

**PRIX DE THESE CODEGEPRA 2017**  
**(thèses soutenues en 2016)**

**Analyse expérimentale et simulation numérique pour l'extrapolation d'un  
bioréacteur dédié à la production du biohydrogène de 2<sup>ème</sup> génération :  
caractérisation de l'hydrodynamique locale et du mélange**

**Zaineb TRAD**

**Institut Pascal**

(CNRS, Université Clermont Auvergne, SIGMA)

Directeurs de thèse : **Pr. Christophe VIAL** et **Pr. Jean-Pierre FONTAINE**  
[christophe.vial@uca.fr](mailto:christophe.vial@uca.fr) / [jean-pierre.fontaine@uca.fr](mailto:jean-pierre.fontaine@uca.fr)

**Cadre**

Ce travail a été financé par le **LABEX IMobS<sup>3</sup>** et a fait l'objet de collaborations et partenariats le **LRGP (Nancy)** et l'**Ecole Supérieure de Technologie de Casablanca (Maroc)**.

**Résumé / présentation du travail**

Dans un contexte énergétique mondial marqué par l'épuisement et la volatilité des prix des ressources fossiles, la production d'*énergies vertes* s'impose comme une alternative prometteuse permettant de répondre aux besoins futurs. Dans le domaine de la mobilité, le *biohydrogène* (bioH<sub>2</sub>) obtenu par voie fermentaire sombre à partir de déchets lignocellulosiques apparaît comme l'une des ressources potentielles du mixe énergétique capable de se substituer partiellement aux carburants d'origine fossile et aux biocarburants de 1<sup>ère</sup> génération. L'objectif de ce travail est de participer au développement d'une technologie innovante de bioréacteur pour la production de bioH<sub>2</sub> à partir de déchets agricoles (paille) : il s'agit d'un fermenteur anaérobie mécaniquement agité couplé à une membrane immergée dans une boucle externe avec recirculation forcée (BAMIE). En détail, l'objectif est d'optimiser la géométrie et les conditions d'opération du bioréacteur par une approche multi-échelles en se focalisant sur les facteurs abiotiques. En effet, un bon mélange est nécessaire dans ce procédé qui met en contact une phase liquide enrichie en substrats solubles et en particulier en acides gras volatils (AGV), une suspension de matières insolubles et une phase gaz riche en BioH<sub>2</sub>. Toutefois, l'agitation ne doit pas perturber les processus biologiques et surtout consommer très peu d'énergie afin de maintenir la soutenabilité économique et environnementale du procédé.

Dans un premier temps, une étude bibliographique destinée à prouver l'influence du mélange sur le comportement des fermenteurs anaérobie a été conduite ; elle a été complétée par la suite par une analyse de la littérature sur les bioréacteurs anaérobies à membrane qui ont été bien moins étudiés à ce jour que leurs homologues aérobies, en particulier sur le volet modélisation. Les travaux expérimentaux ont tout d'abord porté sur l'étude du macromélange et de l'efficacité de filtration. Les résultats ont validé la preuve de concept du BAMIE avec soutirage des AGV par le perméat. La cuve agitée a ensuite été modélisée par une approche de type CFD. Les résultats ont montré dans un premier temps la faisabilité de la mise en oeuvre de modèles RANS de type  $k-\epsilon$  pour décrire de façon approchée l'hydrodynamique locale, la mise en suspension de la paille (modèle ASM) et la déformation de la surface libre (modèle VOF). Dans un second temps, des méthodes de mesure fines développées au cours de ce travail ont été mises en oeuvre, comme la PIV (vélocimétrie par images de particules) et la PLIF (fluorescence induite par nappe laser), afin de décrire plus finement l'écoulement, puis d'obtenir une meilleure description du mélange ainsi qu'une comparaison plus précise entre les simulations et les mesures des champs de vitesse et de dissipation de l'énergie

turbulente. Plusieurs configurations de mobiles d'agitation ont été comparées et les données des simulations ont pu être reliées quantitativement aux mesures de la puissance consommée par l'agitation. En fin de compte, une géométrie de mobile permettant de minimiser la puissance consommée tout en maintenant un bon transfert de matière gaz-liquide et des temps de macromélange acceptables a pu être définie, de même que les positions optimales des points d'entrée et de sortie de la boucle de circulation du BAMIE dans la cuve agitée.

En conclusion, les résultats obtenus ont montré la faisabilité de la mise en oeuvre d'un BAMIE pour la production de BioH<sub>2</sub>. Couplés aux travaux en cours sur l'optimisation des paramètres biotiques, ils permettront à terme d'obtenir un procédé optimisé qui maximisera la consommation des substrats et la récupération des AGV en qualité de molécules plateformes, tout en minimisant les cycles de nettoyage de la membrane et la consommation d'énergie du procédé.

