

Modélisation avec Cast3M d'une colonne pulsée : appareil d'extraction liquide-liquide diphasique

-

Couplage fort

Hydraulique & Transport de gouttes

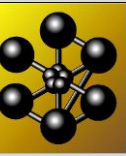
The logo for CEA (Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives) features the lowercase letters 'cea' in a white, sans-serif font. A horizontal green line is positioned below the letters.

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

Club Cast3M
25 novembre 2022



Clément BERTHINIER DMRC/SASP/LSPS (Ingénieur – Chercheur)



Amont du cycle nucléaire

- Extraction minière
 - Excavation
 - Concassage (augmentation de la surface)
 - Lixiviation (procédé chimique)
 - Extraction sélective (métaux d'intérêt)
 - Concentration (YellowCake → pratique pour le transport)

Aval du cycle nucléaire

- Retraitement du combustible (La Hague)
 - Découpage des assemblages
 - Dissolution dans HNO_3
 - Séparation (U + Pu | AM, PF)
 - Partition (U | Pu)
 - Pu → Poudre pour MOx | U → Solution concentrée

Mine d'uranium d'Akouta (Niger)

(plus exploitée depuis 2021)



Crédit photo : Thomas LEMAITRE

<https://energynews.pro/orano-fin-de-l'exploitation-d'une-mine-d'uranium-au-niger/>

La Hague

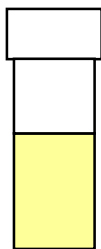


Crédit photo : Cyril CRESPO

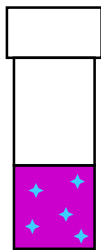
<https://www.orano.group/fr/l-expertise-nucleaire/tour-des-implantations/recyclage-du-combustible-use/la-hague/expertise-unique->



Etape 1

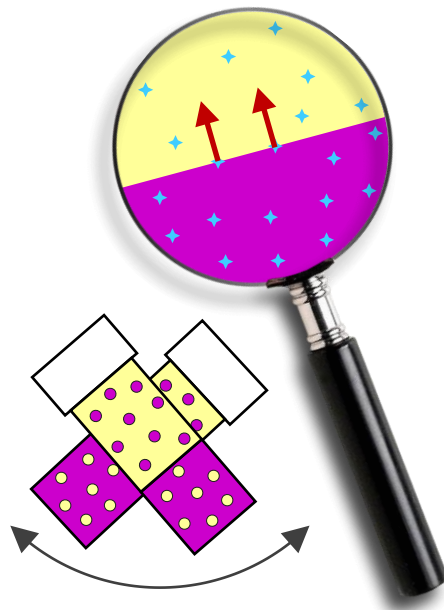


Solution organique
(légère)



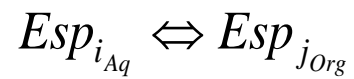
Solution aqueuse « chargée »
(lourde)

Etape 2



Emulsion : Surface d'échange

Transfert de matière



Etape 3



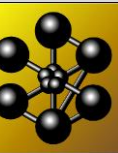
Décantation & Séparation

Equilibre thermochimique

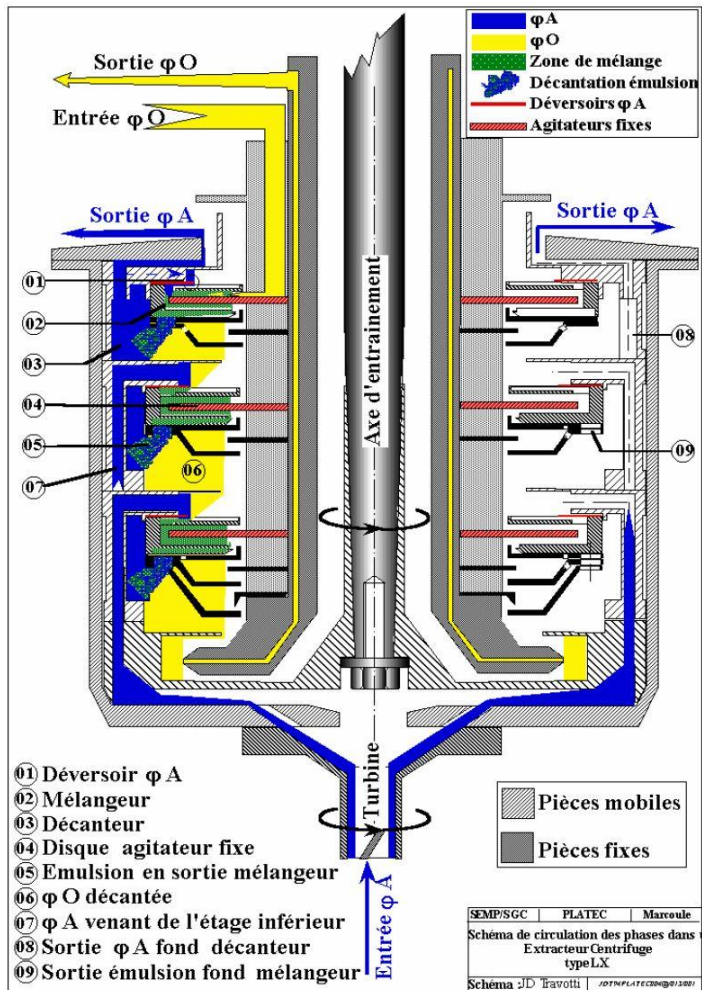
$$C_{i_{Aq}} = D_i \cdot C_{i_{Org}}$$

(Relation)

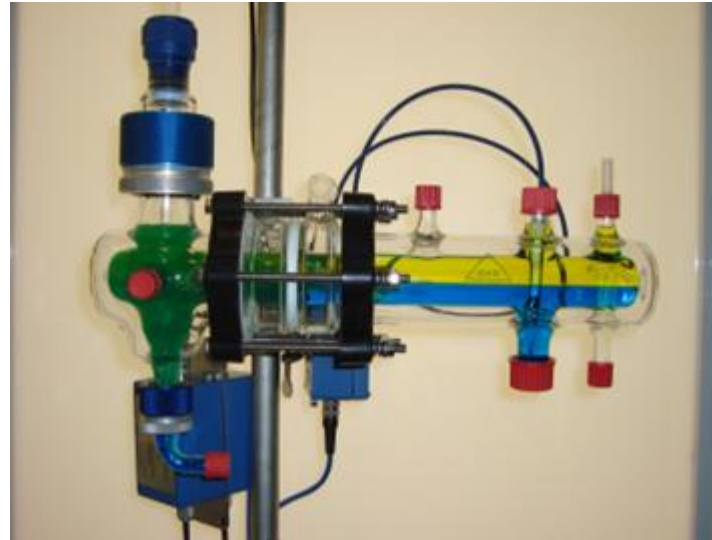
Coefficient de distribution



Extracteur centrifuge



Mélangeur décanteur (Glaskeller)



