

N° d'ordre

THESE
présentée à

L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES
DE LILLE 1

pour obtenir le titre de
Docteur de l'Université

par

Mohammed ELQOTBI

D.E.A. de Mathématiques Appliquées (Lille I)

D.E.S.S. d'Informatique Industrielle (Lille I)

Ecole Doctorale: Sciences de la Matière, du Rayonnement et de l'Environnement

Spécialité: Ingénierie des Systèmes Biologiques

APPLICATION DE LA DYNAMIQUE DES FLUIDES (CFD)
A LA MODELISATION D'UN BIOREACTEUR GAZ-LIQUIDE

soutenue le 6 avril 2009 devant le jury composé de :

M. Jean-Philippe CASSAR, Professeur à l'Université de Lille I	Président
M. Henri DELMAS, Professeur à l'INP de Toulouse.....	Rapporteur
M. Abdellah SABONI, Professeur à l'Université de Pau et des Pays de l'Adour	Rapporteur
M. Serafim D. VLAEV, Professeur à l'Académie des Sciences de Bulgarie..	Rapporteur
M. Pascal DHULSTER, Professeur à l'Université de Lille I.....	Examineur
M. Ludovic MONTASTRUC, MdB à l'INP de Toulouse.....	Examineur
M. Aziz NAKRACHI, MdB à l'Université de Lille I.....	Co-encadrant
M. Iordan NIKOV, Professeur à l'Université de Lille I.....	Directeur de Thèse

APPLICATION OF CFD IN GAS-LIQUID BIOREACTOR ANALYSIS

FLUENT et MIXSIM sont des marques déposées de Fluent Incorporated.

MAPLE 7 est une marque déposée de Waterloo Maple Inc.

Visual C++ est une marque déposée de Microsoft Corporation.

*A mes parents
et
mes enfants*

Il n'est pas logique de te venter de liberté alors
que tu es enchaîné par les liens de la logique.

Mikhaïl Nouâïma

ليس من المنطق في شيء أن تتباهى
بالحرية وأنت مكبل بقيود المنطق.

ميخائيل نعيمة

REMERCIEMENTS

Les travaux de recherche qui font l'objet de ce mémoire ont été menés au sein du laboratoire des Procédés Biologiques, Génie Enzymatique et Microbien (ProBioGEM), sous la direction de Monsieur Jordan NIKOV, Professeur à l'Université des Sciences et Technologies de Lille I (Polytech'Lille). Son accueil, sa disponibilité et son investissement m'ont beaucoup aidé; je tiens à lui témoigner ma profonde reconnaissance.

Le Professeur Jean-Philippe CASSAR, Professeur à l'Université de Lille I qui, ayant assuré la phase de latence de l'essentiel de ce travail, accepte de participer au jury de sa soutenance et d'en assurer la présidence. Je le remercie pour toute son implication.

Je remercie tout particulièrement les Professeurs Henri DELMAS de l'ENSIGC-INP de Toulouse et le Professeur Abdellah SABONI de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour, d'avoir accepté de participer au jury de cette thèse et d'en avoir évalué le contenu.

Le Professeur Serafim D. VLAEV, de la «Bulgarian Academy of Sciences» de Bulgarie (Institute of Chemical Engineering; Sofia), trouve ici l'expression de mes remerciements pour son sens de la communication et la pertinence de ses remarques.

Mes remerciements vont aussi à Monsieur Pascal DHULSTER, Professeur à l'Université de Lille I, pour avoir accepté de prendre part à l'évaluation de ce travail.

J'exprime ma reconnaissance à Monsieur Ludovic MONTASTRUC, Maître de Conférences à l'Université de Toulouse, pour avoir accompagné l'avancement de ce travail et accepté d'être membre du jury.

Monsieur Aziz NAKRACHI, Maître de conférences à l'Université des Sciences et Technologies de Lille I, m'a témoigné le long de ce travail d'une disponibilité et d'un soutien exemplaires. Je le remercie pour tous ses efforts et pour sa participation au jury final.

Que tous les gens, que j'ai côtoyés durant l'élaboration de ce travail ainsi que toute personne ayant contribué à sa réalisation, trouvent ici un témoignage de ma reconnaissance et ma sympathie.

Enfin, que mes enfants, ma femme et les membres de ma famille, trouvent dans ces lignes l'expression de mes remerciements pour tout ce qu'ils ont pu supporter de ma part, pendant cette longue durée, sans pouvoir peut-être l'exprimer. Les amis, pour toute forme de soutien dont vous m'avez témoigné, pour le partage de moments agréables, je vous remercie.

Email : elqotbi.moh@orange.fr

TABLE DES MATIERES

Remerciements.....	7
Résumés : Français	9
Anglais.....	10
Table des matières.....	11
Liste des figures.....	19
Liste des tableaux.....	23
NOMENCLATURE.....	25
INTRODUCTION.....	29
<u>CHAPITRE I : ETAT DE L'ART et POSITION DU PROBLEME</u>	33
I – REACTEUR, BIO-REACTION, DTS ET CFD EN GDP.....	33
1°/ Réactions biologiques aérobies.....	35
2°/ Les réacteurs et leur conditionnement.....	37
3°/ La DTS et la CFD.....	40
II - POSITION DU PROBLEME	41
III - LES DEMARCHES METHODOLOGIQUES D'ETUDE DE REACTEURS	41
1°/ Démarche de la DTS en GDP.....	41
2°/ Démarche de la CFD	46
3°/ L'objectif et l'intérêt du présent travail	53
IV – CONCLUSION.....	53

CHAPITRE II : LES ASPECTS DU PROBLEME 55

INTRODUCTION.....	55
I – ASPECT BIOLOGIQUE: LES REACTIONS BIOLOGIQUES ET LEURS SPECIFICITES.....	55
II – ASPECT HYDRODYNAMIQUE: LE REACTEUR EN MONOPHASIQUE ET EN DIPHASIQUE.....	60
III – ASPECTS MATHEMATIQUE ET NUMERIQUE: DE L’ENONCE A L’ANALYSE DES RESULTATS.....	62
1°/ La mise en équations du problème.....	63
(a) Equations de l’écoulement des deux phases.....	63
(b) Transfert massique d’oxygène de la phase gazeuse dispersée vers la phase liquide continue.....	64
(c) Taux de croissance et vitesses de formation des constituants.....	65
(d) Equations des quatre scalaires transportés par la phase continue.....	65
2°/ La démarche de résolution adoptée.....	66
3°/ La discrétisation du système obtenu.....	66
4°/ Le maillage de la cuve et ses caractéristiques.....	67
5°/ Les paramètres influents sur la résolution numérique.....	69
6°/ L’analyse et l’exploitation des résultats.....	70
IV - ASPECTS MATERIELS INFORMATIQUES.....	70
V - CONCLUSION.....	71

**CHAPITRE III : STRUCTURE DE L’ECOULEMENT DANS UN
BIOREACTEUR HETEROGENE (CAS DE LA CUVE AGITEE AEREE). 73**

INTRODUCTION.....	73
I – EVALUATION DU CISAILLEMENT DANS UNE CUVE AGITEE A L’AIDE D’UN CAPTEUR SPHERIQUE PAR LA CFD.....	74
1°/ Le facteur de friction	74
2°/ Structure de l’écoulement autour d’une sphère.....	75
(a) Approche globale.....	75
(b) Approche locale.....	76
3°/ Structure de l’écoulement dans la cuve agitée.....	78
4°/ Problématique de validation du « calcul par la CFD ».....	79

II- EVALUATIONS EXPERIMENTALE ET PAR CFD DU CISAILLEMENT....	81
1°/ Introduction.....	81
2°/ La sonde et l'évaluation expérimentale du taux de cisaillement.....	82
(a) La cuve et le dispositif de mesure.....	83
(b) Eléments théoriques support de la méthode de mesure.....	83
3°/ L'évaluation numérique(par CFD) du taux de cisaillement.....	84
(a) Eléments théoriques.....	84
(b) L'accès aux valeurs du taux de cisaillement.....	87
III – COMPARAISON DES RESULTATS:	
VALIDATION DE LA METHODE « MESURE PAR LA CFD ».....	87
1°/ Evaluation du taux de cisaillement et des vitesses radiales pour RT.....	87
2°/ Résultats numériques en images d'un calcul marginal.....	89
3°/ Taux de cisaillement pour RT au voisinage de la turbine et de la sonde...	92
4°/ Génération du taux de cisaillement caractéristique en fonction d'une	
variable (ex : la viscosité) et comparaison des deux turbines.....	93
(a) <i>Comparaison des deux turbines à travers les coefficients de Metzner</i>	
<i>et Otto pour les écoulements laminaires.....</i>	94
(b) <i>Potentiel d'étude des champs des taux de cisaillement autour</i>	
<i>d'une turbine.....</i>	95
IV – CONCLUSION.....	98

CHAPITRE IV : INTEGRATION HYDRODYNAMIQUE-BIOLOGIQUE
PAR LA CFD (modèle hydrodynamique-biologique simplifié
diphasique avec $k_t a$ et viscosité constants)..... 99

INTRODUCTION.....	99
I - MODELE HYDRODYNAMIQUE DIPHASIQUE EN REGIME	
« LAMINAIRE ».....	100
1°/ La cuve.....	100
2°/Les écoulements-support en monophasique et en multiphasique.....	101
3°/ Les conditions frontières adoptées.....	103
(a) Les parois de la cuve.	103
(b) La turbine et son arbre.....	104
(c) Le distributeur de bulles d'air.....	104

(d) La sortie.....	104
(e) La configuration du maillage mobile de la turbine.....	105
(f) Les scalaires.....	105
(g) Les sources volumiques.....	105
II - LE MODELE BIOLOGIQUE UTILISE ET SA RESOLUTION.....	105
1°/ Le modèle retenu et ses caractéristiques.....	105
2°/ La résolution du système différentiel formé par les termes réactifs et les profils des concentrations.....	105
3°/ L'approximation d'ordre 0 de la vitesse de la bioréaction.....	107
4°/ Commentaire sur la résolution du système différentiel local dans une maille.....	108
III – LA RESOLUTION NUMERIQUE DU MODELE RESULTANT ADOPTE.	108
1°/ Le « pseudo-réacteur » élémentaire.....	108
2°/ Les hypothèses adoptées dans le modèle.....	109
3°/ Le traitement informatique en quatre étapes.....	111
4°/ Les résultats obtenus: Détails pour $\Omega = 120 \text{ rpm}$ et $\mu = 0,1 \text{ Pa.s}$	111
(a) Les champs hydrodynamiques.....	112
(b) Les étapes du calcul.....	113
(c) Les champs et profils des concentrations obtenus.....	115
(d) Commentaire: (comparaison des résultats du 1°/ et 4°/c)).....	116
(e) Les zones mortes.....	118
5°/ Autre approximation de la croissance de la culture.....	119
IV - L'ADJONCTION DE LA TURBULENCE.....	120
1°/ La turbulence en mécanique des fluides.....	120
2°/ Les modèles de turbulence en écoulements multiphasiques.....	121
3°/ Les modèles adoptés, raison, paramètres et le déroulement du calcul.....	121
4°/ Les résultats obtenus et la validation du modèle.....	125
(a) Les champs en images des vitesses, de l'énergie turbulente k_L et de sa dissipation ε_L pour la phase liquide.....	126
(b) Les répartitions volumiques de l'énergie turbulente et de sa dissipation et de la viscosité turbulente pour la phase liquide.....	127
V - CONCLUSION ET REMARQUES: Nécessité d'intégrer dans le modèle l'échange massique et la viscosité.....	129

CHAPITRE V : INTEGRATION DE L'ECHANGE MASSIQUE ($k_l a$)..... 131

INTRODUCTION.....	131
I - LE TRANSFERT D'OXYGENE EN ECOULEMENTS ET LES MODELES D'ECHANGE.....	131
1°/ Les échanges inter-phasiques.....	131
2°/ Structure dispersive de la phase gazeuse dans une cuve agitée.....	132
3°/ L'interface en écoulements diphasiques gaz-liquide.....	133
4°/ Les échanges cinétiques et thermiques.....	134
5°/ L'échange massique.....	135
(a) Le coefficient k_l	136
(b) Le « volume » de l'échange.....	136
II - LES COEFFICIENTS k_l ET $k_l a$ EN LITTERATURE.....	136
1°/ Les modèles d'échange gaz-liquide.....	137
(a) Le modèle des deux films.....	137
(b) Le modèle de la pénétration de Higbie.....	137
(c) Le modèle film-pénétration.....	138
(d) Autres modèles.....	139
2°/ Tour d'horizon des coefficients d'échange massique dans la littérature....	139
III – LE MODELE ADOPTE ET SES CARACTERISTIQUES.....	140
1°/ L'importance de la turbulence.....	140
(a) La turbulence dans les modèles de coefficients k_l	140
(b) Quelques modèles.....	140
2°/ L'expression du modèle adopté.....	140
3°/ L'implémentation informatique.....	141
IV - LES RESULTATS ET LA MISE EN EVIDENCE DE L'INTERACTION REACTION-ECOULEMENT.....	141
1°/ Les quatre grandeurs hydrodynamiques.....	141
(a) Les valeurs du taux de la dissipation ε_L	141
(b) Les valeurs du coefficient de transfert k_l	143
(c) Les valeurs de la surface volumique d'échange a	144
(d) Les valeurs du coefficient volumique de transfert de masse $k_l a$	145

II – COMMENTAIRE DES RESULTATS DU MODELE INTEGRAL (CONTOIS)..	167
1°/ Les distributions volumiques de ε_L , k_l , a et k_1a (Contois).....	167
2°/ Les profils des moyennes volumiques de $\dot{\gamma}$ (Contois).....	170
3°/ Les profils des moyennes volumiques de ε_L , k_l , a et k_1a (Contois).....	171
4°/ Les profils des moyennes volumiques de μ_X et r_X (Contois).....	172
5°/ Les profils des moyennes volumiques de X , S , O_d et P (Contois).....	173
6°/ Courbes de la viscosité en fonction du temps et de la concentration en biomasse (Contois).....	174
III – LE MODELE INTEGRAL DE MONOD PAR LA CFD.....	175
1°/ Le modèle biologique de Monod et le calcul local.....	175
2°/ Les profils des moyennes volumiques de $\dot{\gamma}$ (Monod).....	176
3°/ Les profils des moyennes volumiques de ε_L , k_l , a et k_1a (Monod).....	177
4°/ Les profils des moyennes volumiques de μ_X et r_X (Monod).....	178
5°/ Les profils des moyennes volumiques de X , S , O_d et P (Monod).....	179
6°/ Courbes de la viscosité en fonction du temps et de la concentration en biomasse: (Monod).....	180
IV - COMMENTAIRE DES RESULTATS.....	180

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES..... 183

BIBLIOGRAPHIE..... 191

ANNEXES :..... 199

ANNEXE 1: Evolution des valeurs moyennes des variables impliquées dans le coefficient k_1a :..... 199

ANNEXE 2: Valeurs moyennes des champs des grandeurs hydrodynamiques et biologiques du modèle intégral:..... 203

 A2-1 : Modèle de Contois..... 204

 A2-2 : Modèle de Monod..... 209

<u>ANNEXE 3:</u> Structure de la fonction-utilisateur (UDF)	
utilisée dans le travail.....	215
<u>ANNEXE 4:</u> Ensemble de tous les résultats..	219

Liste des figures

Figure I-1	: Réacteur et son conditionnement de contrôle	37
Figure I-2	: Cuve avec une turbine Rushton et un anneau d'injection de gaz	38
Figure I-3	: Turbines Rushton (RT) et Narcisse (NS).....	39
Figure I-4	: Détails de la turbine Narcisse	39
Figure I-5	: Chemins d'une particule fluide dans un réacteur	42
Figure I-6	: (a) Réacteurs piston – (b) Réacteur parfaitement agité.....	43
Figure I-7	: DTS d'un réacteur piston/ parfaitement agité/quelconque	44
Figure I-8	: Cumul des temps de séjour dans un réacteur	44
Figure I-9	: Mise en évidence par la DTS d'une zone morte/d'un court-circuit	45
Figure I-10	: Modèles de réacteurs élémentaires pour associations	45
Figure I-11	: Déséquilibre équiangulaire d'une maille	48
Figure I-12	: Schéma général des méthodes de descente en optimisation.....	51

Figure II-1	: Les phases du développement d'une culture	56
Figure II-2	: Détail de l'activité dans un « pseudo-réacteur » élémentaire.....	63
Figure II-3	: (a) Coupe du maillage de la cuve-(b) Capsule de référence de la turbine... 68	
Figure II-4	: (a) Champs du déséquilibre équiangulaire-(b) Raffinement du maillage . 68	

Figure III-1	: Sphère dans un écoulement soumise aux forces de traînée, de portance et au couple	74
Figure III-2	: Variations du coefficient de traînée d'une sphère en fonction de Re.....	75
Figure III-3	: Sphère et son sillage.....	77
Figure III-4	: Photos de TANEDA (1956) Développement du sillage à l'arrière d'une sphère pour différents nombres de Reynolds	77
Figure III-5	: Types d'échanges cinétiques dans une cuve agitée	79
Figure III-6	: Schéma de la microélectrode.....	82
Figure III-7	: Position angulaire de la microélectrode	82
Figure III-8	: Dispositif de mesure par la sonde sphérique.....	83
Figure III-9	: Profils typiques des vitesses radiales des turbines RT et NS dans le plan entre deux pales ($x = y$) pour des viscosités de $2 Pa.s$ et $1,2 Pa.s$..	88
Figure III-10	: Distribution du taux de cisaillement pour RT et NS dans le plan de	

	turbine et pour des viscosités de $1,2 Pa.s$ et $2 Pa.s$ en écoulement quasi-laminaire. Caractérisation des zones de forte intensité pour les deux turbines.....	88
Figure III-11 :	Champs du cisaillement en (s^{-1}) des deux turbines pour $\mu = 1 Pa.s$	89
Figure III-12 :	Distribution des taux de cisaillement des deux turbines pour $\mu = 1 Pa.s$ et $N = \pm 600 rpm$	90
Figure III-13 :	Distribution des taux de cisaillement des deux turbines en fonction de la hauteur z . (les couleurs n'ont pas de signification importante).....	91
Figure III-14 :	Modèle de simulation et contours du taux de cisaillement en ks^{-1} autour de la sonde sphérique obtenus par CFD pour RT et un fluide suivant une loi de puissance.....	93
Figure III-15 :	Génération par la CFD du taux de cisaillement en fonction de la viscosité par la CFD en écoulements laminaires (moy.volumiques).....	95
Figure III-16 :	Positions observées pendant l'expérience et utilisées pendant le calcul par CFD	95
Figure III-17 :	Taux de cisaillement dans les écoulements suivants la loi de puissance Correspondant (LP) pour les deux turbines et $n = 0,4$ et $K \approx 0,3 Pa.s^n$...	96
Figure III-18 :	Comparaison des aires d'équipotentiels en fonction du taux de Cisaillement ($2 Pa.s$ et $Re=100$).....	97

Figure IV-1 :	Cuve et plans des vues.....	100
Figure IV-2 :	Profils des concentrations en X , S , O_d et P pour les modèles de Contois et de Monod obtenus par Maple	107
Figure IV-3 :	Echanges entre pseudo-réacteurs élémentaires adjacents	109
Figure IV-4 :	Champs des vitesses vectorielles des deux phases (pseudo-laminaire) ...	112
Figure IV-5 :	Champs des vitesses scalaires des deux phases (pseudo-laminaire).....	112
Figure IV-6 :	Fractions volumiques de la phase gazeuse au niveau de la turbine et du distributeur d'oxygène en bulles.....	113
Figure IV-7 :	Courbe de saturation de la phase liquide en oxygène dissout	114
Figure IV-8 :	Injection de l'échantillon et convection.....	115
Figure IV-9 :	Champs des concentrations volumiques des quatre scalaires X , S , O_d et P (fin de fermentation).....	116
Figure IV-10 :	Profils des moyennes volumiques des quatre scalaires X , S , O_d et P ..	117
Figure IV-11 :	Equipotentiels caractérisant les zones mortes de la cuve.....	118
Figure IV-12 :	Champs des vitesses vectorielles des deux phases (pseudo-turbulent) ...	126
Figure IV-13 :	Distribution de la vitesse des deux phases sur un plan vertical	

	(pseudo-turbulent).....	126
Figure IV-14	: Champs de l'énergie turbulente k_L et son taux de dissipation ε_L dans différents plans de la cuve.....	127
Figure IV-15	: Distribution de l'énergie turbulente k_L dans un plan vertical	127
Figure IV-16	: Distribution du taux de dissipation ε_L dans un plan vertical	128
Figure IV-17	: Distribution de la viscosité turbulente μ_t dans un plan vertical.....	128
Figure IV-18	: Couplage entre la bio-réaction et l'écoulement	129

Figure V-1	: Dispersion de la phase gazeuse en fonction de la vitesse et du débit	133
Figure V-2	: Illustration de la méthode des deux films	137
Figure V-3	: Illustration de la méthode de pénétration de Higbie.....	138
Figure V-4	: Champ des valeurs de la dissipation visqueuse ε_L	142
Figure V-5	: Fractions volumiques de la dissipation ε_L	142
Figure V-6	: Champ des valeurs du coefficient de transfert k_l	143
Figure V-7	: Fractions volumiques du coefficient de transfert k_l	143
Figure V-8	: Champ des valeurs de la surface volumique d'échange a	144
Figure V-9	: Fractions volumiques de la surface volumique d'échange a	144
Figure V-10	: Champ des valeurs du coefficient volumique d'échange $k_l a$	145
Figure V-11	: Fractions volumiques du coefficient volumique d'échange $k_l a$	145
Figure V-12	: Les équipotentielles $k_l a = Constante$ pour les valeurs : 0,2000 ; 0,1000 ; 0,0500 ; 0,0400 ; 0,0200 ; 0,0190 ; 0,0180 ; 0,0175 ; 0,0160 ; 0,0160 ; 0,0150 ; 0,0140 ; 0,0130 ; 0,0120 et 0,0110 s^{-1}	146
Figure V-13	: Valeurs médianes des champs de ε_L , k_l , a et $k_l a$	148

Figure VI-1	: Evolution du champ des vitesses des deux phases en fonction de la viscosité μ_L de la phase liquide continue ($0,0015 < \mu_L < 0,1$) $Pa.s$	154
Figure VI-2	: Evolution du champ de ε_L en fonction μ_L ($0,001 < \mu_L < 0,583$) $Pa.s$	156
Figure VI-3	: Champ des valeurs de k_l en fonction de μ_L ($0,001 < \mu_L < 0,583$) $Pa.s$	156
Figure VI-4	: Champ des valeurs de a en fonction de μ_L ($0,001 < \mu_L < 0,583$) $Pa.s$	157
Figure VI-5	: Champ des valeurs de $k_l a$ en fonction de μ_L ($0,001 < \mu_L < 0,583$) $Pa.s$..	157

Figure VI-6 : Evolution des fractions volumiques de ε_L pour de μ_L ($\mu_0 < \mu_L < 10\mu_0$) ..	158
Figure VI-7 : Evolution des fractions volumiques de k_l pour de μ_L ($\mu_0 < \mu_L < 10\mu_0$) ...	159
Figure VI-8 : Evolution des fractions volumiques de a pour de μ_L ($\mu_0 < \mu_L < 10\mu_0$) ...	159
Figure VI-9 : Evolution des fractions volumiques de $k_L a$ pour de μ_L ($\mu_0 < \mu_L < 10\mu_0$)	160

Figure VII-1 : Injection de l'échantillon et convection.....	166
Figure VII-2 : Fin de fermentation: Champs des quatre constituants X , S , O_d et P ...	167
Figure VII-3 : Distribution des fractions volumiques de ε_L , k_l , a et $k_l a$ en début et Fin de la fermentation.....	168
Figure VII-4 : Médianes de ε_L , k_l , a et $k_l a$ en début de fermentation	169
Figure VII-5 : Evolution du taux de cisaillement pendant la fermentation (Contois).....	170
Figure VII-6 : Evolution de ε_L , k_l , a et $k_l a$ pendant la fermentation (Contois).....	171
Figure VII-7 : Profil de μ_x et r_x pendant la fermentation (Contois).....	172
Figure VII-8 : Profil des quatre scalaires X , S , O_d et P pendant la fermentation (Contois).....	173
Figure VII-9 : Evolution de la viscosité pendant la fermentation(Contois).....	174
Figure VII-10 : Profil de la viscosité du milieu en fonction de la concentration volumique moyenne en culture(Contois).....	174
Figure VII-11: Evolution du taux de cisaillement pendant la fermentation (Monod).....	176
Figure VII-12: Evolution de ε_L , k_l , a et $k_l a$ pendant la fermentation (Monod).....	177
Figure VII-13: Profil de μ_x et r_x pendant la fermentation (Monod).....	178
Figure VII-14: Profil des quatre scalaires X , S , O_d et P pendant la fermentation (Monod).....	179
Figure VII-15: Evolution de la viscosité pendant la fermentation (Monod).....	180
Figure VII-16 : Profil de la viscosité du milieu en fonction de la concentration volumique moyenne en culture (Monod).....	180

Figure VIII-1: Perspectives d'évaluation du modèle en fonction de la vitesse d'agitation et du débit d'oxygène gazeux.....	187

Liste des tableaux

Tableau III-1: Comparaison des valeurs du taux de cisaillement obtenues par mesure expérimentale et par CFD pour une turbine Rushton.....	87
Tableau III-2: Comparaison des résultats expérimentaux et numériques(CFD) pour une turbine Rushton au niveau de la turbine et de la sonde.....	92
Tableau III-3: Comparaison sélective des deux turbines par le taux de cisaillement dans les écoulements suivants une loi de puissance.....	96

Tableau IV-1: Les quatre étapes du traitement en écoulement « laminaire » avec k_1a et viscosité constants.....	110
Tableau IV-2: Les quatre étapes du traitement dans le cas de l'écoulement « turbulent » ..avec k_1a et viscosité constants.....	123
	124

Tableau VI-1: Pourcentage des zones mortes en fonction de la viscosité	160

Tableau VII-1: Pas temporel adopté pour les quatre étapes dans le modèle intégral.....	164

NOMENCLATURE

Symboles latins

a	: Aire volumique de la surface d'échange.....	m^2 / m^3
B	: Largeur des chicanes en cuve standard.....	m
C	: Côte de la position d'une turbine en cuve standard.....	m
C_D	: Coefficient de traînée.....	1
$C(t)$: Concentration d'un traceur à l'instant t	kg / m^3 (g / l)
d, d_G	: Diamètre (unique) des bulles de la phase gazeuse.....	m
D	: Diamètre d'une turbine en cuve standard.....	m
D	: Diffusivité moléculaire.....	m^2 / s
$E(t)$: Distribution des temps de séjour à l'instant t	1
H	: Hauteur d'une cuve standard.....	m
k_l	: Coefficient de transfert de masse.....	m / s
$k_1 a$: Coefficient volumique de transfert de masse.....	$1 / s$ ou (1 / h)
k_L, k_G	: Energie cinétique turbulente d'un fluide en écoulement...	m^2 / s^2
K_S	: Affinité de la culture au substrat.....	1
K_{O_d}	: Affinité de la culture à l'oxygène dissout.....	1
L	: Longueur de pale d'une turbine en cuve standard.....	m
L_f	: Echelle de longueur de la turbulence.....	m
N_G	: Densité de flux molaire.....	$mol / (m^2 . s)$
N	: Vitesse de rotation d'une turbine.....	rad / s ou (rpm)
O_d	: Concentration en oxygène dissout.....	kg / m^3 (g / l)
O_d^*	: Concentration de saturation en oxygène dissout.....	kg / m^3 (g / l)
P	: Concentration en produit.....	kg / m^3 (g / l)
p	: Pression en un point donné ou globale.....	Pa
Q, Q_g	: Débit volumique de gaz.....	m^3 / s
R_c	: Terme source/puit dans l'équation de transport du scalaire c	quantité / kg

r_c	: Vitesse d'accroissement de la concentration du scalaire c	$(kg/m^3)/s$ $(g/l)/s$
S	: Concentration en substrat.....	kg/m^3 (g/l)
t_s	: Temps de séjour.....	s
T	: Diamètre d'une cuve standard.....	m
$\overline{u'}, \overline{u'_x}$: Fluctuation de la vitesse.....	m/s
$\overline{U_G}, \overline{U_L}$: Vitesse moyenne locale du liquide et du gaz.....	m/s
V	: Volume d'une cuve (d'un réacteur).....	m^3
$\overline{v_L}, \overline{v_G}$: Vecteur vitesse du fluide liquide L ou gaz G.....	m/s
V_s	: Vitesse superficielle du gaz.....	m/s
W	: Largeur de pale d'une turbine en cuve standard.....	m
X	: Concentration en culture.....	kg/m^3 (g/l)

Symboles grecques

α_L, α_G	Fraction volumique du liquide L, du gaz G.....	1
$\varepsilon_L, \varepsilon_G$	Taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente d'un liquide ou un gaz en écoulement.....	m^2/s^3
$(\varepsilon_{ij}), (\dot{\gamma}_{ij})$	Tenseur des déformations dans un fluide en écoulement....	$1/s$
$\dot{\gamma}$	Taux du cisaillement et sa dérivée.....	$1/s$
Φ	Dissipation visqueuse de l'énergie cinétique turbulente.....	$1/s^2$
μ	Taux de croissance de la culture (vitesse spécifique de croissance).....	$1/s$ ou $1/h$
μ	Viscosité dynamique d'un fluide.....	$Pa.s$
μ_c	Viscosité dynamique de la phase continue	$Pa.s$

μ_L, μ_G	Viscosité dynamique du fluide : liquide L, du gaz G.....	$Pa.s$
$\mu_m; \mu_{max}$	Taux maximal de croissance de la culture.....	$1/s$ ou $1/h$
$\mu_t; \mu_{eff}$	Viscosité turbulente, viscosité effective (dynamique).....	$kg/(m.s)$
ν	Viscosité cinématique.....	m^2/s
Θ	Temps d'extinction de la turbulence.....	s
θ_s	Angle de décollement d'un sillage autour d'une sphère.....	$(^\circ)$
τ	Contrainte de cisaillement.....	N/m^2
(τ_{ij})	Tenseur des contraintes dans un fluide en écoulement.....	N/m^2
ρ_L, ρ_G	Masse volumique du liquide L, du gaz G.....	kg/m^3
ρ_C	Masse volumique de la phase continue.....	kg/m^3
(ω_{ij})	Tenseur des taux de rotations dans un fluide.....	$1/s$

Grandeurs adimensionnelles

Re	Nombre de Reynolds (pour une cuve agitée).....	$Re = \frac{\rho ND^2}{\mu}$
----	--	------------------------------

Abréviations

CFD	Computational Fluid Dynamique (Mécanique des Fluides Numérique)
CAO	Construction Assistées par Ordinateur
CF	Conditions aux Frontières
CI	Conditions Initiales
CMC	Carboxymethyl cellulose
DTS	Distribution des Temps de Séjour
ED	Equations Différentielles
EDP	Equations aux Dérivées Partielles
GDP	Génie Des Procédés
GDPA	Génie Des Procédés Alimentaires
NS	Turbine NARCISSE
rpm	rotation(s) par minute
rps	rotation(s) par seconde
RANS	Reynolds-Averaged Navier Stokes equations
RT	Turbine RUSHTON
SD	Système Différentiel
UDF	User Defined Function (Fonction définie par l'utilisateur)

INTRODUCTION

L'activité virtuelle est de plus en plus présente et de plus en plus considérée comme composante de la vie. Pourtant, celle-ci n'est souvent que **simulation** partielle de la réalité avec un certain degré de perfection ou extrapolation de notre imaginaire que nous mettons en images pour mieux les vivre. Toutefois, on tire de plus en plus de satisfaction de cet aspect virtuel allant jusqu'à le faire coïncider avec le réel comme dans les interventions chirurgicales à distance. C'est dire tout l'intérêt que comporte cette « **virtualisation** » de notre quotidien dans son vaste spectre d'applications tant ludiques que fonctionnelles ou économiques. La tendance actuelle à plus d'économie et moins de pollution favorisera le développement de cette activité immatérielle dotée de qualités économiquement très porteuses.

Les cartes des bulletins météorologiques ainsi que les images tomographiques, fruits de longs calculs numériques sur de puissantes machines, constituent des simulations prédictives, productives d'informations pour les premières et des intrusions « logicielles » reconstitutives de l'intérieur d'un milieu à travers sa frontière pour les secondes. Les calculs, objet de ces démarches, portent sur la résolution d'équations traduisant l'activité désirée. Ces exemples, parmi d'autres, permettent, à travers une ou plusieurs simulations, souvent à moindre coût, de contribuer à la prise de décisions importantes lors de l'étude d'un projet. Ces simulations numériques sont devenues un enjeu majeur dans la phase de conception d'un grand nombre de produits évoluant en présence de fluides (transport spatial, aérien et maritime; écoulements naturels, urbains ou confinés; cuves et conduites de transports de fluides,...etc...).

En industrie en général, et en biotechnologies en particulier, ces simulations peuvent être mises en œuvre avant la naissance du chantier de production pour contribuer à l'élaboration d'une activité optimale ou pendant cette dernière pour bien conduire le processus productif, voire en éviter les dérives inutiles ou dangereuses.

Ainsi les réacteurs, les fluides et les procédés peuvent être modélisés et simulés pour livrer quelques secrets qui peuvent être déterminants pour les choix à faire ou les décisions à prendre.

Cette recherche d'informations a toujours existé et prend de plus en plus d'importance avec le développement de l'informatique et la démocratisation du coût du calcul et de son support. Le rendu d'un **calcul manuel** par la résolution d'une équation algébrique, différentielle ou aux dérivées partielles, lors de la résolution (toujours simulatrice) d'un problème, longtemps satisfaisante, se trouve largement dépassée par le grand potentiel calculateur d'un ordinateur de salon supportant un modèle mathématique suffisamment performant. Cette puissance de traitement incite à la recherche et la mise en œuvre de modèles plus performants et plus pertinents dans leurs interprétations des phénomènes étudiés.

Ce travail s'inscrit, au sein des activités du Génie des Procédés (GDP), dans le cadre des recherches concernant la modélisation et la simulation des réacteurs biocatalytiques. Dans ce mémoire, après une analyse bibliographique du problème, nous allons tout d'abord vérifier la validité de la méthode utilisant la CFD (Computational Fluid Dynamic) ou MFN (Mécanique/Dynamique des Fluides Numérique) pour déterminer le gradient de vitesse et donc les contraintes de cisaillement dans une cuve mécaniquement agitée. Nous examinerons les résultats ainsi élaborés et nous les comparons à ceux obtenus par une méthode expérimentale électrochimique. La connaissance du cisaillement, et de la contrainte de cisaillement en amont, est d'une première importance dans la caractérisation du mélange ainsi que pour le développement des cellules bactériennes dans le cas d'une fermentation et par ailleurs dans d'autres applications.

La CFD, essentiellement axée sur la résolution d'un ensemble d'équations aux dérivées partielles et/ou différentielles et/ou algébriques sur un domaine donné, est de plus en plus présente, ces dernières années, dans les études de projets en compétition avec la DTS (Distribution des Temps de Séjour). Cette dernière opère de façon moins énigmatique en considérant les deux situations extrêmes (le réacteur piston et le réacteur infiniment mélangé) et modélise un réacteur réel donné dans une approche développée autour d'eux. La DTS, longtemps pratiquée, a atteint un haut degré de développement en puisant ses moyens dans des concepts théoriques assez

pointus. La CFD, quant à elle, longtemps réduite dans ses applications dans des cas marginaux ou des situations simplifiées, s'est vu portée au devant par l'essor informatique et le développement de moyens de calcul, tant séquentiel, que vectoriel ou parallèle. La recherche croissante de vitesse d'exécution motive le développement d'algorithmes et processeurs dédiés à ce type de calcul. Les problèmes d'algèbre linéaire, d'optimisation, de résolution d'équations différentielles ou aux dérivées partielles et toute situation mettant en œuvre ces méthodes numériques, comporte souvent de façon intrinsèque du parallélisme. Depuis les années quatre-vingt, les recherches concernant ces domaines ont pris de plus en plus d'importance.

L'ambition de ce mémoire est de proposer une mise en chiffres, graphiques et images de l'activité interne à un réacteur agité dans lequel se développe un échantillon d'une culture localement injecté. Les aspects matériels (cuve et ustensiles), hydrodynamiques (écoulement diphasique visqueux avec échange massique), biologiques (échantillon: injection, développement, évolution) sont abordés au fur et à mesure et intégrés à la fin en une seule opération permettant cette approche simulatrice de la bio-réaction dans son ensemble par la CFD.

Ce mémoire est constitué de sept chapitres dont les objectifs s'échafaudent progressivement vers l'élaboration d'un modèle de « **fermentation numérique** ».

Le premier chapitre détaille les motivations particulières de l'étude, propose une analyse bibliographique qui présente et discute les travaux antérieurs à la présente contribution.

Le deuxième chapitre est dédié à la présentation du dispositif expérimental et aux aspects hydrodynamique, biologique, mathématique et informatique du problème.

Le troisième chapitre, est consacré à la validation de la méthode utilisée. Il propose l'évaluation numérique du cisaillement et la comparaison de ses résultats avec des données expérimentales précédemment établies, ainsi qu'une comparaison de deux turbines à travers leurs effets dans un réacteur.

Un modèle simplifié d'une fermentation numérique, conforme à des données expérimentales, est présenté dans le quatrième chapitre et dans lequel le couplage écoulement-réaction est réduit au **transport convectif** des constituants du mélange en régimes « laminaire » puis « turbulent ».

