulièrement intéressant. En effet, le vanadium présente quatre degrés d'oxydation consécutifs facilement accessibles (du degré 2 au degré 5). Cette propriété permet la réalisation d'une batterie dont les deux électrolytes sont composés de vanadium, en exploitant du côté de l'électrode négative le couple V^{III}/V^{II} et du côté positif le couple V^{V}/V^{IV} . Cette configuration rend la batterie beaucoup plus résistante aux problèmes de *cross-over*. Cependant, la solubilité des différents ions du vanadium est limitée (environ 2M en solution acide (Kazacos et al., 1990)) ce qui limite la densité d'énergie du système à environ 40 kWh/m^3 contre au moins 250 kWh/m^3 pour les accumulateurs Li-ion, par exemple et rend les RFB au vanadium peu compétitives. Nos travaux visent à remédier à cet inconvénient en remplaçant la solution aqueuse de vanadium par une suspension liquide/solide de vanadium. Cette solution fait cependant apparaître de nouvelles problématiques relatives notamment au transfert de matière dans la cellule, à la cinétique de dissolution/précipitation du vanadium ou à la gestion de l'écoulement de la suspension dans la cellule.

Références

- KAZACOS, M., CHENG, M. et SKYLLAS-KAZACOS, M., 1990. Vanadium redox cell electrolyte optimization studies. In : *Journal of Applied Electrochemistry*. 1 mai 1990. Vol. 20, n° 3, p. 463-467. DOI 10.1007/BF01076057.
- WEBER, Adam Z., MENCH, Matthew M., MEYERS, Jeremy P., ROSS, Philip N., GOSTICK, Jeffrey T. et LIU, Qinghua, 2011. Redox flow batteries: a review. In : *Journal of Applied Electrochemistry*. octobre 2011. Vol. 41, n° 10, p. 1137-1164. DOI 10.1007/s10800-011-0348-2.
- YANG, Zhenguo, ZHANG, Jianlu, KINTNER-MEYER, Michael C. W., LU, Xiaochuan, CHOI, Daiwon, LEMMON, John P. et LIU, Jun, 2011. Electrochemical Energy Storage for Green Grid. In : *Chemical Reviews*. 11 mai 2011. Vol. 111, n° 5, p. 3577-3613. DOI 10.1021/cr100290v.

P21. Simulation par la méthode SPH du problème de Stefan 1D et 2D : conduction thermique et changement de phase solide/liquide

GEARA Sandra^{a*}, MARTIN Sylvain^a, BONNEFOY Olivier^a

^a Centre SPIN, LGF UMR CNRS 5307,

Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne, 158 Cours Fauriel,

F-42023 Saint-Etienne Cedex 2, CS 62362 France

Résumé

La méthode de simulation numérique SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) est une méthode Lagrangienne largement utilisée dans diverses applications, allant de l'astrophysique à l'hydrodynamique naval [Monaghan, 2005]. L'objectif de ce projet de recherche est de coupler la méthode SPH avec le transfert thermique (conduction et changement de phase), les aspects de surface libre et la tension de surface. Dans ce travail, nous nous concentrons sur les équations SPH de transfert de chaleur, qui constituent la première brique de ce projet. Le principe de la méthode SPH est de modéliser un fluide continu en le discrétisant avec une série de particules ; chacune ayant une entité physique (dans ce cas, cette entité est la température) et la transfère aux particules voisines en passant par une fonction de lissage (Kernel/smoothing function) (Figure1). La nature sans maillage de la méthode SPH lui donne l'avantage d'être potentiellement applicable aux géométries complexes. Par contre la mise en œuvre des conditions aux limites peut parfois être problématique. Nous présenterons des simulations 1D et 2D de problèmes de conduction et de changement de phase avec des comparaisons avec les solutions analytiques [Carslaw et Jaeger, 1959]. Cette approche pourrait être étendue pour simuler plusieurs processus notamment l'ablation au laser et la fabrication additive [Alshaer *et al.*, 2017].