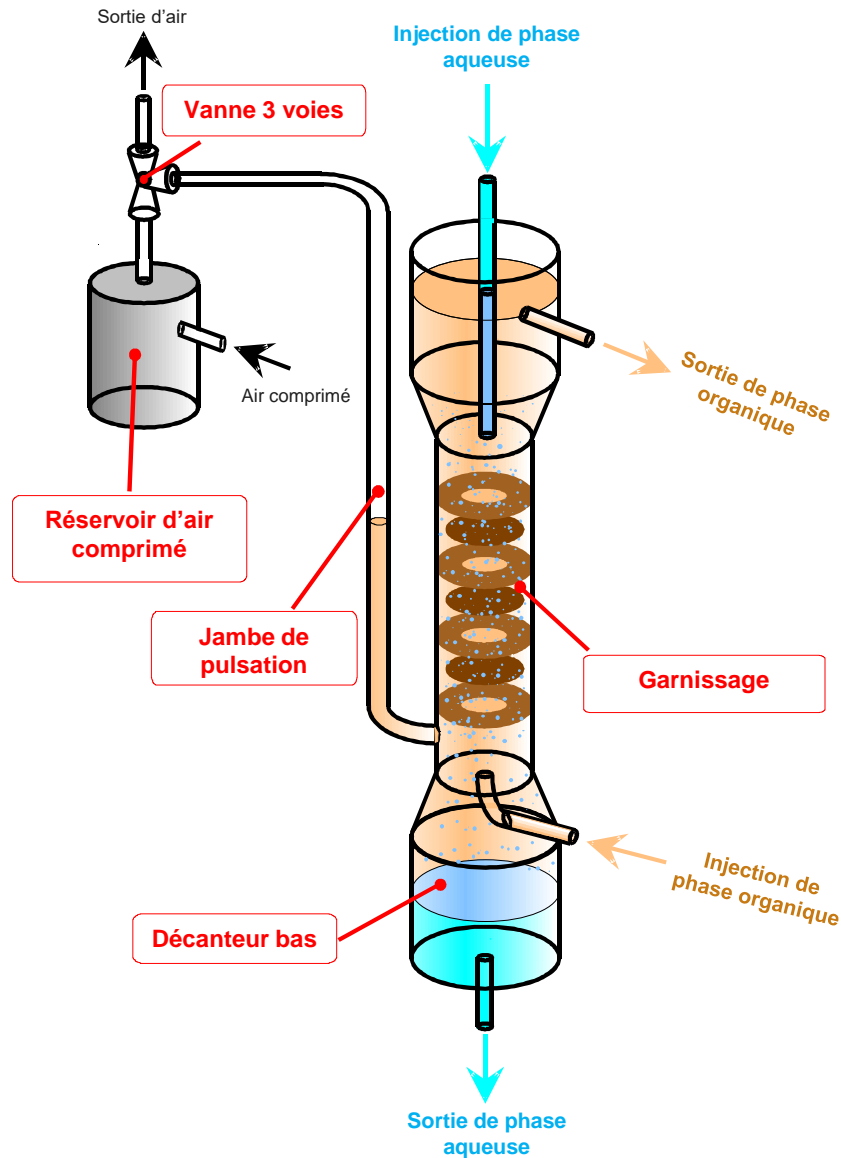
Crédit photo : -

<https://www.glaskeller.ch/en/products/extraction/mixer-settler/>

Colonne pulsée (CEA)



Crédit photo : -

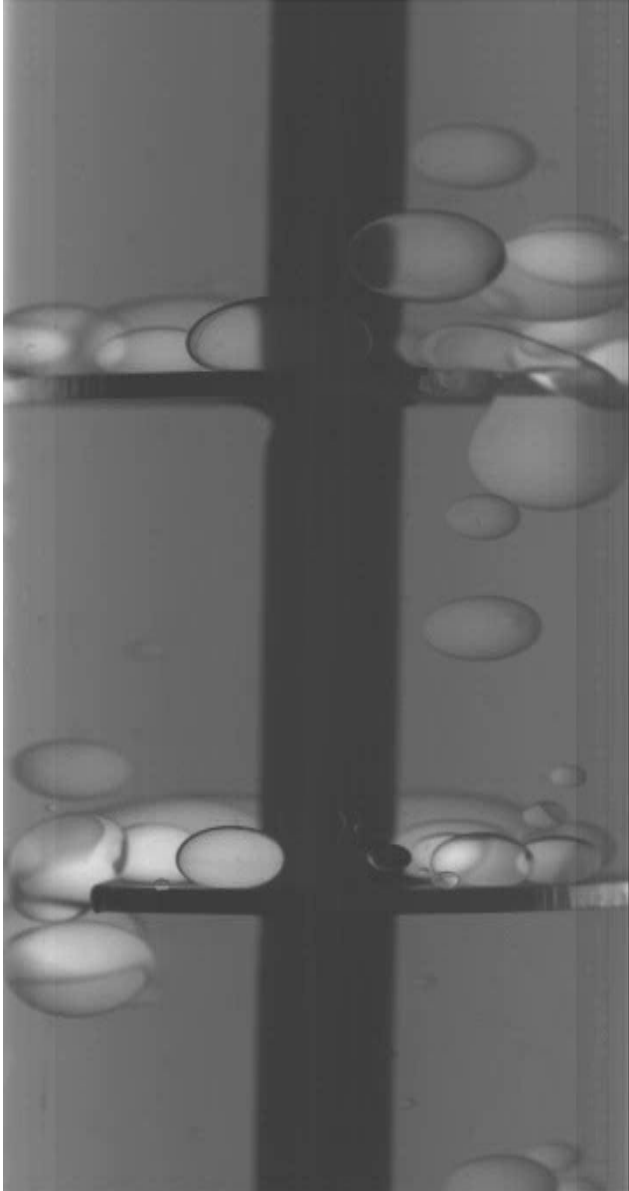
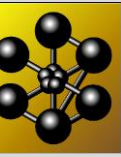


Méthodes de contrôle de la « qualité » de l'émulsion

- Débit d'injection des phases
- Fréquence, pression et symétrie de la pulsation
- Géométrie
 - Section hydraulique
 - Propriétés du garnissage (espacement, section de passage, matériau)

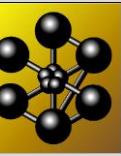
Forces agissant sur la phase dispersée

- Poids
- Trainée
- Pression
- Cisaillement
- Turbulence



Travaux en cours au CEA de Marcoule

- **Reconnaissance d'image (Deep Learning)**
- **Caractérisation de l'émulsion**
 - Distribution de taille → moments (d_{32})
 - Taux de rétention
 - Vitesse des gouttes
 - Taux de coalescence / rupture
- **Caractérisation de l'écoulement**
 - Taux de dissipation d'énergie