L'échange massique gaz-liquide est abordé dans le cinquième chapitre et installé, par le biais de la turbulence, l'influence de l'hydrodynamique de l'écoulement sur la réaction biologique.

L'influence réciproque, de l'évolution de la bio-réaction sur l'écoulement, abordée dans le sixième chapitre, est implémentée par le biais de la viscosité du milieu qui est variable en fonction de sa concentration en biomasse.

Le septième et dernier chapitre est consacré à l'exécution du modèle numérique final intégrant, aussi bien la convection, que les deux volets direct et réciproque de l'interaction écoulement-bioréaction et à la génération des résultats justifiant cette interaction.

Ce modèle, endossant l'écoulement lui-même, suppose un développement de la culture selon le schéma de Contois ou de Monod et propose donc une comparaison plus réaliste entre eux.

A l'heure actuelle, les travaux de ce genre sont au stade de développement et seront appelés à s'intensifier pour traiter les nombreuses situations qui se présentent, aussi bien industrielles qu'environnementales (traitement des eaux et des déchets par exemple).

Une conclusion clôt ce mémoire par un commentaire de son contenu et des perspectives qui en découlent.

CHAPITRE I

ETAT DE L'ART et POSITION DU PROBLEME

Le développement et la modélisation expérimentale et mathématique des procédés biocatalytiques est une activité qui fait partie du génie des procédés biologiques. Elle permet l'élaboration, l'étude et l'extrapolation de techniques et maquettes de laboratoire vers des outils de production du monde industriel. Le génie des procédés biologiques (GDPA) peut être défini, dans une première approche, comme l'application des principes du génie chimique aux procédés de transformation de la matière par des catalyseurs biologiques, qu'ils soient enzymatiques ou cellulaires. D'un point de vue plus fondamental, la démarche envisagée nécessite la compréhension des phénomènes et des processus de base, liés d'une part, aux concepts mécaniques (écoulements, transfert de matière et de chaleur, cisaillement, extraction,...) et, d'autre part, aux matériels biologiques (structure des bio-molécules, voies métaboliques intracellulaires, propriétés physico-chimiques des constituants des milieux réactionnels,...)

L'étude vise plus particulièrement les milieux hétérogènes réactionnels aérobies utilisant une culture libre (un système gaz-liquide). Cette analyse s'intéresse à la modélisation des phénomènes de transfert et d'écoulement ainsi qu'à leur impact sur la cinétique de production. Les résultats attendus visent aussi à diminuer les temps de mise au point de tels procédés à l'échelle industrielle. Le bio-réacteur doit, pour sa part, permettre d'augmenter les performances de production tout en répondant aux critères d'extrapolation industrielle et de qualité du produit. Le niveau optimal de sophistication du procédé sera également à confronter au niveau de fiabilité et de sécurité souhaitées.

I- REACTEUR, BIO-REACTION, DTS ET CFD EN GDP :

De la simple mais agréable activité d'une cuisine à l'industrie sophistiquée des produits pharmaceutiques ou autres arômes et peintures, les réactions chimiques et/ou biologiques sont au cœur de ces processus. Alors qu'une réaction chimique concerne des représentants de la matière inerte dans leurs transformations, une bio-réaction s'organise autour de la vie et du développement d'organismes vivants. Ceux-ci sont fournis en nutriments et éventuellement en oxygène pour les réactions aérobies. Un vrai

élevage qu'il faut entretenir et surveiller. L'objectif de cet élevage est la transformation d'un composant en un autre ou la synthèse d'un produit doté d'une certaine utilité. La qualité de vie de ces organismes dans les réacteurs est recherchée dès la conception même de ces derniers. Le recours d'une part, à une agitation mécanique dans la plupart des situations et/ou par injection gazeuse dans d'autres cas, et d'autre part, à l'adjonction d'autres ingrédients ou moyens (tels les catalyseurs, le conditionnement informatique,...etc....) confirment cette volonté d'offrir et de contrôler ce bien-être à ces organismes. L'évolution qualitative et quantitative de cette population transforme les caractéristiques hydrodynamiques et thermodynamiques de son lieu de vie (le réacteur et surtout l'écoulement dont il est le siège) dans sa composition et ses caractéristiques physico-chimiques (masse volumique, viscosité, température, inhibiteurs,...etc,...) et dont les conséquences peuvent être nocives pour son développement. Les évolutions des grandeurs thermiques, dont l'impact ne peut être toujours négligé aussi bien sur l'agitation que sur les cellules vivantes, ne sont pas considérées dans la présente étude.

Lors de la conception d'un projet en biotechnologies, la démarche méthodologique consiste à recenser le plus de facteurs possibles concernant la culture, le réacteur et la réaction; procéder par des étapes souvent répétitives, d'étude, d'expérimentation en laboratoire et d'analyse des résultats afin d'élaborer un réacteur techniquement et économiquement optimal pour la production. On constate, à travers la littérature que, malgré cette démarche, les résultats de la production ne sont pas toujours en adéquation avec les prévisions avancées. L'accompagnement de la production en chimie par exemple, d'une maquette chaude est souhaité pour la réalisation d'essais lors de changements dans les matières premières par exemple .

Cette démarche d'élaboration du réacteur adéquat s'est enrichie par la simulation de l'écoulement interne à celui-ci depuis l'avènement des ordinateurs et le développement des méthodes numériques pour la résolution des équations de la mécanique des fluides. La simulation permet la récupération d'un volume de données importantes pour l'étude. Antérieurement à la CFD, la cuve tenait lieu de boîte noire et seul le volet biologique était étudié par le biais des caractéristiques des débits des entrées/sorties ou des prélèvements internes. Avec l'arrivée de la CFD, l'écoulement interne au réacteur était pris en compte, sous une forme monophasique homogène au départ, pour prendre actuellement en considération sa réalité multiphasique et hétérogène. Cette évolution était précédée par l'élaboration, lente et ardue, de la théorie du mélange de fluides et des

concepts mécaniques et mathématiques qui la soutiennent. La lecture d'articles, tels que [1,2,3], éclaire sur le chemin parcouru dans l'élaboration des équations régissant les écoulements de ce type et tout particulièrement au niveau des phénomènes survenant au niveau de l'interface. En effet, les études des milieux multiphasiques remontent à la période précédant l'avènement de la puissance informatique pour bien s'installer et se développer dans les années soixante-dix (comme rapporté dans[4]) et déboucher sur des formalismes actuels [4,5], encouragés dans ce progrès par la croissance de la vitesse de calcul et des possibilités de stockage des données. Les formalismes mathématiques courants, dépourvus de leur histoire et contexte mathématique de base, paraissent assez accessibles. Les besoins environnants ne cessent de mettre à l'avant de la scène des situations impliquant des mélanges de ce genre. On s'intéresse de plus en plus aux milieux gazeux humides, fluides poussiéreux ou aérés, ainsi qu'au transport de matière, chaleur ou aux processus réactifs dont la réussite dépend de la qualité du contact entre réactants. Les divers phénomènes rencontrés dans les écoulements, à travers leurs concepts fondamentaux [6,7,8,9,10], leur constitution [4], nature [11] et utilisation en génie chimique [5,12] ou électrochimique [13] parmi d'autres domaines, de pollution des milieux atmosphériques et marins, de fonte des glaciers et de circulation sanguine sont aussi une cause de cet intérêt pour les mélanges afin de cerner leur progression et leurs interactions. Le suivi des courants marins ou fluviaux, des tsunamis ou autres solitons hydrodynamiques, des avalanches en montagne ou des vents de sables sont aussi d'autres applications sans oublier les besoins quotidiens en informations météorologiques. Le volume de la partie purement solide de l'espace vital de l'homme sur terre, ne représente qu'une petite part, face à la prépondérance du reste qui est fluide. La CFD n'est-elle pas par essence un fiable générateur d'informations de ce type de milieu ? Par ailleurs, les besoins croissants en eau potable incitent au dessalement d'eau de mer et au traitement des eaux usées [14,15,16] et donc la prise en compte de leur caractère hétérogène à la base et propice au développement de bactéries. Ces mêmes bactéries qu'on utilise dans le traitement de l'eau tout en contrôlant le processus.

1°/ Réactions biologiques aérobies:

Une des motivations du présent travail est de considérer un écoulement dans le réacteur sous une forme au moins **diphasique** avec présence d'échange entre les deux phases. L'apport d'oxygène dissout par le biais d'une phase gazeuse dans un milieu liquide répond à ce besoin; ce qui a initié le choix de réactions aérobies

comme support de l'étude. Quelques aspects des mélanges multiphasiques se trouvent abordés et côtoient ceux des réactions biologiques plus détaillés, comme dans [17,18]. L'élément central de l'échange entre les phases est formé par les interfaces entre celles-ci et le transfert massique parmi d'autres, y est dépendant de l'hydrodynamique; mais seul l'un des deux sens de ce transfert (du gaz vers le liquide) reste prépondérant et nous concerne ici. Cet échange nécessite, pour être optimal, d'éviter la saturation locale et stagnante en oxygène dissout au voisinage de l'interface. Pour cela, le recours à une agitation suffisamment intense déjoue l'aspect laminaire de l'écoulement et garantit le renouvellement des couches fluides qui lui sont voisines. Les turbulences locales ainsi créées entretiennent aussi la présence de bulles de gaz, empêchent leur coalescence (phase dispersée sous forme de bulles d'air ou d'oxygène) et favorisent donc cet échange. Les caractéristiques de la turbulence de l'écoulement dans le réacteur se trouvent prises en compte dans la modélisation de cet échange et avec insistance récemment. Ces aspects sont étudiés dans la littérature [19,20,21,22] et seront partiellement repris au chapitre V.

Dans le cas théorique d'un milieu réellement multi-espèces, homogène en chacun de ses constituants, "hydrodynamiquement" monophasique -cas loin d'être réel-, l'établissement d'un modèle biologique qui traduit l'évolution d'une culture dans ce milieu se trouve simplifié. De tels modèles, développés depuis longtemps, se trouvent dans [17,18,23] et quelques-uns seront rappelés au chapitre IV.

Le cisaillement dans un écoulement, différence fondamentale avec l'état solide de la matière, participe à la qualité du mélange du milieu par le renouvellement des couches autour des bulles, la réduction de leurs tailles, et dans l'homogénéisation ainsi que d'autres effets. Son évaluation est donc très importante aussi bien du point de vue hydrodynamique que pour le développement des cellules bactériennes. Elle se trouve abordée au chapitre III dans le cadre comparatif de sa génération par deux turbines différentes. Le cisaillement et son taux forment l'emprunte d'une source d'agitation dans un fluide en écoulement. Son évaluation peut caractériser sélectivement cette source cinétique (au sens mécanique du terme)

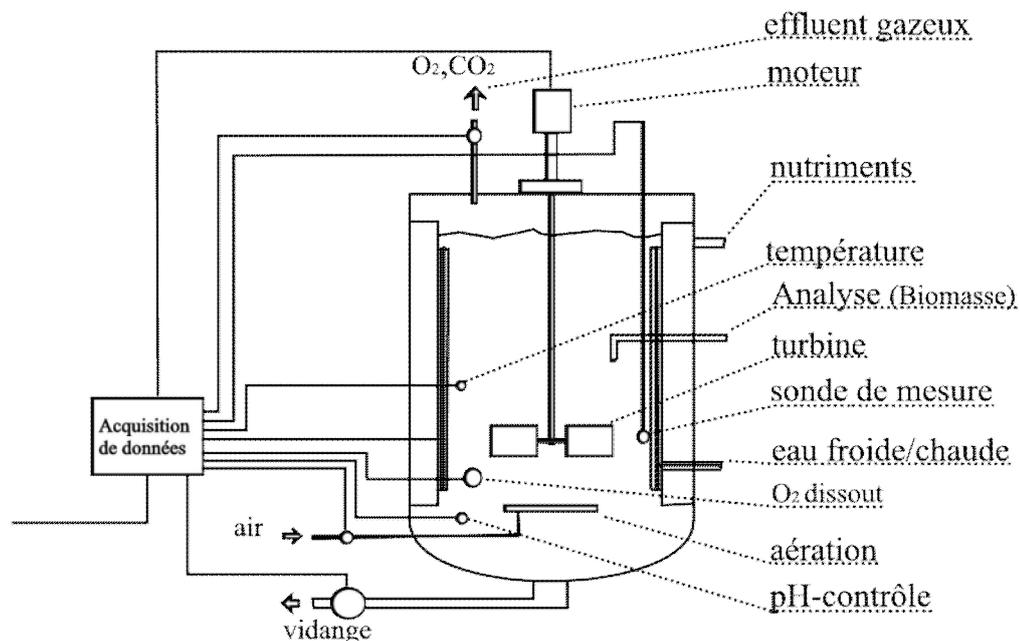
La réalité multiphasique des mélanges, la géométrie des réacteurs ainsi que les sources d'agitation et les divers capteurs ou autres corps qui y sont immergés, font qu'une homogénéisation parfaite n'est jamais atteinte et une attention particulière est accordée aux gradients des divers constituants et grandeurs impliqués. Leur évolution dynamique influe sur les caractéristiques locales de l'écoulement. Les champs des

vitesse, des concentrations, de cisaillement, de taux et de densités d'autres grandeurs seront souvent recherchés dans ce travail. Leur élaboration se fait par calculs sur la base des données générées par la CFD.

2°/ Les réacteurs et leurs conditionnements :

Pour des raisons de spécificité ou de moyens d'une production donnée, on utilise un (ou des) réacteur(s) adapté(s) dont le dimensionnement a été étudié selon une méthodologie [24,25] qui reste en deçà des objectifs attendus, mais qui ne semble pas toujours respectée. On adopte et adapte des solutions offertes par le marché.

Ainsi, on rencontre dans le commerce, et par là en activité, une large gamme de différents réacteurs dans leurs conceptions géométriques et constitutives, leurs systèmes d'agitation, d'aération, de réchauffement/refroidissement, leurs systèmes d'alimentation/soutirage, leur conditionnement électronique et informatique et qu'on trouve largement détaillés dans [26,27]. Un schéma sommaire d'un réacteur équipé pour une bio-réaction aérobie, se trouve présentée dans la figure I-1.



Réacteur et son conditionnement de contrôle

Figure I-1

Pour les objectifs visés dans cette étude, on utilise un réacteur agité par un mobile et aéré par un anneau. Il constitue un tremplin pour la mise en œuvre d'un

modèle numérique traduisant l'évolution de la réaction biologique elle-même et son interaction avec l'écoulement et l'aération du milieu de la culture.

Par ailleurs, le recours aux coefficients globaux constants tels le coefficient k_1a joue un rôle simplificateur dans la résolution du modèle biologique qui le contient. Ce nombre unique, qu'on « charge » de l'échange massique dans l'ensemble de la cuve et à tout instant de la durée de l'opération, est loin de représenter cet échange qui ne se déroule pas de la même façon dans tous les points de la cuve. La rétention gazeuse et par conséquent la surface volumique d'échange ne sont pas homogènes dans le réacteur. Le transfert massique est donc supporté par un champ, éventuellement constant s'il y a homogénéité multiphasique parfaite, ce qui n'est jamais réalisé dans la pratique. L'étude s'intéresse à une prise en considération de cet aspect local de ce coefficient à l'intérieur de la cuve et en fonctions de données locales aussi.

Le réacteur utilisé ici, soit pour réaliser des réactions biologiques, soit pour dérouler des simulations numériques en vue d'autres objectifs, est un réacteur standard dont les caractéristiques sont les suivantes :

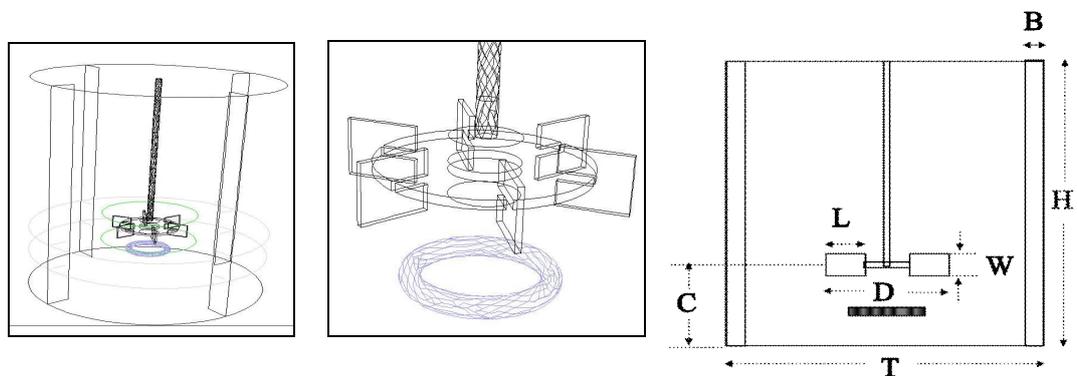


Figure I-2 : Cuve avec une turbine Rushton et un anneau d'injection de gaz.

Il s'agit d'une cuve cylindrique chicanée, à fond plat, de diamètre T , de hauteur H tels que $\frac{H}{T} = 1$. Elle comporte 4 chicanes de largeur B telle que $\frac{B}{T} = \frac{1}{10}$ et qui ne présentent pas de jour par rapport à la paroi externe de la cuve. La turbine d'agitation, de diamètre D , est située à la hauteur C du fond avec $\frac{C}{D} = 1$ et $\frac{D}{T} = \frac{1}{3}$. Elle est entraînée par un arbre sur lequel est fixé un moteur placé au dessus de la cuve. La turbine comporte un disque sur lequel sont montées 6 pales.

L'ensemble de l'étude concerne des cuves agitées par une turbine Rushton à pales rectangulaires verticales [de largeur W et de longueur $L = 2W = \frac{D}{4}$], excepté une partie concernant une comparaison entre celle-ci et une autre turbine particulière à pales courbes profilées, la turbine Narcisse.

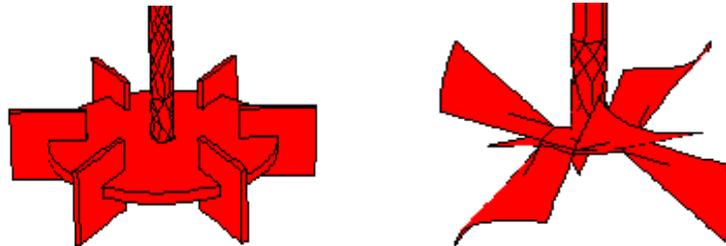
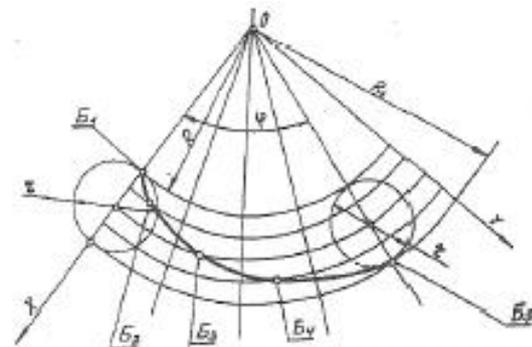
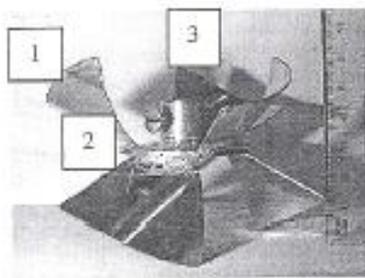


Figure I-3: Turbine Rushton (RT) Turbine Narcisse (NS)

La figure I-3 présente ces deux turbines et la figure I-4 présente, parmi les détails de la turbine Narcisse, le profil épicycloïdal externe de ses pales. Les caractéristiques géométriques de cette dernière se trouvent dans [28,29,30]. Cette comparaison entre ces deux turbines est faite ailleurs dans des conditions opératoires semblables.



Фиг. 4-77 Эпициклоида

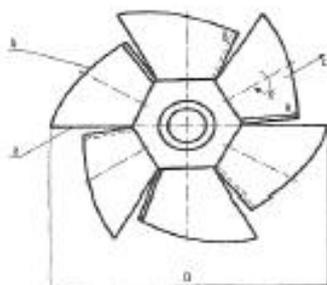


Figure I-4: Détails de la turbine NARCISSE

3°/ La DTS et la CFD :

Précédant la **CFD**, la **DTS** a été largement utilisée pour étudier les écoulements aussi bien dans les réacteurs que dans d'autres situations. Méthodologiquement très différente, la DTS prend en compte la diversité des chemins suivis par des particules ou éléments de volume d'un fluide en écoulement dans le réacteur (un palliatif d'une impossible description lagrangienne intégrale). Elle débouche en conséquence sur les deux situations idéales et non réalistes constituées par le **réacteur piston** et le **réacteur parfaitement mélangé**. Elle opère, pour approcher un réacteur réel, une structuration en une multitude de réacteurs idéaux particularisés connectés entre eux, et rejoint ainsi la CFD en termes de volume de calcul engendré au fur et à mesure qu'on affine cette structuration.

Dans un réacteur piston, les chemins sont tous parallèles et le temps de séjour est unique, alors que dans un réacteur parfaitement mélangé, les longueurs des chemins varient théoriquement entre 0 et l'infini, d'où une distribution (à qui on peut conférer un sens ou une interprétation probabiliste) des temps de séjour sur l'intervalle $[0; \infty[$ qu'on étudie pour appréhender le fonctionnement du réacteur.

Dans sa démarche méthodologique, la CFD prend son point de départ dans l'élément de volume mécanique -suffisamment petit vis-à-vis du réacteur mais suffisamment grand vis-à-vis d'une particule (une molécule)-, l'extrapole à l'élément de volume mathématique et y établit les bilans massique, cinétique et thermique. L'espace du réacteur est ensuite approché par la réunion d'un nombre fini de « solides élémentaires » que sont les entités géométriques d'un maillage et dans lesquels sont exprimés les bilans.

Cette démarche adoptée en mécanique des fluides est celle que l'étude emprunte pour développer le modèle de la réaction biologique en considérant les mailles comme des « pseudo-réacteurs élémentaires ». L'analyse numérique, s'appuyant sur la puissance de calcul des ordinateurs, se charge d'approcher la solution du problème théoriquement généré, et qu'il faut par la suite décortiquer et interpréter. La DTS prend son point de départ dans le réacteur donné lui-même, et qui peut déjà fournir une approximation grossière des activités qui s'y déroulent en le considérant comme homogène (donc idéal), alors que la CFD opère sur les volumes élémentaires pour le reconstruire et synthétiser cette activité.

II- POSITION DU PROBLEME :

L'objectif de ce travail est de disposer du plus possible d'informations pertinentes sur la fermentation qui se déroule dans un réacteur donné. Dans cette opération et depuis le nettoyage de la cuve jusqu'à sa vidange, quelles informations peut-on obtenir par la CFD ? Le contenu de la cuve est formé de plusieurs phases qu'on réduit (volontairement ici) à deux phases hydrodynamiquement distinctes: une phase liquide continue (l'ensemble biomasse, substrat, oxygène dissout et produit: mixture liquide topologiquement continue) et une phase gazeuse (l'air: dont 20% d'oxygène). L'évolution de ce contenu, sur fond de réaction biologique aérobie, implique des cellules cultivées appelées à se multiplier (*Aspergillus Niger*), un nutriment formé par du glucose, et une source de la phase gazeuse apportant l'oxygène nécessaire de l'air en bulles et contribuant à l'agitation de ce mélange; l'essentiel de cette agitation étant assuré par une turbine. L'oxygène dissout transféré de cette phase gazeuse dispersée à la phase liquide assure la respiration des cellules, alors que l'utilité de cette culture réside dans la génération d'un produit (l'acide gluconique). L'étude vise le suivi de chacune des deux phases, de chacun des quatre constituants du mélange dans son évolution aussi bien dans sa répartition géographique ainsi que l'évolution simultanée des caractéristiques de l'hydrodynamique établie dans le réacteur.

Il est à noter que l'influence mutuelle de la nature et des caractéristiques de l'écoulement (laminaire/turbulent/zones mortes) et de l'évolution de la bio-réaction (viscosité de la biomasse) sont déterminants pour le devenir de la culture. La mise en évidence de cette influence est très importante et sera abordée et implémentée, dans ses deux volets, pour aboutir au modèle final :

« Une fermentation numérique dans laquelle, tout en évoluant, l'hydrodynamique de l'écoulement influe sur la bio-réaction et vice-versa ».

III- LES DEMARCHES METHODOLOGIQUES D'ETUDE DES REACTEURS :

1°/ Démarche de la DTS en GDP :

Afin d'appréhender l'activité dans un réacteur, l'hydrodynamique interne à celui-ci impose la considération du déplacement (trajectoire) de toute particule qu'il contient. La prise en compte de ce déplacement, inaccessible lui-même pour plus d'une raison (traduction lagrangienne pratiquement impossible), se fait par le biais de

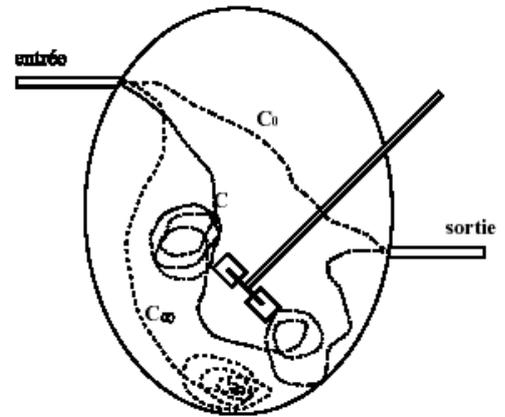
la durée de celui-ci -et par extrapolation aux trajectoires des volumes élémentaires de fluides que le réacteur contient-. Cette durée, qui est le temps de présence dans le réacteur, est nulle pour une particule pratiquement en sortie, et peut être infinie pour une autre transitant par une zone tourbillonnaire globalement immobile ou une zone totalement morte comme le montre la figure I-5.

La **DTS**, introduite par McMullin et Weber en 1935, est développée par P.V. Danckwerts et O. Levenspiel au début des années 1950[31], sous des hypothèses d'écoulement permanent, déterministe, en régime forcé et sans diffusion, occupe un chapitre de l'ouvrage en français de Villiermaux J.[24] dans sa description de l'approche « systémique » d'un réacteur quelconque. Elle se décline à travers une fonction numérique E , de variable positive t_s appelée temps de séjour de particules dans le réacteur. La fonction E , qui est une fonction de pondération, vérifie :

$$\Rightarrow \text{Pour tout temps de séjour possible } t_s \in [0; \infty[, \text{ on a : } 0 \leq E(t_s) \leq 1. \quad (I-1)$$

$$\Rightarrow \text{toutes les particules quitteront le réacteur: } \int_0^{\infty} E(t_s) dt_s = 1. \quad (I-2)$$

Figure I-5: Chemin d'une particule fluide dans un réacteur agité.



$E(t_s)$ est la fraction de fluide du réacteur dont toutes les **particules** ont séjourné le même temps t_s (tous les **éléments de volume fluide** ont séjourné un temps entre t_s et $t_s + dt_s$).

En s'affranchissant de l'hypothèse « déterministe » si le milieu est turbulent par exemple, et en termes de langage des statistiques-probabilités, toutes les particules étant identiques, $E(t_s)$ est la limite des fréquences des groupes de particules ayant eu la même durée de séjour t_s dans le réacteur ou encore densité de probabilité en extrapolant au temps continu et aux éléments du volume de fluide infinitésimaux. Le nombre $\int_{t_1}^{t_2} E(t_s) dt_s$ peut être interprété comme la probabilité, pour une particule ou un élément de volume du fluide, pris au hasard dans le réacteur, d'y séjourner une

durée comprise entre t_1 et t_2 . Comme en témoigne quelques remarques et passages dans [24], parmi les ouvrages traitant de la DTS, cet aspect probabiliste de ce concept n'est pas exploité, mais quelques propriétés y trouvent des significations et des applications telles les moments et les moments centrés.

Le temps de passage $\tau = \frac{V}{Q}$ est aussi la moyenne des temps de séjour (espérance mathématique des temps de séjour) $\bar{t} = \int_0^{\infty} tE(t)dt$ qui est une grandeur accessible de valeur $\tau = \bar{t}$, où V est le volume du réacteur et Q est le débit. La DTS caractérise la durée de la transition par un réacteur et non l'itinéraire emprunté.

Son utilisation dans les études de procédés chimiques [25], électrochimiques [13], biologiques [32] ou d'autres domaines exploitant le traçage, met en avant dans une élaboration théorique, Figure I-6, les deux réacteurs idéaux particuliers, le **réacteur piston (ou tubulaire)** et le **réacteur infiniment mélangé**.

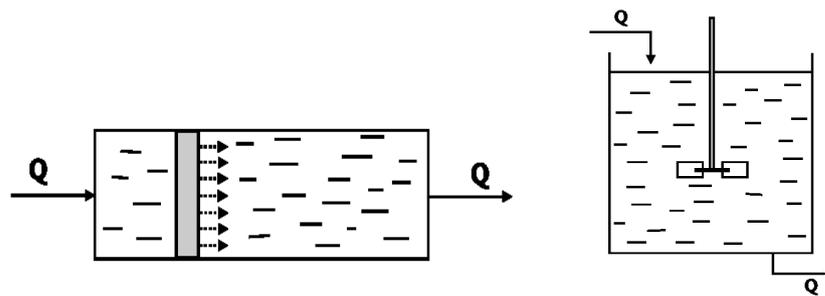


Figure I-6: (a) Réacteur piston (b) Réacteur parfaitement mélangé

Le réacteur piston n'assure qu'un retard unique et identique à toutes les particules. On obtient en sortie le même signal que celui appliqué en entrée après un retard égal au temps de séjour moyen τ ; ainsi pour un signal en entrée du traceur $e(t) = f(t)$, on aura $s(t) = f(t - \tau)$ en sortie. δ étant la distribution (sens mathématique ici: généralisation de la notion de fonction) de Dirac, la distribution des temps de séjour d'un réacteur piston est $E(t_s) = \delta_{(t_s - \tau)}$.

Le réacteur (supposé instantanément) parfaitement mélangé contenant un fluide et un traceur, alimenté en fluide seul, avec un écoulement à débit constant, voit sa concentration interne en traceur décliner suivant la relation :

$$C(t) = C_0 e^{-\frac{t}{\tau_s}} \quad (I-3)$$

où C_0 est la concentration initiale homogène du traceur. D'où une distribution des

temps de séjour donnée par :
$$E(t_s) = \frac{1}{\tau} e^{-\frac{t_s}{\tau}} \quad (I-4)$$

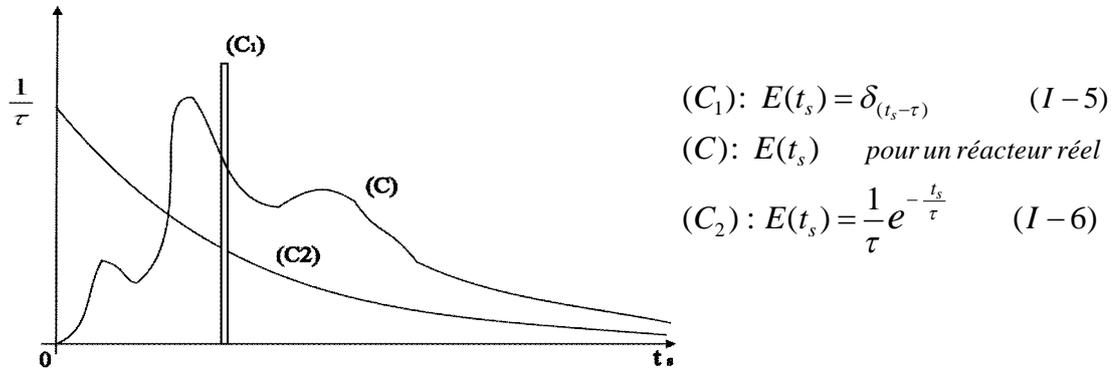


Figure I-7: DTS d'un réacteur: (C_1) piston; (C_2) parfaitement agité; (C) quelconque.

La figure I-7 donne les courbe des DTS de trois réacteurs dont le réacteur piston, le réacteur parfaitement mélangé et un réacteur quelconque. La figure I-8 présente les fonctions de répartition donnant les cumuls des fractions correspondants aux temps de séjours croissants.

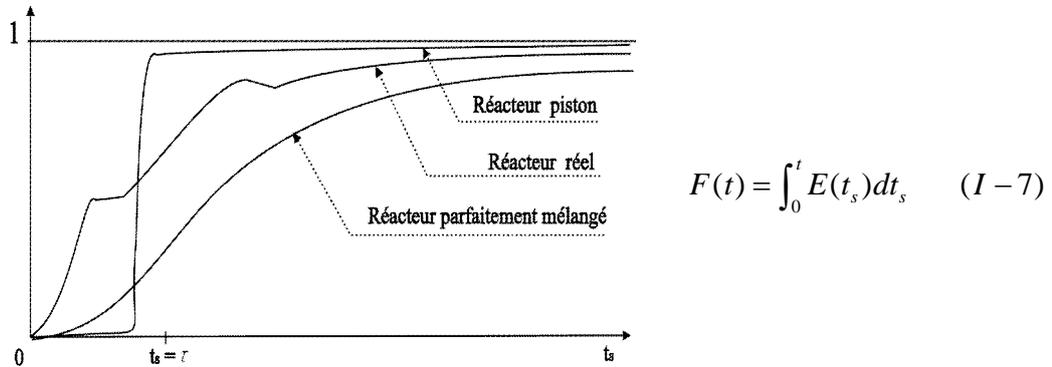


Figure I-8: Cumul des temps de séjour dans un réacteur

Le concours de ces deux cas idéaux permet de modéliser les réacteurs réels dans leurs deux aspects particuliers et que sont les courts-circuits et les zones mortes dont l'impact sur une réaction est très important en termes d'apports nutritionnels et d'oxygénation du milieu ambiant par exemple.

Ainsi et dans la pratique, la DTS, qui est obtenue le plus souvent de façon expérimentale, peut révéler leur existence, à travers des essais expérimentaux, selon la figure I-9.

Pour approcher davantage le comportement d'un réacteur réel, on utilise une modélisation basée sur la dispersion axiale du réacteur piston, sur la cascade des réacteurs parfaitement mélangés et une modélisation à plusieurs paramètres traduisant les courts-circuits, la présence des zones mortes, le recyclage, l'échange, ...etc..., comme présenté dans [24,25].

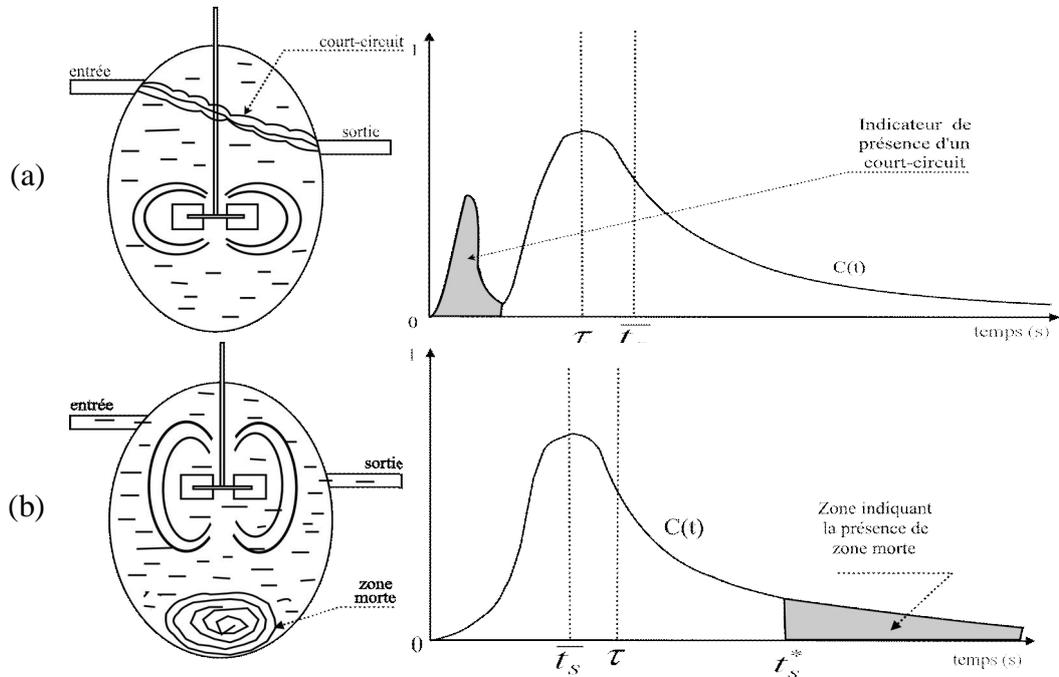


Figure I-9: Mise en évidence par la DTS de : (a) court-circuit; (b) zones mortes.

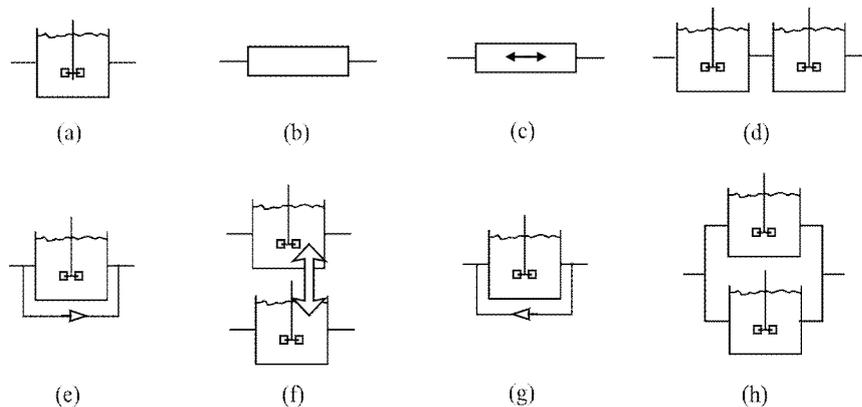


Figure I-10 : Modèles de réacteurs élémentaires pour associations.