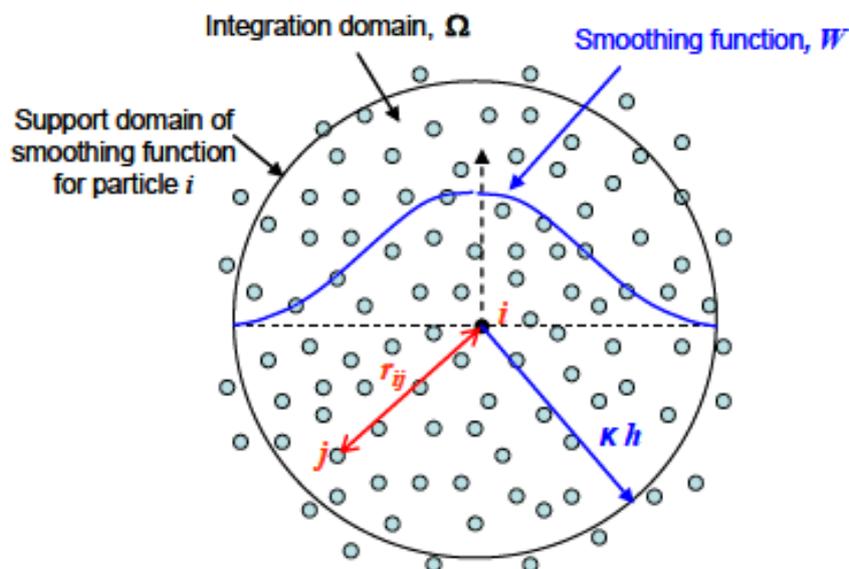


Figure 1. Concept de la méthode SPH [Hallquist, 2006]

Références

- Alshaer, A. W., Rogers, B. D. et Li, L., 2017, Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) modelling of transient heat transfer in pulsed laser ablation of Al and associated free-surface problems. *Computational Materials Science*, 127, 161-179.
- Carslaw, H. S. et Jaeger, J. C., 1959, *Conduction of heat in solids*: Oxford Science Publications (p. 510). Oxford, England.
- Hallquist, J. O., 2006, LS-DYNA theory manual. *Livermore software Technology corporation*, 3, 25-31.
- Monaghan, J. J., 2005, Smoothed particle hydrodynamics. *Reports on progress in physics*, 68(8), 1703.

* Auteur/s à qui la correspondance devrait être adressée : sandra.geara@emse.fr

P22. Experimental Evidences of Interaction of Gas-Water-Oil Flow Pattern with Gas Hydrate Formation Kinetics and Pipeline Plugging

ALMEIDA Vinicius^{a*}, CAMEIRAO Ana^a, HERRI Jean-Michel^a and GLENAT Philippe^b

^aEcole des Mines de Saint-Etienne, Centre SPIN

158 Cours Fauriel, Saint-Etienne 42023 - FRANCE

^bTOTAL S.A. – CSTJF.

Avenue Larribau, Pau Cedex 64018, FRANCE

Abstract

The formation of gas hydrates in oil and gas pipelines has developed into a hazardous problem, since it may cause the plugging of the pipeline. Recent studies have shown that coupling multiphase flow and gas hydrate formation is necessary in order to predict plugging tendencies (Ding et al., 2017; Joshi et al., 2013; Melchuna et al., 2016; Pham, 2018). The flow pattern before hydrate formation affects the hydrate formation rate, since the hydrate formation requires the contact between water and gas. The droplets sizes present on the flow will directly interfere on the initial size of the particles. The flow pattern after hydrate formation plays a decisive role on whether the plugging will be observed or not. Three important phenomena in solid-liquid flow are agglomeration, deposition and sedimentation of particles. Agglomeration occurs when two particles collide and adhere each other due to the attractive forces and growth near the contact between them. It directly affects the size of the dispersed particles. The larger are the particles flowing in the pipeline, the higher is the risk of plugging. Deposition occurs due to the collision of the particles to the wall and other phenomena. Sedimentation of particles at the bottom or at the top of the pipeline takes place when the flow velocity is not enough to carry the particles. When deposition or sedimentation occur, the cross sectional area is reduced, affecting the flow rate and the pressure drop, which increases the risk of plugging. The biggest challenge is to understand how these three phenomena will occur over time and space. The objective of this work is to analyze the mechanisms observed in agglomeration, deposition and sedimentation of particles, investigate how they behave according to the flow initial conditions, and see if it is possible to establish a relationship between the observed flow patterns and the plugging risk. An experimental work will be conducted to simulate hydrate formation using a flow loop (Melchuna et al., 2016), applying high pressure and low temperature similar to the ones found in deep sea. A range of water cut with different flow rates will be tested. A commercial anti-agglomerant and salt will be tested as well to evaluate if they reduce the risk of plugging.