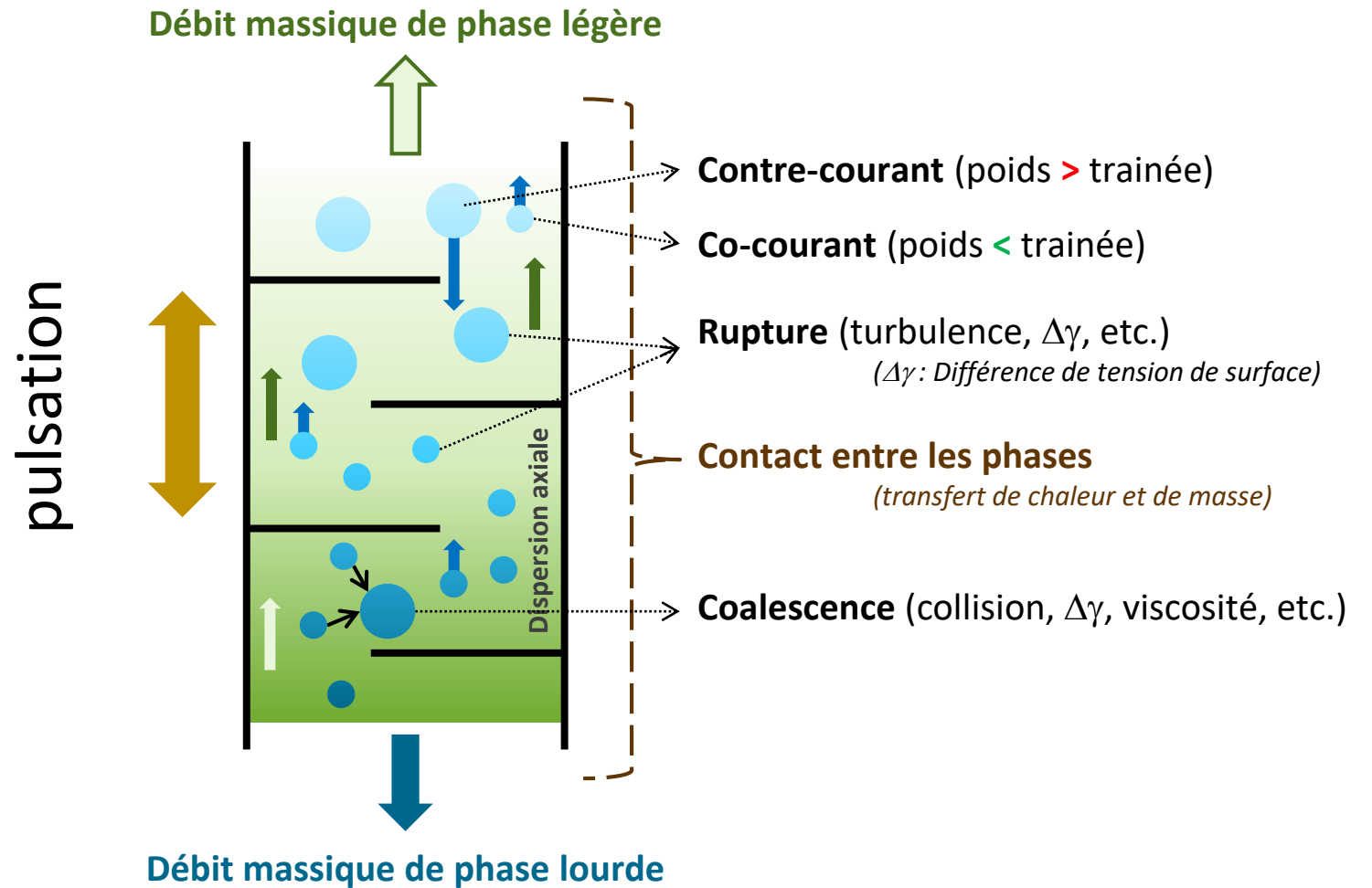
Phase continue

- Débit massique (injection)
 - Vitesse moyenne non nulle
 - Diffusion moléculaire
 - Dispersion axiale (profil de vitesse)
- Pulsation
 - Vitesse moyenne nulle
 - Dispersion axiale (mélange isotrope)

Transfert de chaleur et de masse

Phase dispersée

- Débit massique (injection)
 - Distribution de taille de goutte
 - Distribution de vitesse de goutte
- Pulsation
 - Mélange axial (\sim Fick Diffusion)
 - Loi de coalescence/Rupture

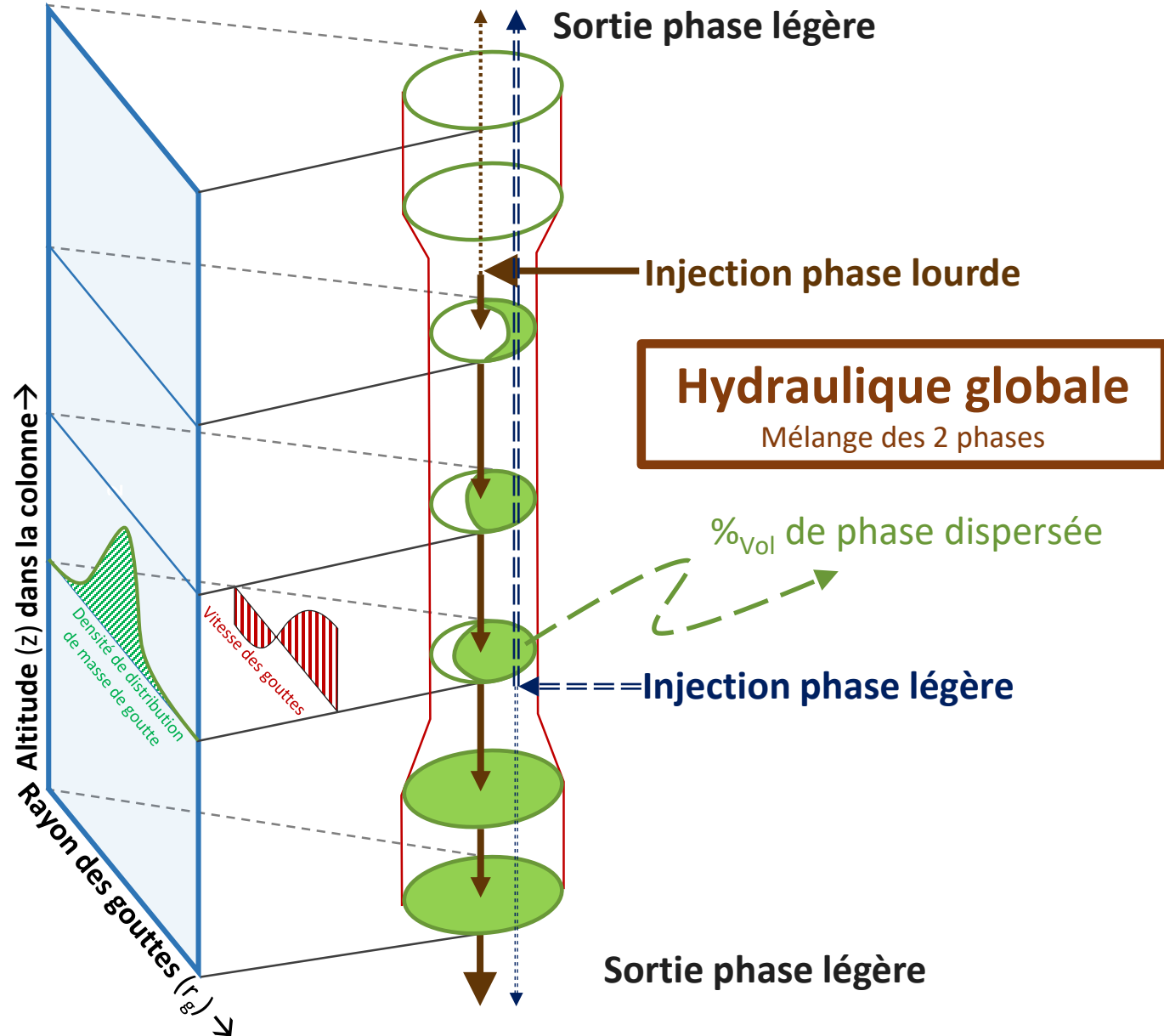


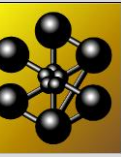


Phase dispersée

Modèle de gouttes rigides sphériques

Maillage 2D 'QUA4' (r_g, z)
Distribution de masse de gouttes





Modélisation hydraulique 1D : 'TUY2'

- Bilan de masse global (Bi-phasique)

$$\int_{\Omega_h} \left(\frac{\partial \rho_h}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_h \cdot \mathbf{v}_h) \right) \cdot d\Omega_h = \int_{\Omega_h} \left(q_{inj_c} + q_{inj_d} + q_{sout} \right) \cdot d\Omega_h$$

- Simplification : Ecoulement en **1D** dans un tuyau de section quelconque

$$\Rightarrow \vec{\nabla} \times \mathbf{v}_h = \mathbf{0} \quad \left(\overline{\text{rot}(\mathbf{v}_h)} = \mathbf{0} \right)$$

$$\Rightarrow \mathbf{v}_h = -\overline{\nabla(\phi_h)} \quad \leftarrow \text{----- La vitesse hydraulique « dérive d'un potentiel »}$$