- (a) Réacteur parfaitement mélangé
- (b) Réacteur piston
- (c) Réacteur piston à dispersion axiale
- (d) Réacteurs en série
- (e) Court-circuit
- (f) Echange
- (g) Recyclage
- (g) Réacteurs en parallèle

Un aperçu des éléments de cette modélisation est présenté dans la figure I-10. Les modèles d'approche élaborés sont ensuite ajustés aux résultats expérimentaux à l'aide des paramètres traduisant leurs particularités. L'utilisation des transformées de Laplace permet de déduire du modèle ainsi obtenu, la DTS du réacteur réel à étudier.

Remarques :

Comme noté dans l'ouvrage de Villiermaux [24], cette approche systémique développée à travers la DTS, fournit des informations globales sur la circulation du fluide dans le réacteur; mais ne peut autoriser un désintérêt des équations de la mécanique des fluides qui sont les plus aptes à décrire cette circulation. Par ailleurs, et en dehors de la complexité paramétrique qui s'installe et augmente avec l'affinement descriptif d'un réacteur réel, les aspects multiphasique et réactif (chimique ou biochimique) restent encore à explorer davantage.

2°/ Démarche de la CFD :

En ce qui concerne les réactions chimiques, la démarche de la CFD consiste, une fois la géométrie du réacteur admise occupant un domaine spatial D , à décrire l'hydrodynamique de l'écoulement multiphasique par des équations aux dérivées partielles (Equations de Navier Stokes). La réaction chimique qui est une activité locale est décrite par des termes sources et puits, en fonction des données locales à partir des coefficients stœchiométriques constants de son équation. La situation est exprimée par un ensemble d'équations du profil suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} - \text{Equations hydrodynamiques multiphasiques avec sources et/ou puits.} \\ - \text{Equations de transport des scalaires avec sources et/ou puits.} \\ - \text{Conditions aux frontières et conditions initiales.} \\ - \text{Conditions spécifiques du problème traité.} \end{array} \right. \quad (I - 8)$$

La présente étude, dans son approche de simulation des réactions biologiques, adopte globalement la même démarche. Les EDP qui gouvernent l'écoulement sont accompagnées de termes sources/puits qui traduisent l'apparition ou la disparition de chacun des quatre constituants.

A la différence des coefficients stœchiométriques constants d'une réaction chimique, ceux-ci sont variables et dépendent :

- de façon directe les uns des autres,
- de façon indirecte des caractéristiques de l'écoulement.

L'usage de ces taux, en conjugaison avec les variables hydrodynamiques et les propriétés du calcul numérique (conditionnement du problème, diffusion ou propagation des erreurs d'arrondi), peut occasionner des redondances vis-à-vis des qualités des fonctions solutions du problème, telles qu'elles sont attendues par le solveur lors du calcul.

Une approche, commode pour contourner cet obstacle et contrôler le déroulement du calcul, consiste à dissocier l'aspect réactif du reste du problème et le traiter séparément.

Par ailleurs, il ne peut être intégré dans le processus calculatoire de l'écoulement pour une question de faisabilité: les pas temporels de calcul pour la cinétique hydrodynamique et la cinétique biologique ne sont pas de la même échelle.

En conséquence, l'évolution de la bio-réaction est traitée numériquement à part, en parallèle au traitement numérique de l'écoulement dans la génération d'une solution du problème global posé.

L'analyse et l'interprétation de la solution approchée obtenue (postprocessing) permet de :

- ⇒ capter l'hydrodynamique de chacune des phases en présence et de chacun des constituants biologiques du mélange,
- ⇒ suivre l'évolution de la réaction localement ou globalement lors de son déroulement dans la cuve en différé.

La portée attendue de cet objectif dépend aussi de plusieurs autres paramètres qui seront abordés par la suite dans l'étude.

De nos jours, les progrès technologiques en informatique et en génie logiciel permettent, par le biais de calculateurs et de codes de calcul du commerce, de résoudre des problèmes de taille assez importante supportant plusieurs **réactions chimiques** avec des échanges inter-phasiques. Le but donc du présent travail est d'initier et de réaliser un couplage de l'hydrodynamique représentée par les équations de l'écoulement diphasique et les équations de transport et un modèle de **réaction biologique**. Le modèle utilisé dans cette étude est celui de Contois, adopté par Znad H., Blazej M., Bálež V. et Markoš J. [33], qui représente la réaction aérobie de la **production d'acide gluconique par culture de *Aspergillus Niger***, qu'ils ont

entreprise et modélisée et qui constitue le volet expérimental sur lequel s'appuie et avec lequel interagit la présente étude.

Les principaux points importants de la démarche numérique de résolution sont :

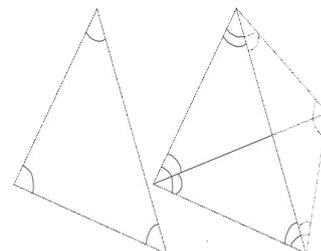
(a) La CAO, le maillage et sa qualité:

La géométrie de la cuve, aussi bien que son maillage, sont réalisés par un logiciel de CAO du commerce. Elle est découpée en domaines disjoints pour des raisons de forme ou de fonctionnalité. Mailler un domaine, c'est: se donner une forme géométrique de référence « la maille de référence » et d'un ensemble d'applications bijectives pour la reproduire dans l'ensemble du domaine. Ainsi, dans notre cas, une maille de référence est un solide géométrique (simplexe, cube, prisme unitaire) pour tout objet spatial, une surface (simplexe, carré) pour les parois, les entrées-sorties, les interfaces et tout objet surfacique et le simplexe (segment) pour les courbes linéiques. Le diamètre h_{M_i} d'une maille M_i est une donnée utile pour un maillage: c'est le diamètre de la plus petite sphère qui la contient. h désignera, pour un maillage donné, la plus grande valeur d'entre elles. Sa valeur intervient dans la convergence et reflète une des facettes des caractéristiques du maillage. L'équilibre angulaire de maille dit «cell equiangular skew» qui est décrit ci-dessous, sur la figure I-11, dans le cas d'une triangulaire ou tétraédrique, est une forme d'évaluation de la qualité d'un maillage (une évaluation de l' «obliquité» de la maille) dans sa proximité d'un triangle équilatéral ou d'un carré, d'un tétraèdre régulier ou d'un cube, et est exprimé par le nombre:

$$e = \text{Max} \left(\frac{\alpha_{\max} - \alpha_0}{180 - \alpha_0}; \frac{\alpha_0 - \alpha_{\min}}{\alpha_0} \right) \quad (I - 09)$$

où α_{\max} et α_{\min} sont le plus grand et le plus petit angle de la face ou de la maille. α_0 est l'angle d'une face ou une maille équiangulaire (60° pour un triangle et 90° pour un carré).

Figure I-11: Déséquilibre angulaire d'une maille (Skewness)



Une valeur de 0 correspond à un bon équilibre et une valeur de 1 indique un mauvais ou la proximité d'un triangle/polyèdre dégénéré. Pour plus de détail, voir [34, 35,36].

Le maillage d'un sous-domaine par reproduction d'une même maille de référence se dit aussi « maillage du sous-domaine par un élément fini ». La cuve sera donc maillée par éléments finis.

(b) Le raffinement d'un maillage:

Lorsqu'un problème présente des aspects locaux à fort gradient, il est parfois nécessaire de raffiner le maillage localement pour ne pas transgresser le conditionnement de la méthode utilisée pour sa résolution et éviter la diffusion des erreurs d'arrondi. C'est le cas au voisinage des parois fixes ou mobiles, des obstacles immergés, des sources et puits, par exemple.

Le raffinement d'un maillage consiste à adapter la densité des mailles dans ce type de zones en fonction de critères adéquats. Plusieurs types de raffinement sont proposés et peuvent être mis à contribution pour améliorer la convergence à l'exécution et la qualité de la solution finale. Inversement, une forte densité de mailles dans une zone à faible activité hydrodynamique et loin de toute interface fixe ou mobile ne contribue qu'à augmenter inutilement le volume de calcul numérique et ses conséquences, l'écoulement y tend vers un régime sans singularités.

Raffiner un maillage augmente sa taille, et donc le temps d'exécution aussi. L'usage de ce concept de raffinement consiste en une **gestion** des ressources matérielles informatiques disponibles (mémoires, UDFs) et de ce temps d'exécution et nécessite une bonne connaissance du problème. Il se pratique en interaction avec le traitement lui-même.

(c) Les statuts des divers constituants géométriques de la cuve:

Les sous-domaines de la cuve sont répartis en fonction de leurs caractéristiques: fixe ou mobile, liquide ou solide, poreux ou non, interface étanche ou interface d'échange, paroi, entrée, sortie, ...etc....

Dans notre cas, la région du voisinage immédiat de la turbine est configurée en zone mobile, qui est en rotation autour de l'axe de la turbine avec la même vitesse que celle-ci [36]. Le reste de la cuve est une zone liquide globalement fixe.

(d) Les conditions frontières et les conditions initiales:

Dans un domaine volumique, les frontières qui sont des surfaces, sont classées en plusieurs catégories: parois, entrées, sorties, interfaces avec/sans échanges, un statut leur est donc affecté en fonction de leur fonctionnalité et sont donc configurées numériquement en conséquence. Il en est de même pour les conditions initiales dont parfois dépend le bon déroulement du calcul scientifique. Ces dernières peuvent ne pas correspondre à une réalité physique, mais doivent respecter le cahier des charges du code de calcul afin que la résolution numérique soit initialisée correctement et le calcul amorcé.

(e) Le suivi du calcul et de sa qualité de sa convergence :

La mise en équations du problème considéré (écoulement et réaction) aboutit à un système d'équations aux dérivées partielles (EDP) non linéaires couplé avec un système d'équations différentielles (ED) non linéaires.

Les méthodes numériques de résolution de ce type de système d'EDP se résument à l'élaboration d'un problème d'optimisation quadratique ou à la résolution équivalente d'un système linéaire. L'élément central de cette résolution est la matrice obtenue à partir de la discrétisation des EDP sur les points du maillage et dont la taille est fortement dépendante de ce dernier. Les méthodes utilisées, déclinées sous la première forme sont nombreuses [37, 38,39,40,41,42] dont certaines sont adaptées aux problèmes de la mécanique des fluides[43]. On en cite, les méthodes du gradient, de descente en général, du gradient conjugué, des métriques variables (ou quasi-Newton) ainsi que des méthodes adaptées au calcul parallèle telles les méthodes de Chazan et Miranker [44,45] qui se basent sur la conjugaison vectorielle pour obtenir des tâches simultanément exécutables.

La figure I-12 illustre le cheminement de la résolution selon l'approche point par point. Dans cette approche, à partir d'un point initial M_0 , on génère une suite de points M_1, M_2, \dots qui converge vers la solution recherchée M^* .

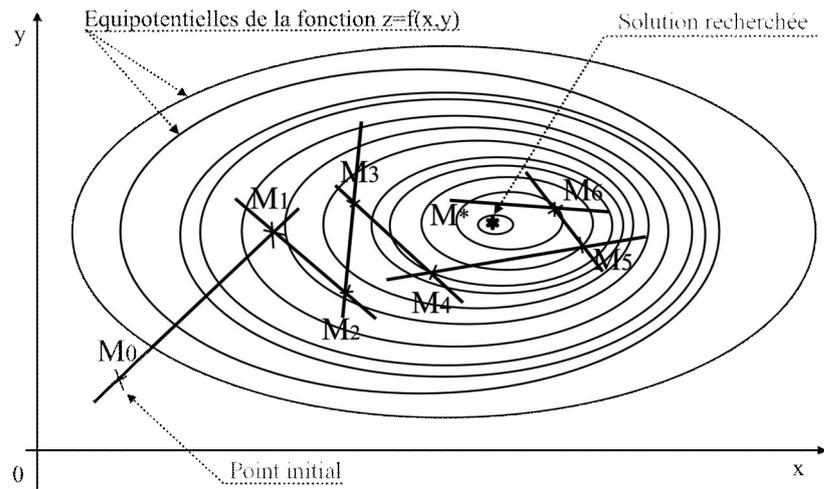


Figure I-12: Schéma général des méthodes de descente.

La convergence d'une telle suite est une question importante pour les applications qui ne cadrent pas avec les limitations prévues par le code de calcul utilisé. Ces derniers proposent des critères permettant d'en suivre l'évolution, et qui sont le reflet d'une convergence pour bon nombre de cas et de paramétrages convenables. D'autres possibilités peuvent être exploitées pour aboutir à une convergence valable pour l'application en cours, telles les suivis des grandeurs particulières relevant de l'application traitée.

Par ailleurs et dans la démarche utilisée pour la prise en charge des équations du modèle biologique, la résolution du système différentiel d'évolution des quatre concentrations (Sucre, Oxygène dissout, Culture et Produit) est faite en dehors et en synchronisation avec celle des EDP par le biais d'un programme additionnel (UDF) qui est recompilé avec le noyau du code de calcul utilisé.

Le système différentiel, géré à part, peut être résolu, sous des conditions convenables, par :

_ des méthodes itératives telles:

- * la méthode d'Euler.
- * la méthode de Heun.
- * la méthode de Runge Kutta.

_ des méthodes théoriques donnant des solutions exactes après approximation dont les démarches méthodologiques se trouvent dans [46,47] et les détails théoriques amplement exposés dans [48, 49,50].

Cependant, les premières présentent deux inconvénients dans notre situation :

- * Elles nécessitent plusieurs itérations pour fournir une valeur réellement acceptable. Ce qui augmente le temps de calcul.
- * le stockage des valeurs intermédiaires nécessaires pour le calcul. Ce qui consomme de l'espace mémoire.

La méthode utilisée, du second groupe, consiste donc à:

- * utiliser une approximation d'ordre 0 ou 1 du taux de croissance μ de la réaction biologique.
- * résoudre exactement l'équation différentielle $\tau_x = \mu X$ obtenue.
- * évaluer algébriquement les trois autres constituants du mélange en conséquence.

L'approximation d'ordre 0 est pratiquée et les résultats sont fournis dans ce travail, tandis que pour celle d'ordre 1, seule la démarche numérique de l'itération est présentée ici.

(f) L'analyse et l'interprétation des résultats:

Il s'agit presque d'un art à développer pour faire parler le volume de données généré par la résolution d'un problème traité. L'énorme potentiel de souplesse offert par les moyens informatiques n'a presque pas de limites dans la gestion de l'immense volume de données. C'est là l'un des atouts de la CFD; les couleurs permettent de « voir » à l'intérieur de la cuve et les concepts d'analyse numérique et des statistiques trouvent ici un vaste champ d'applications.

Conclusion : La conjugaison de la puissance des calculateurs, de la flexibilité des codes de calcul, de la performance des méthodes numériques et d'une gestion en temps réel de l'évolution de la résolution permettent à cette dernière de s'accomplir. Cette gestion commence depuis le choix des types de maillage, structurés pour les domaines de la cuve dont la simplicité de la géométrie le permet et non structurés pour d'autres domaines dont la géométrie est plus complexe. La souplesse des moyens informatiques permet de personnaliser l'étude de la solution et d'adapter éventuellement cette étude à un objectif particulier.

3°/ L'objectif et l'intérêt du présent travail :

La démarche d'étude entreprise ici pour la modélisation hydrodynamique d'une fermentation, offre beaucoup de souplesse. On peut concevoir la géométrie du réacteur en CAO et en changer si nécessaire ou la modifier, ce qui est déjà économiquement très important. Par ailleurs, les codes de calcul permettent actuellement la prise en charge des écoulements multiphasiques avec échanges interphasiques de plusieurs grandeurs ainsi que les **réactions chimiques**. La souplesse informatique de ces codes, par leur ouverture à la modification, pour adaptation ou amélioration du code proposé par programmation, nous permet la prise en charge des réactions biologiques sous la forme des modèles biologiques validés par l'expérience tels celui qui sera utilisé dans cette étude.

La simulation peut être réalisée en grandeur nature, pour un réacteur de laboratoire ou pour une maquette froide. Elle sera nécessairement précédée de la recherche expérimentale d'un modèle traduisant la bio-réaction et qui fournira les données numériques du modèle biologique à utiliser. Ce modèle est à chercher dans la configuration d'un réacteur parfaitement agité. Il fournira les paramètres directement utilisables dans les équations différentielles.

Le cadre théorique de la démarche consistant à fusionner le volet biologique et le volet hydrodynamique est globalement identique à celui utilisé pour simuler les réactions chimiques. Sa partie appliquée consiste à remplacer la résolution d'une infinité d'équations différentielles par celle d'un nombre fini d'entre elles. Cette démarche est dictée par l'étape de discrétisation du problème et la génération du maillage; le nombre de mailles donnant ainsi le nombre de « pseudo-réacteurs élémentaires » qui est le même que le nombre de systèmes différentiels à résoudre.

Contrairement à la DTS, la CFD offre la possibilité de faire vivre l'écoulement support de la bio-réaction et d'en étudier le déroulement. L'investissement n'est pas matériel comparativement à l'acquisition d'un vrai réacteur et de son exploitation pendant l'étude du projet. Le changement de cuve, de turbine ou l'adjonction de tel ou tel système à la cuve existante n'a d'apport que bénéfique pour le projet. Le stockage de matériel essayé ou usé n'est que virtuel.

IV- CONCLUSION :

C'est donc, dans un premier temps, une validation de l'usage de la CFD qui est établie par l'évaluation du cisaillement et de son taux. Ensuite, la réalisation d'une

« bioréaction par simulation numérique », que l'étude se fixe comme objectif en reposant son contenu sur des résultats expérimentaux. L'analyse des résultats obtenus conforte l'utilisation de celle-ci pour la suite.

La simulation de l'interaction de la bio-réaction avec l'écoulement, dont la cuve est le siège, est entreprise en deux étapes. La conséquence est une « **fermentation numérique** » dans les aspects majeurs de son déroulement effectif et que sont: l'agitation, le caractère multiphasique, l'échange massique, le transport convectif et les transformations biologiques internes ainsi que l'interaction mutuelle écoulement-bioréaction.

CHAPITRE II

LES ASPECTS DU PROBLEME

INTRODUCTION : La simulation, l'optimisation et l'automatisation des bioprocédés passent par l'élaboration de modèles mathématiques aptes à représenter fidèlement le fonctionnement réel de tels procédés. Ces modèles doivent être la résultante de plusieurs volets caractérisant non seulement les écoulements, l'aération, le cisaillement, l'extrapolation mais également la physiologie du biocatalyseur et son métabolisme. Les milieux réactionnels et les cinétiques rencontrés dans les procédés biologiques sont rarement simples. Ils comportent, le plus souvent, un grand nombre de composants et présentent des caractéristiques dont la prise en compte est indispensable pour la conception, aussi bien du bioréacteur de production (agitation, aération, température, concentrations,...) que des étapes d'extraction et de purification ou d'entretien. Par ailleurs, ces milieux biologiques présentent un comportement rhéologiquement complexe et toujours évolutif, devenant progressivement visqueux ou gélatineux (polysaccharides, protéines,...). Un tour d'horizon des diverses facettes du problème permet d'en dégager les divers aspects sur lesquels repose la présente étude.

I - ASPECT BIOLOGIQUE : LES REACTIONS BIOLOGIQUES ET LEURS

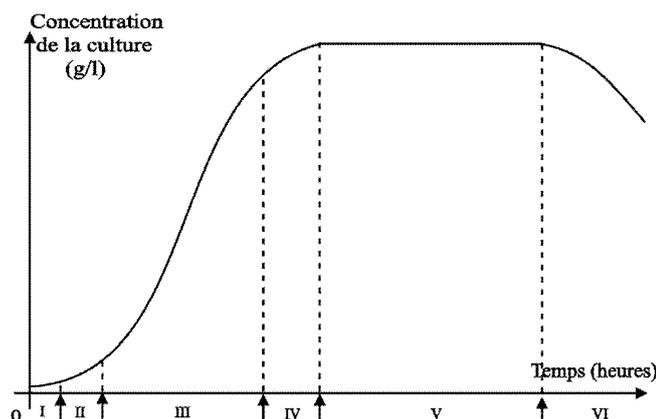
SPECIFICITES.

Les réactions, chimiques d'une part et biologiques d'autre part, ont de nombreuses ressemblances. Une différence essentielle, dans la formulation de leurs cinétiques, en ce qui concerne notre objectif ici, se manifeste dans les **coefficients stœchiométriques** qui sont bien définis pour les premières. Ils sont uniques et non évolutifs alors que les **vitesse de création/disparition** des modèles décrivant les réactions biologiques sont des fonctions mathématiques pour la plupart « polynomiales, rationnelles ou parfois transcendantes ». Les coefficients numériques de ces fonctions, souvent déterminés expérimentalement, ne sont pas précis et traduisent approximativement la situation traitée. Toutes ces fonctions sont globalement semblables dans l'allure qu'elles renvoient pour l'évolution d'une population d'organismes. Une culture discontinue présente dans son évolution six phases comme le montre la figure II-1 suivante:

Figure II-1

Les phases du développement
d'une culture

- I - la phase de latence
- II - la phase d'accélération
- III - la phase exponentielle
- IV - la phase de ralentissement
- V - la phase stationnaire
- VI - la phase de décroissance



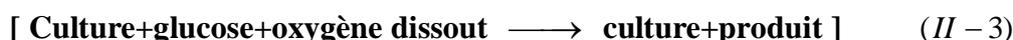
L'opération biologique concernée par cette étude est l'oxydation du glucose en acide gluconique selon l'équation:



Elle consiste en un apport d'oxygène par échange inter-phasique



et une bioréaction proprement dite:



selon la démarche expérimentale rapportée dans les travaux Znad et al [33].

Plusieurs modèles d'évolution de ce genre de réactions enzymatiques ou bactériennes existent dans la littérature. Ils traduisent la croissance de levures et bactéries dès lors que les conditions nutritives, respiratoires et les conditions matérielles sont favorables. Elles ont toutes une croissance théorique de type exponentiel selon l'expression

$$X = X(t) = X_0 e^{\mu t} \quad (II - 4)$$

où X_0 est la concentration de départ de l'échantillon de la culture, X la concentration après une durée t et μ est le taux de croissance des cellules.

Le modèle le plus simple de taux de croissance (ou vitesse spécifique de croissance) a été proposé Jacques Monod (1942) [23] et suit la loi de Michaélis-Menten décrivant l'activité enzymatique des cellules. Il est donné, pour une culture anaérobie à un seul limitant, par l'expression:

$$\mu = \mu_m \frac{S}{K_s + S} \quad (II - 5)$$

où S est la concentration du substrat et K_S est l'affinité de la biomasse au substrat et qui représente la concentration de substrat correspondante à la valeur:

$$\mu = \frac{\mu_{\max}}{2} \quad (II - 6)$$

On trouve dans la littérature [18] d'autres modèles de taux de croissance, parmi lesquels on cite :

- le modèle de Contois (1959): $\mu = \mu_m \frac{S}{K_S X + S} \frac{O_d}{K_o X + O_d}$ (II - 7)

pour une culture à deux limitants qui sont le substrat et l'oxygène dissout de concentrations respectives S et O_d et qui fait l'objet de la présente étude.

- le modèle de Haldane(1930): $\mu = \mu_m \frac{S}{K_S + S + \frac{S^2}{K_I}}$ (II - 8)

où K_I est la constante d'inhibition du substrat.

- le modèle de Aiba (1968): $\mu = \mu_m \frac{S}{K_S + S} e^{-\frac{S}{K_I}}$ (II - 9)

- le modèle de Tseng et Wayman : $\mu = \mu_m \frac{S}{K_S + S} - K(S - S_{crit})$ (II - 10)

où K est une constante d'inhibition à partir d'un seuil critique S_{crit} .

Pour des situations où il y a inhibition par le produit, on trouve :

- le modèle de Jerusalimsky et Neronova (1965) : $\mu = \mu_m \frac{S}{K_S + S} \frac{K_P}{K_P + P}$ (II - 11)

- le modèle de Levenspiel (1980) : $\mu = \mu_m \frac{S}{K_S + S} \left(1 - \frac{P}{P_{crit}}\right)^n$ (II - 12)

où P_{crit} est le seuil maximum du produit autorisant la croissance et n est la puissance toxique.

D'autres modèles prétendant généraliser le modèle simple de Monod n'ont pas réussi à s'imposer; c'est le cas du modèle de Moser (1957) donné par :

$$\mu = \mu_m \frac{S^x}{K_S + S^x} \text{ où } x \text{ est un réel positif} \quad (II - 13)$$

On trouve par ailleurs dans [18] plus de détails sur la synthèse des modèles et des expressions plus générales induisant plusieurs limitants ou inhibiteurs et tenant compte d'autres facteurs de croissance d'une culture.

On cite enfin le modèle de l'IWAC (International Association for Water Quality) qui est suggéré comme forme de description du traitement des effluents aqueux dont la vitesse est donnée par:

$$\mu = \mu_{\max} \prod_{i=1}^n \frac{S_i}{K_{S_i} + S_i} \prod_{j=1}^m \frac{K_{S_j}}{K_{S_j} + S_j} \quad (II - 14)$$

mettant en œuvre un groupe de limitants et un groupe d'inhibiteurs.

Tous ces modèles permettent de décrire l'évolution d'une culture biologique dans un réacteur selon les expressions de systèmes différentiels de la forme:

$$\begin{cases} r_X = \frac{dX}{dt} = f(\mu, X, L_i, P_j) \\ r_{L_k} = \frac{dL_k}{dt} = g_k(\mu, X, L_i, P_j) \quad \text{pour } i = 1 \text{ à } I \text{ et } j = 1 \text{ à } J \\ r_{P_l} = \frac{dP_l}{dt} = h_l(\mu, X, L_i, P_j) \quad \text{pour } i = 1 \text{ à } I \text{ et } j = 1 \text{ à } J \\ \text{Avec les conditions initiales } X(0) = X_0, L_k(0) = L_{k,0} \text{ et } P_l(0) = P_{l,0} \end{cases} \quad (II - 15)$$

Les vitesses r_X , r_{L_k} et r_{P_l} sont celles de la création/disparition de la culture, des limitants L_i consommés et des produits P_j générés. Ils correspondent aux équations - différentielles ici- décrivant l'évolution des concentrations de tous les constituants du mélange intervenant dans le modèle de la bioréaction. Ces équations peuvent avoir une portée (théorique) plus générale et dépendre d'autres grandeurs telles la température, la pression, le pH, le champ électrique, ...etc...ainsi que de leurs dérivées -partielles éventuellement-.

D'autres paramètres peuvent intervenir dans les fonctions f , g_k et h_l tels les conditions opératoires, les concentrations en catalyseurs ou autres additifs.

Le système différentiel (II - 15) se présente sous la forme globale :

$$\begin{cases} Y'(t) = F(Y(t), \theta(t)) \\ Y(t_0) = Y_0 \end{cases} \quad (II - 16)$$

en posant

$$Y = \begin{pmatrix} X(t) \\ L_k(t) \\ P_l(t) \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad Y_0 = \begin{pmatrix} X_0 \\ L_{k0} \\ P_{l0} \end{pmatrix} \quad (II - 17)$$

où F est une fonction de Y et d'autres paramètres éventuels notés θ ici.

Ces systèmes différentiels du premier ordre, sont en général non linéaires mais peuvent être résolus par des méthodes numériques. Leur résolution théorique -exacte- est tributaire des qualités de la fonction F . Elle peut être simple si F est affine par exemple et pratiquement impossible en général. Leur résolution numérique, établie sous certaines conditions sur cette fonction F , se fait par des méthodes itératives.

Pour l'essentiel, les résolutions numériques de ces systèmes reposaient avant l'arrivée des calculateurs, sur l'**homogénéité** supposée du **contenu de tout le réacteur**. Ce qui est loin d'être le cas dans la réalité.

C'est cependant cette homogénéité, abandonnée pour l'intégralité de la cuve, qui sera appliquée au «pseudo-réacteur élémentaire» et qui sera exploitée dans ce travail pour approcher la solution de notre problème non homogène. Cette homogénéité «locale» supposée dans notre cas se trouve plus justifiée par les dimensions de ce «pseudo-réacteur» qui est le volume élémentaire du fluide contenu dans une **maille** dont le volume est réellement très petit vis-à-vis de celui du réacteur étudié. Deux mailles différentes contiguës seront supposées homogènes toutes les deux sans avoir les mêmes valeurs des divers constituants. L'échange entre ces deux mailles sera assuré par le transport convectif dû à l'écoulement dans le réacteur. La diffusion des scalaires est négligée.

Notons, pour finir, que dans sa constitution, le contenu d'un fermenteur est formé de nutriments, de métabolites et d'autres composés en phases liquide, solide ou gazeuse solubles ou non et en perpétuelle évolution. Leurs concentrations évolutives ont des conséquences sur l'écoulement dont le réacteur est le siège et ceci à travers la viscosité de ce contenu. Cette viscosité est le paramètre-maître de l'écoulement dont dépend la qualité du mélange et en conséquence le devenir de la culture.

II- ASPECT HYDRODYNAMIQUE: LE REACTEUR EN MONOPHASIQUE ET EN DIPHASIQUE :

Dans les premières études sur les écoulements, la nature multiphasique était souvent écartée au détriment d'un écoulement monophasique supposé ayant des caractéristiques suffisamment représentatives pour l'occasion. Il est à noter que la multiplicité des phases alourdit le formalisme traduisant les événements et nécessite un effort de calcul conséquent pour mener la résolution à terme. Une phase supplémentaire nécessite un ensemble d'équations pour suivre sa propre évolution et un autre ensemble d'équations pour suivre ses interactions avec toutes les autres.

Ces considérations se trouvent reprises dans la littérature sur les écoulements multiphasiques tels [4,5] dont il ressort, en ce qui concerne notre objectif, et conformément au code de calcul Fluent [36], que nous utiliserons pour la résolution, l'existence de quatre modèles-support possibles pour les traitements des écoulements de ce genre:

- **Le modèle de la phase discrète:** Il traite, en plus d'une phase liquide continue, une phase secondaire discrète fluide ou solide. Ce traitement s'opère sous forme lagrangienne par suivi des trajectoires des particules de façon déterministe. La phase discrète peut représenter des particules, des bulles ou des gouttelettes et doit être très diluée. Par ailleurs, ce modèle ne permet pas de simuler directement les réactions.

- **Le modèle VOF (Volume of Fluid):** Ce modèle est destiné à traiter les problèmes d'écoulements à plusieurs fluides non miscibles dont la solution stationnaire présente de l'intérêt. Il permet le suivi de l'évolution de l'interface entre deux phases. Il ne permet pas de simuler des mélanges réactionnels. Dans ce modèle, seul un ensemble d'équations est résolu pour le mélange et les fractions volumiques de toutes phases présentes sont déterminées à partir du champ vectoriel des vitesses ainsi obtenu. Un exemple d'utilisation de ce modèle est constitué par les écoulements dans les canaux ou le suivi de grosses bulles dans une enceinte liquide.

- **Le modèle de la mixture (Mixture Model):** Utilisé pour résoudre les problèmes dans lesquels, il y a une forte dépendance entre les phases dont résulte en conséquence une évolution grossièrement identique pour toutes, il convient pour les écoulements multiphasiques homogènes. Comme pour le modèle précédent, un seul système

d'équations de la mixture est résolu et de son champ de vecteurs vitesse sont déduites les vitesses relatives de toutes les autres phases. Il convient pour le traitement des problèmes de transport de matière (milieux poussiéreux, sédimentaires ou brumeux par exemple). Cependant, il ne supporte pas les mélanges réactionnels.

- **Le modèle eulérien (Eulerian Model) :** Ce modèle permet de simuler les mélanges multiphasiques réactionnels (réactions chimiques) et un nombre élevé de réactions simultanées. Le nombre de phases n'est pas fixé d'avance mais se trouve organisé en, d'une part une phase primaire, nécessairement continue, et d'autre part des phases secondaires continues ou dispersées (sous forme de grains, bulles ou gouttelettes). Dans ce modèle, un ensemble d'équations est résolu pour chaque phase en plus de la configuration locale constitutive en fractions volumiques. Il gère, en plus des évolutions individuelles des phases, les interactions cinétiques, massiques et thermiques éventuelles entre les phases. Il convient donc à notre objectif, étant donné qu'il supporte en plus, plusieurs modèles de turbulence pour le mélange ou par phase.

Conclusion: Des modèles-support précédents, le dernier est le plus adapté à la problématique retenue dans ce travail. Il sera donc utilisé dans tous les calculs effectués dans cette étude. Nous procédons d'abord à la simulation de l'écoulement dans la cuve en «laminaire», ensuite en «turbulent». Ces calculs utiliseront le modèle RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes Equations) complété par le modèle de turbulence $k-\varepsilon$ qui donne des résultats précis selon Jenne et Reuss (1999) [51], selon Zakrzawska et Jaworski après comparaison de huit modèles dans les mêmes conditions [52] et est conseillé par Bailly et Comte-Bellot [11].

Plusieurs démarches peuvent être adoptées pour implémenter les deux phases et surtout les quatre constituants du mélange:

- * Utiliser un modèle hydrodynamique à quatre phases liquides différentes continues et de même caractéristiques hydrodynamiques que la biomasse et une phase dispersée gazeuse formée de bulles d'oxygène ou d'air. Les quatre phases liquides correspondront aux trois constituants que sont la biomasse, le substrat et le produit. L'oxygène dissout sera représenté par un scalaire transporté par leur mixture.

- * Une variante du modèle précédent peut consister à adopter une phase dispersée granulaire, de même caractéristiques physico-chimiques que les trois autres pour représenter la biomasse au lieu d'une phase liquide. Ce modèle sera donc triphasique.
- * Une idée plus simple, et économe en termes de volume de calcul, consiste à adopter deux phases, dont l'une sera liquide continue et l'autre gazeuse dispersée. Cette réduction est dictée par la minimisation du temps d'exécution du programme informatique final élaboré pour simuler la bioréaction. Quant aux quatre constituants que sont la culture, le substrat, l'oxygène dissout et le produit, ils seront représentés par quatre scalaires transportés par la phase liquide. Ce modèle à deux phases et quatre scalaires sera utilisé dans tous les calculs. Il est à noter que l'évolution d'une phase se fait par la résolution d'un système de plusieurs équations (EDP) à quatre inconnues, alors que celle d'un scalaire se fait à travers une seule équation (ED).

Remarque: Dans ce genre de problèmes, la question du temps d'exécution est très importante. L'adjonction d'une phase supplémentaire augmente considérablement le volume de calcul nécessaire pour la résolution (doublement du nombre d'équations en dehors des interactions mutuelles), alors qu'un scalaire ajoute une seule équation.

III - ASPECTS MATHEMATIQUE ET NUMERIQUE: DE L'ENONCE DU PROBLEME A L'ANALYSE DES RESULTATS.

Dans ce paragraphe, on présente la méthode adoptée pour atteindre l'objectif visé. Comme décrit au chapitre I, l'écoulement diphasique dans la cuve se trouve exprimé par les équations de la mécanique des fluides selon le modèle eulérien sans prendre en compte (pour simplification) les considérations énergétiques. Il est à noter, par ailleurs que cette fermentation n'est pas exothermique. La phase liquide continue (de l'eau pour simplifier la présentation dans la figure II-2 et dans le programme) sera la phase primaire et la phase gazeuse dispersée (formée de bulles d'air injectées au fond du réacteur) sera la phase secondaire. L'ensemble de la phase primaire et des quatre scalaires forme le milieu de culture agité (la mixture). Le système différentiel traduisant la bio-réaction et portant sur ces quatre scalaires, doit être résolu dans tout l'espace du réacteur en fonction des données locales de ces scalaires. Il s'agit d'un système différentiel décrivant une réaction biologique qui est supposée se dérouler dans un réacteur homogène.

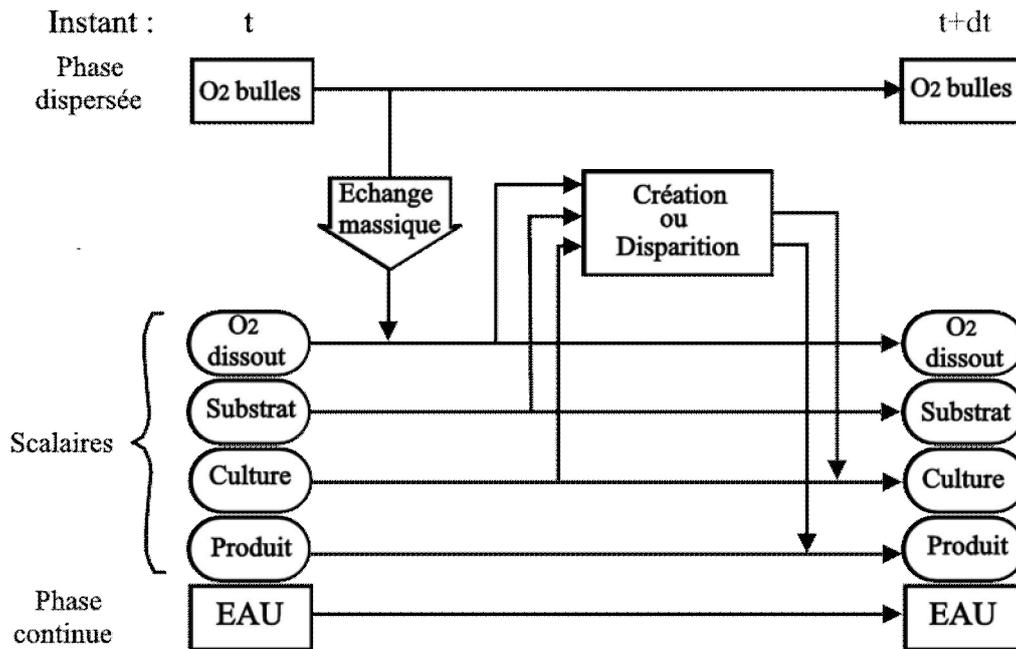


Figure II-2: Détails de l'activité un « pseudo-réacteur » élémentaire

La méthode de résolution s'articule autour du schéma de cette figure II-2, qui représente l'activité biologique ayant lieu dans un élément de volume interne au réacteur. Elle consiste, au chapitre IV de l'étude, en la réalisation de ses deux volets que sont l'échange massique entre les deux phases et la création ou disparition des autres constituants du mélange. Cette figure présente le déroulement de ces deux points entre les instants t et $t + dt$ en un point quelconque de la cuve.