References

- Ding, L., Shi, B., Lv, X., Liu, Y., Wu, H., Wang, W., Gong, J. Hydrate Formation and Plugging Mechanisms in Different Gas-Liquid Flow Patterns. *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 56, pp. 4173 – 4184 (2017)
- Joshi, S. V., Grasso, G.A., Lafond, P.G., Rao, I., Webb, E., Zerpa, L.E., Sloan, E.D., Koh, C.A., Sum, A.K. Experimental flow loop investigations of gas hydrate formation in high water cut systems. *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 97, pp. 198 – 209 (2013)
- Melchuna, A., Cameirao, A., Herri, J.M., Glenat, P. Topological modeling of methane hydrate crystallization from low to high water cut emulsion systems. *Fluid Phase Equilib.*, Vol. 413, pp. 158 – 169 (2016)
- Pham, T.K. Experimental study and modelling on methane hydrates crystallization under flow from a water-oil dispersion at high water cut. PhD Thesis, 334 p., Mines Saint Etienne, France (2018)

* Corresponding author: vinicius.de-almeida@emse.fr

P23. Caractérisation d'un milieu poreux pour un procédé de dépollution des sols l'extraction Multiphasique (MPE)

LAAFAR Amin^{ab}, KACEM Mariem^b, BESANÇON Celine^b, BENADDA Belkacem^a

^a Laboratoire DEEP : Déchets, Eau, Environnement, Pollution, INSA-Lyon
20, Avenue A. Einstein, Bât S. Carnot 69621, Villeurbanne, France

^b Univ Lyon, ENISE Saint-Etienne, Laboratoire de Tribologie et Dynamique des Systèmes LTDS
58 Rue Jean Parot, 42100 Saint-Étienne

Résumé

Aujourd'hui, plus de 65% des sites pollués en France le sont par des COVs (BASOL), considérés comme étant très dangereux et toxiques pour l'homme et l'environnement. Cela nécessite d'utiliser des techniques de traitement pour restaurer les sites et limiter les risques de propagation vers les eaux souterraines. L'extraction multiphasique(MPE) est une méthode physique de traitement des COVs. Ce procédé présente l'avantage d'être in-situ, d'être peu onéreux et de permettre la remédiation simultanée des zones saturée et non saturée. L'objectif de ce projet est d'étudier la MPE en étudiant l'écoulement multiphasique des différentes phases et de développer un modèle numérique d'écoulements. Ainsi, la connaissance des propriétés hydrodynamiques du sol est un caractère primordial. Ici seront présentés les résultats d'essais de perméabilité d'un sol sableux en fonction du pourcentage de Kaolinite afin de représenter des conditions réelles ainsi que la détermination du paramètre de rétention. Le choix du sable s'est orienté vers un sable fin HN31 permettant une importante perméabilité hydraulique dans le domaine d'application de la MPE. La détermination de la perméabilité s'est effectuée en utilisant un perméamètre à charge constante sur des mélanges massiques de sable HN31 et de kaolinite KI (de 1 à 10%). Le paramètre de Van genuchten a été déterminé à l'aide du logiciel RETC et d'une cellule de Richard en étudiant la succion de l'eau dans le sol en fonction de la pression. Les essais montrent une diminution de la perméabilité hydraulique lorsque la teneur en argile augmente et que des teneurs allant jusqu'à 6% d'argiles KL dans un sable fin HN31 permettent l'application de la MPE. Le paramètre de Van genuchten obtenu est de 1.56 correspondant à des sables fins avec perméabilité hydraulique importante, il permettra d'améliorer le modèle numérique. Dans la suite de ce projet seront menés des essais de drainage d'eau et de COVs à l'aide de tensiomètres ainsi que des essais d'extraction multiphasique sur le pilote 2D en analyse continu sur GC-FID afin de déterminer les conditions optimales d'application de la MPE.