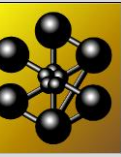
$$\Rightarrow \underbrace{\int_{\Omega_h} \left(\vec{\nabla} \cdot \left(-\rho_h \cdot \overline{\nabla(\phi_h)} \right) \right) \cdot d\Omega_h}_{\text{'COND'}} = \int_{\Omega_h} \left(\left(q_{inj_c} + q_{inj_d} + q_{sout} - \frac{\partial \rho_h}{\partial t} \right) \cdot d\Omega_h \right)_{\text{'CHAR'}} \quad \leftarrow \text{----- Equation de diffusion NL}$$

- '**CARACTERISTIQUES**' nécessaires pour résoudre ce problème : ρ_h et $S(z)$

$$\rho_h = \beta \cdot \rho_d + (1 - \beta) \cdot \rho_c \quad \Rightarrow \frac{\partial \rho_h}{\partial t} \neq 0 \text{ Durant un transitoire}$$

$$\beta = \frac{V_d}{V_h} = \frac{\int_{\Omega_d} \left(\frac{\xi}{\rho_g} \cdot d\Omega_d \right)}{\int_{\Omega_h} (S \cdot d\Omega_h)}$$

```
MOD_HYDRO = 'MODE'  DOM_HYDRO 'DIFFUSION' 'TUY2' 'INCO' 'Ph' 'Qmh';
```



Modélisation du transport des gouttes 2D : 'QUA4'

- Conservation de la masse pour la phase dispersée

$$\int_{\Omega_d} \left(\frac{\partial \xi}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\mathbf{j}_\xi) \right) \cdot d\Omega_d = \int_{\Omega_d} (q_{inj_\xi}) \cdot d\Omega_d$$

Distribution massique d'injection de gouttes [$\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$]

- Transport advectif des gouttes et dispersion axiale

$$\mathbf{j}_\xi = \mathbf{v}_g \cdot \xi - \mathbf{D}_g \cdot \overline{\nabla(\xi)}$$

$$\Rightarrow \underbrace{\int_{\Omega_d} \left(\frac{\partial \xi}{\partial t} \cdot d\Omega_d \right)}_{\text{'CAPA'}} + \underbrace{\int_{\Omega_d} \left(\vec{\nabla} \cdot (-\mathbf{D}_g \cdot \overline{\nabla(\xi)}) \cdot d\Omega_d \right)}_{\text{'COND'}} + \underbrace{\int_{\Omega_d} \left(\vec{\nabla} \cdot (\mathbf{v}_g) \cdot \xi \cdot d\Omega_d \right)}_{\text{'CAPA'}} + \underbrace{\int_{\Omega_d} \left(\mathbf{v}_g \cdot \overline{\nabla(\xi)} \cdot d\Omega_d \right)}_{\text{'ADVE'}} = \underbrace{\int_{\Omega_d} (q_{inj_\xi}) \cdot d\Omega_d}_{\text{'SOUR'}}$$

- 'CARACTERISTIQUES' nécessaires pour résoudre ce problème : \mathbf{v}_g et \mathbf{D}_g

$$\mathbf{v}_g = \mathbf{v}_c + \mathbf{v}_g^* \cdot k_v \cdot (1 - \beta)^{x_p}$$

$$\mathbf{v}_g^* = \sqrt{\frac{|\rho_h - \rho_g| \cdot V_g \cdot \|\mathbf{g}\|}{\frac{1}{2} \cdot \rho_h \cdot S_f \cdot C_D}} \cdot \text{sign}(\rho_h - \rho_g) \cdot \mathbf{e}_z$$

$$\mathbf{v}_c = \frac{\rho_a \cdot \mathbf{v}_h - \frac{q d m_d}{V_h}}{(1 - \beta) \cdot \rho_c}$$

$$\mathbf{D}_g = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & D_{g_{zz}} \end{bmatrix}$$

MOD_DISPERS='MODE' DOM_DISPERS 'DIFFUSION' 'ORTHOTROPE' 'ADVECTION' 'INCO' 'Xi' 'QXi';

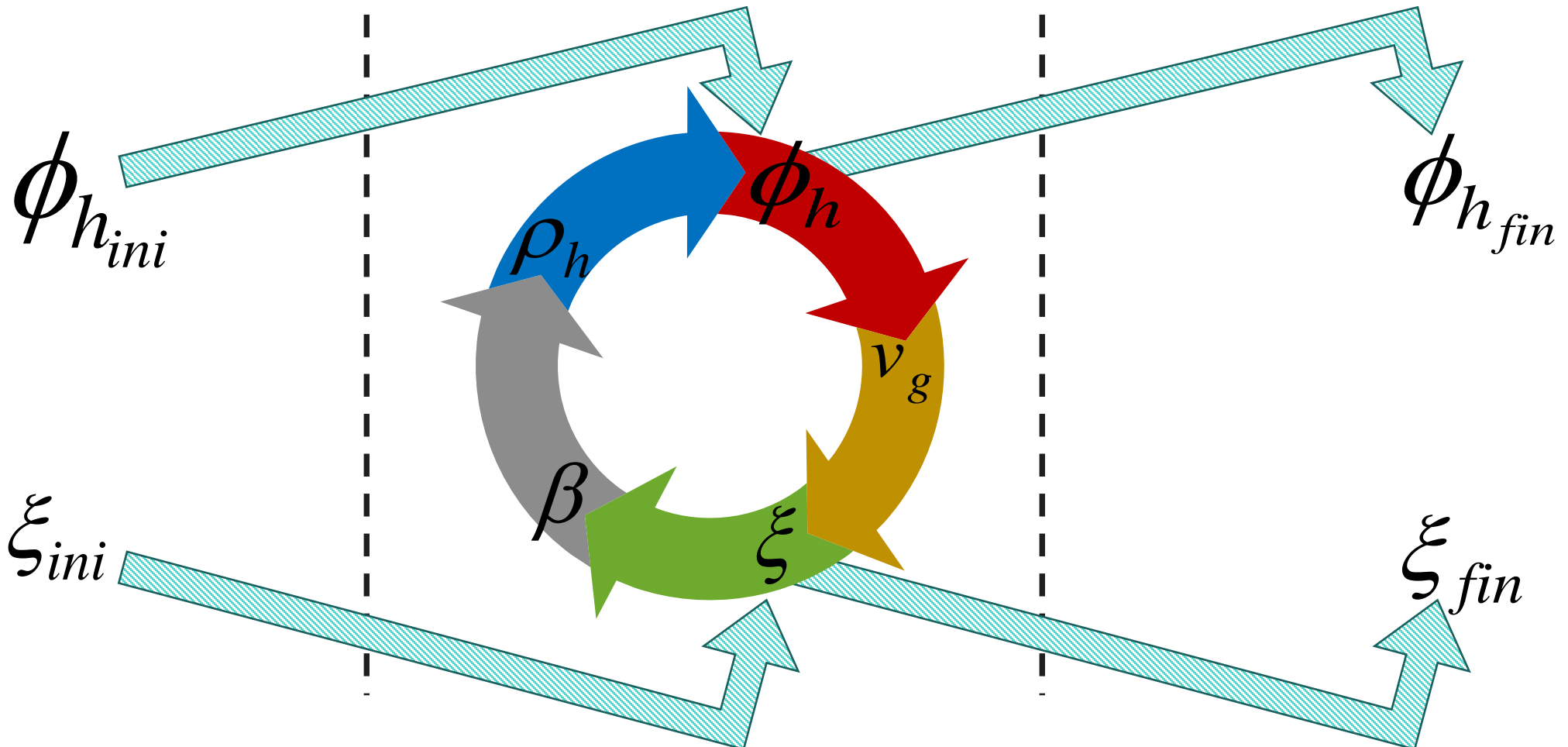


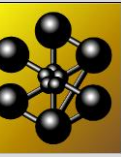


Initialisation
ou
Solution pas précédent

Résolution pas courant
Processus itératif
Jusqu'à convergence

Pas suivant
ou
Fin du calcul





Mise en donnée réduite pour les utilisateurs

- **Propriétés physiques des phases**
 - Viscosité dynamique (Phase continue) → `FLOTTANT`, `EVOLUTION` ou `PROCEDUR`
 - Masses volumiques → « idem »