1°. La mise en équations du problème.

L'ensemble des équations à résoudre est repris en fonction du volet concerné dans le déroulement de la bio-réaction:

a) Equations de l'écoulement des deux phases (Eq. de continuité et de Navier-Stokes) :

$$\frac{\partial \alpha_L \rho_L}{\partial t} + \text{div}(\alpha_L \rho_L \vec{v}_L) = 0 \quad (II - 18)$$

$$\frac{\partial \alpha_G \rho_G}{\partial t} + \text{div}(\alpha_G \rho_G \vec{v}_G) = 0 \quad (II - 19)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_L \rho_L \vec{v}_L) + \text{div}(\alpha_L \rho_L \vec{v}_L \otimes \vec{v}_L) = -\alpha_L \overline{\text{grad} p} + \overline{\text{div} \tau}_L + \alpha_L \rho_L \vec{g} + \overline{R}_{GL} + \alpha_L \rho_L \overline{F}_{\text{ift},L} + \alpha_L \rho_L \overline{F}_{\text{vm},L} \quad (II - 20)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_G \rho_G \vec{v}_G) + \text{div}(\alpha_G \rho_G \vec{v}_G \otimes \vec{v}_G) = -\alpha_G \overline{\text{grad} p} + \text{div} \overline{\tau}_G + \alpha_G \rho_G \overline{g} + \overline{R}_{LG} + \alpha_G \rho_G \overline{F}_{\text{lift},G} + \alpha_G \rho_G \overline{F}_{\text{vm},G} \quad (II - 21)$$

$$\text{avec la contrainte} \quad \alpha_L + \alpha_G = 1 \quad (II - 22)$$

Dans ces équations $\alpha_L, \rho_L, \vec{v}_L, \tau_L$ et $\alpha_G, \rho_G, \vec{v}_G, \tau_G$ désignent la fraction volumique, masse volumique, vitesse et tenseur des déformations des deux phases respectivement liquide L et gazeuse G . Les trois derniers termes du second membre de chacune des deux dernières équations sont des termes représentant respectivement :

- les forces d'interaction entre les deux phases.
- les lift forces
- les forces de masse virtuelle

Ces termes se trouvent décrits dans [4,5], repris dans la documentation Fluent [36] et ne sont pas détaillés ici. Leur effet est négligé dans ce travail.

b) Transfert massique d'oxygène de la phase dispersée vers la phase continue:

Le transfert massique est régi, pour le même modèle de Contois dans [33], par l'équation différentielle:

$$r'_{O_d} = r'_{(O_2 \text{ bulles} \rightarrow O_2 \text{ dissout})} = \frac{dO_d}{dt} = (k_l a)_{O_2} \times (O_d^* - O_d) \text{ avec } k_l a = 63 h^{-1} . \quad (II - 23)$$

Cette équation traduit le transfert d'oxygène dissout de la phase dispersée gazeuse vers la phase porteuse liquide continue. La valeur du coefficient d'échange $(k_l a)_{O_2}$ - noté plus simplement $k_l a$ - est extraite du même article et ce coefficient sera repris plus loin pour être exprimé en fonction du taux de dissipation visqueuse ε_L de l'énergie turbulente k_L de la phase liquide L .

c) Taux de croissance et vitesses de formation des constituants (réaction biologique):

Les vitesses de production/consommation de la culture, du substrat, de l'oxygène dissout et du produit, à appliquer aux quatre scalaires, fournis pour le modèle de Contois, sont données par:

$$r_x = \frac{dX}{dt} = \mu X \quad \text{où} \quad \mu = \mu_m \frac{S}{K_S X + S} \frac{O_d}{K_{O_d} X + O_d} \quad (II-24)$$

$$r_s = \frac{dS}{dt} = -\gamma \frac{dX}{dt} - \lambda X \quad (II-25)$$

$$r_{O_d} = \frac{dO_d}{dt} = k_t a (O_d^* - O_d) - \delta \frac{dX}{dt} - \phi X \quad (II-26)$$

$$r_p = \frac{dP}{dt} = \alpha \frac{dX}{dt} + \beta X \quad (II-27)$$

où μ_m , α , β , γ , λ , δ et ϕ sont des constantes données plus loin.

Chacun des termes r_x , r_s , r_{O_d} et r_p correspond au taux de production ou de consommation d'un scalaire transporté avec les coefficients correspondants tels qu'ils apparaissent dans l'article [33]. Ces données correspondent à une partie expérimentale déjà réalisée et traduisent la production d'acide gluconique par transformation de glucose par une culture d'*Aspergillus Niger*. Ce modèle utilise les deux limitants que sont le glucose et l'oxygène dissout. Il se trouve accompagné par un modèle de Monod en comparaison dont les équations et les coefficients correspondants seront donnés au dernier chapitre.

d) Equations des 4 scalaires transportés par la phase continue :

L'évolution du bilan local de chacun des scalaires X , S , O_d et P transportés par la phase primaire se trouve décrite par l'une des quatre équations suivantes :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_L \rho_L C) + \text{div}(\alpha_L \rho_L C \vec{v}_L) = R_C \quad \text{avec} \quad C = X, S, O_d \text{ ou } P \quad (II-28)$$

On reconnaît dans chacune d'elles: le terme instationnaire, le terme convectif et le terme réactif. Dans la démarche adoptée, le code de calcul gère l'aspect convectif de ces équations tandis que l'aspect réactif (source ou puit de matière) se trouve géré par des fonctions-utilisateur (UDF) qui sont recompilées avec le code originel selon la méthodologie décrite dans la documentation du code Fluent [36]. Le déroulement du calcul par la fonction-utilisateur, dans un pseudo-réacteur élémentaire, lors d'une itération portant sur les équations de Navier-Stokes, est illustré en Annexe 3. Ce code de calcul permet d'implémenter les vitesses r_x , r_s , r_{O_d} et r_p en termes sources/puits R_C avec $C = X, S, O_d$ ou P ou de gérer

séparément leur impact dans l'évolution sur la bioréaction. Le choix s'est porté sur la moins naturelle des deux possibilités pour le niveau de souplesse qu'elle offre. Le système différentiel que forme ces quatre équations sera résolu autant de fois qu'il y a de mailles dans la cuve pendant chaque itération. La dite itération correspond à un intervalle de temps donné de la durée totale de la fermentation. Ceci justifie la recherche continue de simplification du modèle, réduisant ainsi le plus possible son temps d'exécution.

La souplesse des fonctions-utilisateur est, par ailleurs, d'une grande efficacité dans le suivi du calcul et l'exploration spatio-temporelle de l'activité interne au fermenteur.

2°/ La démarche de résolution adoptée :

La résolution de l'ensemble des équations du modèle obtenu, qui décrit une fermentation en écoulement laminaire ou turbulent, est faite sous une forme assez simple. Outre la prise en charge de l'écoulement par le code de calcul, la résolution du système différentiel de la bio-réaction est réduite à la résolution ségrégative de l'ensemble des équations différentielles du modèle sous l'une des hypothèses simplificatrices suivantes :

(H1) : Pendant le pas temporel Δt , la vitesse de la bio-réaction est constante.

(H2) : Pendant le pas temporel Δt , la vitesse de la bio-réaction dépend uniquement de la concentration X de la culture.

Ces deux approximations donnent lieu à deux calculs différents dont le premier sera le plus utilisé. Le second modèle est donné ici à titre indicatif uniquement.

3°/ La discrétisation du système obtenu :

Comme précisé auparavant, le problème ainsi formulé se trouve supporté par un maillage de la cuve en un nombre fini de points, converti dans un formalisme mathématique discret et résolu selon la méthodologie des volumes finis utilisée par le code de calcul. Cette méthodologie est utilisée par la majorité des codes de calcul pour la résolution des équations de l'écoulement en variables primitives. Elle consiste en une division du domaine (la cuve) en volumes finis centrés sur les nœuds d'un maillage. Les équations de conservations sont intégrées sur chacun de ces volumes constitutifs du domaine et les variations d'une grandeur impliquée dans le calcul entre deux nœuds voisins peuvent être constantes, affines ou quadratiques.

Cette démarche, dans son mode opératoire est initiée par D.B Spalding (1962) [53]. On lui trouve plus de détails dans l'ouvrage de S. Patankar [54] ainsi que des variantes.

Cependant, lorsque dans ces équations, pour une grandeur ϕ , le terme-source R_ϕ dépend d'une la variable calculée, il doit être linéarisé et exprimé sous la forme

$$R_\phi = K_0 + K_1\phi \quad (II - 29)$$

où K_0 et K_1 sont des constantes. D'où un éventuel stockage de champs de valeurs pour ces constantes et qu'il serait préférable d'éviter.

La présence des quantités X , S et O_d au dénominateur est une source d'instabilité dans le déroulement du calcul s'il est exécuté de façon automatique. Un des avantages de la démarche adoptée est le contrôle de ce type de situation lors de l'exécution du programme.

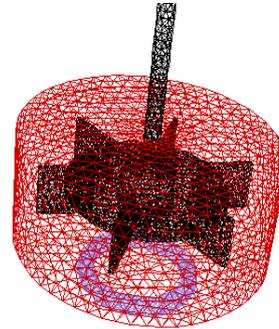
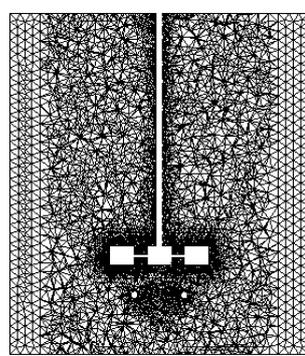
Pendant la résolution et en marge de celle-ci, le caractère instationnaire du problème nous permet de disposer de l'évolution, en fonction du temps, d'une grandeur scalaire ou vectorielle en un point donné de la cuve, en une région de la cuve ou bien de leurs moyennes volumiques sur l'ensemble de la cuve ; ainsi que de l'évolution de toute grandeur accessible directement ou indirectement dans le volume des données recueillies.

4°/ Le maillage de la cuve et ses caractéristiques :

Le réacteur utilisé est une cuve standard d'un volume de 5 ou 50 litres. Le problème formulé a fait l'objet de plusieurs simulations numériques dans les deux cas avec les dimensions réelles de cette cuve standard. Ces simulations se basent sur un maillage, non structuré de 326395 mailles. La cuve est partagée en deux régions d'importances dynamiques différentes: la région voisine de la turbine, formant une capsule autour de celle-ci en figure II-3(b) d'une part (127304 mailles), et le reste de la cuve d'autre part (199091 mailles). Ce maillage, non structuré, est généré automatiquement par le logiciel Mixsim 2.0 [35] de Fluent et ses caractéristiques n'ont pas fait l'objet d'une recherche particulière. Les mailles sont tétraédriques et la figure II-3(a) en présente les traces dans un plan vertical de la cuve.

La capsule est solidaire de la turbine et a la même vitesse de rotation que celle-ci. La recherche des qualités des mailles, telles une bonne symétrie globale au niveau de la cuve et surtout au niveau des mailles elles-mêmes ainsi que d'autres paramètres

sont des données dont l'importance peut s'avérer déterminante au niveau de la convergence. Pour plus d'informations sur le maillage, voir [36].



Figure

II-3: (a)

Coupe du

maillage (b) Capsule de référence de la turbine

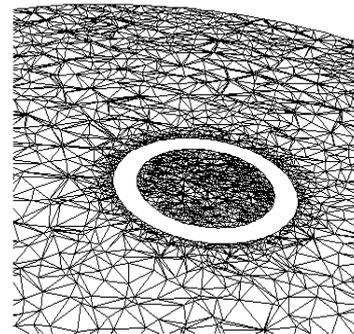
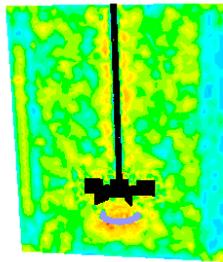


Figure II-4: (a) Champs du déséquilibre
équiangulaire

(b) Raffinement du maillage

Un raffinement du maillage a été effectué au voisinage des parois et au niveau du distributeur de la phase dispersée.

La simulation est faite en 3D malgré la symétrie géométrique axiale apparente de la cuve afin de procéder à l'injection de l'échantillon dans un endroit quelconque de celle-ci. Cette symétrie axiale n'est pas respectée par l'écoulement si cette condition initiale ne présente pas la même symétrie. La conséquence immédiate de cette dissymétrie initiale est l'évolution non homogène de la dynamique de l'écoulement pour les deux phases et les scalaires. Par ailleurs, lorsque l'écoulement est turbulent, l'aspect aléatoire intrinsèque à la turbulence ne présente par essence pas de symétrie. Dans de telles conditions aussi, pour l'écoulement autour d'une sphère, utilisé dans le chapitre III, cette symétrie qui reste valable jusqu'à $Re \approx 400$, voit la naissance

d'un sillage manifestant un caractère tridimensionnel (rouleaux tourbillonnaires). Ceci est la conséquence de la non-linéarité des équations de Navier-Stokes.

L'absence de symétrie de l'injection et du gradient de la concentration en culture qui en résulte induit des gradients de la vitesse de croissance de la culture et des autres constituants et par conséquent un mélange non homogène. Il en découle par la suite, lorsqu'on tiendra compte de la constitution du milieu dans l'évolution de sa viscosité, l'effet de la croissance de la culture sur l'hydrodynamique du réacteur. En ce même sens, la consommation du substrat rend le milieu de moins en moins visqueux, mais la génération de produit et surtout l'accroissement de la culture en augmente la viscosité. Les caractéristiques rhéologiques du mélange sont donc en évolution continue et globalement non homogène.

Les contraintes matérielles et logicielles de calcul disponibles ont permis de considérer des maillages-support des simulations d'environ 180000 à 380000 mailles mais la configuration utilisée n'a pas pu endosser un maillage de 1200000 mailles. Par la suite, le maillage de 326395 mailles est adopté pour tous les calculs.

5°/ Les paramètres influents sur la résolution numérique :

Outre les qualités du maillage dont les conséquences sur la convergence sont déterminantes, d'autres paramètres peuvent influencer sur celle-ci. Dans le cadre de la volonté du présent travail, les grandeurs, dans leur majorité, sont appelées à ne pas être homogènes; leurs variations spatiales ou temporelles peuvent occasionner des forts gradients et induire des instabilités de calcul ou des mauvais conditionnements des méthodes numériques utilisées. L'effet des procédures d'approximation et de troncature sur les valeurs calculées, conjugué avec l'énorme volume de calcul amplifient ces phénomènes (phénomène de propagation -diffusion- des erreurs d'arrondi). Les paramètres de sous-relaxation, accessibles sur le code de calcul, permettent d'améliorer la qualité de la convergence au détriment de sa vitesse. Les coefficients de sous-relaxation permettent de réduire le pas d'avancée pour les méthodes de descente dans les algorithmes relevant de ce type de méthodes. Le fait de réduire (en minimisation par exemple) ce pas d'avancée vers la solution optimale recherchée, permet de cheminer vers celle-ci sur les bords d'une « rigole » contenant le meilleur chemin menant à elle. D'autres propriétés mathématiques du problème, telles la connexité, la convexité de l'ensemble des solutions réalisables ou de son conditionnement peuvent influencer lourdement sur la résolution. On trouve les

justifications théoriques de l'usage de ces coefficients dans les manuels d'analyse numérique qui traitent de la résolution des systèmes d'équations ou des problèmes d'optimisation.

6°/ L'analyse et l'exploitation des résultats :

Les résultats recueillis après les calculs sont constitués de données numériques, graphiques, en images ou en films.

Les champs recueillis dans cette étude, portent sur :

- les coordonnées des centres des mailles et leurs volumes, ainsi que les centres des faces et leurs surfaces normalisées.
- les vecteur-vitesses des phases du mélange ainsi que leurs fractions volumiques et ceux des grandeurs relatives à la turbulence.
- les champs des pressions.
- les champs des concentrations des scalaires.
- les champs d'autres grandeurs telles le nombre de Reynolds des mailles ou le taux de cisaillement,...etc....

Il est donc possible de disposer d'une foule de résultats et d'informations sur l'activité interne à la cuve par reconstruction de courbes ou de surfaces en 3D et d'en faire une interprétation. L'activité d'analyse des résultats (ou postprocessing) relève de la maîtrise du code de calcul, d'une bonne dose de pratique ainsi que d'un objectif permettant le fil conducteur de cette analyse.

IV - ASPECTS MATERIELS INFORMATIQUES :

L'ensemble des calculs est mené sur un ordinateur personnel (PC) ayant un processeur cadencé à 2,4 Ghz, doté de 4G de mémoire vive et un disque dur de 120G. Le logiciel de calcul utilisé est constitué d'un solveur d'équations aux dérivées partielles (Fluent 6.18 puis 6.23 [35,36]) dédié au traitement des problèmes de la mécanique des fluides. Le logiciel de CAO de génération automatique de cuve maillée, fait partie de la même famille (Mixsim 2.0 [35]), permet de réaliser la cuve et génère en même temps le maillage. C'est un logiciel dédié au mélange au sein des cuves agitées. Sa portée ne permet pas la simulation de notre problème. La cuve maillée est donc récupérée et utilisée par le solveur des EDP.

D'autre part, la souplesse de ce solveur permettant l'adjonction de programmes adaptés à des situations personnalisées (par des fonctions-utilisateur ou UDFs), nous

offre la possibilité de compléter le code source originel par des fonctions traduisant la bio-réaction. Ces fonctions-utilisateur ont d'autres intérêts puisqu'elles offrent la possibilité de disposer directement des résultats bruts des calculs en cours de son exécution et même de pouvoir intervenir sur un bon nombre d'entre eux. Elles permettent par ailleurs la compréhension de plusieurs phénomènes numériques relatifs à ce type de calcul et qui sont inaccessibles à travers les résultats définitifs ou les situations d'arrêts inattendus de la machine.

V- CONCLUSIONS :

La diversité des aspects de l'étude, depuis la mise en équations du problème jusqu'à l'analyse des résultats met en collaboration dans l'élaboration de ces derniers, des méthodes qui reposent sur un ensemble épars de savoirs. Les contributions individuelles de chacun de ces domaines reposent souvent sur des notions très pointues. On retrouve dans cette collaboration, les méthodes de résolution des EDP et des ED en analyse numérique ; la turbulence ainsi que les échanges interphasiques en mécanique des fluides ; la modélisation de l'activité dans les réacteurs allant chercher dans la transformation de Laplace ou la théorie des distributions les outils à mettre en œuvre pour traiter les spécificités des situations qui se présentent. Tous ces domaines du savoir constituent des champs relativement éloignés les uns des autres et qu'on concatène pour résoudre le problème.

La chimie, dans l'étude de l'évolution d'une réaction sur fond d'écoulement, a tiré profit de cette coopération de savoirs et méthodes pour bénéficier des retombées de la CFD dans de nombreux domaines, allant des réactions lentes jusqu'au explosions dans les moteurs et à la simulation des flammes. La biochimie et la biologie peuvent mettre à contribution ce moyen d'évaluation et de prospection pour les mêmes raisons et en tirer les mêmes bénéfices.

Il ressort donc de l'énumération de ces divers aspects du problème, que la contribution du présent travail ne saurait endosser et mettre en œuvre l'intégralité de leurs ambitions respectives mais subsistera des améliorations à apporter telles :

- le diamètre non constant des bulles d'air de la phase gazeuse.
- la prise en compte de la température pour les bioréactions endo/exothermiques ainsi que les phénomènes de catalyse de la réaction.

- La réduction éventuelle des dimensions des mailles et du pas temporel afin de permettre un suivi plus fin de l'évolution de la bioréaction et l'adaptation aux cuves de grandes dimensions.
- La recherche de méthodes numériques plus adaptées à ce genre de problème et à son traitement.
- La mise en œuvre de traitements sur machines à multiprocesseurs ou en ayant recours au calcul parallèle par le biais d'algorithmes adaptés.
- L'étude de plusieurs modèles biologiques et particulièrement ceux dont les cinétiques mettent en jeu d'autres paramètres hydrodynamiques tels la température, la pression, le cisaillement.

CHAPITRE III

STRUCTURE DE L'ÉCOULEMENT DANS UN BIOREACTEUR HÉTÉROGÈNE: (CAS DE LA CUVE AGITÉE AÉRIÉE)

INTRODUCTION: Un réacteur **homogène** est supposé ne contenir qu'une seule «phase».

Dans les réacteurs biologiques, il s'agit en général d'une phase liquide. Ainsi, les réacteurs à enzymes solubles, aussi bien que la plupart des réacteurs anaérobies à cellules dispersées, peuvent être considérés comme des bioréacteurs homogènes, dans la mesure où la matière transformée est soluble et donc le milieu est hydrodynamiquement monophasique. « Une définition hydrodynamique » d'une phase qualifie ainsi toute substance fluide homogène ayant un comportement hydrodynamique propre au sein d'un mélange. Cette définition introduit la notion de phase dispersée liquide, solide ou gazeuse au sein d'un mélange comportant une autre phase qui est « topologiquement » continue.

Les bioréacteurs sont considérés comme **hétérogènes** lorsque le biocatalyseur est fixé sur un support, que le milieu est aéré ou que le substrat est solide. Ils comportent fréquemment deux ou trois phases (liquide, solide ou gazeuse). Le réacteur support de l'étude est une simple cuve mécaniquement agitée dans laquelle la phase substratée est aérée. **L'agitation** doit être efficace dans le cas des mélanges visqueux et suffisamment douce en présence de cellules très fragiles. Les systèmes d'agitation devront permettre à la fois une homogénéisation correcte du milieu, mais joueront également un rôle important dans le transfert de matière, tel que celui de l'oxygène. L'aération, qui est souvent le premier facteur limitant, notamment aux fortes concentrations cellulaires, doit être dimensionnée avec soin, en particulier dans le cas des réacteurs très volumineux. Par contre, des systèmes d'aération douce doivent être conçus pour ceux des procédés mettant en œuvre des cellules très sensibles aux **forces de cisaillement** provoquées par les bulles d'air ou par les mobiles.

Dans ce chapitre, nous analysons le gradient des vitesses créé dans une cuve agitée, à partir duquel nous pouvons calculer la force de frottement (de traînée de friction) ou la contrainte de cisaillement, ainsi que la structure de l'écoulement du mélange gaz-liquide obtenue. Cette analyse se fait parallèlement dans deux cuves standard agitées par la

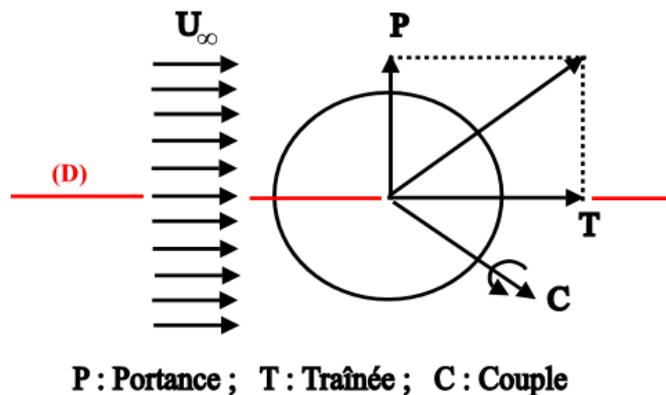
turbine classique RUSHTON pour l'une et par un nouveau mobile curviligne, intitulé NARCISSE pour l'autre. Notons que la force de traînée est la somme des forces de frottement et de pression. L'accès à la force de frottement nécessite en général la connaissance du champ des contraintes de cisaillement, ce qui rend la mesure de cette grandeur physique plus délicate. Nous allons par la suite comparer les résultats des méthodes expérimentales et numériques permettant d'atteindre cette grandeur. Plus précisément, le gradient de vitesse dans la cuve sera estimé par une technique électrochimique, utilisant des sondes sphériques et il sera par ailleurs évalué, dans les mêmes conditions, par la CFD.

I – EVALUATION DU CISAILLEMENT DANS UNE CUVE AGITEE A L'AIDE D'UN CAPTEUR SPHERIQUE PAR LA CFD:

1°/ Le facteur de friction:

Figure III-1:

Sphère dans un écoulement soumise aux forces de traînée, de portance et au couple.



Tout obstacle, plongé dans un écoulement, figure III-1, développe une résistance à celui-ci. Le facteur de friction, pour une sphère de diamètre d , dans l'écoulement de vitesse établie U_∞ d'un liquide de viscosité μ_L et de masse volumique ρ_L constantes, se calcule par :

$$C_x(\text{Re}) = \frac{T}{\frac{1}{2} \rho S U_\infty^2} \quad \text{avec} \quad S = \frac{\pi d^2}{4} \quad (\text{III} - 1)$$

où T est l'intensité de la force de traînée \vec{T} qui s'exerce sur la sphère et qui est donnée par :

$$\vec{T} = \iint_S \overline{\tau(M)} ds \quad (\text{III} - 2)$$

et $\overline{\tau(M)}$ est la contrainte locale au point M de la surface S de la sphère. Ce nombre adimensionnel C_x , aussi bien que des coefficients semblables pour la portance P et le couple C , exprime le rapport de cette résistance T aux forces de pression exercées sur

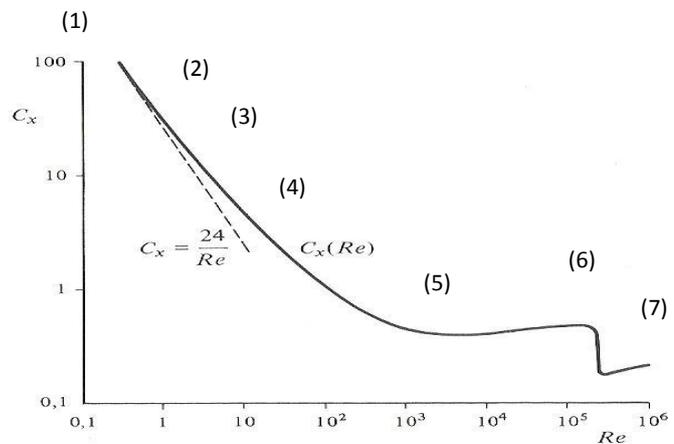
la sphère. Il varie avec la nature de l'écoulement et est donc fonction du nombre de Reynolds

$$Re = \frac{\rho_L U_\infty d}{\mu_L} \quad (III - 3)$$

La courbe de la figure III-2 donne l'évolution de C_x en fonction de Re .

Figure III-2:

Variations du coefficient de traînée avec le nombre de Reynolds.



2°/ Structure de l'écoulement autour d'une sphère :

La structure de l'écoulement du fluide autour de la sphère évolue en fonction du nombre de Reynolds. Pour détecter et repérer ces changements, deux approches peuvent être utilisées, l'une globale et l'autre locale.

a) Approche globale :

Le facteur de friction adimensionnel C_x , exprime la force de traînée, exercée sur la sphère par l'écoulement du fluide. On peut distinguer, à travers la figure III-2 plusieurs régions indiquant ainsi un changement de structure autour de la sphère:

- (1)- Pour $Re < 0,1$, il s'agit d'un écoulement rampant sans décollement de la couche limite, symétrique par rapport à l'axe (D) de la sphère parallèle à la direction de la vitesse de l'écoulement.
- (2)- Pour $Re \approx 4$, un décollement apparaît à l'arrière de la sphère le long d'un cercle. Il s'accompagne d'un tourbillon torique.
- (3)- pour $Re \approx 10$, le tourbillon à l'arrière augmente de volume et le cercle occupe une position diamétrale dans le plan perpendiculaire à l'axe (D) passant par le centre de la sphère.
- (4)- pour $Re \approx 100$, un cercle de décollement apparaît sur la face avant de la sphère et un sillage apparaît à l'arrière de la sphère.
- (5)- Pour $400 < Re < 3 \times 10^5$, le facteur de friction est quasi constant autour de la valeur de 0,45. Le tourbillon se détache et prend une forme hélicoïdale. Aux

environs de $Re = 1000$, il y a formation d'un sillage qui est une zone très perturbée.

(6)- Pour $3 \times 10^5 < Re < 4 \times 10^5$, une brusque diminution de ce facteur qui atteint la valeur de 0,07 indique un régime critique qui est caractérisé par un nombre de Reynolds critique correspondant généralement à un facteur de friction $C_x = 0,3$.

(7)- Pour $Re > 4 \times 10^5$, C_x augmente pour tendre vers la valeur $C_x = 0,19$. Il s'agit du régime supercritique.

Une description de ces étapes est présentée par R. Comolet dans [6].

b) Approche locale :

L'évolution du facteur de friction en fonction du nombre de Reynolds ne suffit pas à elle seule pour nous renseigner sur l'aspect local de l'écoulement.

Ainsi, plusieurs auteurs ont procédé par différentes méthodes aussi bien numériques qu'expérimentales pour donner une description et une quantification plus détaillées, comme des profils de vitesses, des lignes de courant ou des variations de pression en surface. Les méthodes expérimentales qui utilisent les traceurs pour visualiser les lignes courant, ainsi que les résolutions numériques basées sur la détermination du champ des vitesses, des lignes de courant et de la vorticité nous éclairent plus sur ce caractère local.

Pour des nombres de Reynolds assez faibles, nous parlons d'un écoulement rampant dont les lignes de courant contournent toute la sphère sans qu'il y ait détachement de la couche limite. Celles-ci sont symétriques par rapport à l'axe (D) et le sont aussi par rapport au plan équatorial. Cette situation est observée de façon d'autant plus précise que la vitesse d'approche est plus faible, soit pour un nombre de Reynolds inférieur à 0,1.

Pour un nombre de Reynolds voisin de 20, une recirculation de l'écoulement se produit. Un petit tourbillon axisymétrique apparaît au point de stagnation arrière. Cependant, la valeur du nombre de Reynolds pour laquelle la recirculation commence à faire l'objet d'un débat et diffère selon les méthodes utilisées. Les méthodes numériques basées sur un changement du signe du rotationnel suggèrent un nombre de Reynolds proche de 10, alors que les techniques nécessitant la

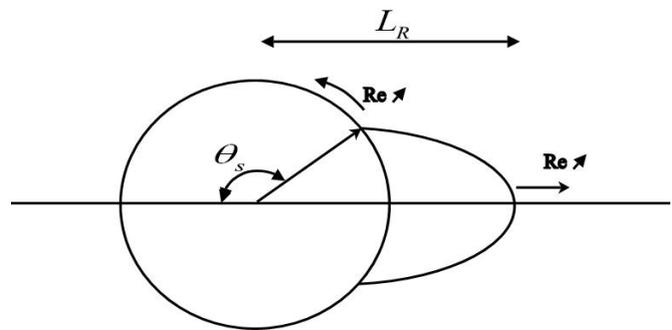
visualisation de très petits tourbillons indiquent un nombre de Reynolds un peu plus élevé. Par exemple, TANEDA (1965), propose la valeur 24 pour Re .

Une zone de sillage stable est observée pour un nombre de Reynolds compris entre 20 et 130. Quand Re augmente au-delà de 20, cette zone de circulation correspondante au tourbillon s'étend tout en restant attachée à la sphère.

Le développement du sillage est illustré par les photos montrant l'évolution de la structure de l'écoulement dans la partie en aval de la sphère en figure III-4 dues à TANEDA (1956). NAKAMURA (1976), suggère que le sillage change d'une forme convexe à une forme concave à un nombre de Reynolds de 35.

Le sillage est caractérisé par l'angle de décollement θ_s et la longueur de recollement L_R comme sur la figure III-3:

Figure III-3:
Sphère et son sillage



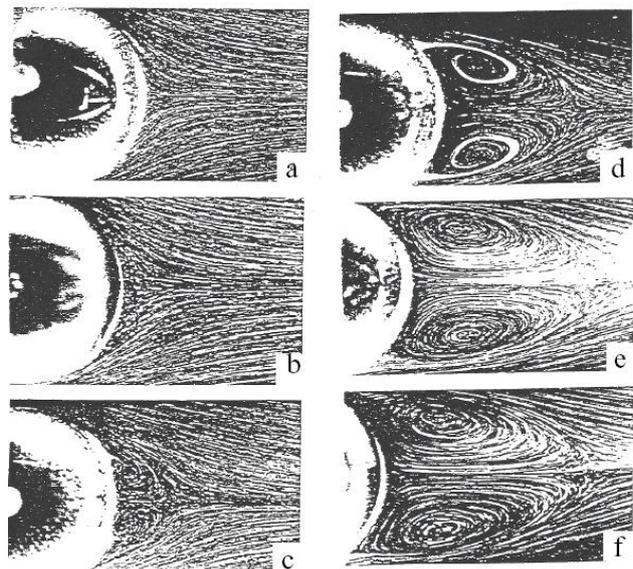
L'angle de décollement se déplace vers l'amont (diminue avec Re) et la longueur de recollement L_R augmente lorsque Re augmente. L'angle de séparation, mesuré en degrés, est approximé par la relation suivante, (CLIFT, 1978) :

$$\theta_s = 180 - 42,5 \left(\frac{Re}{20} \right)^{0,483} \quad \text{pour } 20 < Re < 400 \quad (III - 4)$$

Figure III-4:

Photos de TANEDA (1956) montrant le développement du sillage à l'arrière d'une sphère rigide pour différents nombres de Reynolds Re :

- | | |
|-----------|-----------|
| (a): 17,9 | (d): 73,6 |
| (b): 26,8 | (e): 118 |
| (c): 37,7 | (f): 133 |



Au voisinage de $Re = 130$, des oscillations de faible amplitude et de basses fréquences apparaissent à l'extrémité du sillage (TANEDA, 1965). L'amplitude de ces oscillations augmente quand Re augmente et peut atteindre 10% du diamètre de la sphère pour $Re = 270$ (GOLDBURG et coll., 1966). Toutefois, l'écoulement arrière du sillage reste laminaire jusqu'à des nombres de Reynolds largement supérieurs à 200.

Le sillage commence à devenir instable pour Re compris entre 130 et 400. En effet, au-delà de 130, l'équilibre entre la production du rotationnel à la surface de la sphère et sa diffusion et convection dans le fluide, devient instable. À cause des pulsations du fluide, en recirculation, de gros tourbillons se détachent périodiquement sous forme d'anneaux qui sont convectés vers l'aval, tout en conservant leur symétrie axiale. L'importance de la traînée de pression augmente continuellement avec Re , et surpasse la traînée de frottement pour $Re > 150$.

Pour $Re > 400$, les tourbillons qui se détachent perdent leur caractère axisymétrique, et on observe dans le sillage des rouleaux tourbillonnaires qui se forment de plus en plus près de la sphère. Ces rouleaux qui ont une structure en fer à cheval (ACHENBACH, 1974), perdent leur caractère individuel et s'interpénètrent formant ainsi des masses tourbillonnaires. Vers $Re = 1300$, le sillage manifeste des rotations autour des trois axes, tandis que les vitesses en arrière de la sphère fluctuent en grandeur et en direction à cause de détachement des rouleaux tourbillonnaires (SEELEY, 1972).

3°/ Structure de l'écoulement dans la cuve agitée:

La structure et les caractéristiques des écoulements dans une cuve agitée sont le reflet des performances de l'ensemble des composants de l'équipement d'agitation dans son interaction avec le mélange et ses propres caractéristiques. Ces propriétés contribuent au dimensionnement des installations. L'étude de l'agitation permet d'établir diverses classifications: celles des écoulements eux même, des mobiles d'agitation, des cuves,...et par-là l'adoption de matériel convenable pour un procédé donné.

Pratiquement, tout écoulement est tridimensionnel et présente des échanges entre différentes zones s'il est confiné. Dans le cas de la cuve agitée, les échanges sont de type axial (échanges haut-bas) ou radial (échanges axe-paroi latérale). L'absence de chicanes engendre un écoulement avec vortex qui peut être utile pour certaines applications mais ne permet pas un mélange de bonne qualité. La figure III-4 illustre ces

quelques situations qui peuvent avoir des variantes intermédiaires et ces considérations sont aussi étroitement dépendantes des mobiles utilisés en nombre et en géométrie..

