

PRIX DE THESE CODEGEPRA 2014
(thèses soutenues en 2013)

**Coupling of Population Balance Modeling with Computational Fluid
Dynamics in Turbulent Emulsification Systems**

Per Julian BECKER

LAGEP (UCB Lyon 1)

Directeur de thèse : Pr. Nida Sheibat-Othman
nida.othman@lagep.univ-lyon1.fr

Cadre

Ce travail a été réalisé dans le cadre du **Projet Européen MULTIMOD** avec un partenariat industriel **UNILEVER** (Vlaardingen, Pays-Bas) et des articles co-écrits avec le **NTNU** (Université Norvégienne de sciences et technologies) et le **CEA Marcoule**.

Résumé

L'objectif de cette thèse était de développer une approche multi-échelle de la modélisation des procédés d'émulsification dans un milieu turbulent, dans le but de simuler l'évolution d'une distribution des tailles de gouttes (DSD) dans des géométries complexes. Ce sujet suscite un grand intérêt de la communauté scientifique. Ce travail s'est déroulé dans le cadre d'un projet européen sur la modélisation multi-échelle de procédés chimiques et biochimiques (MULTIMOD). Trois verrous scientifiques majeurs ont été identifiés :

- La mise en place d'un algorithme de couplage PBE-CFD (population balance equations – computational fluid dynamics)
- L'amélioration des modèles de brisure sur l'échelle de goutte
- La mesure in-situ de la DSD

Pour aboutir à l'objectif de cette thèse, il a fallu à la fois développer des compétences dans les méthodes expérimentales (conception des montages, suivi in-situ et en ligne, instrumentalisation), l'analyse des données, le développement des modèles de génie des procédés, la modélisation de l'hydrodynamique et de la turbulence (CFD), et informatique (programmation C++, supercalculateur).

Trois géométries différentes ont été étudiées dans le cadre de ce travail : une cuve agitée, un homogénéisateur à haute pression, et un système d'homogénéisation avec mélangeurs statiques. Des émulsions huile/eau à base d'huiles silicones de viscosités différentes, ainsi que des huiles végétales et de l'EGDS (Ethylene Glycol di-Stearate) ont été utilisées. Ceci était dans l'objectif de valider le modèle de brisure pour différentes viscosité et avec des intensités d'agitation de natures et niveaux différents.

L'évolution de la DSD d'une émulsion due à la brisure dans un milieu parfaitement agité est traditionnellement décrite par des bilans de population. Des noyaux de brisure décrivent les

phénomènes de brisure sur l'échelle d'une goutte (~ 10 – 100 µm). Une description de la turbulence (échelle µm – mm) et de l'écoulement (échelle mm – cm) peut être obtenue par des simulations d'éléments/volumes finis en CFD. La principale difficulté d'un point de vue numérique était d'introduire un jeu de quelque dizaines/centaines d'équations différentielles dans un maillage avec 10^5 – 10^6 éléments. Un tel système a été conçu en introduisant la méthode de discrétisation des PBE par volumes finis dans une plateforme CFD open-source (OpenFOAM dans notre cas). La méthode de volume finis est plus stable numériquement que les méthodes de moments habituellement utilisées pour le couplage PBE-CFD.

Le modèle de brisure de Luo & Svendsen, a été amélioré en ajoutant un terme liée à la viscosité de la phase dispersée. Ce nouveau modèle décrit les phénomènes de brisure d'une manière plus physiques que les modèles traditionnels.

Enfin, des avancées significatives ont été faites concernant le suivi in-situ. Une sonde vidéo avec détection automatique des tailles de gouttes, développée au LAGEP, a été utilisée pour la mesure de la DSD. L'algorithme a été adapté pour donner des mesures fiables jusqu'à 20-30 % de fraction de phase dispersée (avant : 5 %), et a donné de meilleurs résultats comparés à la méthode de diffraction laser habituellement utilisé hors ligne.

L'ensemble de ces résultats n'ont pas seulement permis d'avancer la compréhension des phénomènes d'émulsification dans un milieu turbulent, mais surtout de rapprocher la micro-échelle avec l'écoulement et la turbulence pour arriver à un modèle plus complet et basé sur des phénomènes physiques.

Mots-clés

Bilans de population, Emulsification, Modélisation multi-échelle des procédés, CFD, taille des gouttes, homogénéisateur à haute pression, réacteur agité, mélangeurs statiques.

Conférences

- A Coupled Population Balance – CFD Framework in OpenFOAM for a High-Pressure Homogenizer P.J. BECKER, F. PUEL, A DUBBELBOER, N. SHEIBAT-OTHTMAN, **XIVe Congrès SFGP**, 8-10 Octobre **2013** (Lyon, France) (présentation orale)
- Coupling Population Balance Modeling to Computational Fluid Dynamics in a High-Pressure Homogenizer, Julian Becker, Francois Puel, Arend Dubbelboer, Nida Sheibat-Othman **Jacques Cartier Meetings: Emulsification Modelling, Technologies and Applications**, 19-21 November **2012**, (Lyon, France) (poster)

Publications

- P.J. Becker, F. Puel, R. Henry, N. Sheibat-Othman, Investigation of Discrete Population Balance Models and Breakage Kernels for Dilute Emulsification Systems, **Industrial & Engineering Chemistry Research** 50(19), 11358–11374, **2011**
- A. Amokrane, S. Charton, N. Sheibat-Othman, J. Becker, J. P. Klein, F. Puel, Development of a CFD – PBE coupled model for to the simulation of the drops behavior in a pulsed column, **Canadian Journal of Chemical engineering**, 92(2), 220-233, **2014**

- J. Solsvik, Z. Borcka, P.J. Becker, N. Sheibat-Othman and H.A. Jakobsen, Evaluation of breakage kernels for liquid–liquid systems: Solution of the population balance equation by the least-squares method, **Canadian Journal of Chemical Engineering**, 92(2), 234-249, **2014**
- J. Solsvik, P.J. Becker, N. Sheibat-Othman, H.A. Jakobsen, On the solution of the population balance model describing emulsification: Evaluation of weighted residual methods, **Canadian Journal of Chemical Engineering**, 92(2), 250-265, **2014**
- J. Becker, F. Puel, Y. Chevalier, N. Sheibat-Othman, Monitoring of silicone oil in emulsification in stirred vessels: Effect of dispersed phase concentration and viscosity, **Canadian Journal of Chemical Engineering**, 92(2), 296-306, **2014**
- J. Solsvik, P.J. Becker, N. Sheibat-Othman and H.A. Jakobsen, Population balance model: breakage kernel parameter estimation to emulsification data, **Canadian Journal of Chemical Engineering**, 92(6), 1082-1099, **2014**
- P.J. Becker, F. Puel, H.A. Jakobsen, N. Sheibat-Othman, Development of an Improved Breakage Kernel for High Dispersed Viscosity Phase Emulsification, **Chemical Engineering Science**, 109, 326–338, **2014**
- P.J. Becker, F. Puel, J. Janssen A. Dubbelboer, N. Sheibat-Othman, Coupled Population Balance - CFD Simulation of Droplet Breakup in a High Pressure Homogenizer, **Computers & Chemical Engineering**, 68, 140–150, **2014**