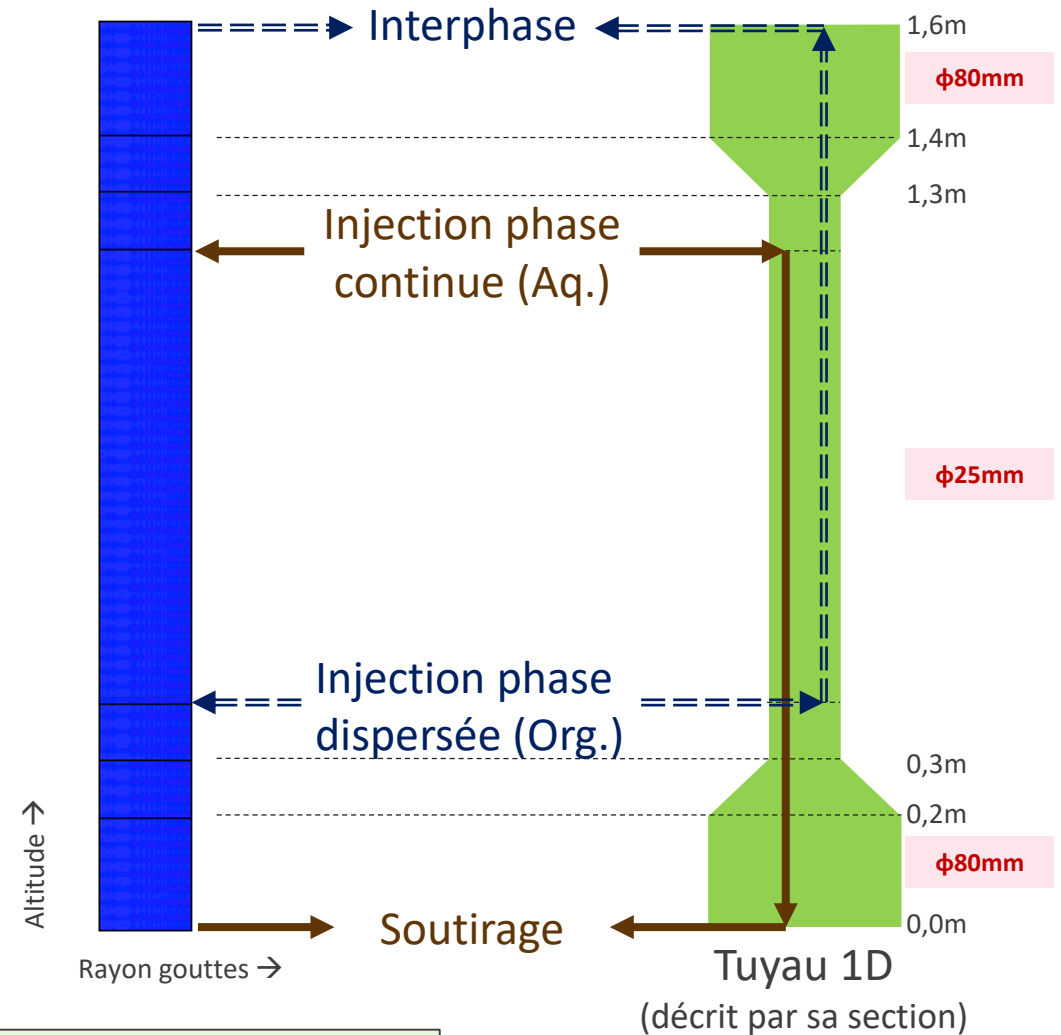
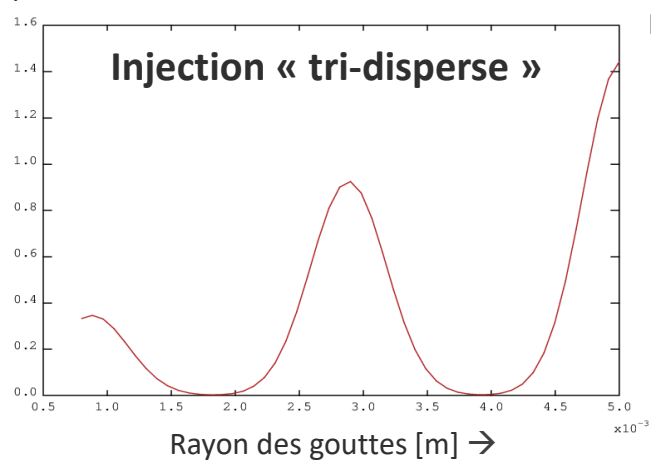
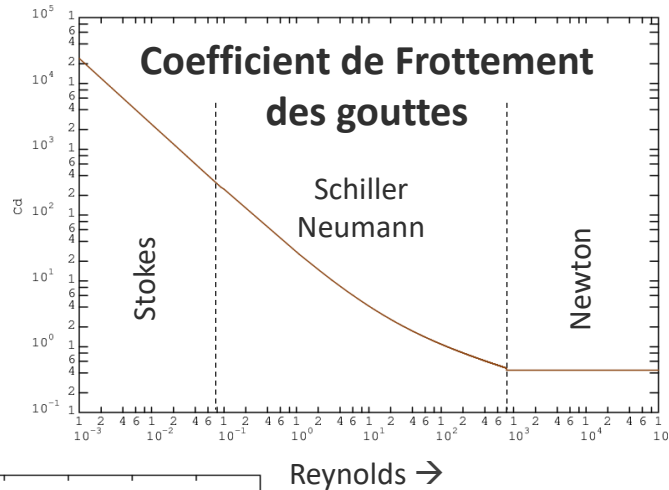
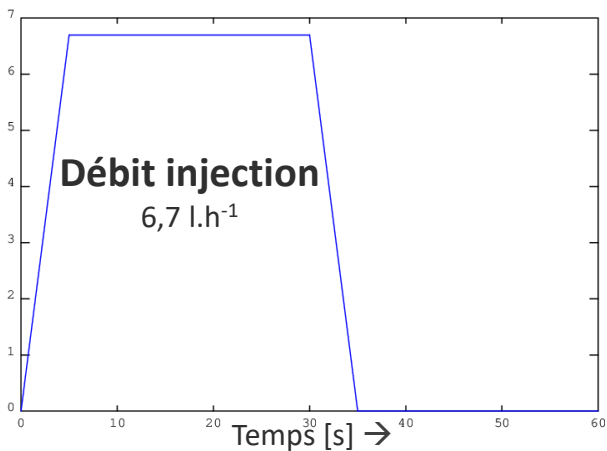
- **Description de la colonne pulsée**
 - Diamètre hydraulique → `FLOTTANT` ou `EVOLUTION`
 - Type de fonctionnement → `FOC` ou `FAC`