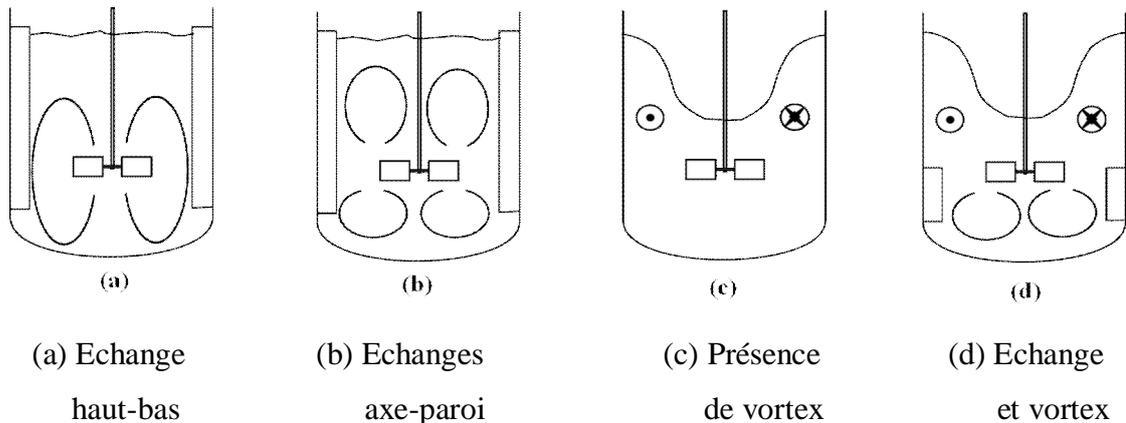


Figure III-5: Types d'échanges cinétiques dans une cuve agitée.

Dans le cas des systèmes gaz-liquide, une dispersion complète et homogène des bulles reste un objectif très important pour assurer un apport spatialement uniforme en oxygène dissout. Aussi, les recherches sur les mobiles assurant cette dispersion ainsi que d'autres qualités favorables ou défavorables pour le fonctionnement des bioréacteurs sont toujours d'actualité. Dans ce cadre, la turbine Narcisse (Vlaev et al. 2002), dotée d'une résistance hydrodynamique réduite due probablement à son profil épicycloïdal, est présentée, avec les mêmes dimensions géométriques qu'une turbine Rushton, en comparaison avec celle-ci, dans une cuve de 40cm de diamètre. L'étude de la conception et des caractéristiques des agitateurs reste toujours d'actualité pour les besoins de plus en plus pointus des applications [28, 29, 30, 91, 92].

4°/ Problématique de la validation du «calcul par la CFD» :

Lors de l'agitation dans un réacteur, les sources d'agitation (turbine et/ou injection gazeuse), installent et entretiennent un champ de cisaillement dans la cuve. Ce champ a des effets qui peuvent être bénéfiques ou non pour une culture donnée. **Une absence totale d'agitation réduit le milieu de la culture à une zone morte alors qu'une agitation trop intense peut occasionner des dégâts irréversibles sur les cellules elles-mêmes (destruction) ainsi que d'autres phénomènes (écumes,...).** Les efforts de cisaillement sont responsables, outre et partiellement de l'homogénéisation, de la dispersion des petites bulles de gaz en réduisant leur coalescence. La source d'agitation constituée par la turbine, conjuguée avec les caractéristiques hydrodynamiques du milieu à agiter, peut opérer à divers régimes et générer ainsi divers champs de

cisaillements ayant des conséquences différentes sur l'ambiance dans le réacteur. Le taux de cisaillement qui est précisément un paramètre impliqué dans la qualité du milieu biologique, sujet d'une interdépendance avec la viscosité du milieu, nécessite un intérêt particulier lors de l'étude d'un réacteur. Son évaluation se fait par le biais de capteurs à travers la mesure de celle des champs des vitesses et conformément à des méthodes développées pour cet objectif et aux contraintes de leurs modes opératoires.

Ces champs des vitesses, disponibles simplement par calcul numérique en résolvant les équations de l'écoulement, livrent avec plus de facilité les valeurs de ce taux de cisaillement. Ce dernier, dépendant directement de l'agitateur peut donc caractériser celui-ci dans une forme de cuve donnée et contribuer efficacement à une prise de décision lors d'une étude.

Dans ce chapitre, l'objectif est de répondre à deux questions :

- Peut-on obtenir, par la CFD, des distributions du taux de cisaillement dans des cuves agitées et qui soient conformes à celles obtenues par des méthodes expérimentales ayant déjà fait leurs preuves?
- Dans l'affirmative, peut-on rendre compte de différences pratiques entre deux turbines différentes, en concordance avec le verdict obtenu à travers des valeurs expérimentales déjà validées?

Pour répondre à ces deux questions, les distributions des taux de cisaillement ont été calculées pour les deux turbines citées auparavant, d'une part la turbine Rushton et la turbine Narcisse, et ensuite comparées à des valeurs expérimentales obtenues par une méthode électrochimique (Reuss; Vlaev et al; Nikov).

A travers ces résultats ainsi que d'autres données rencontrées dans la littérature, il ressort une coïncidence entre les valeurs mesurées et calculées validant ainsi la technique d'évaluation du taux de cisaillement par la CFD.

Par la suite, une étude comparative des distributions des deux taux de cisaillement correspondant aux deux turbines est entreprise et confrontée à une étude identique faite pour les mêmes turbines à travers les valeurs mesurées in situ. Il en découle une confirmation supplémentaire de l'aptitude de la CFD à caractériser des turbines différentes, en termes de cisaillement produits par celles-ci, et à permettre de trancher selon un critère basé sur ce taux de cisaillement.

II – LES EVALUATIONS EXPERIMENTALE ET PAR CFD DU CISAILLEMENT:

1°/ Introduction :

Les travaux concernant la mesure directe de la force de frottement ou du coefficient de traînée sur une sphère ne sont pas abondants dans la littérature (Nikov et Delmas; 1992)[58]. La mesure directe du gradient pariétal de vitesse est fournie par les travaux de Reiss et Harnatty (1962 et 1963) [55, 56].

En effet, les auteurs ont établi dans le cas d'une microélectrode sphérique affleurant la paroi d'un tube, une relation entre le coefficient de transfert de matière apparent mesuré par l'intermédiaire du courant limite sur l'électrode et le gradient de la vitesse longitudinale à proximité de la paroi. Dans ce modèle, Reiss et Harnatty proposent cette relation sous réserve des conditions d'utilisation suivantes :

- (1)- Les échelles de turbulence sont largement supérieures à la dimension de l'électrode; ce qui signifie que l'écoulement est uniforme sur la surface de celle-ci et dans son voisinage immédiat.
- (2)- L'épaisseur de la couche limite de concentration est inférieure à celle de la couche hydrodynamique et ces deux épaisseurs sont, à leur tour, inférieures au diamètre de la colonne.
- (3)- Les intensités locales de la turbulence dans les directions x et z sont faibles.
- (4)- Les propriétés physico-chimiques du fluide, telles que la masse volumique, la viscosité et la diffusivité de matière restent constantes.

La mesure de la force de frottement sur une sphère isolée par utilisation d'une microélectrode insérée sur la sphère a été réalisée pour la première fois par Riba (1978) [57], puis par Nikov et Delmas (1992) [58].

La méthode expérimentale utilisée adopte la même technique électrochimique décrite auparavant et est appliquée par Vlaev et all. (2006) dans le cas d'une cuve agitée. Cette technique consiste en la détermination du coefficient de transfert de matière local apparent (et par la suite du gradient pariétal de vitesse), qui est déduit du courant limite de diffusion, lors de la réduction d'une espèce électroactive sur une petite surface active insérée en effleurement à la surface d'une bille de matière isolante. Cette bille de plastique de 10mm de diamètre, a été percée et traversée par un canal coudé de 90° dans lequel est introduit un fil d'or gainé de 1mm de diamètre et qui est coupé au ras de la surface comme le montre la figure III-6. Le tube rigide, visible sur la figure III-7, lui

sert de support et permet d'orienter la microélectrode, par rotation de son support d'un angle θ par rapport à la direction moyenne de l'écoulement.

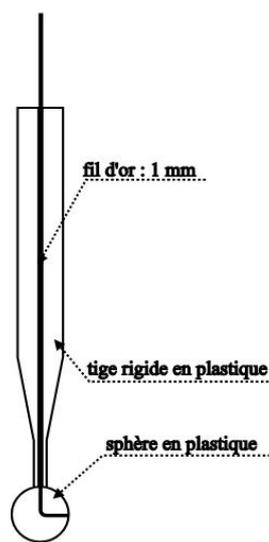


Figure III-6: Schéma de la microélectrode.

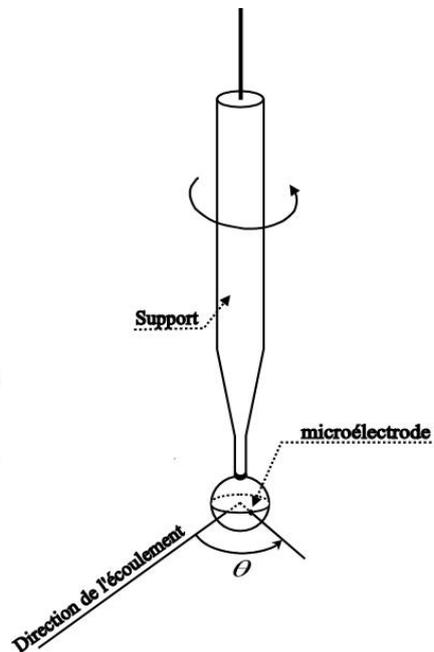
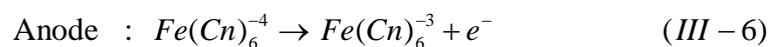


Figure III-7: Position angulaire de la microélectrode.

Le liquide employé est le ferricyanure-ferrocyanure de potassium. La réaction mise en jeu au niveau de l'électrode de travail est la réduction du ferricyanure, tandis qu'au niveau de la contre-électrode a lieu l'oxydation du ferrocyanure ; comme dans les réactions suivantes :



2°/ La sonde et l'évaluation expérimentale du cisaillement:

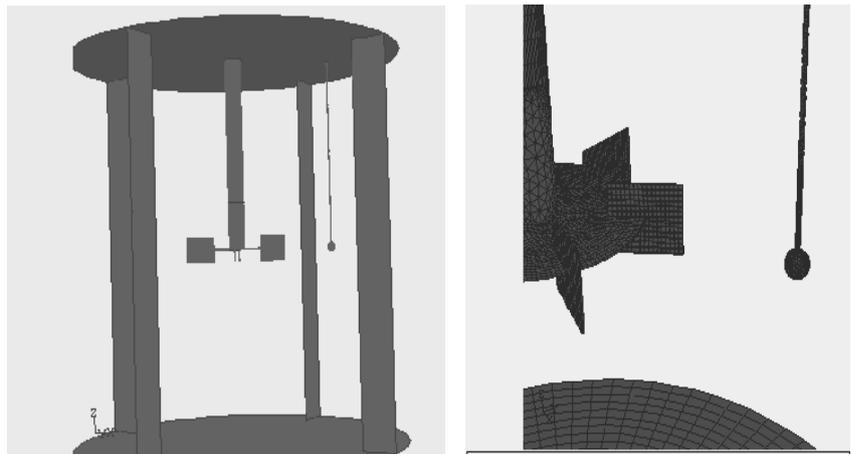
Dans [59], S.D. Vlaev, I. Nikov et M. Martinov exposent une étude sur la sélection d'une turbine basée sur l'évaluation expérimentale du taux de cisaillement par une technique d'électrodiffusion. L'étude fournit des données pour plusieurs turbines, liquides et régimes d'écoulements qui peuvent être utilisées pour faciliter une procédure de validation de l'évaluation de ce taux. Dans le cas où son évaluation par la CFD confirme les résultats de cette étude, ceci légitime l'utilisation de cette dernière dans des situations similaires.

L'importance du problème se manifeste dans des études récentes, de plus en plus présentes à travers la littérature. Parmi de telles études, celles sur le taux de cisaillement dans les cuves non chicanées, des fluides à rhéologies particulières [60], des taux de cisaillements maximums au voisinage des disques et des pales plates [61,62], au voisinage des turbines A315 et A200 dans les liquides à rhéologie suivant la loi de puissance [63]; celles sur les jours dans les pales [64], sur les taux de cisaillement causés par les turbines lors d'une agitation oscillatoire [65] ou au voisinage des parois en rotation dans les échangeurs de chaleur [66].

a) La cuve et le dispositif de mesure:

Pour l'évaluation expérimentale du taux de cisaillement, la sonde sphérique de 10mm de diamètre, avec sa microélectrode de 1mm de diamètre, est suspendue au niveau de la turbine comme l'indique la figure III-8.

Figure III-8:
Dispositif de mesure
par la
sonde sphérique.



b) Eléments théoriques support de la méthode de mesure:

En mécanique des fluides, le tenseur des taux de distorsions est :

$$(\tau_{ij}) = \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) \quad (III - 7)$$

et se décompose en ses deux parties :

- la partie symétrique, le tenseur des déformations $(\varepsilon_{ij}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)$ (III - 8)

pour lequel, en tout point M de l'écoulement :

- ε_{ii} décrit l'allongement dans la direction i pour $i = 1, 2, 3$.
- ε_{ij} décrit le cisaillement dans le plan (i, j) pour $(i, j) = (1;1), (1;2)$ et $(2;3)$.

- la partie antisymétrique, le tenseur des rotations $(\omega_{ij}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)$ (III – 9)

et ne joue pas de rôle en élasticité. Il est appelé aussi tenseur de vorticit .

Le tenseur des taux de cisaillement s'écrit $\dot{s}_{ij} = \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)$ (III – 10)

qui, pour des matériaux incompressibles (vitesse de dilatation nulle) vaut $\dot{s}_{ij} = \dot{\gamma}_{ij}$.

Le courant I_d , résultant de la réduction rapide des ions ferriques   la surface de la sph re est mesur . Le taux de cisaillement au voisinage de la paroi de la sonde

\dot{s} est li    ce courant I_d par la relation : $\dot{s} = \left(\frac{1.477}{n_z F} \right)^3 \frac{I_d^3}{D_{eff}^2 C_0^3 d_e^5}$ (III – 11)

dans laquelle n_z est le nombre d' lectrons  chang s, F est la constante de Faraday, D_{eff} est le coefficient de diffusion des ions actifs dans la solution dont C_0 est leur concentration molaire et d_e est le diam tre de la micro lectrode circulaire. On a $D_{eff} = 6,7 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2 / \text{s}$ [58] et $C_0 = 2 \text{ mol} / \text{m}^3$.

La sonde sph rique est immerg e   diff rents endroits de la cuve. Le taux d' lectrodiffusion ionique   sa surface est mesur  et le taux de cisaillement est d duit par la relation (III – 10). Des donn es exp rimentales du taux \dot{s} sont pr sent es dans la publication [67] et figurent dans la litt rature [62, 68].

Ces r sultats sont analys s et se trouvent r sum s dans les tableaux du paragraphe V de ce chapitre conjointement   ceux obtenus par la CFD.

3 / L' valuation num rique (par CFD) du cisaillement:

(a).  l ments th oriques :

Afin de proc der   l' valuation du taux de cisaillement dans des conditions similaires   ceux du dispositif exp rimental, une sph re a  t  cr e e aux endroits concern s et les conditions hydrodynamiques   la surface de la sph re configur es en cons quence. Les calculs ont  t  effectu s en utilisant les  quations de Navier-Stokes moyenn es (mod le RANS). Ce mod le, introduit par Reynolds en 1883, est bas  sur la notion de fluctuation des grandeurs en  coulements. A la base de son  laboration, il y a le fait que toute grandeur hydrodynamique ϕ est consid r e comme repr sentant une distribution spatio-temporelle de valeurs autour de sa

moyenne d'ensemble $\bar{\phi}$. Ainsi, cette grandeur ϕ s'écrit, en notant ϕ' le terme correspondant aux fluctuations :

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (III - 12)$$

et par construction, on a la relation $\bar{\phi}' = 0$.

Le terme $\bar{\phi}$ peut se calculer de diverses manières, selon des considérations théoriques sur la dépendance (théoriquement supposée) des expériences de l'espace et du temps. On en cite la moyenne d'ensemble, théoriquement définie, en un point de coordonnées x , à un instant t et pour un nombre (théorique) N d'expériences par :

$$\bar{\phi}(x; t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g_i(x; t) \quad (III - 13)$$

où ϕ_i le résultat de la $i^{\text{ème}}$ expérience.

Pour des valeurs statistiques indépendantes du point concerné, on utilisera la

relation:

$$\bar{\phi}(x) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} g_i(x; t) dt \quad (III - 14)$$

et pour une indépendance de temps, on aura :

$$\bar{\phi}(t) = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \int_V g(x; t) dx \quad (III - 15)$$

Ce formalisme, théoriquement riche, permet de pallier les carences interprétatives de certains phénomènes tels la turbulence ou d'autres phénomènes à caractères purement aléatoires. On rencontre dans la littérature, une activité croissante sur la turbulence traduisant une part de progrès en termes d'acquis [11, 70, 71] et de volonté de maîtrise de celle-ci.

Pour l'écoulement d'un fluide incompressible newtonien et en considérant le volet énergétique, les équations de Navier-Stokes traduisant l'écoulement découlent de :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \end{array} \right. \quad (III - 16)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \otimes \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau \end{array} \right. \quad (III - 17)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho e}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e \vec{v}) = -\nabla \cdot q - p \nabla \cdot \vec{v} + \Phi \end{array} \right. \quad (III - 18)$$

dans lesquelles, ρ , \vec{v} , p et e désignent, à l'instant t , les valeurs locales en un point de la masse volumique, du vecteur-vitesse, de la pression et de l'énergie interne. Le caractère incompressible du fluide impose que $\nabla \cdot \vec{v} = 0$. La fermeture

de ces équations se fait par la loi des gaz parfaits si tel est le cas et par la loi de Fourier qui sont respectivement :

$$p = \rho RT \quad (III - 19)$$

et

$$q = -\lambda \nabla T \quad (III - 20)$$

R est la constante des gaz parfaits et λ la conductivité thermique du fluide.

L'opérateur τ , dans lequel μ est la viscosité dynamique du fluide, désigne le tenseur des contraintes visqueuses et s'écrit :

$$\tau = \mu \overline{\overline{D}} \quad \text{avec} \quad \overline{\overline{D}} = \left[\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v} \right] - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} I \quad (III - 21)$$

Par ailleurs, la fonction de dissipation visqueuse Φ , toujours positive ou nulle, est donnée par :

$$\Phi = \nabla \vec{v} : \tau \quad (III - 22)$$

et s'exprime explicitement, en coordonnées cartésiennes, par :

$$\Phi = \mu \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial v_x}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_y}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_z}{\partial z} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \right)^2 \right\} = 2\mu s_{ij}^2 \quad (III - 23)$$

En moyennant les équations de Navier-Stokes pour les coordonnées de la vitesse \vec{v} , la pression p , le tenseur des contraintes visqueuses τ_{ij} et l'énergie e et en notant toujours par v_x, v_y, v_z , et p les valeurs moyennes de ces grandeurs, on obtient les équations de Reynolds moyennées (RANS) qui seront reprises plus loin et complétées pour fermeture en modélisant la turbulence.

Les champs des vitesses et des pressions dans notre cas sont donc fournis par le système d'équations :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \\ \left(\begin{array}{ccc} \frac{\partial v_x}{\partial x} & \frac{\partial v_x}{\partial y} & \frac{\partial v_x}{\partial z} \\ \frac{\partial v_y}{\partial x} & \frac{\partial v_y}{\partial y} & \frac{\partial v_y}{\partial z} \\ \frac{\partial v_z}{\partial x} & \frac{\partial v_z}{\partial y} & \frac{\partial v_z}{\partial z} \end{array} \right) \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} = -\frac{1}{\rho} \begin{pmatrix} \frac{\partial p}{\partial x} \\ \frac{\partial p}{\partial y} \\ \frac{\partial p}{\partial z} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -g \end{pmatrix} + \nu \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \\ \frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \\ \frac{\partial^2 v_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \end{pmatrix} \end{array} \right. \quad (III - 24)$$

complété par des conditions frontières convenables. Il permet, à travers ces champs, l'évaluation de celui des taux de cisaillement.

(b). L'accès aux valeurs du cisaillement:

Le code de calcul permet l'accès à presque toutes les grandeurs utilisées ou déterminées à travers la résolution des équations traduisant le problème et fournit les valeurs de $\dot{\gamma}$ calculées par l'expression numérique

$$\dot{\gamma} = \sqrt{\frac{1}{2} \overline{D} : \overline{D}} \quad (III - 25)$$

qui est en relation avec les invariants du tenseur des déformations.

III - COMPARAISON DES RESULTATS:

VALIDATION DE LA METHODE «MESURE PAR LA CFD»

1°/ Evaluation du taux de cisaillement et des vitesses radiales pour la turbine RT :

Dans un premier temps, la démarche a été utilisée pour évaluer le taux de cisaillement en faisant varier les vitesses de rotations et les valeurs de la viscosité afin de disposer des régimes hydrodynamiques voulus.

Les résultats ainsi obtenus sont confrontés à leurs homologues expérimentaux concernant les vitesses et le taux de cisaillement, mais peuvent aussi porter sur d'autres paramètres du mélange.

Les expériences physiques ont été simulées d'abord pour la turbine RT et le tableau III-1 résume le bilan de ces résultats chiffrés pour $Re > 10^4$.

RT ($Re > 10^4$)	Taux de cisaillement adimensionnel	
	mesuré	Prédit par CFD [72]
Valeurs maximales du cisaillement pour RT dans l'eau et dans des fluides CMC non-Newtonniens ($Re \sim 1.10^4 - 5.10^4$) (acc. to Wichterle et al., 1984) [61]	700-1200	660
Valeur maximale sur la paroi de la sonde sphérique à 20 mm de l'extrémité de la turbine pour $Re=5.10^5$ dans l'eau. (Vlaev et al., 2005)	1050-1110	1070
Taux du cisaillement moyen dans les écoulements internes en vortex - ($Re > 10^4$) (acc. to Van't Riet and Smith, 1975) - ($Re > 5.10^3$) [68]	40-90 20-60	20-86 24-55

Tableau III-1 : Comparaison des valeurs des taux de cisaillement obtenus par mesure expérimentale et par CFD pour une turbine Rushton.

Il ressort de ce tableau une corrélation entre les valeurs expérimentales et celles fournies par CFD.

D'autre part, les vitesses radiales pour les deux turbines RT et NS sont données en figure III-9 et leurs taux de cisaillement dans le plan des turbines, pour $1,2 Pa.s$ et $2 Pa.s$, en figure III-10. L'ensemble des résultats se trouve dans l'article [73].

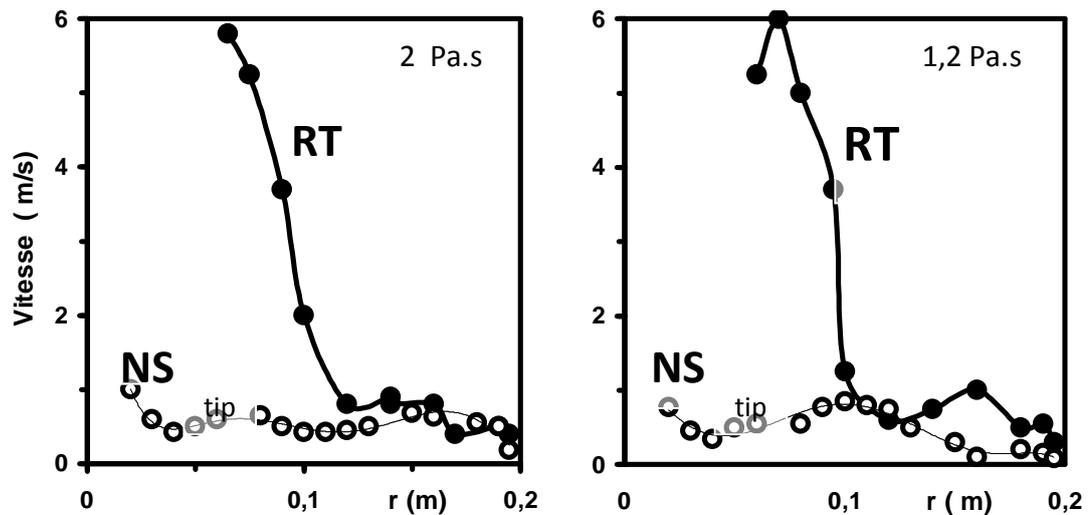


Figure III-9 : Profils typiques des vitesses radiales des turbines RT et NS dans le plan de turbine entre deux pales ($x = y$) pour des viscosités de $2 Pa.s$ et $1,2 Pa.s$.

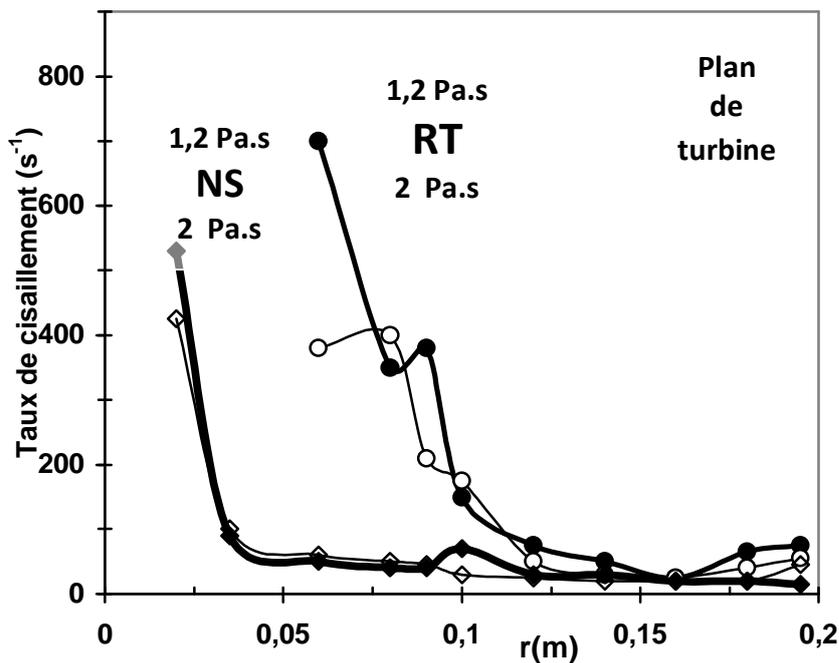


Figure III-10:

Distribution du taux de cisaillement pour RT et NS dans le plan de turbine et pour des viscosités de $1,2 Pa.s$ et $2 Pa.s$ en écoulement quasi-laminaire.

Caractérisation des zones de forte intensité pour les deux turbines.

2°/ Résultats numériques en images d'un calcul marginal:

Les figures III-11 ci-dessous livrent un aperçu de l'apport potentiel de la CFD pour la simulation de l'agitation dans deux cuves contenant un fluide ayant une viscosité de $1,2 Pa.s$. L'agitation est assurée par les deux turbines citées précédemment avec une vitesse de $600 rpm$. Ces figures présentent les champs obtenus sur deux plans verticaux perpendiculaires ($x=0$) et ($y=0$), les deux turbines étant à six pales, les champs ne sont pas de révolution autour de l'arbre d'entraînement. NS a une périodicité double de celle de RT et les pales de cette dernière ne produisent pas les mêmes résultats en fonction du sens de rotation de la turbine.

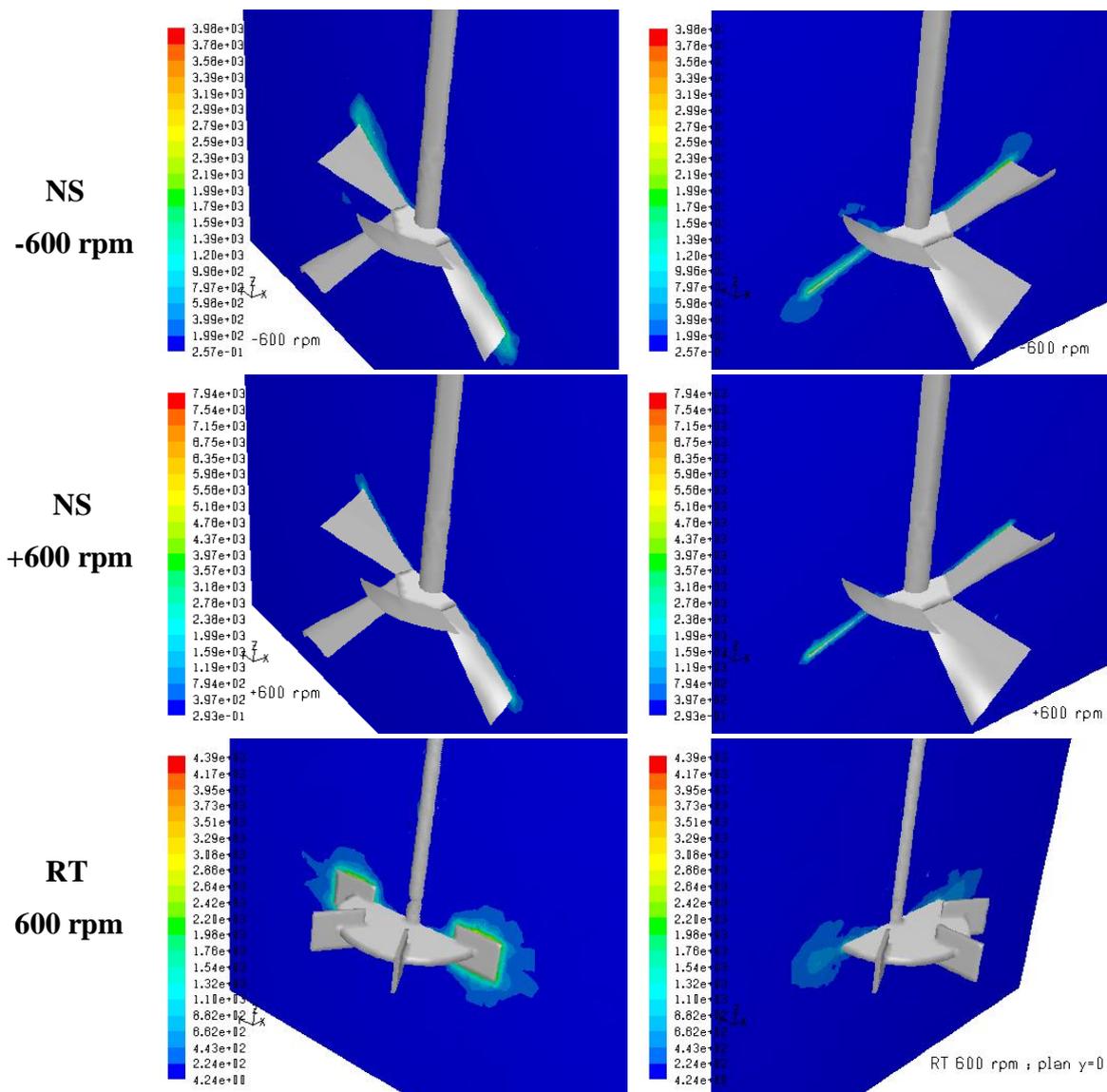


Figure III-11: Champs du cisaillement en (s^{-1}) des deux turbines pour $\mu = 1,2 Pa.s$.

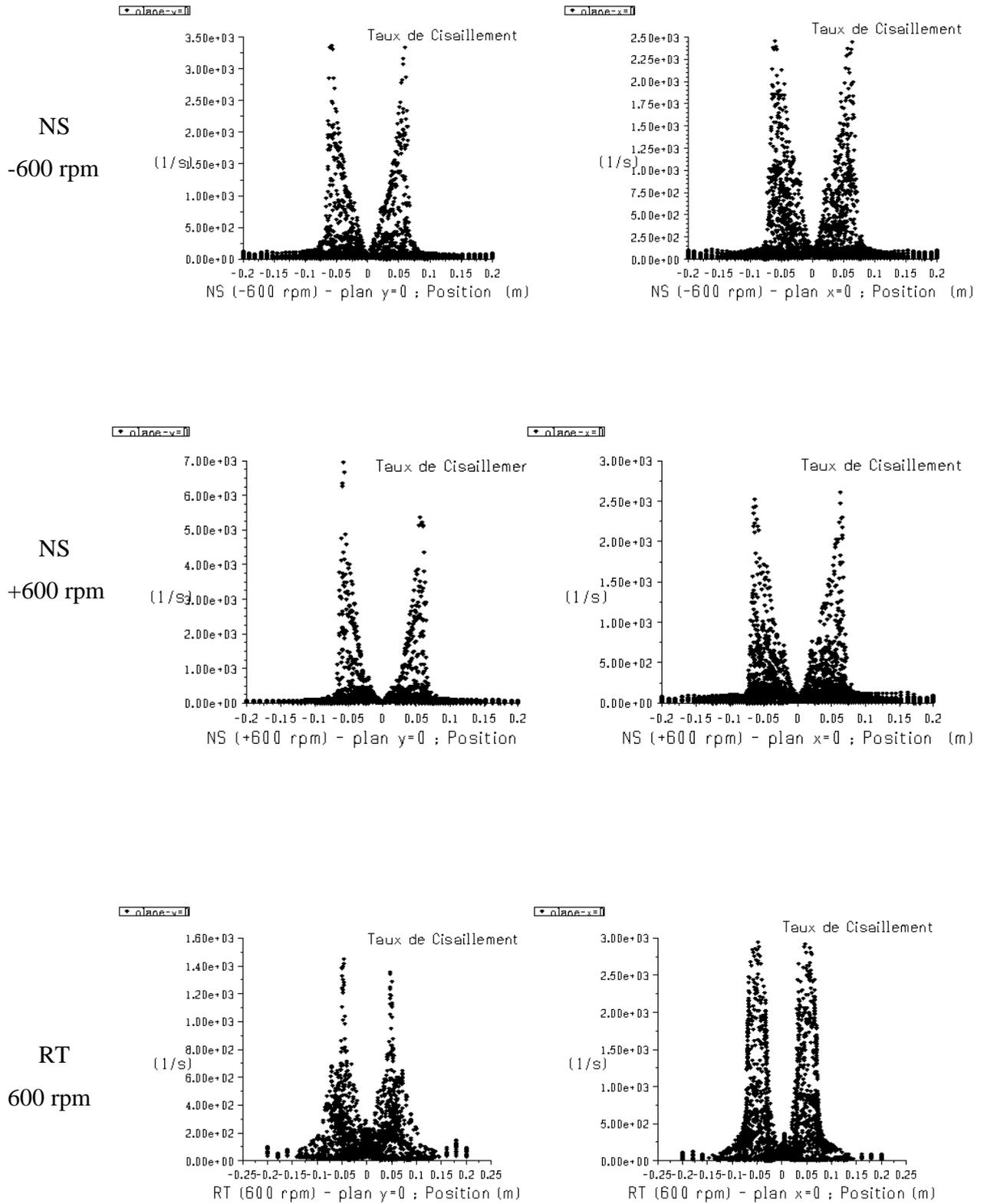
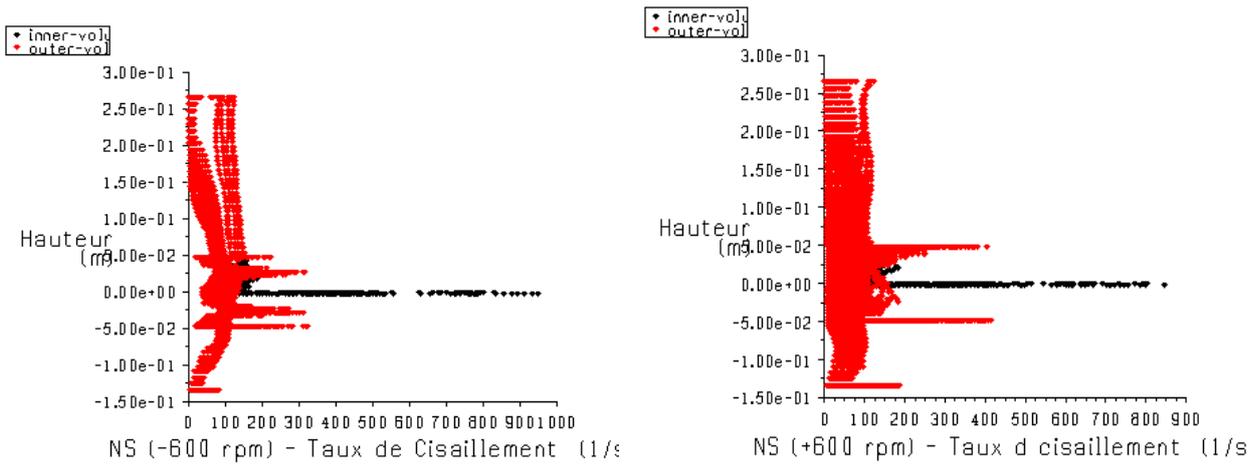


Figure III-12: Distribution des taux de cisaillement en (s^{-1})

des deux turbines pour $\mu = 1.2 Pa.s$ et $N = \pm 600 rpm$.

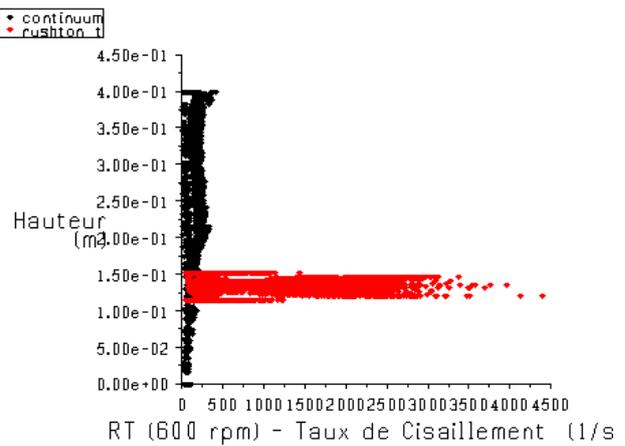


(a) Narcisse (-600 rpm et $+600\text{ rpm}$)

Figure III-13:

Distribution des taux de cisaillement des deux turbines en fonction de la hauteur z . (les couleurs n'ont pas de signification importante).