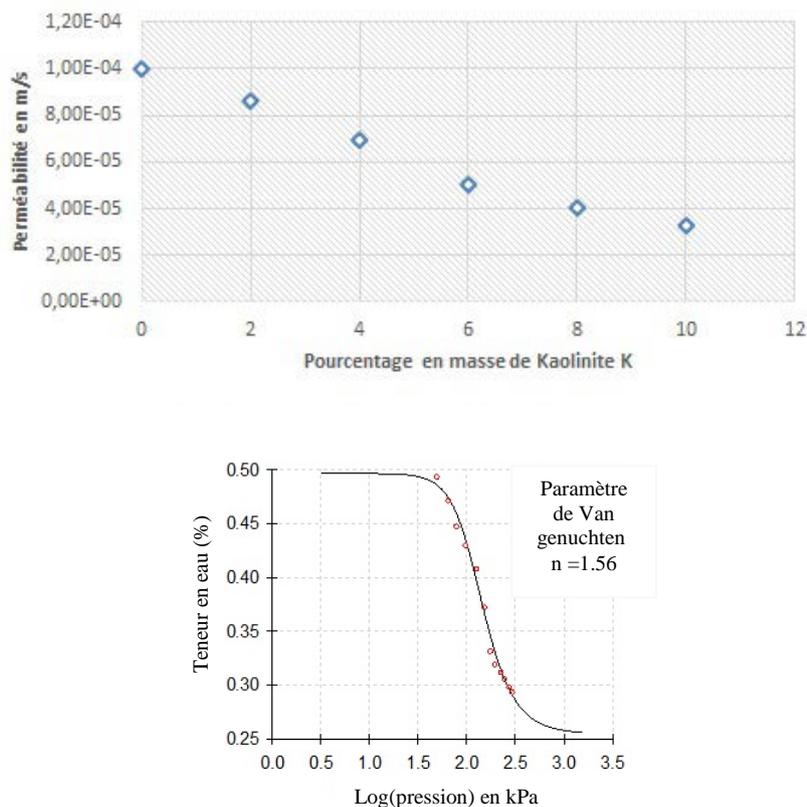


Figure 1. Courbe de perméabilité du sable HN31 en fonction du % de Kaolinite K en masse (haut) et courbe de paramètres de rétention (bas)

P24. Kinetic modeling of lignin catalytic hydroconversion in a semi-batch reactor

PU Junjie^{a,b}, LAURENTI Dorothée^b, GEANTET Christophe^b, TAYAKOUT-FAYOLLE Mélaz^a et PITAULT Isabelle^{a*}

^aUniv Lyon, Université Claude Bernard Lyon 1, CNRS, LAGEP
43 Boulevard du 11 Novembre 1918, F-69622, Villeurbanne, France

^bUniv Lyon, Université Claude Bernard Lyon 1, CNRS, IRCELYON
2 Avenue Albert Einstein, F-69626, Villeurbanne, France

Introduction

Lignin which represents almost 30 wt% of lignocellulosic biomass could be the most relevant and abundant bioresource to produce aromatic compounds due to its natural polymeric structure composed by phenylpropane units with ether linkages. One potential way is the catalytic hydroconversion to depolymerize lignin and produce aromatic compounds. In our work, a upgraded batch reactor is used (Figure 1), open for gas phase with a continuous feeding of H₂, and equipped with a condensing reflux followed by cooled traps to remove continuously light products and water from the reacting mixture and recycle the solvent.

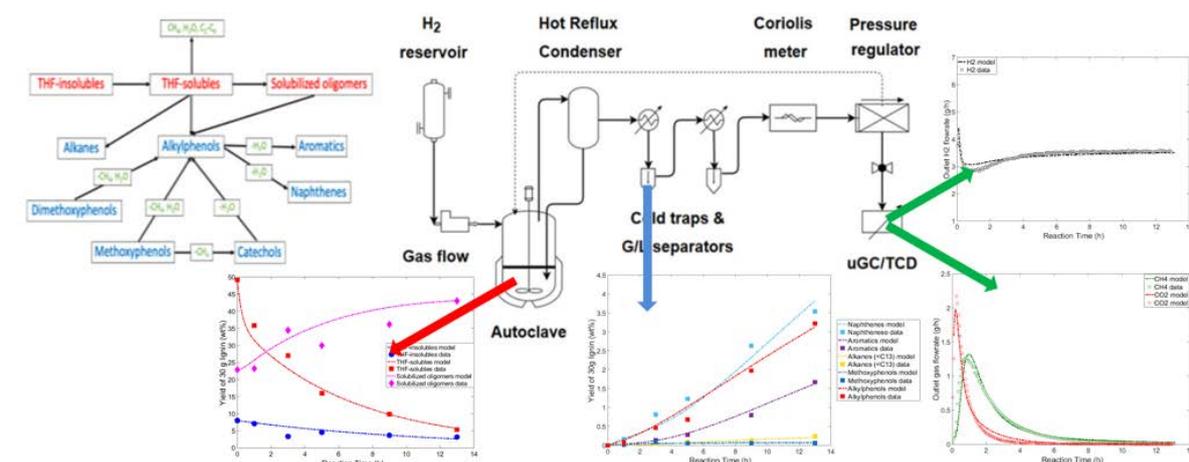


Figure 1. Schematic diagram of the experimental set-up and model result

Results and Discussion

In order to get a more accurate description of the intrinsic kinetics, the gas hydrodynamic behaviour and the liquid-vapor mass transfer between phases need to be taken into account. The gas RTD experimental results show that the reactor and the reflux can be modelled as CSTRs and the other parts of the semi-batch pilot (condensers and tubes) as PFRs at reaction conditions. The hydrodynamic model of the gas phase was coupled to the mass balance of each unit of the semi-batch pilot. The liquid-vapor mass transfer between phases in the kinetic model was calculated by a driving force model ($k_L a \Delta C$), to take into account the vaporized fraction of reactants and products at reaction conditions. Interface concentrations (C^*) were estimated for each lumps from partition coefficients (K) found with flash calculations by Prosim Plus, with a group contribution equation of state called PSRK using a PSRK mixing rule coupled with a UNIFAC method. Assuming first-order reactions with respect to each lump, experimental data corresponding to the solid and liquid samples and dynamic outlet gas flow were used to estimate 21 parameters corresponding to the rate constant (k) and stoichiometric coefficients (ν) for a set of 10 reactions in the reaction work. Our kinetic model (lines) fits well with experimental data (makers) (Figure 1).