- **Définition des injections et soutirages**
 - Côte des injections et soutirages
 - Débit des injections et soutirages → `FLOTTANT`, `EVOLUTION`, `PROCEDUR`
 - Distribution de taille (Phase disp.) → « idem »

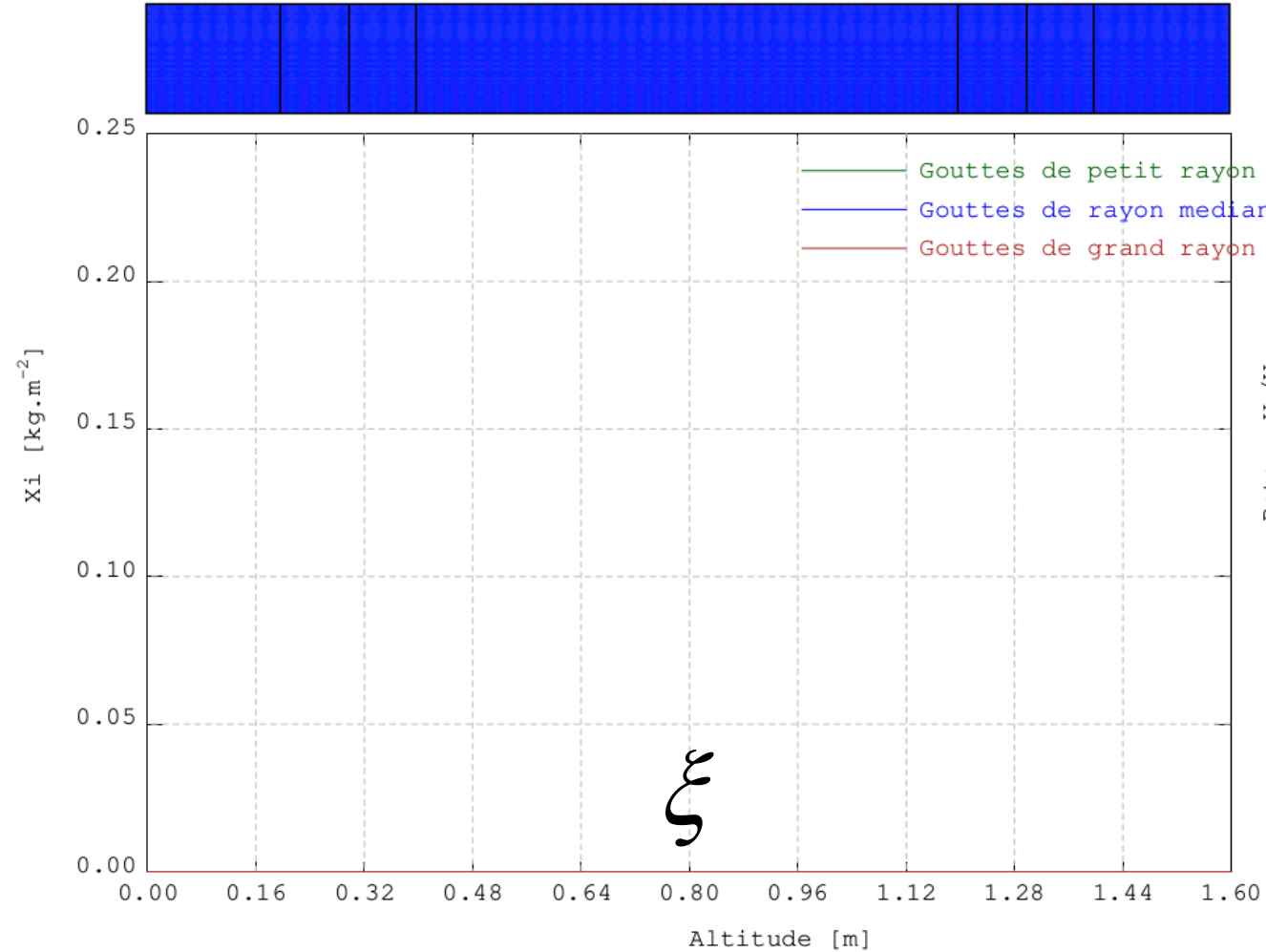
- **Définition des propriétés liées aux gouttes**
 - Rayon min & max des gouttes
 - Loi de vitesse des gouttes → `FLOTTANT`, `EVOLUTION`, `PROCEDUR` ou `MOT`
 - Dispersion axiale → `FLOTTANT`, `EVOLUTION`, `PROCEDUR`



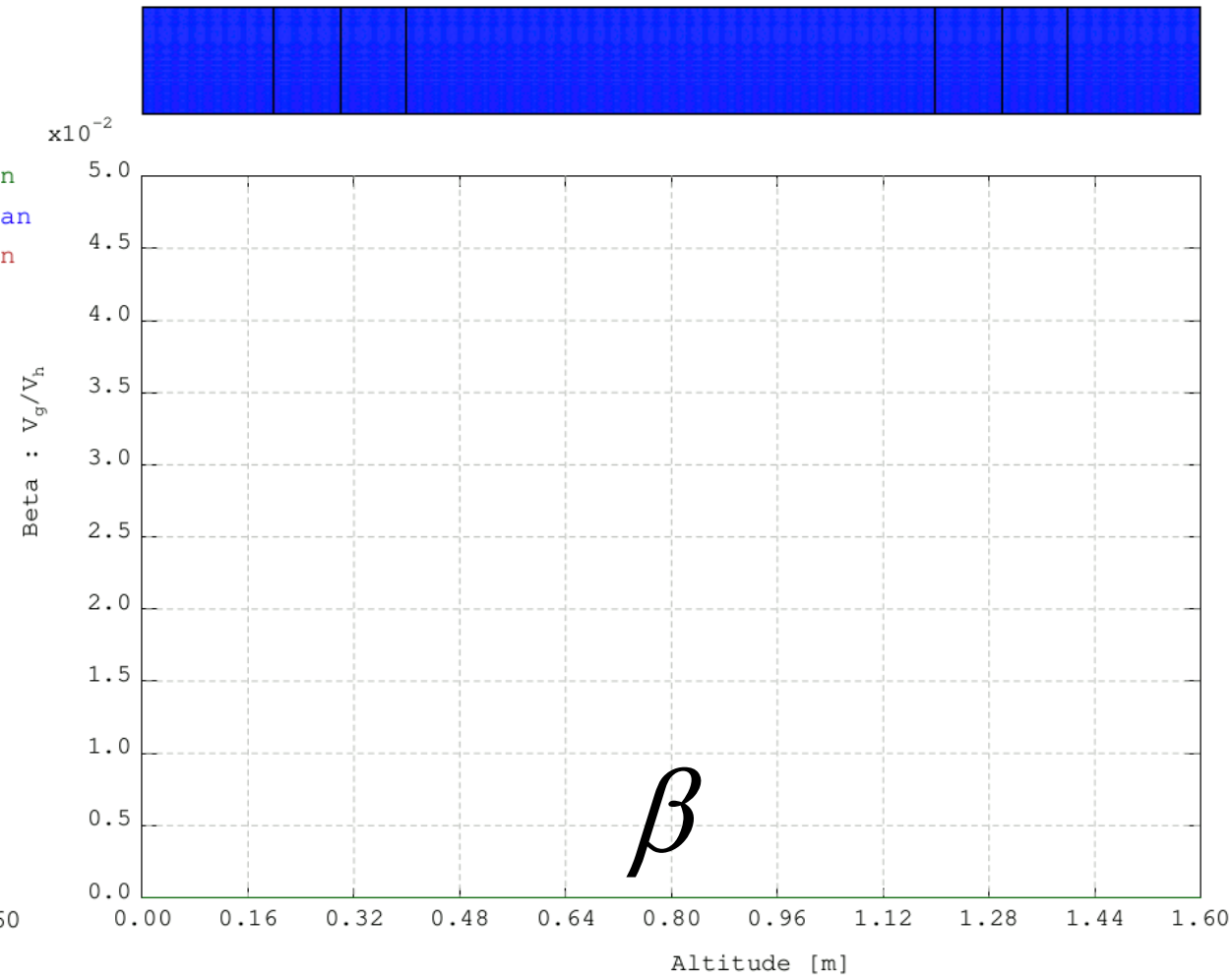
- Phase continue
1100 kg.m⁻³
3,3 l.h⁻¹
- Phase dispersée
900 kg.m⁻³