### **Mots clés**

Réacteur à cuve agitée, CFD, hydrodynamique, mélange, transfert de matière gaz-liquide, PIV, PLIF, décoloration chimique, colmatage, BioH<sub>2</sub>

### **Production scientifique**

#### **Articles internationaux à comité de lecture**

Z. TRAD, Ch. VIAL, J.-P. FONTAINE & Ch. LARROCHE, Experimental and numerical investigation of hydrodynamics and mixing in a dual-impeller mechanically-stirred digester, Chem. Eng. J., <https://doi.org/10.1016/j.cej.2017.07.038>, Accepté (Juillet 2017).

Z. TRAD, Ch. VIAL, J.-P. FONTAINE & Ch. LARROCHE, Mixing and liquid-to-gas mass transfer under digester operating conditions, Chem. Eng. Sci., <https://doi.org/10.1016/j.ces.2017.01.056>, Accepté (Janvier, 2017).

Z. TRAD, Ch. VIAL, J.-P. FONTAINE & Ch. LARROCHE, Multiscale analysis and modeling of biohydrogen production by dark fermentation, Rene. Ener J., 98, 264-282 (2016).

Z. TRAD, J. AKIMBOMI, Ch. VIAL, Ch. LARROCHE, M.J. TAHERZADEH & J.-P. FONTAINE, Development of a submerged anaerobic membrane bioreactor for concurrent extraction of volatile fatty acids and biohydrogen production, Bioresour. Technol., 196, 290-300 (2015).

Z. TRAD, Ch. VIAL, J.-P. FONTAINE & Ch. LARROCHE, Modeling of hydrodynamics and mixing in a submerged membrane bioreactor, Chem. Eng. J., 282, 77-90 (2015).

Ch. VIAL, Y. STIRIBA & Z. TRAD, CFD simulation of flow and mixing in-line rotor-stator mixers with complex fluids, Can. J. Chem. Eng., 93, 391-403 (2014).

#### **Article avec ISBN**

Z. TRAD, Ch. VIAL, J.-P. FONTAINE & Ch. LARROCHE, CFD Optimization of a Submerged Membrane Reactor for Biohydrogen Production, In: Proceedings of The World Congress on Engineering and Computer Science 2014 (S. I. Ao, Craig Douglas, W. S. Grundfest, Jon Burgstone, eds.), Newswood Limited (Hong Kong), pp. 595-600.

#### **Publication technique**

Z. TRAD & Ch. VIAL, Optimization & Modelling of the Hydrodynamics of an Anaerobic Stirred Tank Reactor, Phoenix News, Autumn 2014 ([www.cham.co.uk](http://www.cham.co.uk)).

#### **Open access**

Z. TRAD, Ch. VIAL, J.-P. FONTAINE & Ch. LARROCHE, Optimisation du design du d'un fermenteur anaérobie pour la production du biohydrogène, In : Auvergne Science: le nouveau monde de la recherche et de l'innovation, Septembre 2015 (<http://www.auvergnesciences.com>).

## **Communications orales avec actes dans des congrès nationaux & internationaux**

Z. TRAD<sup>1</sup>, J.-P. FONTAINE, Ch. LARROCHE & Ch. VIAL, Mixing and liquid-to-gas mass transfer under digester operating conditions, 13th International Conference on Gas-Liquid and Gas-Liquid-Solid Reactor Engineering GLS-13 (accepté, Bruxelles, Belgique, 20-23 Août 2017).

Z. TRAD, Ch. VIAL, J.-P. FONTAINE, & C. LARROCHE, Experimental and numerical investigation of hydrodynamics and mixing in a dual-impeller mechanically-stirred digester. XXII International Conference on Chemical Reactors CHEMREACTOR-22 (London, Angleterre, 19-23 Septembre 2016).

Ch. VIAL & Z. TRAD, Multiscale analysis and modeling of biohydrogen production by dark fermentation, International Conference on New Horizons in Biotechnology NHBT (Trivandrum, Inde, 22-25 Novembre, 2015)

Z. TRAD, J.-P. FONTAINE, C. LARROCHE, S. PONCIN, D. FUNFSCHILLING & Ch. VIAL, Computational and experimental analysis of hydrodynamics and mixing in an anaerobic membrane bioreactor for BioH<sub>2</sub> production, 10th European Congress of Chemical Engineering - ECCE 10 (Nice, France, 27 Sept. – 1er Octobre 2015).