(b) Rushton (600 rpm)



Une analyse rapide des images de la figure III-11 permet de constater que, pour la turbine Narcisse, il y a une différence entre les deux champs de cisaillement correspondant au deux sens de rotation contraires; ainsi qu'une différence de distribution de leurs valeurs. L'un des deux sens de rotation présente des valeurs maximales légèrement inférieures à celles données par l'autre et largement en deçà de celles données par la turbine Rushton. Le plan contenant les deux pales présente des valeurs plus fortes que l'autre alors que pour Narcisse, les deux plans rencontrent la turbine. Une étude du champ des fractions volumiques correspondant donnera des résultats plus précis.

Les différences mentionnées précédemment s'observent sur les distributions des valeurs de ces champs dans les deux plans comme le montre les figures III-12 et III-13. Par ailleurs, on remarque sur la figure III-13 les valeurs très élevées du taux de cisaillement au niveau de la turbine Rushton par rapport à Narcisse.

3°/ Taux de cisaillement pour RT au voisinage de la turbine et la sonde:

La résolution des équations de Navier-Stokes permet de récupérer les résultats obtenus par la CFD. Pour la turbine Rushton, objet de l'évaluation ici, l'expérimentation et le calcul numérique sont faits avec la même vitesse de rotation de $N = 600 \text{ rpm}$ et fournissent les résultats du taux de cisaillement autour des pales plates et pour les fluides testés qui sont présentés comparativement dans la table III-2. Ces résultats constituent l'essentiel de la publication [67].

N°	Paramètres RT (600 rpm)	$\frac{\dot{\gamma}}{N}$ mesuré	$\frac{\dot{\gamma}}{N}$ prédit par CFD
1	Taux de cisaillement au niveau des pales: valeurs moyennes (eau ; $Re > 10^4$)	600-1200	($Re = 1,1 \cdot 10^4$) 660
2	taux de cisaillement au voisinage de la sonde (Valeurs moyennes): - dans l'eau..... - rhéologie suivant la loi de puissance	910-1000 600-800	900-4000 300-800
3	* CMC : 30 mPa.s ($n = 0,75$; $K = 0,1 \text{ Pa.s}^n$)	550-900	300-800
4	* XG : 14 mPa.s ($n = 0,38$; $K = 0,26 \text{ Pa.s}^n$)		
5	Taux du cisaillement moyen dans les écoulements internes en vortex	[69] 40-90	20-86
6	- pour $Re > 10^4$ - pour $Re > 5 \times 10^5$	20-60	24-55
7	Taux de cisaillement en cuve chicanée autour de la turbine en Karo syrup 2 Pa.s :	20-40	(Figure III-15) 50-70
8	$en \ 2r/T = 0,33$ $en \ 2r/T = 0,5$	3-4	<10

Tableau III-2: Comparaison des résultats expérimentaux et numériques (CFD) pour une turbine Rushton au niveau de la turbine et de la sonde.

Concernant les méthodes de mesure, Van't Riet et Smith [68] ainsi que Metzner et Taylor ont utilisé la méthode de photographie à grande vitesse (high-speed photography) et Wichterle et al. [61] ont utilisé la méthode de polarographie.

La figure III-14 en 3D présente la surface de la sonde sur laquelle sont dessinées les équipotentielles du taux de cisaillement. Les valeurs mesurées de $\dot{\gamma}$ dans la même

position, dans le plan de la turbine, à 2 cm de l'extrémité de la pale, sont $\dot{\gamma} \approx 11 \text{ ks}^{-1}$ pour (a) et $\dot{\gamma} \approx 6.6 \text{ ks}^{-1}$ pour (b) qui correspondent aux cas 2 et 4 du tableau III-2.

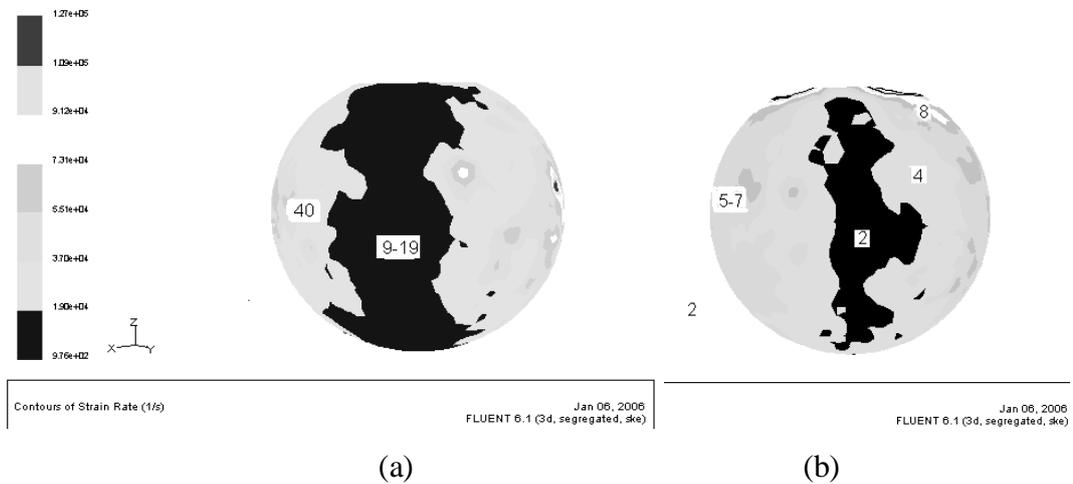


Figure III-14: Modèle de simulation et contours des taux de cisaillement (*en ks^{-1}*) obtenu par la CFD pour la paroi d'une particule sphérique en agitation par une turbine Rushton pour:

a) eau **(b)** liquide suivant une loi de puissance avec:

$$(K=0,38 \text{ Pa.s}^n; n=0,26)$$

CONCLUSION: La concordance des résultats expérimentaux obtenus par mesure in situ par la sonde sphérique et des résultats numériques obtenus par la CFD confirme l'aptitude de cette dernière à générer les valeurs du taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ d'une façon plus simple et non intrusive. Elle évite, de surcroît, les fluctuations dues à l'intrusion de l'appareil de mesure. Elle permettra donc, par calcul numérique, d'évaluer le cisaillement dans un bioréacteur et d'en adopter une configuration conforme aux valeurs adéquates de celui-ci.

4°/ Génération du taux de cisaillement caractéristique en fonction d'une variable donnée (ex: la viscosité) et comparaison des deux turbines:

Dans ce paragraphe, le code de calcul est utilisé pour générer le taux de cisaillement comme (fonction) caractéristique d'une turbine en fonction de la viscosité du milieu agité. Ces (fonctions) caractéristiques sont élaborées pour évaluer le potentiel méthodologique de la CFD. La notion de caractéristique conforte

l'évaluation ponctuelle et renseigne en plus sur une plage de valeurs ou une tendance.

On évalue donc les (fonctions) caractéristiques suivantes à plusieurs vitesses de rotation :

- (1)- Mélange en écoulements laminaires : Taux de cisaillement en fonction de la viscosité dynamique.
- (2)- Régimes transitoires de mélange avec la loi de puissance : Taux de cisaillement en fonction de la viscosité effective.

Afin de justifier l'éventuelle sélection d'une turbine sur des considérations établies par la CFD, les deux turbines Rushton et Narcisse sont évaluées de cette façon [73].

Des écoulements newtoniens et à rhéologie suivant la loi de puissance ont été simulés par une viscosité effective à travers des valeurs en progression constante. Les données détaillées sont présentées dans [74].

(a) : Comparaison des deux turbines à travers les coefficients de Metzner et Otto pour des écoulements laminaires :

Le rapport des moyennes des taux de cisaillement **expérimentaux** à des vitesses de rotation identiques des deux turbines est déterminé par les constantes correspondantes de Metzner et Otto k_s [62,74] et il vaut :

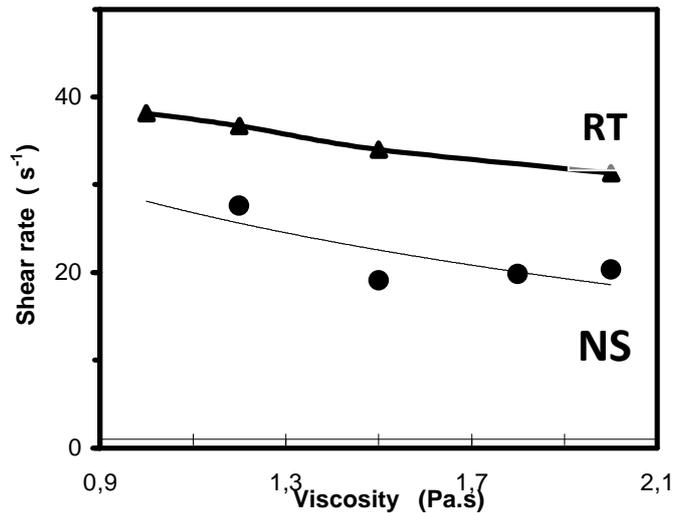
$$\frac{k_s(RT)}{k_s(NS)} = \frac{11,5}{8,1} \approx 1,45 \quad (III - 26)$$

Ainsi, ce rapport obtenu **par simulation**, dans des conditions identiques d'écoulement, vaut environ 1,5.

En comparaison aussi avec ces résultats expérimentaux, les moyennes volumiques du taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ calculées par la CFD sont représentées en fonction de la viscosité. Un aperçu de cette comparaison est présenté dans la figure III-15.

Figure III-15:

Génération par la CFD du taux de cisaillement moyen en fonction de la viscosité en écoulement laminaire (moyennes volumiques).



Il en ressort une valeur

de ce rapport de :

$$\frac{k_s(RT)}{k_s(NS)} \approx 1,4 \quad (III - 27)$$

(b) : Potentiel d'étude des champs des taux de cisaillement autour d'une turbine :

Une fois de plus, on procède à une comparaison des deux turbines.

- * les positions de la sonde de mesure sont sélectionnées et correspondent aux chemins de circulation maximum, comme le montre la figure III-16.
- * Le taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ en ces points est mesuré dans plusieurs liquides. Des exemples de données de $\dot{\gamma}$ dans du Xantan Gum (XG) et de l'eau (W) sont représentés en fonction de la vitesse angulaire N dans la figure III-17. Les relations obtenues dans les positions 3 et 4 sont illustrées et correspondent à W3-W4 pour l'eau et XG3-XG4 pour le Xantan Gum.

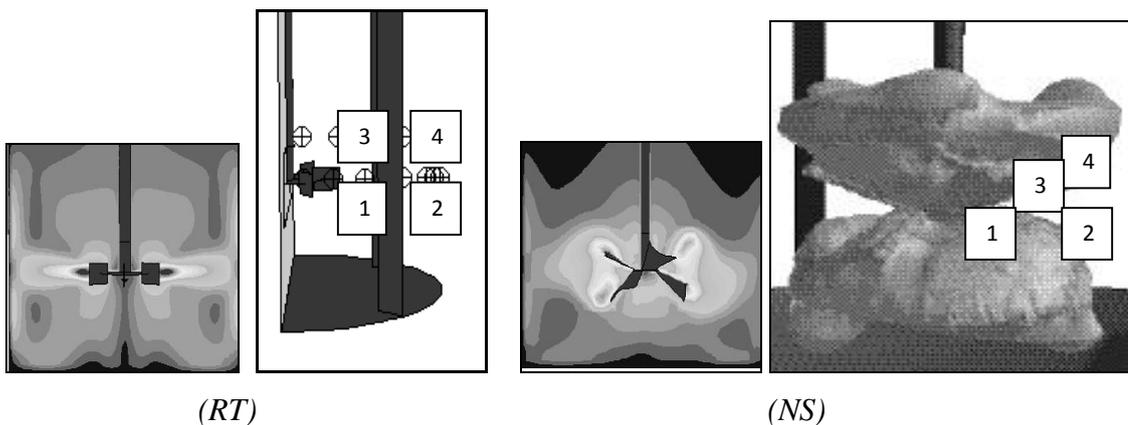
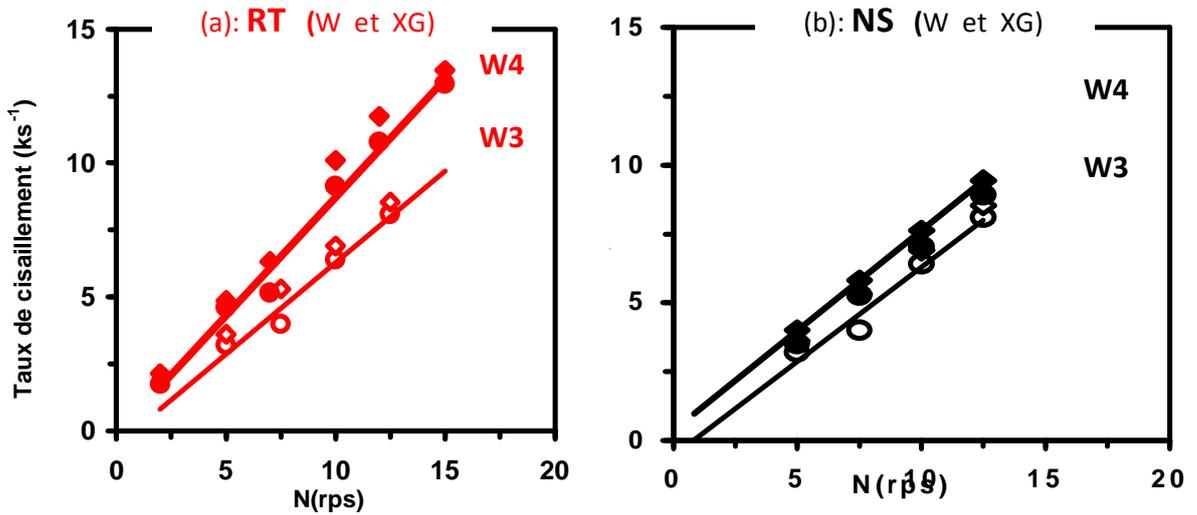


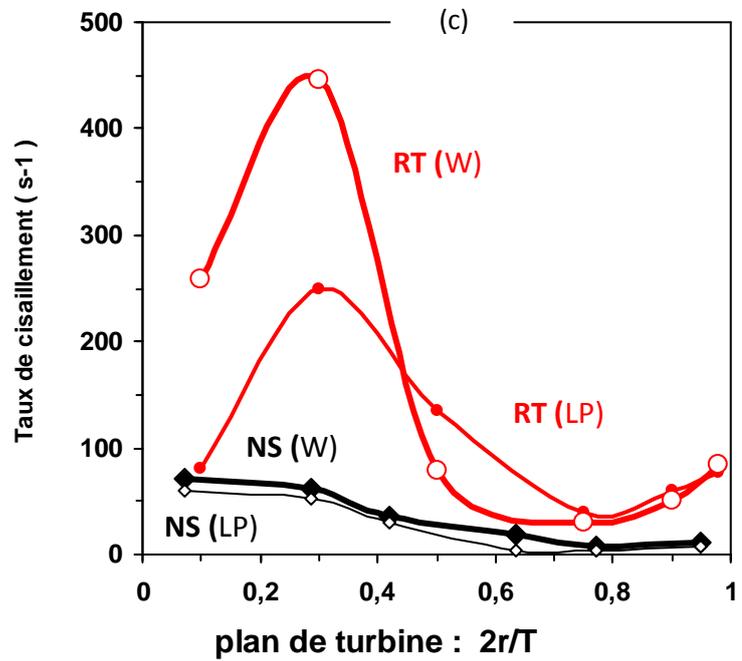
Figure III-16: Positions observées pendant l'expérience et utilisées pendant le calcul par la CFD.



Taux de cisaillement dans les écoulements suivant une loi de puissance (L.P.) pour les deux turbines pour $n=0,4$ et $K \approx 0,3 Pa.s^n$.

(a)- RT et (b)- NS : en fonction de la vitesse de rotation.

(c)- Comparaison par la CFD des profils pour des écoulements internes entre RT et NS .



Turbine RUSHTON (RT)	Turbine NARCISSE (NS)	
<i>Résultats de la simulation comparative de $\dot{\gamma}$ au point P_3</i>		$P_1 \left \begin{array}{l} 2r/T=0,5 \\ z/H=0,5 \end{array} \right.$
$\dot{\gamma} = 9,7 \text{ s}^{-1}$ (eau) et $\dot{\gamma} = 3,6 \text{ s}^{-1}$ (L.P.) forte différence	$\dot{\gamma} = 3,6 \text{ s}^{-1}$ (eau) et $\dot{\gamma} = 4,3 \text{ s}^{-1}$ (L.P.) faible différence	
<i>Résultats des mesures comparatives de $\dot{\gamma}$ au point P_1</i>		$P_3 \left \begin{array}{l} 2r/T=0,5 \\ z/H=0,6 \end{array} \right.$ ----- L.P. : fluide suivant une loi de puissance
$\dot{\gamma} = 134 \text{ s}^{-1}$ (eau) et $\dot{\gamma} = 78,5 \text{ s}^{-1}$ (L.P.) forte différence	$\dot{\gamma} = 35,3 \text{ s}^{-1}$ (eau) et $\dot{\gamma} = 30,7 \text{ s}^{-1}$ (L.P.) faible différence	

Tableau III-3: Comparaison sélective des deux turbines par le taux de cisaillement dans les écoulements suivant la loi de puissance conformément à la figure III-16.

* Les différents cas sont simulés, analysés et traités par la CFD. Les résultats de la réduction du taux de cisaillement en présence de polymères correspondant aux cas Rushton et Narcisse de la figure III-16 et sont présentés dans la table III-3.

Des exemples d'iso-surfaces extraites de simulations pour les deux turbines en écoulement laminaire de viscosité $\mu = 2 Pa.s$ montrent une allure semblable dans la répartition du cisaillement au sein de la cuve (Figure III-18), avec une spécificité distinctive entre les deux turbines pour les petites valeurs du cisaillement comme le montre la courbe (Figure III-19).

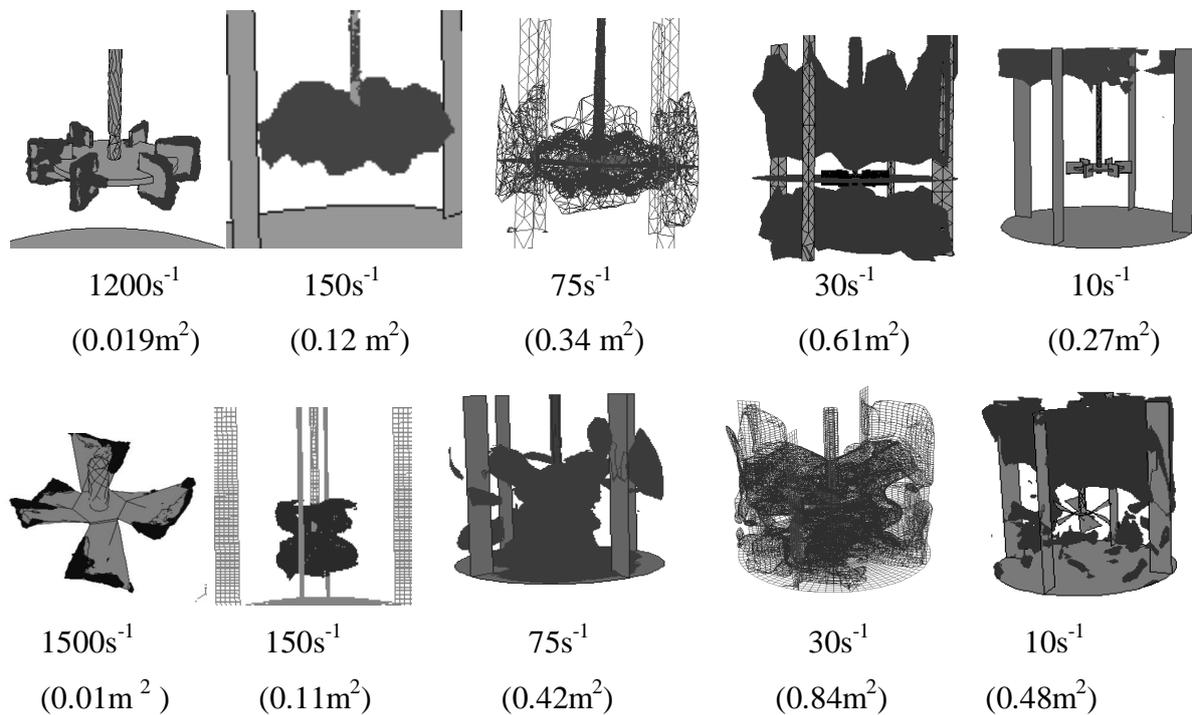


Figure III-18: Comparaison en images des aires d'équipotentielles en fonction du taux de déformation à $2 Pa.s$ et $Re = 100$.

Les données expérimentales obtenues en présence d'addition de polymères ont montré ce qu'on pouvait attendre à travers la présentation des deux écoulements correspondants aux deux turbines en concordance avec les données calculées par CFD : une brusque réduction du cisaillement dans le champ de l'écoulement agité produit par les pâles plates de la turbine Rushton et une réduction modérée de la traînée de cisaillement produite par les pales profilées de Narcisse. Les deux effets conduisent à une performance comparable en termes de cisaillement, comme illustré dans la figure III-18

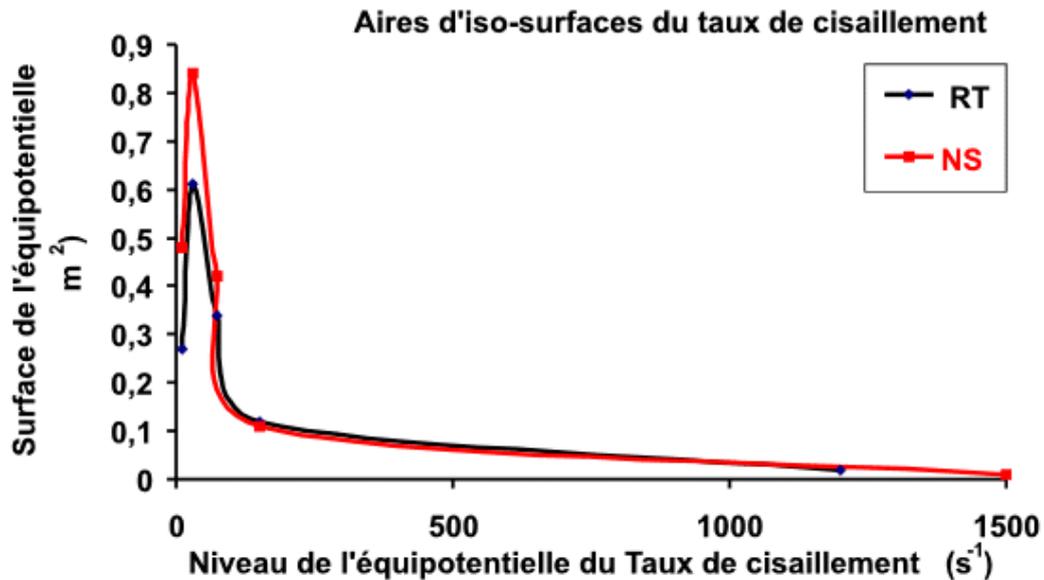


Figure III-19: Comparaison graphique des aires des équipotentielles du taux de cisaillement à $2 Pa.s$ et $Re = 100$.

IV – CONCLUSION :

L'utilisation de la CFD pour l'analyse du cisaillement dans un réacteur agité est introduite pour la génération des champs de plusieurs grandeurs par la résolution des EDP de la mécanique des fluides. L'évaluation du taux de cisaillement en est une évidence. Les distributions de ce taux, pour les écoulements générés pour deux modèles différents de turbines ayant des pales respectivement plates et profilées, sont évaluées et comparées aux données expérimentales obtenues par des méthodes de mesure électrochimiques intrusives. Il en ressort une corrélation très satisfaisante entre ces résultats et donc une validation méthodologique de la démarche d'évaluation par la CFD. Cette procédure illustre par l'exemple son aptitude à caractériser correctement les performances de turbines. En conséquence, la sélection d'une turbine par le biais des potentiels de la CFD est implicitement reconnue à travers cette étude. Des applications industrielles pourraient préférer l'usage de la turbine Narcisse pour son faible taux de cisaillement révélé par les mesures directes mais confirmé aussi par la CFD.

Par ailleurs et pour les mêmes raisons, la sélection d'autres éléments constitutifs d'un bioréacteur par la CFD peut se faire à travers des caractéristiques appropriées à ces éléments et évaluées par celle-ci.

CHAPITRE IV

INTEGRATION HYDRODYNAMIQUE-BIOLOGIQUE

PAR LA CFD

(modèle hydrodynamique-biologique simplifié:
diphasique avec $k_L a$ et viscosité constants)

INTRODUCTION :

En GDPA, concevoir un réacteur agité nécessite de prendre en compte le savoir-faire du génie de la réaction chimique en termes de cuve, agitation, hydrodynamique multiphasique, réactions en cours, et d'accorder, par ailleurs, aux spécificités d'une culture biologique le degré d'attention qui leur convient. Outre la qualité de la cuve et son fonctionnement, l'exigence s'étend aux aspects coût et rendement, sans délaissier dans les conduites de ce type de projets, la consistance et la qualité des mesures de sécurité engagées.

Ainsi, dans la gamme des contributions au fonctionnement adéquat d'une production, le réacteur lui-même et la bio-réaction méritent une attention particulière, chacun pour sa part ainsi que leur influence mutuelle. L'objectif dans ce chapitre et les suivants est d'initier la mise en place d'un modèle numérique, traduisant dans un premier temps la bio-réaction et ensuite l'interaction entre les deux. Le modèle doit d'abord rendre compte de la réaction elle-même dans son évolution quantitative; de l'aspect constitutif du mélange et qualitatif de l'écoulement dans le réacteur; pour terminer enfin par mettre en œuvre l'interaction entre la réaction et l'hydrodynamique ambiante à travers l'agitation (par une turbine et par injection gazeuse) et le transfert massique. Le contenu du chapitre précédent trouve son application ici dans le volet matériel du projet pour un suivi évolutif ou un accompagnement prédictif de la qualité du mélange.

Le thème support de ce modèle est une fermentation biologique aérobie pour la production d'acide gluconique par *Aspergillus Niger* [33]. Le milieu de production est un mélange diphasique (pour simplification) dans une cuve standard. La phase dispersée gazeuse est formée par des bulles de même diamètre et le transfert gaz-liquide est caractérisé par une constante globale. Le programme développé peut servir pour des procédures d'évaluation prévisionnelle dans une étude ou de commande dans une

exploitation fonctionnelle. Il sera toujours exécuté ici dans des conditions géométriques réelles; les questions de dimensionnement n'ont pas été abordées dans la globalité de ce travail et l'usage des nombres adimensionnels est réduit à la caractérisation du régime de l'écoulement par le nombre de Reynolds.

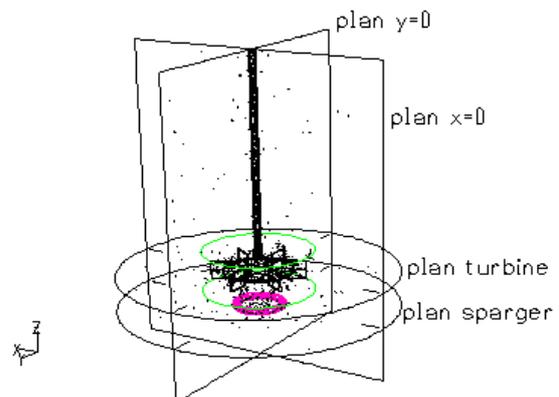
La modélisation mathématique des réacteurs était plus souvent basée sur des considérations statistiques conduisant à l'usage de la DTS et aux développements méthodologiques conséquents ou sur des modèles empiriques affinés par leur confrontation à l'expérience mais rarement sur des modèles impliquant la dynamique des fluides. Pourtant, le rôle prépondérant dans l'usage d'un réacteur est joué par l'écoulement lui-même. Le principal obstacle à franchir se déclinait en termes de calcul numérique aussi bien en calculateurs qu'en méthodes. Avec le développement informatique et les possibilités offertes actuellement, on assiste, à travers la littérature du moins, à une utilisation croissante de la CFD. La simulation des réactions chimiques quant à elle a bénéficié probablement de la simplicité des liens stœchiométriques entre les ingrédients des mélanges réactionnels [36] . Après le travail de Norman et al. [75] et celui de Schmalzried et Reuss [76], ainsi que d'autres études des réactions basées sur la CFD [74, 75,76,77, 78], cette étude s'inscrit dans cette lignée en simulant un bioréacteur de production à travers les équations de Navier-Stokes et un modèle cinétique biologique, celui de Contois [33]. Cette bio-réaction aérobie de la catégorie dominante pour ce type de production suivait jusqu'ici deux voies : *Gluconobacter Oxydans* (Velizarov et Beschkov [80] et Nikov et all [81]) et *Aspergillus Niger* (Znad et al, [33]) ont été étudiées. Les deux cultures sont connues pour leur demande élevée en oxygène et le milieu liquide dans le cas des micromyces est fortement visqueux.

I - MODELE HYDRODYNAMIQUE DIPHASIQUE EN REGIME «LAMINAIRE»:

1°/ La cuve :

Figure IV-1:

Cuve et plans des vues



La cuve simulée, dans cette partie, est une cuve standard de 5 litres de volume agitée par une turbine Rushton à 6 pales pour laquelle nous disposons de données expérimentales. La figure IV-1 présente la cuve, les plans de coupe de visualisation qui seront utilisés lors de. Par ailleurs et en parallèle, une simulation a été effectuée pour une cuve identique de 50 litres. Cette dernière est considérée comme très proche des cuves conventionnelles industrielles destinées aux procédés gaz-liquide

Le repère absolu orthonormé $(O; \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ de référence pour la géométrie des cuves citées a comme origine, O le centre du fond circulaire de la cuve, et comme direction \vec{k} , la direction ascendante de révolution de la cuve. Cette direction est aussi l'axe de rotation de la turbine. Un privilège de la visualisation est accordé aux plans $(x=0)$ et $(y=0)$, au plan de la turbine ainsi qu'au plan de l'anneau d'aération. La génération d'images à travers ces plans sera effectuée pour le rendu des champs de grandeurs telles que les fractions volumiques, les concentrations, les taux, k_l , a , k_a , ...etc...

2°/ Les écoulements-support en monophasique et en multiphasique:

Dans le cas d'un fluide incompressible homogène, l'écoulement est régi par les équations de continuité et de Navier-Stokes accompagnées des conditions aux frontières et des conditions initiales.

$$\left. \begin{array}{l}
 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \\
 \frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \otimes \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau \\
 * \text{équations des scalaires} \\
 (CF): \left\{ \begin{array}{l} \text{entrées, sorties, parois} \\ \text{conditions volumiques} \end{array} \right. \\
 (CI): \left\{ \begin{array}{l} \text{entrées - sorties, parois} \\ \text{divers coefficients} \end{array} \right. \\
 * \text{Adaptations - utilisateur}
 \end{array} \right\} (SEDP-1) \quad (IV-1)$$

Les conditions aux frontières (CF) concernent les parois de la cuve fixes et mobiles ainsi que les entrées-sorties. Ces conditions concernent les fluides en écoulement aussi bien que les scalaires qu'ils transportent ou les champs ambiants tels le champ de pesanteur. Les équations bilans mettant en œuvre la convection, la

diffusion et la réaction, les termes-source (sources et puits) doivent être élaborées. Toutes ces conditions sont dictées par le problème et en font partie.

Les conditions initiales (CI), sont des conditions -mathématiques- dont l'objectif est un lancement valide du calcul; telles les valeurs des coordonnées du vecteur-vitesse, les conditions opératoires,... Dans une approche monophasique de l'écoulement dans le réacteur, et sans considérations énergétiques, le système d'équations aux dérivées partielles précédent (*SEDP* – 1) résume une telle situation :

Dans ce système τ est le tenseur des déformations dans lequel μ est la viscosité dynamique de la phase en écoulement et qui est donné par :

$$\tau = \mu \left[\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v} \right] - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \vec{v} I \quad (IV - 2)$$

et les « adaptations-utilisateur » correspondent à des configurations physiques particulières ou à des adaptations-utilisateur par le biais de fonctions construites et recompilées avec le noyau du solveur d'EDP dont l'élaboration et l'usage sont décrits, pour le code de calcul utilisé, dans [35].

D'autre part, l'équation de transport d'un scalaire c s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) + \nabla \cdot (\rho U c) = \nabla \cdot (\Gamma_c \nabla c) + R_c \quad (IV - 3)$$

où Γ_c et R_c sont le coefficient de diffusion (négligé ici) et le terme source de c , (exprimé en *quantité / unité de masse*) dont on trouve plus de détails dans [5].

En écoulement diphasique, les deux phases coexistent et sont décrites par un système d'équations aux dérivées partielles portant sur les fractions volumiques des deux phases et traduisant leurs cinétiques ainsi que leurs interactions; avec des configurations ainsi que des conditions aux frontières et initiales pour les deux phases et leurs interactions. Par ailleurs, la présence d'interface entre les deux phases donne lieu à plusieurs modèles dont le modèle eulerien (Eulerian Model) utilisé ici. Le système (*SEDP* – 2) résume une telle situation.

(b) La turbine et son arbre: Ce sont des parois étanches mobiles. Ils constituent une source cinétique de l'écoulement, leur vitesse est fixée par la valeur de la vitesse de rotation angulaire de l'ensemble $N = +120rpm$ ou $N = +300rpm$ selon l'application. Chaque point M de leur paroi, situé à la distance $r(M)$ de l'axe de l'arbre, a une vitesse angulaire donnée par :

$$v(M) = \frac{N\pi}{30} r(M) \text{ m/s} \quad (IV - 7)$$

En conséquence, en tout point de l'ensemble, les vitesses des phases sont les mêmes que celles de leur points de contact avec la turbine ou l'arbre. On aura donc, en tout point M de la frontière :

$$\begin{cases} \vec{v}_L \cdot \vec{n} = 0 & \text{et} & \vec{v}_L(M_{phase}) = \vec{v}_L(M_{paroi}) \\ \vec{v}_G \cdot \vec{n} = 0 & \text{et} & \vec{v}_G(M_{phase}) = \vec{v}_G(M_{paroi}) \end{cases} \quad (IV - 8)$$

(c) Le distributeur de bulles d'air: Il est considéré comme une surface torique et configuré en entrée de mélange ; avec une vitesse normale nulle pour la phase continue et constante normale à la surface de ce tore pour la phase dispersée. Cette configuration de la vitesse doit permettre un débit constant de 8 litres par minute.

$$\vec{v}_L \cdot \vec{n} = 0 \text{ et } \vec{v}_G \cdot \vec{n} = \text{Constante} \quad (IV - 9)$$

L'évaluation du débit se fait par une intégrale de surface calculée sur l'aire totale du distributeur. L'évaluation de cette intégrale est effectuée numériquement pour le contrôle du bilan de la phase gazeuse en entrée et en sortie.

(d) La sortie: Le volume du transfert massique inter-phasique est considéré comme sans effet sur l'hydrodynamique et surtout négligeable devant le volume gazeux traversant la cuve, la sortie est configurée, comme l'entrée avec une vitesse nulle pour la phase continue et constante, générant le même débit qu'à l'entrée.

$$\vec{v}_L \cdot \vec{n} = 0 \text{ et } \vec{v}_G \cdot \vec{n} = \text{Constante} \quad (IV - 10)$$

(e) La configuration du maillage mobile de la turbine: Le maillage mobile de la turbine est configuré en MRF (Moving Reference Frame), visible sur la figure II-3, avec la même vitesse de rotation que celle-ci.

(f) Les scalaires: La fermentation étant en mode fermé (batch), les flux des scalaires à travers les entrées et sorties sont nuls; puisqu'il n'y a pas d'échange avec l'extérieur, des constituants qu'ils représentent et les phénomènes de diffusion entre eux sont négligés.

(g) Les sources volumiques: Le champ de gravitation est fixé à $9,81m/s^2$ et les scalaires X , S , O_d et P qui représentent les concentrations respectives de la biomasse, du substrat, de l'oxygène dissout et du produit obtenu ne sont pas implantés en sources et puits volumiques dans la configuration préparant le traitement numérique. Leur gestion est réalisée à travers une fonction-utilisateur (UDF) [36].