* Auteur/s à qui la correspondance devrait être adressée : isabelle.pitault@univ-lyon1.fr

P25. Vieillissement de papiers Kraft et corrélation entre différentes propriétés

BARNET Axelle^{a*}, MORTHA Gérard^a, MARLIN Nathalie^a

^aUniv. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP*, LGP2, 38000 Grenoble, France

Résumé

Cinq papiers Kraft, différents par leur formulation ou par leur densité, ont été soumis à plusieurs températures (100 à 140°C) et durées de vieillissement (1 à 40 j), dans des conditions particulières (immersion dans une huile minérale avec présence d'un matelas d'air au-dessus). Au total, il a été procédé à plus de 70 vieillissements, dans le but d'effectuer une étude cinétique en phase hétérogène, pour étudier le rapport entre évolution des caractéristiques physiques et chimiques de la matrice solide. Les papiers vieillis ont ainsi été caractérisés par la mesure du degré de polymérisation moyen viscosimétrique de la cellulose (DPv) ainsi que par différentes propriétés mécaniques : la résistance à la traction (TS), la résistance au double-pli (df) et la résistance à la traction à mords jointifs à l'état sec (ZS). Le tracé de l'évolution des différentes propriétés mécaniques citées précédemment en fonction du DPv de la cellulose, montre qu'il existe souvent une relation univoque entre elles, dans nos conditions de vieillissement. Par exemple, la résistance à la traction en fonction du DPv décrit un comportement asymptotique horizontal, et ce indépendamment de la température de vieillissement appliquée ou du type de papier étudié. L'observation de cette corrélation est par ailleurs en accord avec la littérature.

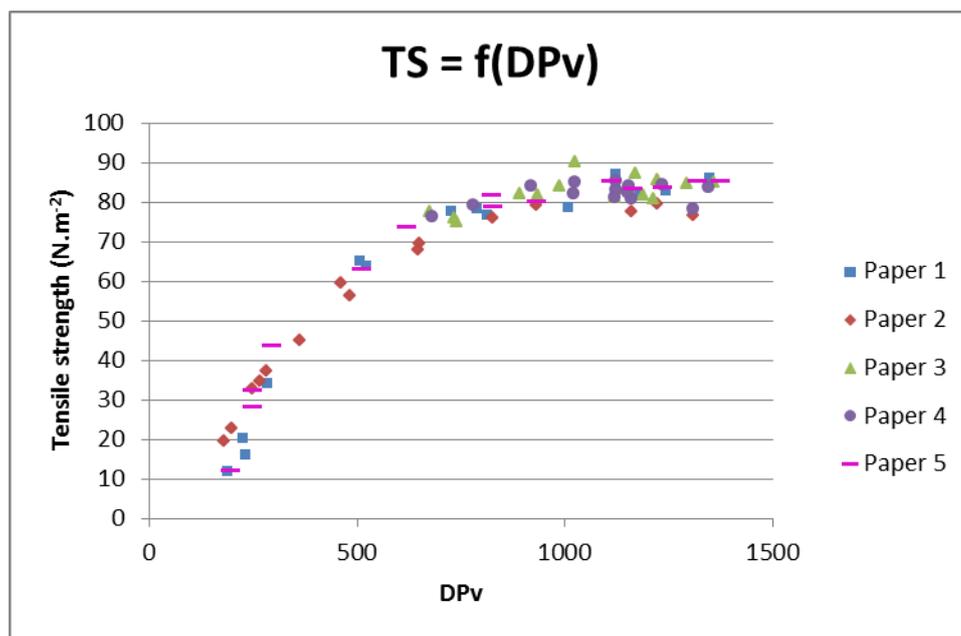


Figure 10. Résistance à la traction, en fonction du degré de polymérisation moyen viscosimétrique de la cellulose, pour 5 papiers différents, et pour plusieurs températures et durées de vieillissement

La mesure du DPv de la cellulose étant fastidieuse, longue et relativement coûteuse (coût du solvant), elle pourrait être avantageusement remplacée par des caractérisations mécaniques plus simples et rapides, les corrélations entre le DPv et ces propriétés permettant un accès à la valeur du DPv.