Z. TRAD, Ch. VIAL, J.-P. FONTAINE, & C. LARROCHE, Analysis of the Influence of Abiotic Parameters of a Submerged Membrane Bioreactor for BioH<sub>2</sub> Production Using a Coupled Experimental and Numerical Methodology, 12th International Conference on Gas-Liquid and Gas-Liquid-Solid Reactor Engineering GLS-12 (New York, USA, 28 Juin-1 Juillet 2015).

Z. TRAD, Ch. VIAL, J.-P. FONTAINE, & C. LARROCHE, Advanced Experimental tools to investigate flow and mixing properties in stirred tank reactor for BioH<sub>2</sub> production, Scientific workshop of CODEGEPR (Institut Pascal, Clermont-Ferrand, 15 Novembre 2015).

Z. TRAD, Ch. VIAL, J.P. FONTAINE & Ch. LARROCHE, Development of a submerged membrane reactor for BioH<sub>2</sub> production: Hydrodynamic modelling, ANQUE-ICCE-BIOTEC 2014 (Madrid, 1-4 juillet 2014).

Z. TRAD, Ch. VIAL, J.-P. FONTAINE, & C. LARROCHE, Optimization of a Submerged Membrane Reactor for Biohydrogen Production, International Conference on Green Chemistry and Sustainable Engineering (Barcelone, Espagne, 29-31 Juillet 2014).

Z. TRAD, J. AKINBOMI, Ch. VIAL, J.-P. FONTAINE, P. FONTANILLE, C. LARROCHE, Hydrodynamic modelling of a submerged membrane reactor for biohydrogen production, 10th European Symposium on Biochemical Engineering Sciences and 6th International Forum on Industrial Bioprocesses (Lille, Septembre 7-10, 2014).

Z. TRAD, Ch. VIAL, J.-P. FONTAINE, & C. LARROCHE, CFD Optimization of a Submerged Membrane Reactor for Biohydrogen Production, World Congress on Engineering and Computer Science 2014 WCECS 2014 (San Francisco, USA, Octobre 2014).

Z. TRAD, Ch. VIAL, J.-P. FONTAINE, & C. LARROCHE, Performance assessment and hydrodynamic analysis of a submerged membrane bioreactor for Biohydrogen production: Experimental and numerical analysis, The 9th International Student Conference on Advanced Science and Technology (ICAST) 2014 (Clermont-Ferrand, France, Decembre 11-12, 2014).

Z. TRAD, Ch. VIAL, J.-P. FONTAINE, & C. LARROCHE, Modélisation et dimensionnement d'une plateforme d'acides gras volatils comme précurseurs de biocarburants. Journée scientifique de l'Ecole Doctorale des Sciences pour l'Ingénieurs (Clermont-Ferrand, France, Juin 2013).

## **Posters**

Z. TRAD & Ch. VIAL, Modelling and experimental analysis of the hydrodynamic behaviour of a bioreactor devoted to Biohydrogen production, International Conference on New Horizons in Biotechnology – NHBT15 (Trivandrum, Inde, 22-25 Novembre, 2015).

Z. TRAD, Ch. VIAL, J.-P. FONTAINE, & C. LARROCHE, Analysis of the Influence of Abiotic Parameters of a Submerged Membrane Bioreactor for BioH<sub>2</sub> Production Using a Coupled Experimental and Numerical Methodology, 12th International Conference on Gas-Liquid and Gas-Liquid-Solid Reactor Engineering GLS-12 (New York, USA, 28 Juin-1er Juillet 2015).

Z. TRAD, Ch. VIAL, J.-P.FONTAINE, & C.LARROCHE, Hydrodynamic modeling effects on mixing in submerged membrane reactor Biosystems engineering: From the cell to the process. Thematic school CNRS. (Clermont-Ferrand, 7-10 Avril, 2015).

Z. TRAD, Ch. VIAL, J.-P. FONTAINE, & C. LARROCHE, Hydrodynamic modelling effects on mixing in submerged membrane reactor, XXI International Conference on Chemical Reactors CHEMREACTOR-21 (Delft, The Netherlands, 22-25 Septembre 2014).

Z. TRAD, J. AKINBOMI, V. BELIGON, G. CHRISTOPHE, P. FONTANILLE, C. LARROCHE & Ch. VIAL, Biohydrogen production using anaerobic membrane reactor, 10th European Symposium on Biochemical Engineering Sciences and 6th International Forum on Industrial Bioprocesses (Lille, Septembre 7-10, 2014).

Z. TRAD, Ch. VIAL, J.-P. FONTAINE, & C. LARROCHE, Modélisation et dimensionnement d'une plateforme d'acides gras volatils comme précurseurs de biocarburants. Journée Scientifique de l'Ecole Doctorale SPI (Clermont-Ferrand, Juin 2013).