II - LE MODELE BIOLOGIQUE UTILISE ET SA RESOLUTION:

1°/ Le modèle retenu et ses caractéristiques :

Le modèle retenu étant celui de Contois [33] utilisé pour rendre compte de l'évolution de la culture de *Aspergillus Niger* dans la production d'acide gluconique. Il se trouve résumé par le système différentiel (IV – 11) suivant donnant les taux de production/consommation des quatre constituants du mélange représentés ici par les scalaires X , S , O_d et P représentant respectivement les concentrations de la culture, du substrat, de l'oxygène dissout et du produit généré formé par l'acide gluconique.

$$\left\{ \begin{array}{l} r_X = \frac{dX}{dt} = \mu X \quad \mu = \mu_m \frac{S}{K_S X + S} \frac{O_d}{K_{O_d} X + O_d} \quad \text{avec} \quad \mu_m = 0,361 h^{-1} \\ \qquad K_S = 21,447 \\ \qquad K_{O_d} = 0,001061 \\ r_S = \frac{dS}{dt} = -\gamma \frac{dX}{dt} - \lambda X \quad \text{avec} \quad \gamma = 2,1768 \quad \text{et} \quad \lambda = 0,2937 h^{-1} \\ r_{O_d} = \frac{dO_d}{dt} = k_L a (O_d^* - O_d) - \delta \frac{dX}{dt} - \phi X \quad \text{avec} \quad \delta = 0,2724 \quad \text{et} \quad \phi = 0,0425 h^{-1} \\ r_P = \frac{dP}{dt} = \alpha \frac{dX}{dt} + \beta X \quad \text{avec} \quad \alpha = 2,5800 \quad \text{et} \quad \beta = 0,1704 h^{-1} \end{array} \right. \quad (IV - 11)$$

Le taux de l'échange massique est pris en compte dans ce système différentiel et il vaut :

$$r'_{O_d} = r_{(O_2_{bulles} \rightarrow O_2_{dissout})} = (k_L a)_{O_2} \times (O_d^* - O_d) \quad \text{avec } k_L a = 63h^{-1} \quad (IV - 12)$$

L'usage, dans ce modèle simplifié de la fermentation numérique, d'un coefficient d'échange constant de valeur $63h^{-1}$, relève d'une validation intermédiaire de l'objectif visé, en reproduisant par la CFD, le modèle de l'article [33] lui-même dont toutes les données de ce modèle sont extraites. Les effets thermiques sont négligés et la température n'est pas prise en compte dans l'élaboration du modèle hydrodynamique-biologique visé. La fermentation support de ce modèle à été réalisée à une température de 30°C .

Afin que les systèmes biologiques soient réalistes et reproduisent le mieux possible l'activité entreprise, les grandeurs représentées par les scalaires étant positives, les systèmes différentiels ci-dessus doivent être soumis à des contraintes sur ces scalaires. L'ensemble de toutes équations précédentes doit être complété par les inégalités suivantes :

$$(C) \quad \begin{cases} X \geq 0 \\ S_0 \geq S \geq 0 \\ O_d^* \geq O_d \geq 0 \\ P \geq 0 \end{cases} \quad (IV - 13)$$

La considération du système des contraintes (C) dans la résolution numérique est incontournable car la cuve n'est pas homogène. La qualité de la prise en compte mathématique de ces contraintes reste à étudier davantage, ce qui complexifiera encore l'expression du problème. Elle est réduite dans le cadre de la présente étude, lors du traitement numérique, à éviter toute dérive numérique incompatible avec la réalité physique du problème exprimée par ces inéquations.

Il en résulte donc un problème formé, d'une part par un système instationnaire d'équations aux dérivées partielles, à résoudre sur le domaine fermé et borné, formé par la cuve et le temps $t \in [0; 60] h$; un système différentiel formé par les équations de transport des scalaires avec termes réactifs et contraintes sur un domaine fermé non borné donné par les contraintes (C).

Lors du traitement numérique du problème totalement mis en équations, les termes réactifs des équations de transport des quatre scalaires S, X, O_d et P ,

données plus loin, sont exploités séparément des équations elles-mêmes. Le système différentiel qu'ils forment est résolu dans l'ensemble de la cuve en utilisant le même maillage. Les contraintes seront gérées de façon simpliste, quant à l'aspect non borné du domaine, qui n'est pas exempt de commentaires, il ne posera pas de problèmes pour le traitement numérique. Il relève de l'expiration de la durée de la fermentation qui s'arrête avec l'épuisement du substrat.

2°/ La résolution du SD formé par les termes réactifs et les profils des

concentrations: La résolution numérique de ce système différentiel seul, est faite sur Maple. Elle correspond à une fermentation en cuve parfaitement agitée et donne les profils de la figure IV-2 correspondants aux concentrations en sucre S , Oxygène dissout O_d , culture X et produit P . Elle est faite pour le modèle de Contois (courbes (C)) conjointement avec le modèle de Monod (courbes (M)) issus de du même article [33] et qui seront repris en annexe V.

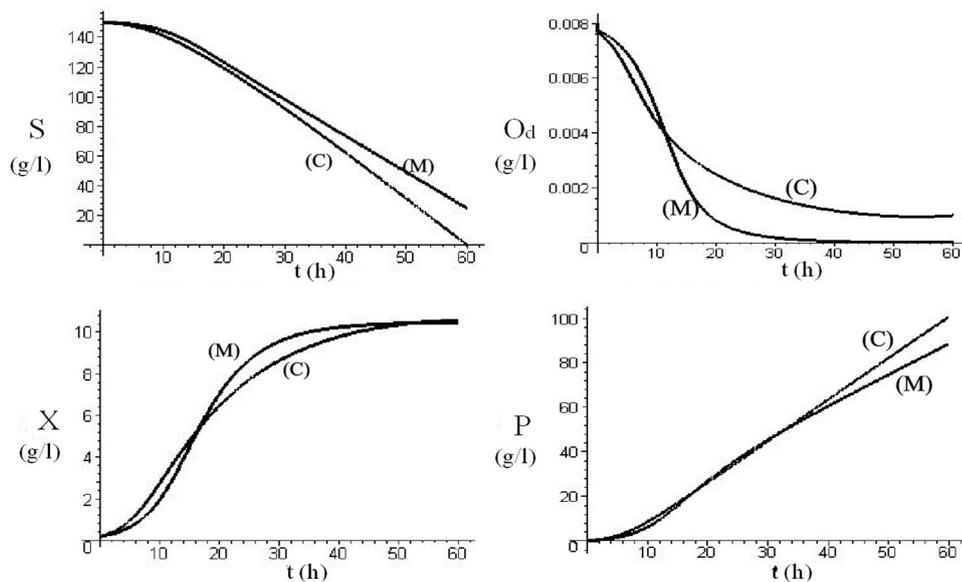


Figure IV-2: Profils des concentrations en S , O_d , X et P pour les modèles de Contois et Monod obtenus par Maple [89].

3°/ L'approximation d'ordre 0 du système différentiel local et sa résolution

ségrégative: Le système différentiel (biologique) à résoudre est un système du premier ordre non linéaire dont la résolution relève de méthodes numériques. Seule, une variante très simplifiée est utilisée ici en exploitant une itération par maille [la

multiplicité des itérations par maille augmente le temps de calcul et incite à adopter ce type de méthodes].

La résolution numérique de ce système différentiel se base sur l'hypothèse déjà mentionnée, que « la maille est un pseudo-réacteur parfaitement agité pendant la durée $\Delta t = t_1 - t_0$ ». Dans ce cas, la composition de la maille en concentrations est constante ainsi que la valeur de la vitesse de la bio-réaction locale. Si X_0, S_0, O_{d0}, P_0 et μ_0 , sont leurs valeurs respectives à l'instant t_0 , leurs valeurs à l'instant t_1 sont :

$$\begin{aligned} X_1 &= X_0 e^{\mu_0 \Delta t} \\ S_1 &= -(\gamma \mu_0 + \lambda) X_0 \Delta t \\ O_{d1} &= O_{d0} + \left[O^* - O_{d0} - \frac{(\delta \mu_0 + \varphi)}{k_L a} X_0 \right] (1 - e^{-k_L a \Delta t}) \\ P_1 &= (\alpha \mu_0 + \beta) X_0 \Delta t \end{aligned} \quad (IV - 14)$$

$$et \quad \mu_1 = \mu_{\max} \frac{S_0}{K_S X_0 + S_0} \frac{O_{d0}}{K_O X_0 + O_{d0}}$$

ce qui permet d'actualiser l'évolution des diverses valeurs dans la cuve. Le caractère « global » du coefficient $k_L a$ ainsi que les autres paramètres de l'écoulement ne sont pas en redondance avec l'hypothèse précédente. Elles permettront même son utilisation dans les chapitres V et VI pour la mise en place du $k_L a$ et de la viscosité apparente μ_a variables localement.

4°/ Commentaire sur la résolution du système différentiel local dans une maille:

Lors du traitement numérique, le schéma itératif précédent (IV – 14) est exécuté dans une boucle portant sur l'ensemble des mailles de la cuve et ceci à chaque itération du solveur réactualisant l'écoulement dans sa globalité. Cette démarche est rendue possible par l'ouverture du code de calcul utilisé. L'annexe 3 présente la position de ce schéma dans l'ensemble du calcul ainsi que ses propres étapes.

III – LA RESOLUTION MATHÉMATIQUE DU MODÈLE RESULTANT ADOPTÉ :

1°/ Le « pseudo-réacteur » élémentaire:

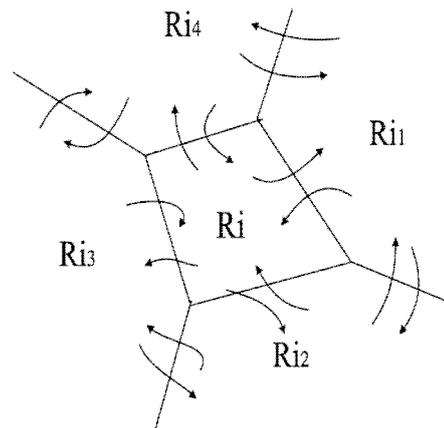
Le modèle mathématique formé des systèmes (IV – 4) et (IV – 11) est résolu dans le domaine spatial formé par la cuve dans sa configuration initiale après sa préparation.

Fluent utilise la méthode des volumes finis pour cette résolution. Les « petits » volumes, en nombre fini, formés par les mailles rejoignent les volumes élémentaires mathématiques lorsque leur diamètre tend vers 0 et en héritent les caractéristiques. L'accueil par chacun de ces petits volumes d'un exemplaire du système différentiel biologique (IV –11) lui confère le profil d'un pseudo-« réacteur biologique élémentaire » R_i qu'on suppose parfaitement agité en regard de la taille de la cuve. Celle-ci se trouve donc décomposée en 326395 exemplaires de ces pseudo-« réacteurs » dotés d'une entrée-sortie formée par l'ensemble des faces externes de la maille. La convection hydrodynamique assure l'échange des quatre constituants que sont le sucre, la culture l'oxygène dissout et le produit, dont les concentrations sont représentée par les scalaires S , X , O_d et P et ceci entre le réacteur R_i et chacun de ses voisins R_{ik} comme le montre le schéma de la figure IV-3.

Figure IV-3:

Echanges convectifs entre «pseudo-réacteurs» élémentaires.

Ainsi, les deux systèmes d'équations sont résolus dans chacun de ces réacteurs (maille) en respectant les contraintes précédentes



2°/ Les hypothèses adoptées dans le modèle:

Dans la résolution du modèle hydro-biologique, on suppose en plus de l'hypothèse précédente sur l'homogénéité des pseudo-réacteurs élémentaires, la suite des hypothèses suivantes :

- (1) Le champ d'écoulement stationnaire n'est pas affecté par le transfert massique gaz-liquide ainsi que par les transformations dues à la réaction biologique.
- (2) Le transfert massique s'effectue de façon locale, homogène et identique pour tous les pseudo-« réacteurs » avec le même coefficient $k_L a = 0.63 h^{-1}$.
- (3) Les phénomènes de diffusion binaires entre les quatre constituants ainsi que leurs conséquences hydrodynamiques sont négligés.

ETAPE	E1	E2	E3	E4
OPERATION	STATIONNARISATION DIPHASIQUE (a): $\Omega = 120rpm$; $\mu = 0,1 Pa.s$; $\Delta t = 10^{-3}s$ (L) (b): $\Omega = 300rpm$; $\mu = 0,1 Pa.s$; $\Delta t = 5 \times 10^{-4}s$ (LT) (c): $\Omega = 300rpm$; $\mu = 0,001 Pa.s$; $\Delta t = 10^{-4}s$ (T)	SATURATION EN O2 DISSOUT	INJECTION DE L'ECHANTILLON	REACTION
Equation résolues	.Equation de continuité .Equation de quantité de mouvement pour la phase porteuse: EAU	.Equation de continuité .Equation de quantité de mouvement Fraction volumique pour les deux phases : EAU+ O ₂ bulles	Equations de transport résolues par FLUENT et avec UDFs	
	Equations hydrodynamiques résolues avec FLUENT et sans UDFs		. Equation de transfert de masse de O ₂ dissout avec $k_l a$ constant . Equation de transport du scalaire O ₂ dissout : O_d	. Equation de transfert de masse de O ₂ dissout avec $k_l a$ constant . Injection de l'échantillon
Temps réel simulé	-----		≈ 8 min	≈ 73 s
				. Réaction biologique totale . Equations de transport des scalaires

Tableau IV-1: Les étapes du traitement en écoulement laminaire avec $k_l a$ et viscosité constants.

(L: Laminaire, LT: presque laminaire, T: Turbulent)

(4) La phase dispersée gazeuse est formée de bulles identiques de même diamètre constant fixé à 1 mm. Elle est injectée par un distributeur poreux en forme d'anneau avec un débit de 8 litres par minute.

On adopte, pour cette cuve de 50 litres, dans ce calcul une vitesse de rotation de 120 rpm pour obtenir un écoulement laminaire avec un nombre de Reynolds $Re < 103$.

3°/ Le traitement informatique en quatre étapes:

Le calcul se déroule en quatre étapes comme présenté dans le tableau IV-1 précédent. La stationnarisation de l'écoulement ne dure que quelques secondes et incite à adopter un petit pas temporel, par contre la durée de 60 heures de la réaction biologique ne permet pas d'adopter un tel pas. Le compromis adopté consiste à dérouler les étapes *E2*, *E3* et *E4* sur fond d'un état stationnaire fixe et gérer le pas temporel en fonction de l'évolution de la réaction. C'est ce qui a été adopté dans le traitement ainsi que dans la gestion des transitions numériques entre les étapes dans ce chapitre. Cette méthode sera abandonnée lorsqu'il faudra tenir compte de l'effet de l'interaction écoulement-bioréaction. Une alternative consiste à gérer séparément les évolutions du mélange d'une part et de la réaction d'autre part. La gestion du pas temporel proposée ici permet dans les conditions mentionnées plus haut d'aboutir à un temps d'exécution d'environ 31 heures, alors que la même fermentation traitée avec un pas plus petit –pour simuler les 60h de la fermentation- prendra beaucoup plus de temps (par exemple pour un pas encore assez grand $\Delta t = 0.1s$, le temps d'exécution dépassera l'année et pour $\Delta t < 0.001s$, il dépassera 13 ans).

4°/ Les résultats obtenus : Détails pour $\Omega = 120 rpm$ et $\mu = 0,1 Pa.s$.

Le calcul est fait dans la configuration d'un écoulement LAMINAIRE avec $D = 0,1333m$; $N = 2rps$; $\mu = 0,1Pas$ d'où $Re \approx 365$ et la valeur du pas adopté pour l'étape *E1* est $\Delta t = 0,001s$

Au fur et à mesure de l'exécution séquentielle des quatre étapes mentionnées précédemment, les résultats suivants ont été obtenus dont la majorité se décline en termes d'images. La génération possible d'autres informations ne trouve pas de motivation précise dans le cadre de cette étude, tant les objectifs peuvent être divers et la situation simplifiée. On cite parmi les résultats obtenus :

a) Les champs hydrodynamiques: Il s'agit, d'une part des champs de vecteurs-vitesses des deux phases liquide et gazeuse présentés sur la figure IV-5, et d'autre part ceux de leurs normes visibles sur la figure IV-6.

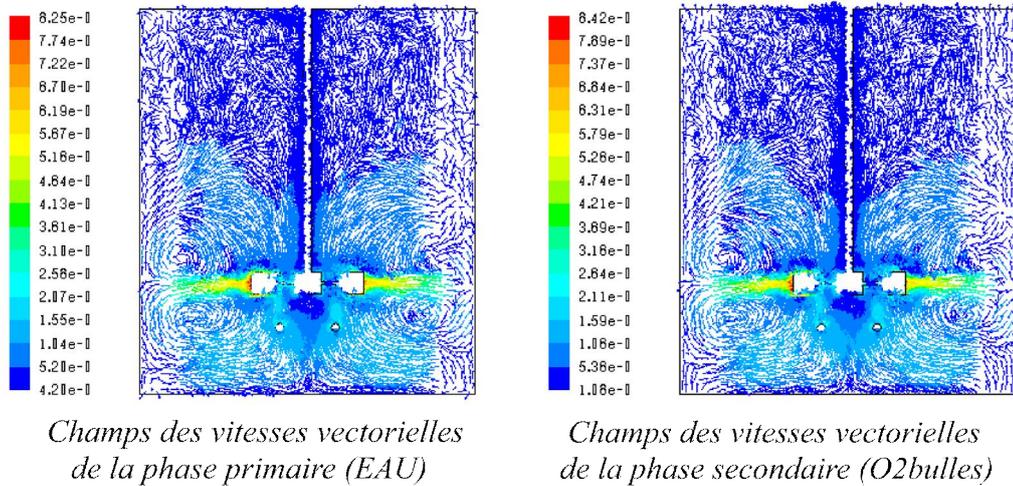


Figure IV-4: Champs des vitesses vectorielles des deux phases (pseudo-laminaire)

On y note visuellement d'une part, un effet de l'agitation sur la mixture des deux phases plus localisé en bas de la cuve et d'autre part, une similitude entre les deux figures consécutive de la valeur du diamètre des bulles (1mm), lesquelles sont entraînées par la phase primaire. Il s'agit d'un écoulement axe-parois. Le mélange donne l'aspect semblable en vitesses aussi, et on remarque que le profil général de l'écoulement radial pour les deux phases au niveau de la turbine Rushton confirme le couplage localement fort entre les deux phases. Les valeurs portées sur la figure le confirment.

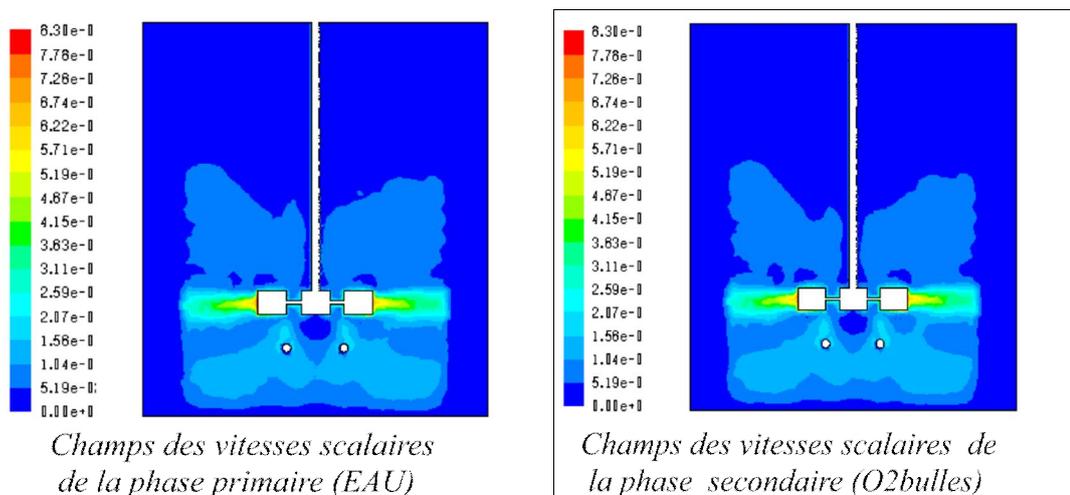


Figure IV-5: Champs des vitesses scalaires des deux phases (pseudo-laminaire)

Par ailleurs, les fractions volumiques, globalement de 0,9 pour la phase liquide continue et de 0,1 pour la phase dispersée gazeuse formée des bulles d'oxygène sont représentées, au voisinage de la turbine et du distributeur, dans la figure IV-6.

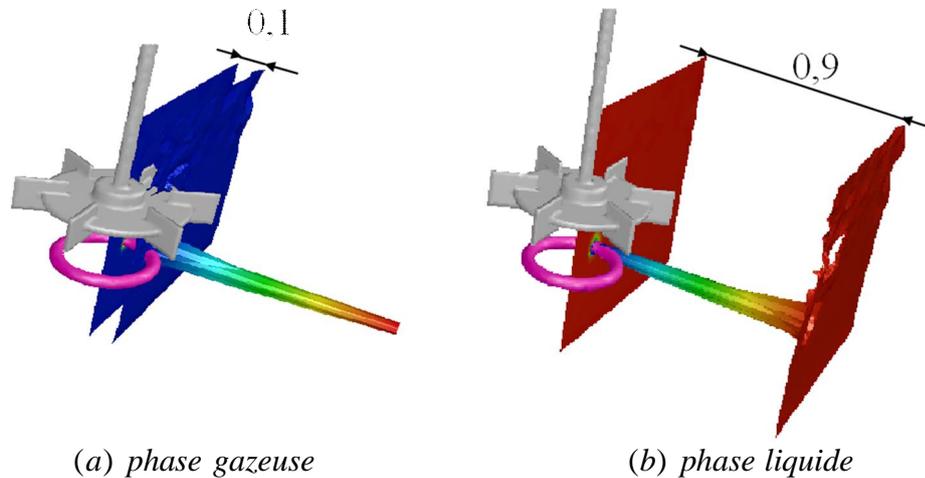


Figure IV-6: Fractions volumiques des deux phases au niveau de la turbine et du distributeur d'oxygène en bulles.

b) Les quatre étapes du calcul: A la fin de l'étape de stationnarisation et au démarrage de celle de la saturation, les concentrations des quatre constituants étaient de: 150 g/l de substrat (sucre), 4,5mg/l d'oxygène dissout dans l'eau et 1 mg/l de produit (acide gluconique) . La concentration de cellules à ce niveau est encore nulle.

L'étape de saturation (E2) est activée et la concentration de l'eau en oxygène dissout passe de 1,5mg/l (valeur fixée arbitrairement pour une eau partiellement saturée) à 8,1mg/l qui est la concentration de saturation adoptée pour toute la fermentation. La figure IV-7 présente la courbe de saturation obtenue par la CFD et qui est conforme au modèle mathématique déduit de l'équation différentielle avec condition initiale :

$$(E_{saturation}): \begin{cases} \frac{dO_d}{dt} = k_L a (O_d^* - O_d) \\ O_d(0) = 0,0015 \end{cases} \quad (IV - 15)$$

dont la solution est

$$O_d(t) = 0,0015 + (O_d^* - 0,0015)(1 - e^{-k_L a t}) \quad (IV - 16)$$

et admet pour graphique le profil suivant fourni comme moyenne volumique de la concentration en oxygène dissout dans la cuve.

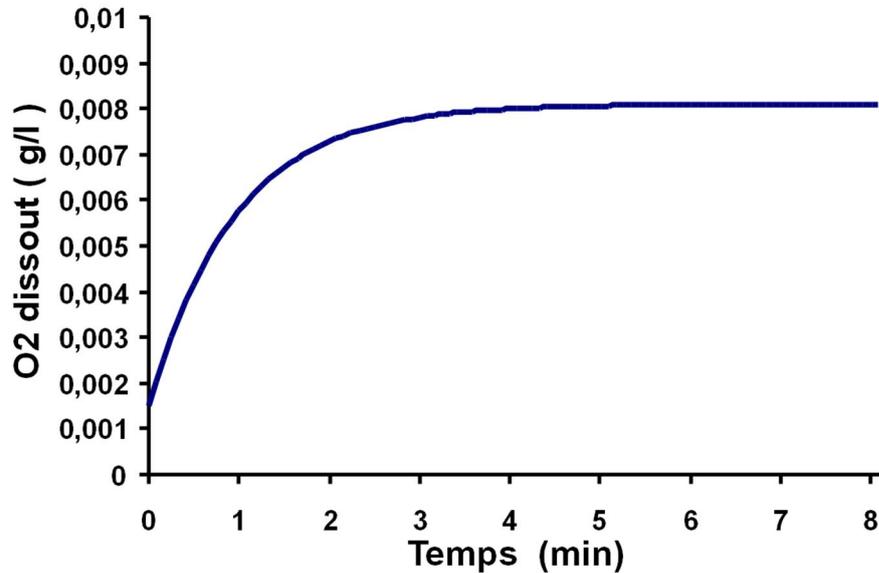
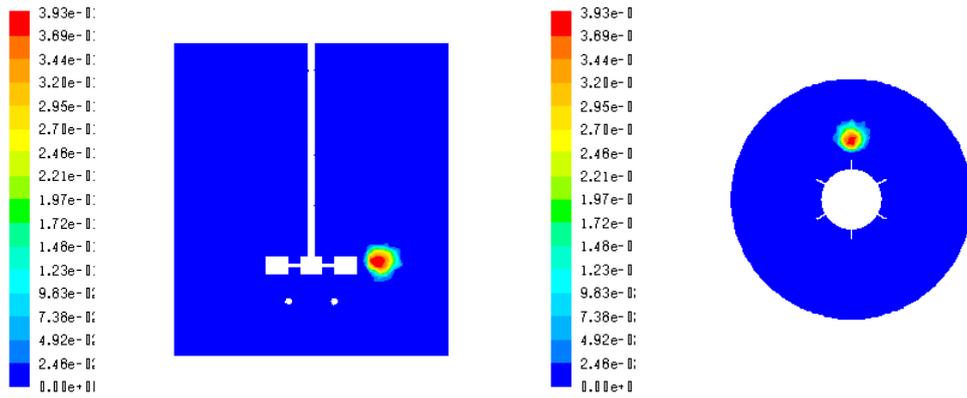


Figure IV-7: Courbe de saturation de la phase liquide en oxygène dissout

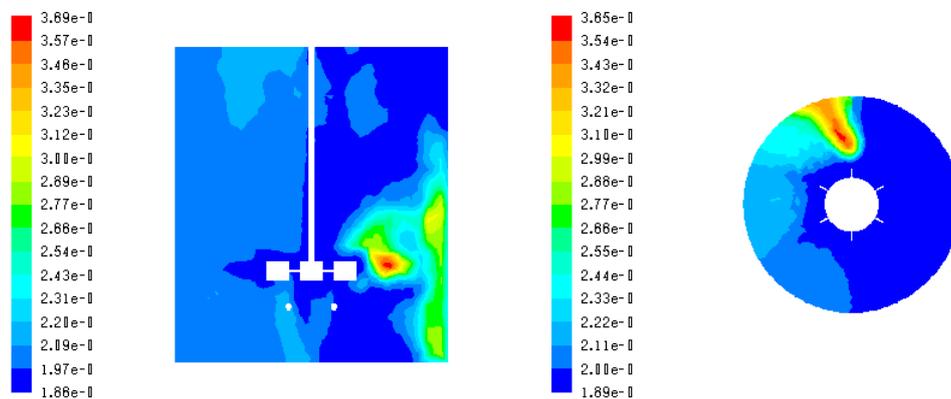
Le champ des concentrations en oxygène dissout, vers la fin de cette étape qui a duré quelques minutes, était homogène et ceci est une conséquence de la globalité du coefficient d'échange.

L'étape *E3* est l'étape à travers laquelle se manifeste la convection hydrodynamique et le rôle joué par la phase porteuse. Elle consiste à injecter localement en une position choisie au niveau de la turbine d'un échantillon sous forme sphérique ayant une concentration telle que, une fois dispersée dans la cuve, elle confère au mélange une concentration en culture sera de $0,2\text{ g/l}$ conformément à l'article de Bales [33]. Cette concentration en cellules est, avec les trois autres concentrations, représentée par un scalaire transporté par la phase liquide continue. La figure IV-8 ci-dessous montre l'effet de la convection consécutive à l'apport cinétique injecté par la turbine, ainsi que l'aspect de l'échantillon au début de cette étape.

L'injection progressive de l'échantillon permet, une fois la concentration $0,2\text{ g/l}$ atteinte, d'exécuter l'étape *E4* d'une durée de 60 heures environ et pendant laquelle se déroule la réaction biologique totale conformément au modèle biologique présenté précédemment.



(a) 5 itérations après le début de l'injection (0,05 s)



(b) 1320 itérations après le début de l'injection (13,2 s).

Figure IV-8: Etape3 : Injection de l'échantillon de culture et la convection.

A l'issue de cette étape, les concentrations volumiques moyennes des constituants du mélange passent des valeurs initiales précédentes aux valeurs finales obtenues à la fin de la réaction et qui sont d'environ 4 g/l pour le substrat, 10 g/l pour la culture, 1 mg/l pour l'oxygène dissout et 80 g/l pour l'acide gluconique. Les valeurs finales dépendent de l'arrêt de l'exécution du programme. D'autre part, le critère d'arrêt de son l'exécution est donné par l'expiration de son délai de 60 h , mais peut être formulé en termes de concentrations de constituants par exemple et/ou des caractéristiques de l'écoulement dans la cuve.

c) Les champs et profils des concentrations obtenus: La figure IV-9 donne les champs des concentrations finales pour les quatre constituants et la figure IV-10 donne les profils attendus, qui sont visiblement semblables à ceux proposés dans l'article [33]. On y remarque un aspect non homogène initié par l'injection de

l'échantillon et la convection hydrodynamique. Il convient de signaler qu'un changement de la valeur globale du coefficient $k_p a$ dans l'intervalle $[45 ; 80] h^{-1}$ a un effet négligeable sur les paramètres cinétiques de la réaction.

d) Commentaire (comparaison des résultats du II-2°/ et III-4°/c): Les profils des concentrations en sucre, oxygène dissout, culture et produit sont obtenus comme des moyennes volumiques de ces grandeurs dans la cuve entière. Elles sont évaluées en discrétisant l'expression (IV – 17) :

$$c(t) = \frac{\iiint_{cuve} c(x, y, z, t) dv}{\iiint_{cuve} dv} \text{ pour } c = S, O_d, X \text{ et } P \quad (IV - 17)$$

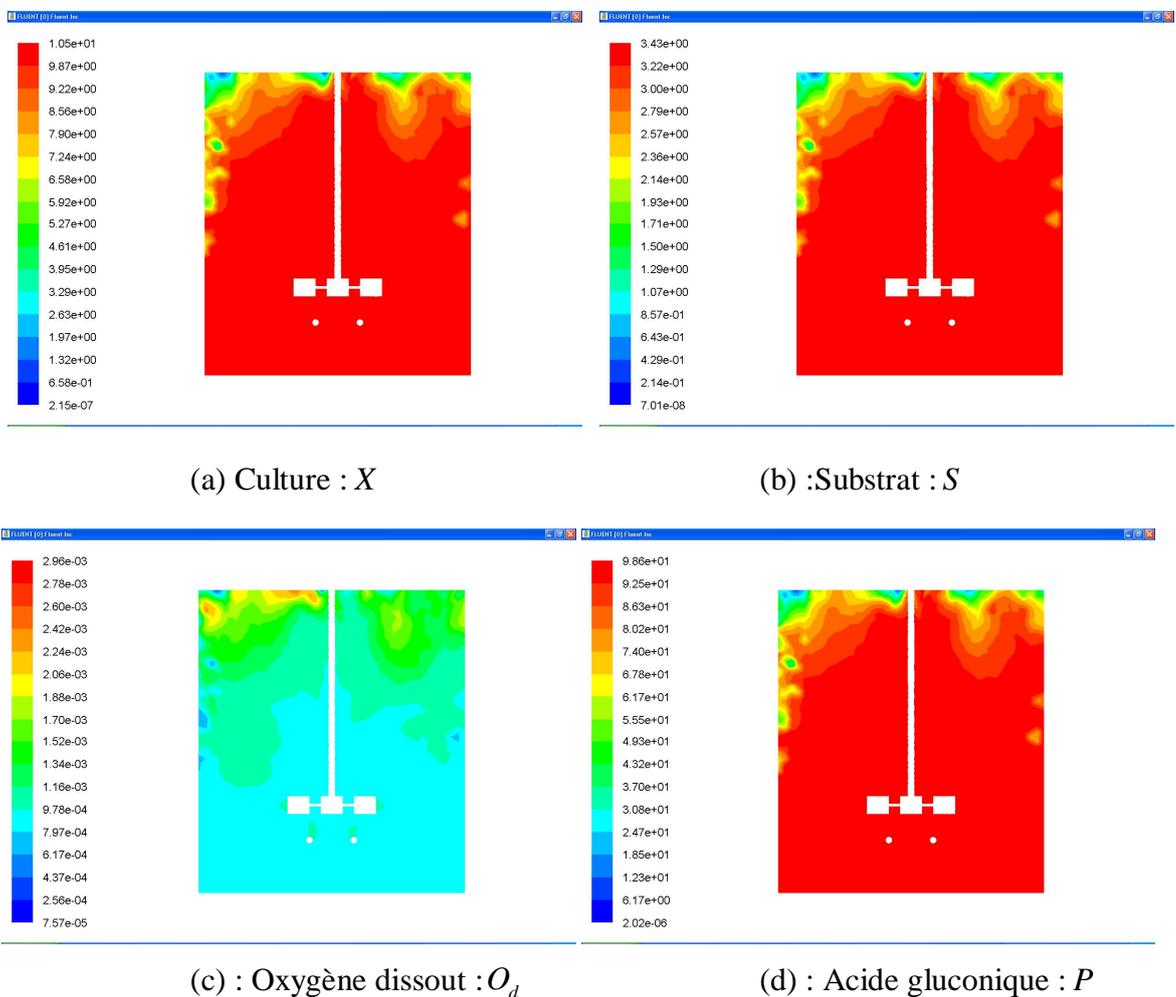


Figure IV-9: Champs des concentrations volumiques des quatre scalaires S, O_d, X et P (Fin de fermentation).

Les résultats obtenus par la CFD sont conformes, d'une part aux résultats expérimentaux qu'ils interprètent, au modèle de Contois accompagnant ces données [33], ainsi qu'aux solutions obtenues par la résolution numérique du paragraphe II-2° par Maple [89]. Ces derniers traduisent favorablement la résolution faite dans le cas d'un réacteur parfaitement mélangé. Ils ont fait l'objet de l'article [90].

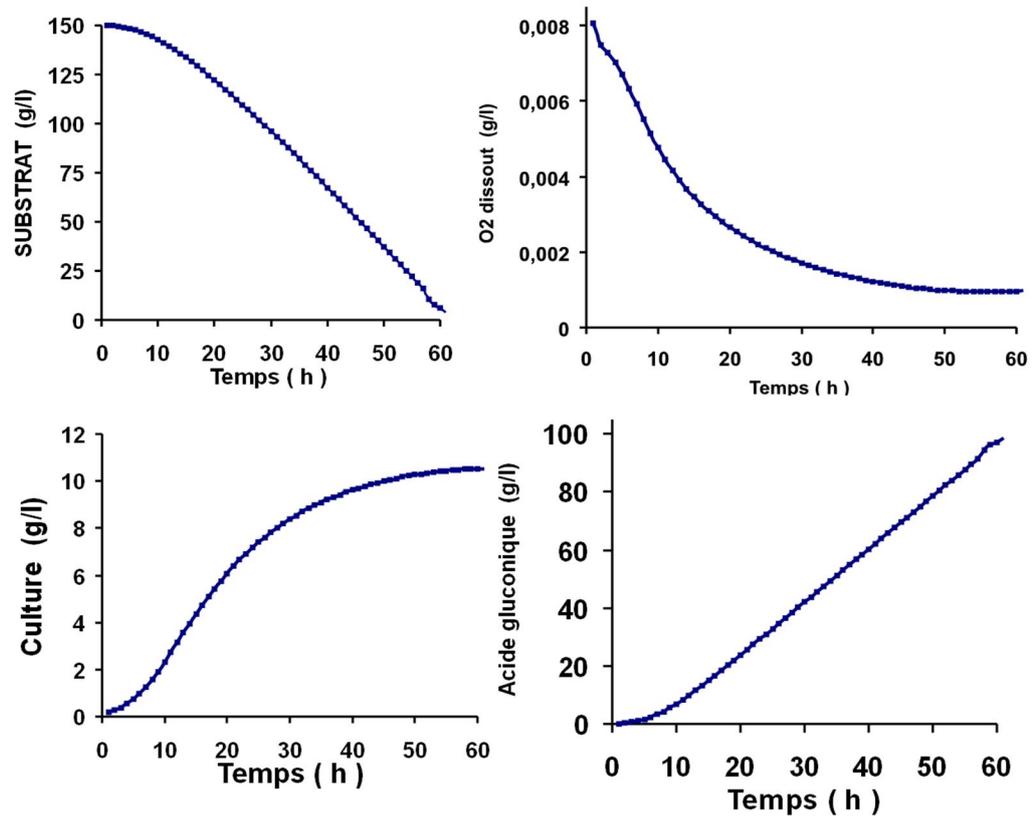


Figure IV-10: Profils des moyennes volumiques des concentrations des quatre scalaires S , O_d , X et P .

Cependant, il faut noter l'absence d'influence de la nature du régime (laminaire/ turbulent) de l'écoulement sur la bioréaction en termes de d'évolution des quatre constituants. Les équations de la cinétique de celle-ci n'intègrent pas cette nature de l'écoulement. Ce qui légitime les profils obtenus par le calcul et leur procure uniquement une valeur méthodologique pour l'instant.

A ce stade de la modélisation, en ce qui concerne l'interaction entre la réaction et l'hydrodynamique, l'effet de la seconde sur la première est manifeste à travers les figures IV-9(a-b) et IV-11 (a,b,c,d), mais il n'y a pas d'influence de la bio-réaction sur l'hydrodynamique.