PRIX DE THESE CODEGEPRA 2018
(thèses soutenues en 2017)

**Étude hydrodynamique d'un écoulement gaz-liquide
dans un milieu poreux confiné**

Marion SERRES

Laboratoire de Génie des Procédés Catalytiques
(LGPC – UMR 5285 CNRS, CPE Lyon, UCB Lyon 1)

Laboratoire de Physique
(LP – UMR 5672 CNRS, ENS de Lyon, UCB Lyon 1)

Directeurs de thèse : **Dr. HDR Régis PHILIPPE, CNRS - LGPC** (regis.philippe@lgpc.cpe.fr)

Dr. HDR Valérie VIDAL, CNRS - LP (valerie.vidal@ens-lyon.fr)

Cadre

Ce travail réalisé sur deux laboratoires du site de Lyon a été financé par le **Labex iMUST de Lyon** et a fait l'objet de collaborations avec le **Karlsruhe Institute of Technology (KIT, Allemagne)** sur la modélisation d'écoulement tri-phasique par champs de phase.

Résumé / présentation du travail

Cette thèse se focalise sur les écoulements gaz-liquide dans un milieu poreux, problématique rencontrée dans des domaines variés allant de la physique fondamentale à la chimie appliquée. Nous avons caractérisé expérimentalement les régimes hydrodynamiques dans deux géométries différentes : un canal millifluidique (écoulement quasi-1D) et une cellule de Hele-Shaw (écoulement quasi-2D). L'originalité de ce travail est d'analyser l'effet du milieu poreux (lits de billes polydisperses ou mousses solides à cellules ouvertes), du confinement (1D/2D) et de la gravité en couplant des approches locales et globales développées dans les communautés de physique expérimentale et de génie chimique. D'une part, une analyse globale a permis de quantifier les pertes de charge [6] et, basée sur le transport d'un traceur fluorescent, les distributions de temps de séjour [3] et le transfert gaz-liquide dans l'expérience 1D ; d'autre part, une analyse locale de la fraction liquide et l'évolution spatio-temporelle de son contenu fréquentiel ont permis de mettre en évidence deux régimes hydrodynamiques dans le canal millifluidique [1,2,4] : un régime pseudo-Taylor, où les caractéristiques de l'écoulement périodique amont sont conservées, et un régime modulé, pour lequel l'écoulement se désorganise à l'entrée du milieu poreux. Un modèle phénoménologique basé sur la propagation des bulles dans le milieu est proposé, et rend compte de l'existence de ces deux régimes [2,4]. Enfin, ces deux analyses sont couplées pour étudier les écoulements dans la cellule de Hele-Shaw, et une analyse dimensionnelle de l'effet du confinement et de la gravité sur les écoulements gaz-liquide dans un milieu poreux est proposée.

Mots clés

Écoulement gaz-liquide, interfaces gaz-liquide, milieux granulaires, mousses solides, milieux poreux

Production scientifique

Articles internationaux à comité de lecture

- [1] **Marion Serres**, Régis Philippe & Valérie Vidal, Effet du milieu poreux sur la désorganisation d'un écoulement de Taylor dans un canal millifluidique. *Compte-rendus de la 19e Rencontre du Non-Linéaire*, Eds. E. Falcon, M. Lefranc, F. Pétrélis & C.-T. Pham, Non-Linéaire Publications, 109-114 (2016).
- [2] **Marion Serres**, Marie-Line Zanota, Régis Philippe & Valérie Vidal, On the stability of Taylor bubbles inside a confined highly porous medium. *Int. J. Multiphase Flow* 85, 157-163 (2016).
- [3] **Marion Serres**, Daniel Schweich, Valérie Vidal & Régis Philippe, Liquid residence time distribution of multiphase flow in packed bed milli-channel: spherical beads versus open cell solid foams. *Chem. Eng. Sci.* 190, 140-163 (2018).
- [4] **Marion Serres**, Timothée Maison, Régis Philippe & Valérie Vidal, A phenomenological model for bubble coalescence in confined highly porous media. *Int. J. Multiphase Flow* 105, 134-141 (2018).
- [5] B. Pascal, N. Pustelnik, P. Abry, **M. Serres** & V. Vidal, Joint estimation of local regularity for texture segmentation. Application to multiphase flow characterization, accepted at 2018 IEEE International Conference on Image Processing (2018).
- [6] **M. Serres**, R. Philippe & V. Vidal, *to be submitted to Geophys. Res. Lett.* (2017).