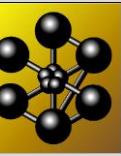
Distribution de masse de gouttes [kg.m⁻¹.m⁻¹]



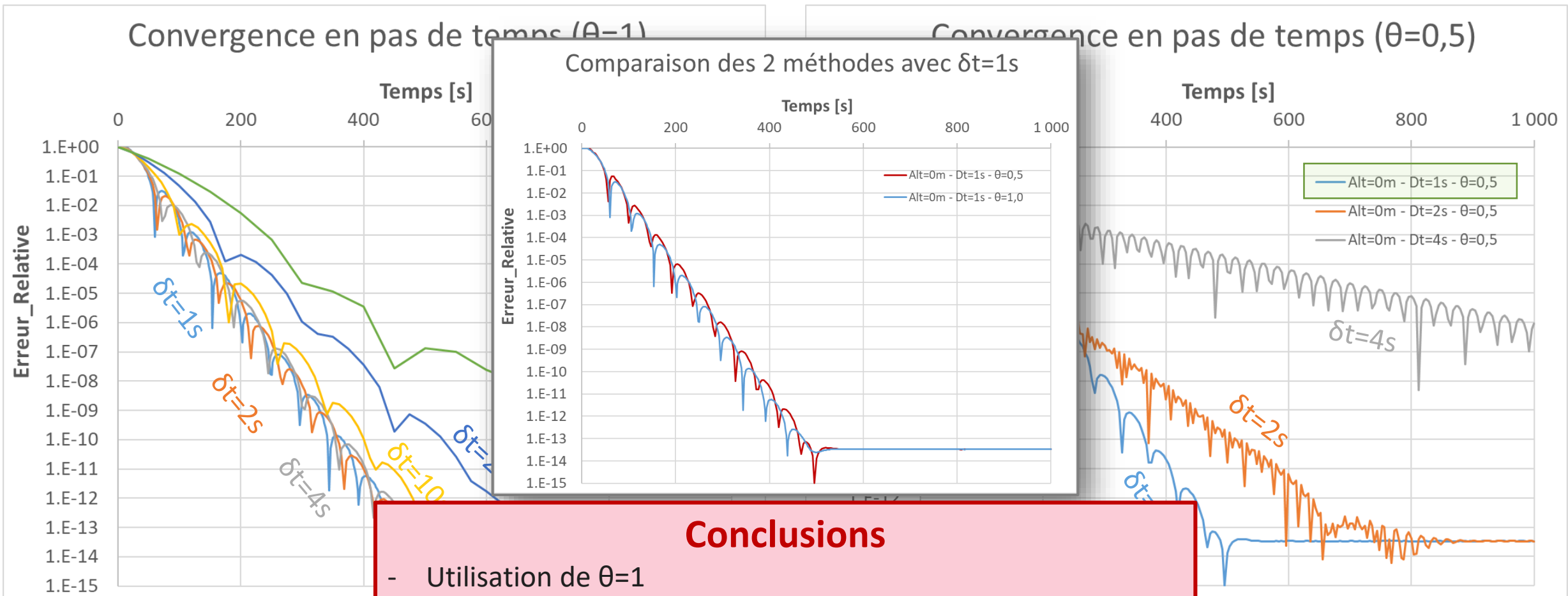
Densite massique de phase dispersee au temps 0.00000E+00 [$\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}$]



Taux de retention au temps 0.00000E+00

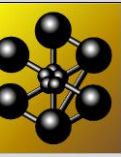


Type de test : Obtention d'un régime permanent par résolution transitoire



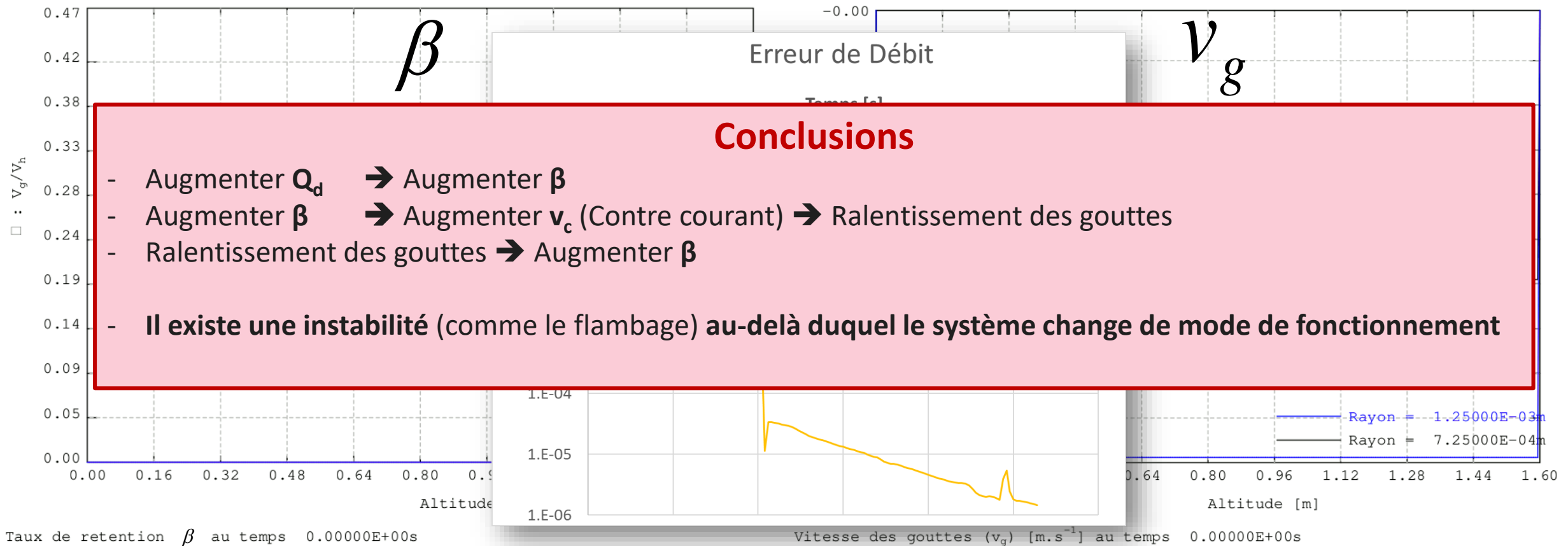
Conclusions

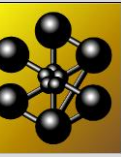
- Utilisation de $\theta=1$
- EF conservatifs pour le transport ! (Précision relative 64-bits = 10^{-15})



Que se passe-t-il lorsque les conditions opératoires évoluent ?