Colloques, congrès, conférences

- Rencontre du Non-Linéaire 2015 (Paris, France) – 17-19 Mars 2015. **M. Serres**, V. Vidal & R. Philippe, Approche pluridisciplinaire des écoulements multiphasiques en milieu poreux (poster).
- Journée des Doctorants du Laboratoire de Physique, ENS de Lyon (Lyon, France) – 1er Juin 2015. **M. Serres**, Ecoulements multiphasiques en milieu poreux - Etudes globales et locales de l'hydrodynamique à l'intérieur d'une mousse métallique (exposé oral).
- Conférence "Low permeability media and nanoporous materials from characterisation to modelling: can we do it better?", IFPEN / Rueil-Malmaison - 9-11 Juin 2015. **M. Serres**, F. Bornette, V. Vidal, R. Philippe, Confinement effect on gas-liquid flow through various porous media (poster).
- Ecole d'été "Flow transport in Porous and Fractured Media", Cargèse, Corse 20 juillet-1er août 2015. **M. Serres**, F. Bornette, V. Vidal, R. Philippe, Confinement effect on gas-liquid flow through various porous media (poster).
- 9th International Conference on Porous Metals and Metallic Foams, 31 août – 2 sept. 2015, Barcelona (Spain). **M. Serres**, F. Bornette, V. Vidal, R. Philippe, G-L Multiphase Flow Through an Open Cell Solid Foam Confined in a Milli-Channel (poster) – PRIX DU MEILLEUR POSTER.
- Rencontre du Non-Linéaire 2016 (Paris, France) – 15-17 Mars 2016. **M. Serres**, R. Philippe & V. Vidal, Effet du milieu poreux sur la désorganisation d'un écoulement de Taylor dans un canal millifluidique (poster).
- 9th International Conference on Multiphase Flow (ICMF 2016), 22-27 Mai 2016, Florence (Italie). **M. Serres**, R. Philippe & V. Vidal, Dynamics of gas-liquid segmented flow in porous media (exposé oral).
- Journée des Doctorants du Laboratoire de Physique, ENS de Lyon (Lyon, France) – 10 Juin 2016. **M. Serres**, R. Philippe & V. Vidal, Dynamics of gas-liquid segmented flow in porous media (exposé oral).
- 26th International Conference on Statistical Physics (STATPHYS26), 18-22 Juillet 2016, Lyon (France). **M. Serres**, T. Maison, R. Philippe & V. Vidal, Critical bubble length controls gas-liquid flow in a solid foam (poster).

Rencontre scientifique de l'IFPEN "Dynamics of Evolving Fluid Interfaces" (DEFI), 12-13 Octobre 2016, IFPEN, Solaize (France). **M. Serres**, V. Vidal & R. Philippe, Stability of Taylor bubbles inside a porous medium (exposé oral + poster).

13ème Journée d'Etude des Milieux Poreux (JEMP2016), 12-14 Octobre 2016, Côte Basque (France). **M. Serres**, R. Philippe & V. Vidal, Multi-scale analysis of gas-liquid flow in confined porous media (poster).

Journée thématique « Les mousses solides à cellules ouvertes », 20 Octobre 2016, CPE Lyon, Villeurbanne (France). **M. Serres**, R. Philippe & V. Vidal, Gas-liquid Taylor flow inside a porous medium in a millichannel (exposé oral).

Workshop à l'Institut Français du Pétrole et des Énergies Nouvelles (IFPEN, Solaize) – 6 Février 2017. **M. Serres**, Effet du confinement sur les écoulements multiphasiques en réacteurs lit fixe (exposé oral).

[14] 15ème Congrès de la Société Française de Génie des Procédés (SFGP2017), juillet 2017 Nancy (France). **M. Serres**, V. Vidal & R. Philippe, Étude hydrodynamique de l'écoulement gaz-liquide en réacteur à mousse solide : Effet du confinement et de l'orientation de l'écoulement (poster)

Séminaires

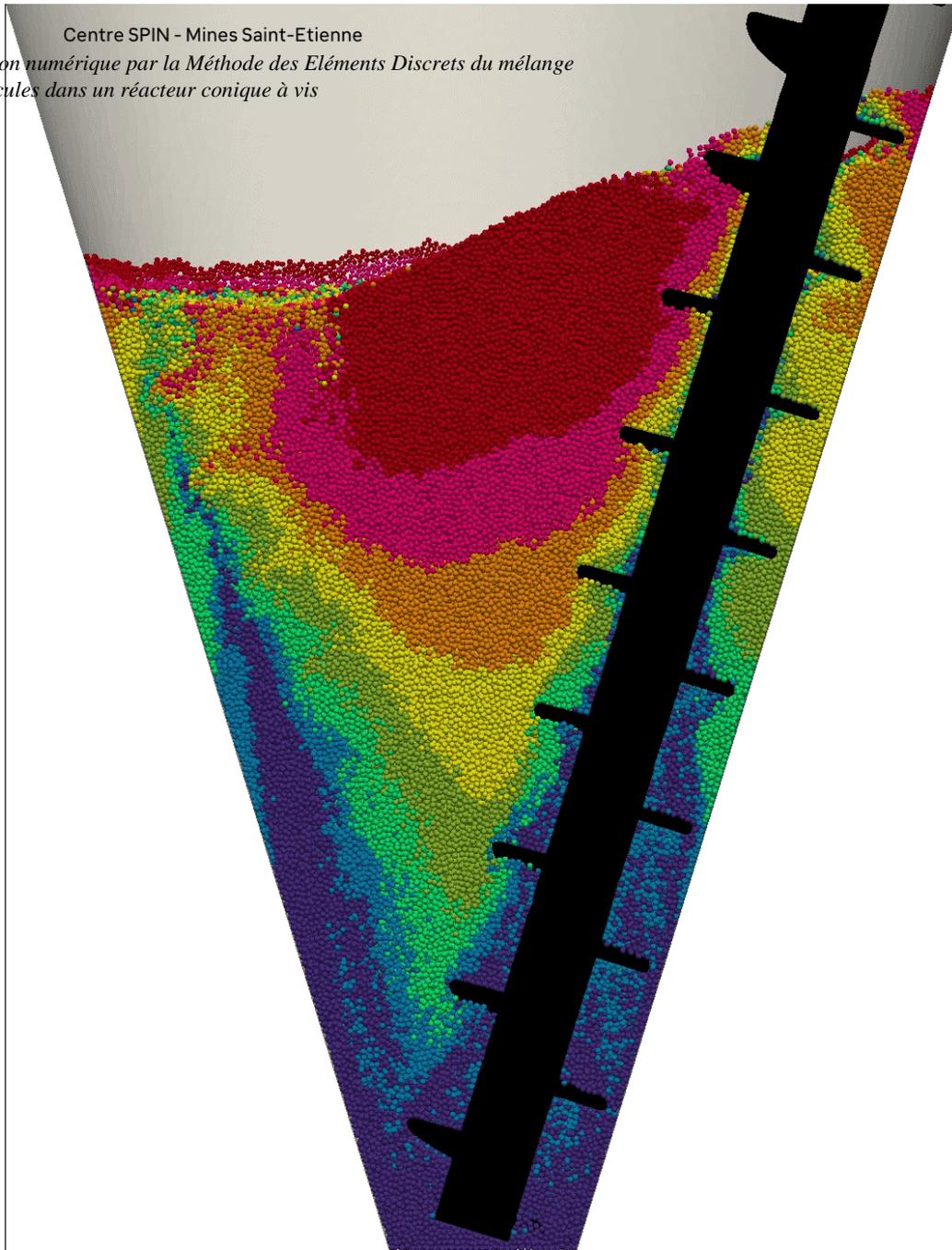
Séminaire du Laboratoire Génie des Procédés Catalytiques (LGPC), CPE Lyon – 12 novembre 2015. Hydrodynamique d'un écoulement gaz-liquide en milieu poreux - Etudes globale et locale à travers une mousse métallique et un micro-lit de billes.

Séminaire à l'Institut de Physique du Globe de Paris (IPGP) – 17 Janvier 2017. Dynamics of multiphase flow in porous media.

Séminaire au Laboratoire de Physique de la Matière Condensée (LPMC, Nice) – 19 Janvier 2017. Influence of porous media on the hydrodynamics of gas-liquid flow.

Séminaire au Laboratoire Surface Verre Interface (SVI, Aubervilliers) – 16 Février 2017. Confinement effect on the hydrodynamics of gas-liquid flow in porous media-

Centre SPIN - Mines Saint-Etienne
*Simulation numérique par la Méthode des Eléments Discrets du mélange
de particules dans un réacteur conique à vis*



Association régie par la loi de 1901

**COmité de DEveloppement du
GEnie des Procédés en Rhône-Alpes Auvergne**

Siège : LGP2 / Grenoble INP-Pagora
461, rue de la Papeterie – CS 10065
38402 Saint-Martin-d'Hères Cedex

Tél : 33 (0)4 76 82 69 00

Fax : 33 (0)4 76 82 69 33

E-mail : codegepra@pagora.grenoble-inp.fr

Site web: <http://pagora.grenoble-inp.fr/codegepra>