- Débit de la phase continue constant (3,3 l/h)
- Débit de la phase organique (rampe telle que $Q_d = 2,5 \times Q_c$ après 100s)





Problème très connu de décantation

- La phase dispersée ne reforme pas suffisamment vite une phase continue → **Engorgement**



Engorgement brutal

- Grande compression du milieu
- Difficile avec des EF

Emulsion « normale »

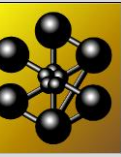
- Débit dispersé trop grand
- Problème non visible si on pilote ici !

Interphase

Gaz / (bulles + bière)

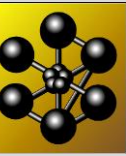
Lit de bulles quasi stagnant

- Taux de rétention ≈ 1
- La décantation peut être longue !!! (Appareil indisponible)



Mise au point d'un Outil Métier sur base Cast3M : « ColHySE^{Cast3M} »

- Simulation d'un écoulement diphasique fortement couplé : Colonne d'extraction liquide/liquide
- Commandes dédiées à des utilisateurs non adeptes de GIBIANE (ou de la programmation en général)
- Utilisation de PASAPAS + quelques modifications dans TRANSNON
 - TRANSNON : Passage en NON-LINEAIRE (si PARATHER existe)
 - PARATHER : Mise à jour du matériau dans la procédure
 - CHARTHER : 'RIGIDITES' et 'CHPOINT' additionnels



Capacité de calcul de l'outil métier ColHySE^{Cast3M}

- **Ajout de modèles de coalescence et rupture**
 - **Rupture** : Problème local simple (assimilable à de la « conduction »)
 - **Coalescence** : Problème non local plus complexe à linéariser (toutes les tailles de gouttes interagissent)
- **Ajout du transfert de chaleur et de masse** (détails slide supplémentaire)
- **Stage** (ouvert) : Confrontation Simulations / Expériences (Calibration des paramètres des modèles)

Développements généraux pour Cast3M

- **Ajout d'un modèle de conditions aux limites :**

$$\underbrace{\int_{\partial\Omega} (h_{Robin} \cdot (\xi - \xi_{ext})) \cdot d\delta\Omega}_{\text{'COND' et 'CONV'}}$$

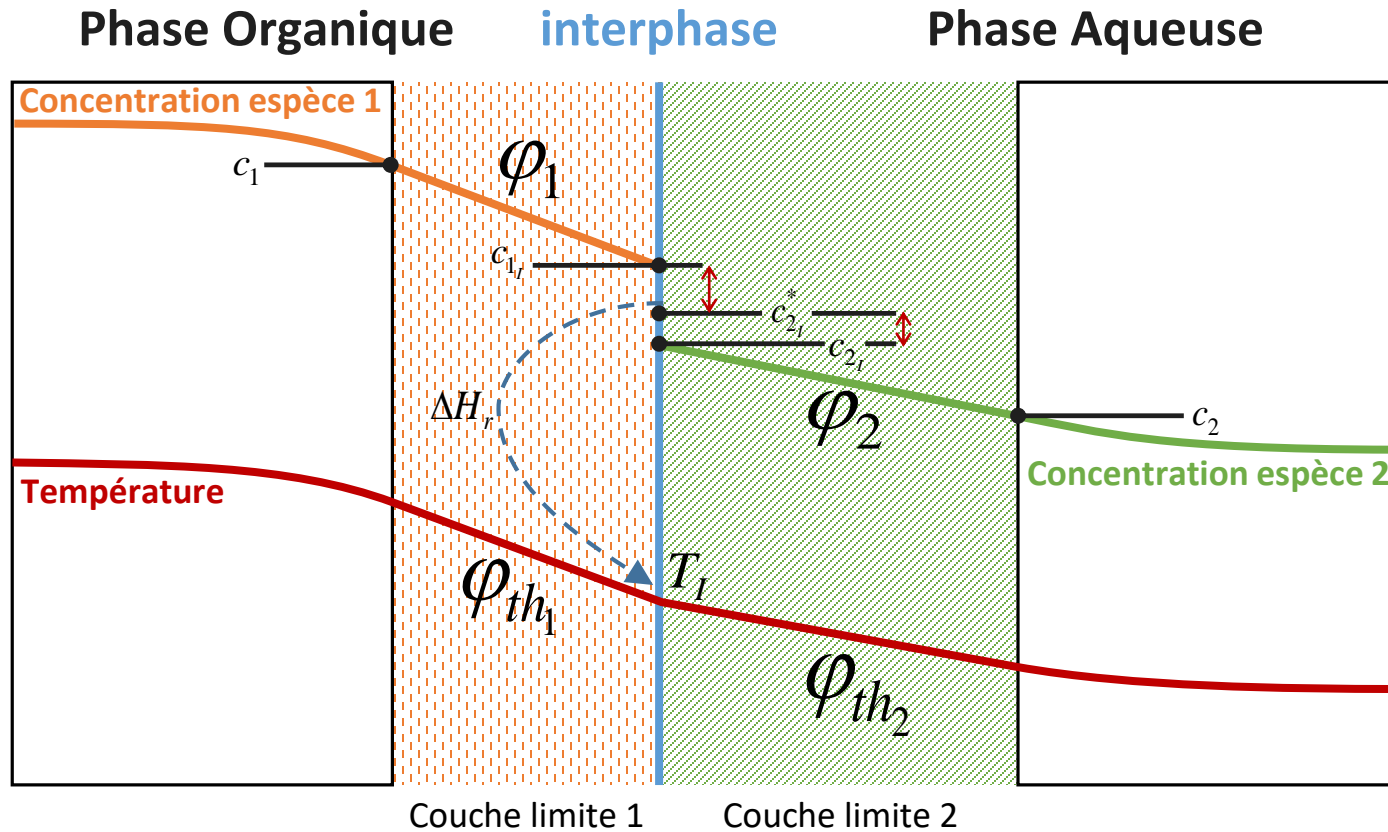
- **Ajout d'un modèle de terme source linéaire :**

$$\underbrace{\int_{\Omega} (K_l \cdot \xi \cdot d\Omega)}_{\text{'CAPA'}}$$



Echange d'espèces chimiques entre les 2 phases (à travers l'interphase)

- Réaction à l'interphase (ex : simple traversée, dissociation, décomposition, etc.)
- Enthalpie de réaction : au niveau de l'interphase



$$\left. \begin{aligned} \varphi_1 &= -S \cdot k_1 \cdot (c_{1I} - c_1) \\ \varphi_2 &= -S \cdot k_2 \cdot (c_2 - c_{2I}) \\ \varphi_{1 \rightarrow 2} &= -S \cdot k_I \cdot (c_{2I} - c_{2I}^*) \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{Problème de conduction} \\ \text{'COND' ('JOINT')} \end{array}$$

Réaction à l'interphase: $c_{1I} \rightleftharpoons \nu \cdot c_{2I}$ ΔH_r

Coefficient de distribution: $c_{1I} - D \cdot c_{2I}^* = 0$

$$\left. \begin{aligned} \varphi_{th1} &= S \cdot k_{th1} \cdot (T_I - T_1) \\ \varphi_{th2} &= -S \cdot k_{th2} \cdot (T_I - T_2) \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{Problème de conduction} \\ \text{'COND' ('JOINT')} \end{array}$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & -D & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ -\nu & 0 & 0 & 0 \\ \Delta H_r & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \lambda \\ c_{1I} \\ c_{2I}^* \\ T_I \end{Bmatrix} \Rightarrow \text{'REAC'} = \begin{cases} 0 \\ Q_{1I} = \lambda \\ Q_{2I}^* = -\nu \cdot \lambda \\ Q_{th1} = \Delta H_r \cdot \lambda \end{cases}$$

Relation non associée (non-symétrique)

'RELA'



Merci pour votre attention