L'influence mutuelle de l'hydrodynamique sur la bioréaction se fera à travers ces deux paramètres lorsque l'écoulement sera turbulent et en tenant compte de la concentration d'un fluide en cellules qui influence les caractéristiques hydrodynamiques du milieu. C'est l'objet des chapitres V et VI. **Cette influence réciproque actera directement ou indirectement sur les champs des vitesses, donc sur le nombre de Reynolds et par conséquent sur le régime de l'écoulement.**

L'écoulement support du calcul précédent était quasi-laminaire; ce qui est loin d'être la réalité ou la prépondérance au sein des cuves agitées. La complétion du modèle précédent en un écoulement turbulent comble ce déficit et constitue un pas vers un modèle plus complet. Elle sera entreprise au paragraphe suivant.

e) Les zones mortes : Elles sont caractérisées en termes de renouvellement de leur contenu à travers les vitesses des phases constituantes du mélange. Il s'agit de zones dans lesquelles les vitesses sont très faibles par rapport au reste de la cuve. On évalue l'étendue de ces zones sous deux aspects :

- les vitesses des phases sont très faibles : un centième de la vitesse en bout de pale qui est d'environ $2,09 \text{ m/s}$.

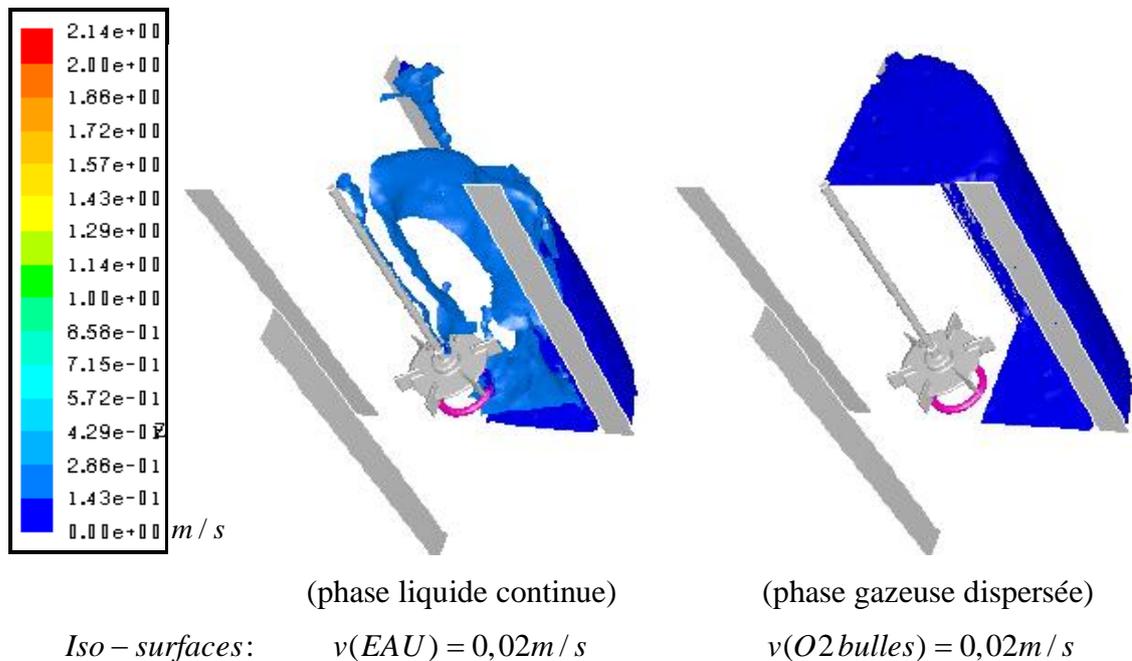


Figure IV-11: Equipotentiels caractérisant les zones mortes.

La figure IV-11 montre les équipotentielles $v = 0,02m/s$ pour chacune des deux phases qui sont moins éloignées de la source d'agitation pour la phase liquide que pour la phase gazeuse.

- les tourbillons locaux qui se créent et constituent des zones en écoulement permanent encapsulés dans une interface immobile limitant le renouvellement et l'apport des ingrédients nécessaires au développement de la culture. Ce deuxième type de zones mortes n'est pas abordé ici.

5°/ Autre approximation de la croissance de la culture:

Dans cette approximation, on suppose que: seulement $S(t)$ et $O_d(t)$ sont constants, de valeurs notées S et O_d , et que la variation locale de la concentration cellulaire $\Delta X = X(t + \Delta t) - X(t)$ notée $X - X_0$ pendant une durée Δt est petite devant $X(t)$. On obtient alors l'équation différentielle suivante :

$$K_s K_{O_d} X(t) X'(t) + (K_s O_d + K_{O_d} S) X'(t) + S O_d \frac{X'(t)}{X(t)} = \mu_{\max} S O_d \quad (IV - 18)$$

qu'on résout en tenant compte de l'approximation du premier ordre pour $X \approx X_0$:

$$X - X_0 \sim X_0 \text{Ln} \frac{X}{X_0} \quad (IV - 19)$$

$$A = K_s K_{O_d} X_0$$

$$\text{on obtient, en posant } B = 2K_s K_{O_d} X_0 + (K_s O_d + K_{O_d} K_s) X_0 + S O_d \quad (IV - 20)$$

$$C = \mu_{\max} S O_d \Delta t$$

$$\text{Ln} \frac{X}{X_0} = \frac{\sqrt{B^2 + 4AC}}{2A} \quad (IV - 21)$$

$$\text{et } X = X_0 e^{\frac{\sqrt{B^2 + 4AC}}{2A}} \quad (IV - 22)$$

comparée à l'expression précédente de X donnée par :

$$X = X_0 e^{\mu \Delta t} \quad (IV - 23)$$

Cette deuxième approximation suppose que, pendant une itération, μ ne dépend que de X contrairement à la première qui est constante indépendante de X, S et O_d et qui a été utilisée dans les calculs précédents.

Elle a été testée et donne des résultats présentant globalement la même allure avec quelques particularités. La phase de latence est plus courte et l’amorce de la croissance est plus prononcée mais ralentit fortement par la suite. La concentration du produit à la fin de la fermentation est plus faible. Cependant, cette approximation est fonctionnelle et peut servir comme terme correctif éventuel dans une recherche de plus de précision. Les résultats obtenus avec cette approximation ne sont pas reproduits dans cette étude.

IV - L’ADJONCTION DE LA TURBULENCE :

1°/ La turbulence en mécanique des fluides:

Les équations de Navier-Stokes moyennées pour un fluide incompressible monophasique sont les deux premières équations du système (IV – 24) ci dessous. Elles forment un système non fermé. La mise en œuvre des modèles de turbulence, représentées ici par les deux autres équations, permet cette fermeture. Le modèle adopté ici, parmi d’autres, pour la fermeture est le modèle standard de turbulence dit « modèle $k - \varepsilon$ ». Le système d’équations décrivant un tel écoulement en régime turbulent, caractérisé par un nombre de Reynolds suffisamment élevé, s’exprime par:

$$(SEDPM - 3) : \begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \bar{U}) = \sum_k \bar{S}_k \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{U}) + \nabla \cdot (\rho \bar{U} \bar{U}) + \nabla \cdot (\rho \bar{u} \bar{u}) = -\nabla \bar{p} - \nabla \cdot \bar{\tau} + \rho g \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \nabla \cdot (\rho \bar{U} k) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{\sigma_k} \nabla k \right) + G - \rho \varepsilon \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \nabla \cdot (\rho \bar{U} \varepsilon) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon \right) + \frac{\varepsilon}{k} (C_1 G - C_2 \rho \varepsilon) \end{cases} \quad (IV - 24)$$

$$\text{avec} \quad G = \frac{1}{2} \mu_t \left[\nabla \cdot \bar{U} + \nabla \bar{U}^t \right]^2 \quad (IV - 25)$$

où les coefficients du modèle $k - \varepsilon$ standard sont :

$$C_1 = 1,44 ; C_2 = 1,92 ; \sigma_k = 1,0 \text{ et } \sigma_\varepsilon = 1,3. \quad (IV - 26)$$

Dans ces expressions, la barre indique la moyenne temporelle et u la vitesse de fluctuation alors qu’indique la vitesse du champ moyen de l’écoulement. Le terme additionnel dans l’équation de la quantité de mouvement est appelé le tenseur de Reynolds et est défini par :

$$(\tau_{ij})_{turb} = \rho \overline{u_i u_j} \quad (IV - 27)$$

Pour de plus amples détails sur la turbulence et les modèles utilisés pour la fermeture, voir [4,5,11,70,71. Le choix du modèle standard est adopté parce qu'il donne des résultats satisfaisants. C'est un modèle à deux équations dont l'une assure le transport de l'énergie cinétique turbulente k et l'autre celui de son taux de dissipation visqueuse ε .

2°/ Les modèles de turbulence en écoulements multiphasiques:

Parmi les modèles de turbulence à deux équations du type $k-\varepsilon$ et utilisés en écoulements multiphasiques, trois modèles sont disponibles dans le code de calcul utilisé [36] :

- le modèle de turbulence de la mixture : Ce modèle est adapté aux mélanges dont les phases sont séparées et dont les densités sont voisines. Il décrit les propriétés turbulentes en utilisant deux équations pour la mixture et les caractéristiques hydrodynamiques résultantes de celle-ci.
- le modèle de la turbulence dispersée : Ce modèle est adapté à des écoulements dans lesquels la phase dispersée est diluée et n'a pas d'influence sur la phase primaire continue par ses effets internes. Des termes correctifs sont adjoints aux deux équations de turbulence de la phase continue qui sont résolues.
- le modèle de turbulence par phase : c'est le modèle le plus général adapté aux situations dont l'interaction entre les deux phases domine dans l'écoulement. Ce modèle utilise deux équations pour chaque phase et consomme plus de temps d'exécution si le nombre de phases augmente.

3°/ Les modèles adoptés, raisons, paramètres et le déroulement du calcul:

Dans le cadre de cette étude, l'interaction entre les deux phases dans la cuve présente de l'intérêt et la proportion de la phase dispersée est d'environ 10%. Celle-ci participe à l'agitation par le biais de son injection en se conjuguant avec l'agitation mécanique.

Dans les deux calculs suivants, le modèle mixture est utilisé pour simuler la turbulence dans le premier, ensuite, le modèle par phase, plus adapté au contexte de l'étude, est adopté dans le second. Par ailleurs, dans le reste de l'étude, pour la cuve

de 5 litres, seul le modèle de la turbulence par phase sera utilisé sous sa forme standard.

Pour le modèle de la mixture, les deux équations suivantes sont résolues en plus des équations de Navier-Stokes moyennées pour l'ensemble des deux phases:

$$\begin{cases} \frac{\partial \alpha_m \rho_m k_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \alpha_m \overline{U_m k_m}) = \nabla \left(\alpha_m \frac{\mu_{Tm}}{\sigma_{km}} \nabla \cdot k_m \right) + \alpha_m (G_m - \rho_m \varepsilon_m) \\ \frac{\partial \alpha_m \rho_m \varepsilon_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \alpha_m \overline{U_m \varepsilon_m}) = \nabla \left(\alpha_m \frac{\mu_{Tm}}{\sigma_{km}} \nabla \cdot \varepsilon_m \right) + \alpha_m \frac{\varepsilon_m}{k_m} (C_{1m} G_m - C_{2m} \rho_m \varepsilon_m) \end{cases} \quad (IV - 28)$$

alors que pour le modèle par phase, on résout deux équations pour chacune des phases présentes:

$$\begin{cases} \frac{\partial \alpha_L \rho_L k_L}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_L \alpha_L \overline{U_L k_L}) = \nabla \left(\alpha_L \frac{\mu_{TL}}{\sigma_{kL}} \nabla \cdot k_L \right) + \alpha_L (G_L - \rho_L \varepsilon_L) \\ \frac{\partial \alpha_L \rho_L \varepsilon_L}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_L \alpha_L \overline{U_L \varepsilon_L}) = \nabla \left(\alpha_L \frac{\mu_{TL}}{\sigma_{kL}} \nabla \cdot \varepsilon_L \right) + \alpha_L \frac{\varepsilon_L}{k_L} (C_{1L} G_L - C_{2L} \rho_L \varepsilon_L) \\ \frac{\partial \alpha_G \rho_G k_G}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_G \alpha_G \overline{U_G k_G}) = \nabla \left(\alpha_G \frac{\mu_{TG}}{\sigma_{kG}} \nabla \cdot k_G \right) + \alpha_G (G_G - \rho_G \varepsilon_G) \\ \frac{\partial \alpha_G \rho_G \varepsilon_G}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_G \alpha_G \overline{U_G \varepsilon_G}) = \nabla \left(\alpha_G \frac{\mu_{TG}}{\sigma_{kG}} \nabla \cdot \varepsilon_G \right) + \alpha_G \frac{\varepsilon_G}{k_G} (C_{1G} G_G - C_{2G} \rho_G \varepsilon_G) \end{cases} \quad (IV - 29)$$

Le tableau IV-2 résume le déroulement des calculs en cascasant les quatre étapes de la fermentation. La dernière ligne de ce tableau propose, pour chaque étape du calcul, un ou plusieurs résultats caractéristiques de l'étape en question. Ces résultats sont soit des images traduisant une qualité de l'écoulement, soit des fichiers numériques de grandes tailles, **dont seulement 2%**, sont convertis en graphiques donnant les profils attendus de certaines grandeurs.

ETAPE (itérations)	E1 (1-18500)	E2 (18501-27500)	E3 (27501 -28500)	E4 (28501-58500)
OPERATION	STATIONNARISATION $\Omega = 300 \text{ rpm} ; m = 0,001 \text{ Pa} \cdot \text{s}$	SATURATION EN O2 DISSOUT	INJECTION DE L'ECHANTILLON	REACTION
	Equations hydrodynamiques résolues par FLUENT et sans UDFs	Equations hydrodynamiques et de transport du scalaire O_d résolues par FLUENT et avec UDFs	Equations de la turbulence et du transport des scalaires résolues par FLUENT et avec UDFs	
Equations résolues	. Equation de continuité . Equation de quantité de mouvement pour la phase porteuse: EAU	. Equation de continuité . Equation de quantité de mouvement . équation des fractions volumiques pour 2 phases: porteuse: EAU et phase dispersée: O2 bulles		Equations hydrodynamiques non résolues
	Equations de Turbulence non résolues	. équations du modèle $k - \varepsilon$ de turbulence par phase (2x2 equations)		
	UDFs disabled	.équation de transfert de masse O_2 dissout avec k_a constant . équation de transport de scalaire O_d	. équation de transfert de masse O_2 dissout avec k_a constant . Injection de l'échantillon	. réaction biologique . équations de transport des scalaires

Temps réel simulé par étape	Sans signification hydrodynamique ou biologique	≈ 8 min	≈ 50s	≈ 60h
Pas Δt (s)	0,01 / 0,005 / 0,002 / 0,001	0,02 / 0,05	0.01 / 0.02 / 0,05	0,05 / 0,1 / 0,2 / 0,5 / 1 / 2 / 5 / 10 / 20 / 50
Nombre d'itérations	18500	9000	1000	30000
Temps d'exécution d'une itération (s)	12	9	9	16
Temps d'exécution total (162 h)	≈ 62h	≈ 22 h	≈ 3 h	≈ 75 h
Images et graphiques	<ul style="list-style-type: none"> . Champs des vecteurs-vitesse de la porteuse et de la phase dispersée. . Champs des vitesses et des grandeurs de la turbulence , etc,... 	<ul style="list-style-type: none"> . Profils de la saturation en O_2 <i>dissout</i>. 	<ul style="list-style-type: none"> . injection de l'échantillon et son mouvement par convection. 	<ul style="list-style-type: none"> . Profils et champs des concentrations des scalaires X, O, S, P.

Tableau IV-2: Les quatre étapes du traitement dans le cas turbulent avec k_1a et viscosité constants.

4°/ Les résultats obtenus et la validation du modèle:

Les profils des quatre scalaires obtenus S , O_d , X et P , obtenus à l'issue du tableau IV-2 (non présentés ici), sont identiques à ceux obtenus au paragraphe III pour un écoulement laminaire. Ceux-ci sont encore confirmés après adjonction de la turbulence au modèle précédent. Par ailleurs, l'allure globale de ces profils est la même aussi bien dans l'utilisation du modèle de turbulence de la mixture que dans celui du modèle par phase. Cette confirmation était attendue puisque le modèle biologique n'intègre la turbulence, sous aucune forme explicite ou implicite, alors que celle-ci joue, au moins, un rôle important dans l'échange massique entre les deux phases; ceci est confirmé à travers la littérature. La distinction entre les deux régimes sera endossée par le modèle au prochain chapitre.

L'intérêt, dans ce paragraphe, s'est donc porté sur la décortication des divers aspects de la turbulence dans le deuxième modèle. L'énergie cinétique turbulente moyenne k_L et son taux de dissipation ε_L sont définis par :

$$\begin{aligned}\overline{k_L} &= \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i} = \frac{1}{2} (\overline{u_1'^2} + \overline{u_2'^2} + \overline{u_3'^2}) \\ \varepsilon_L &= 2 \frac{\mu}{\rho} \overline{s_{ij}^2} = \frac{1}{2} \frac{\mu}{\rho} \overline{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right)^2}\end{aligned}\quad (IV - 30)$$

où $u' = (u'_i)$ est la partie fluctuante de la vitesse de la phase liquide dans laquelle l'indice L est omis.

D'autre part, les équations de la quantité de mouvement moyennées (RANS) acquièrent la même forme que celles d'un écoulement laminaire en utilisant la viscosité effective μ_{eff} , au lieu de la viscosité moléculaire et qui est donnée par :

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \quad (IV - 31)$$

où μ_t est la viscosité turbulente présente dans le modèle de turbulence $k - \varepsilon$ utilisé

sous la forme avec

$$\mu_t = \frac{C_\mu \rho k^2}{\varepsilon} \quad (IV - 32)$$

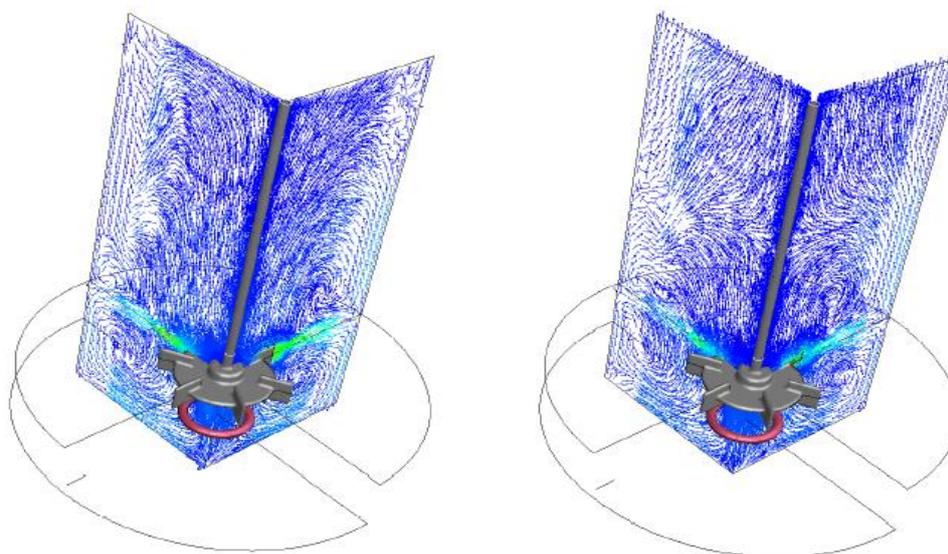
dans laquelle C_μ est une constante empirique. La viscosité turbulente traduit le transfert de quantité de mouvement par les tourbillons dans le fluide.

Les champs de ces deux grandeurs et leurs courbes de répartition volumique confirmés par leurs répartitions volumiques sont donnés dans les figures du paragraphe suivant.

(a) Les champs en images des vitesses, de l'énergie turbulente k_L et de son taux de dissipation ε_L pour la phase liquide :

Dans la figure IV-12 donnant les champs des vecteurs-vitesses, on remarque sur (a), la présence des échanges axe-paroi latérale au dessus et en dessous du plan de la turbine, par contre dans (b) , on perçoit en plus l'ascension de l'oxygène vers la sortie indiqué par la direction des vecteurs-vitesse de celle-ci.

On y constate aussi l'interaction mécanique entre les chicanes et la turbine au niveau du plan de celle-ci ainsi que la contribution des chicanes à canaliser l'écoulement verticalement.



(a) Phase primaire (EAU)

(b) Phase secondaire (O2 bulles)

Figure IV-12: Champs des vitesses vectorielles des deux phases (pseudo-turbulent).

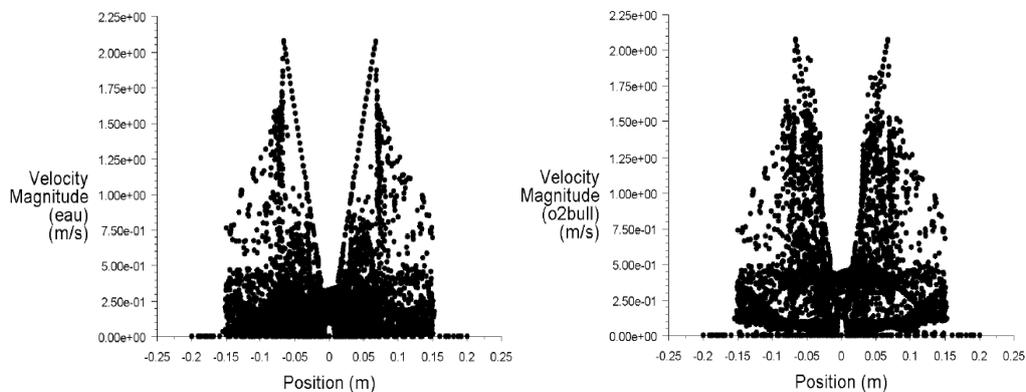


Figure IV-13: Distribution de des vitesses dans un plan vertical (pseudo-turbulent).

Sur la figure IV-13, donnant la distribution des vitesses scalaires des phases dans les centres des mailles d'un plan vertical, on constate une dispersion présentant une densité plus forte des valeurs dans l'intervalle $[0; 0,5] m/s$ et la forme en V (distribution affine) correspondant à la configuration des conditions frontières du problème en utilisant la vitesse de rotation de la turbine sur les pales de celle-ci.

Sur la figure IV-14, l'énergie cinétique turbulente ainsi que son taux de dissipation visqueuse se trouvent localisés intensément au niveau du plan de la turbine avec une participation de l'activité cinétique au niveau du distributeur de la phase gazeuse. Cette activité est quantifiée par le cumul de la fraction volumique de leurs valeurs dans le paragraphe suivant.

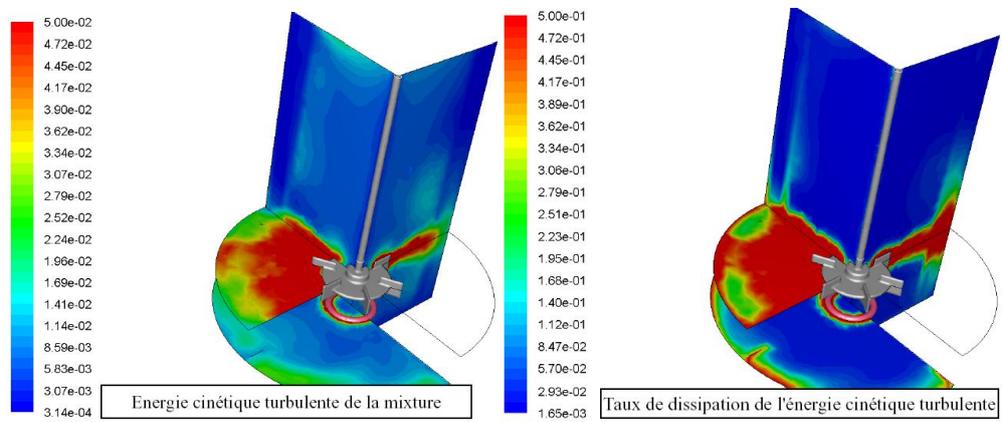


Figure IV-14: Champs de l'énergie cinétique turbulente k_L (m^2/s^2) et de son taux de dissipation visqueuse ε_L (m^2/s^3) dans les différents plans de la cuve.

(b) Les répartitions volumiques des valeurs de k_L , ε_L et μ_t pour la phase

continue:

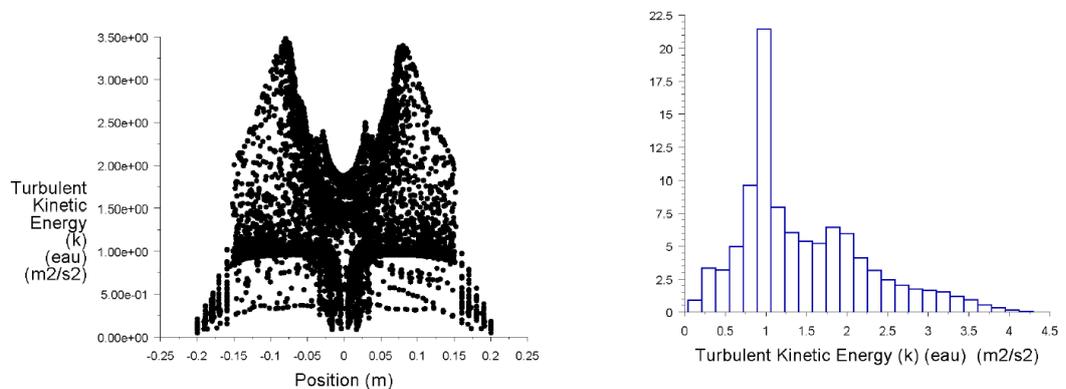


Figure IV-15: Distribution des valeurs de k_L dans un plan vertical.

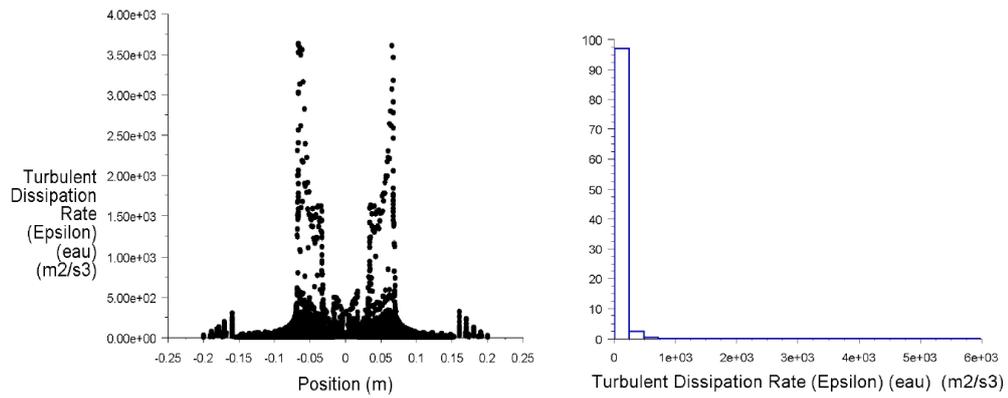


Figure IV-16: Distribution des valeurs de ε_L dans un plan vertical.

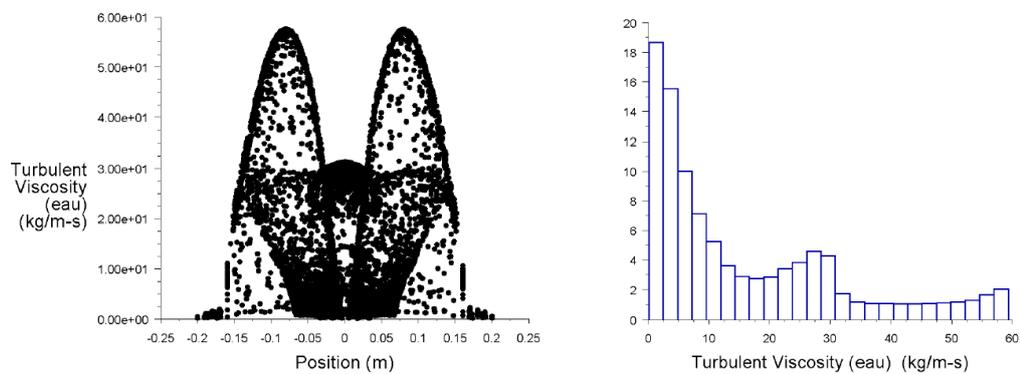


Figure IV-17: Distribution des valeurs de μ_t dans un plan vertical.

Les figures IV-15, 16 et 17 confirment respectivement la présence de la turbulence dans toute la cuve, de façon intense au niveau des pales, moindre au niveau de l'arbre et plus faible à proximité des parois externes. Le taux de dissipation est plus prononcé au voisinage de la turbine. Par ailleurs, sur ces figures, celles de gauche, en noir et blanc, donnent les valeurs de ces grandeurs dans un plan vertical comportant deux chicanes alors que celles de droite, en couleur, donnent leurs distributions volumiques (fractions du volume de la cuve occupée par la valeur de la grandeur en question). Ces valeurs sont prises dans les centres des mailles et sont donc dépendantes du maillage (densité). Cependant, elles permettent de se faire une idée globale en vue d'une analyse plus fine concernant une répartition volumique, et qui sera entreprise dans le chapitre suivant. La dépendance des figures de droite, graphiques en bleu, du maillage est moindre puisqu'il s'agit des quotients d'intégrales volumiques calculées de façon discrète.

V – CONCLUSION ET REMARQUE : Nécessité d’intégrer l’échange massique et la viscosité dans le modèle obtenu:

Le modèle mis au point d’une réaction biologique évoluant dans écoulement turbulent reproduit bien la situation expérimentale dans son volet biologique. Son volet hydrodynamique turbulent supportant cette activité biologique reproduit théoriquement l’agitation interne de la cuve dans son aspect turbulent. **Dans ce modèle, seul le transport convectif des scalaires est assuré par la phase primaire liquide et traduit leur évolution dynamique dans la cuve.** L’interdépendance entre la bio-réaction et l’écoulement n’est pas établie et mérite d’être modélisée pour tout l’intérêt qu’elle comporte. Celle-ci doit se faire par le biais du coefficient de transfert massique $k_l a$ dans sa dépendance de la turbulence et de la surface volumique de l’échange. Ceci établit un premier volet de l’interaction recherchée entre l’écoulement et la bio-réaction et qui consiste en l’influence de la turbulence sur l’oxygénation de la phase liquide. Les bulles sont considérées ici de même diamètre et la réalité variable de ce diamètre n’est pas abordée.

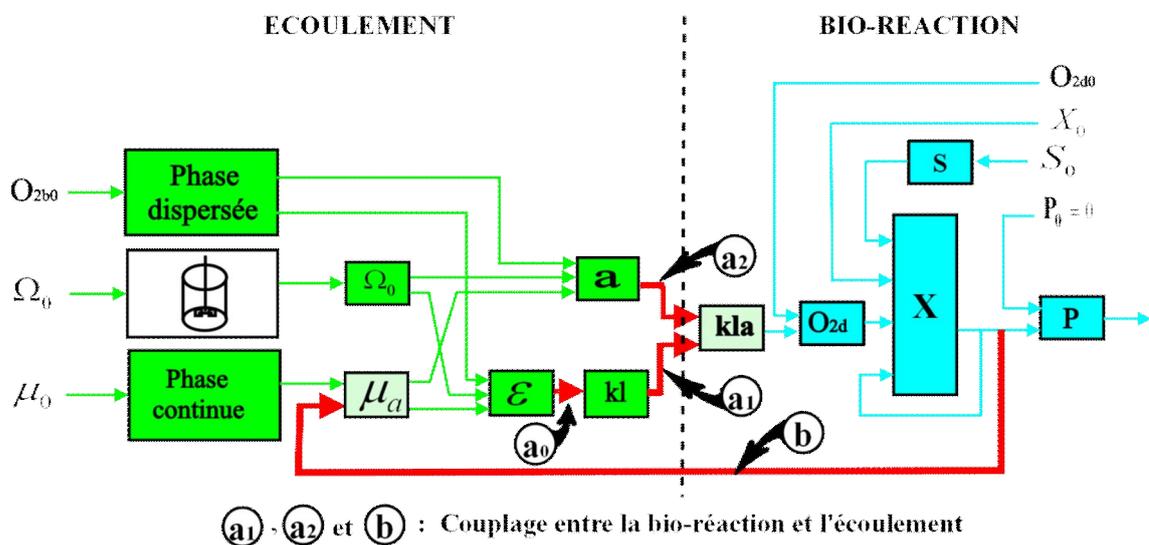


Figure IV-18: Couplage de la bio-réaction et de l’écoulement.

Les expressions du coefficient k_l en fonction du taux de dissipation visqueuse, sont de plus en plus fréquentes dans la littérature, et constituent la pièce manquante du puzzle. A travers la littérature, le rôle de la turbulence est toujours présent dans l’échange massique gaz-liquide, mais non pris en charge dans les modèles élaborés.

L'objet du chapitre suivant est de mettre en place cette influence directe et quantitative de la turbulence sur la charge de la phase porteuse en oxygène dissout. Celle-ci s'opère au niveau de a_0 , a_1 et a_2 de la figure IV-18.

Le chapitre VI, expose le deuxième lien, établissant l'influence inverse, celle de la bio-réaction sur l'hydrodynamique, au niveau b de la même figure IV-18. Il exploite la notion de la viscosité apparente qui s'installe dans le mélange hétérogène sous l'effet de sa concentration en organismes qui augmente avec le développement de la culture. Le choix de cette concentration comme support de ce lien n'est motivé que par le fait que la culture est l'élément central de la bio-réaction. Chacun des constituants du mélange contribue aussi bien dans la valeur de la viscosité que dans son évolution et peut éventuellement être pris en charge dans une formulation plus complète de celle-ci.

CHAPITRE V

INTEGRATION DE L'ECHANGE MASSIQUE ($k_L a$)

INTRODUCTION: Lors d'une simulation par un écoulement monophasique d'un système réellement diphasique gaz-liquide, le rôle de la résolution des équations de l'écoulement modèle laminaire ou turbulent utilisé est d'approcher les caractéristiques de ce dernier. Les hypothèses adoptées et leur mise en œuvre valident l'usage de l'écoulement de remplacement. Pour deux phases dont les caractéristiques physico-chimiques sont assez proches, cette approximation peut convenir; mais ces caractéristiques sont suffisamment distinctes pour ne pas adopter cette démarche ici. Les études entreprises sur des mélanges réellement diphasiques sont peu nombreuses mais connaissent un regain d'intérêt. Bakker et Van Den Akker [84] calculent des diamètres de bulles et des coefficients de transfert en fonction de la puissance spécifique, mais n'arrivent pas à déterminer les profils de l'oxygène dissout suite à la complexité des phénomènes de transfert, hydrodynamiques et de l'évolution de la réaction.

La modélisation hétérogène a progressé avec les travaux de Jenne et Reuss (1997)[85] et Reuss (1997) en utilisant un modèle simplifié avec des bulles à diamètre constant.

L'objectif de ce chapitre est de :

- prendre en compte la réalité diphasique locale dans la cuve pour réaliser le transfert massique en impliquant la fraction volumique locale de la phase dispersée gazeuse et quelques propriétés physico-chimiques de l'échange interphasique.
- considérer la réalité non homogène et globale du coefficient $k_L a$ et adopter une version de ce coefficient dans sa dépendance de la turbulence.

I- LE TRANSFERT D'OXYGENE ET LES MODELES D'ECHANGE:

1°/ Les échanges inter-phasiques:

La coexistence de plusieurs constituants d'un fluide induit la présence de gradients de concentration et d'autres grandeurs de chacun d'eux. Sur des

considérations thermodynamiques, un tel mélange, qui n'est pas en état d'équilibre et en l'absence de réaction chimique, évoluera pour retrouver celui-ci. Un volet de cet équilibre concerne les concentrations massiques dont la présence de gradient génère un flux d'homogénéisation massique. Ce flux se traduit, pour la diffusion d'un constituant du mélange, le gaz G de concentration O_d , dans le mélange gaz-liquide $G - L$, par les lois de Fick (1855) [12] exprimées par les relations ci-dessous (en négligeant la diffusion inverse):

- dans un état stationnaire le transfert de masse de la phase gazeuse G vers la phase liquide L est régit par la loi première loi de Fick:

$$\vec{j}_0 = -D\nabla O_d \quad (V-1)$$

- dans un état instationnaire où le processus dépend du temps -comme dans les réactions chimiques par exemple -ce transfert est régit par la seconde loi de Fick donnée par :

$$\frac{\partial O_d}{\partial t} = D\nabla^2 O_d \quad \text{ou} \quad \frac{\partial O_d}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 O_d}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 O_d}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 O_d}{\partial z^2} \right) \quad (V-2)$$

où D est le coefficient de diffusion massique de G dans L dont la valeur pour la diffusion de l'oxygène dans l'eau est $D \approx 1,98 \times 10^9 \text{ m}^2 / \text{s}$ à 20°C .

Le coefficient D dépend des conditions thermodynamiques et des propriétés physico-chimiques du fluide (il augmente avec la température et décroît avec la viscosité dynamique [12]).

Dans la situation étudiée, le transfert s'effectue au niveau de la discontinuité représentée par l'interface séparant les deux fluides G et L . Cette interface participe par l'étendue de sa surface dans le transfert gaz-liquide et en conditionne la portée quantitative.

2°/ Structure dispersive de la phase gazeuse dans une cuve agitée :

Dans une cuve agitée et alimentée en gaz à travers un anneau, la distribution de la fraction volumique de la phase gazeuse (rétention gazeuse) dépend de l'agitation, du débit entrant de cette phase, de son interaction avec la phase liquide et des positions d'entrée/sortie. A faible débit et forte agitation, la dispersion est complète. En cuve standard, à fort débit et faible agitation, les bulles adoptent des trajectoires ascensionnelles autour de l'arbre d'entraînement de la turbine. Nienow

et al. (1978) [82] définit la vitesse de rotation critique N_{CD} pour une dispersion complète conformément à la figure V-1 extraite de [83].

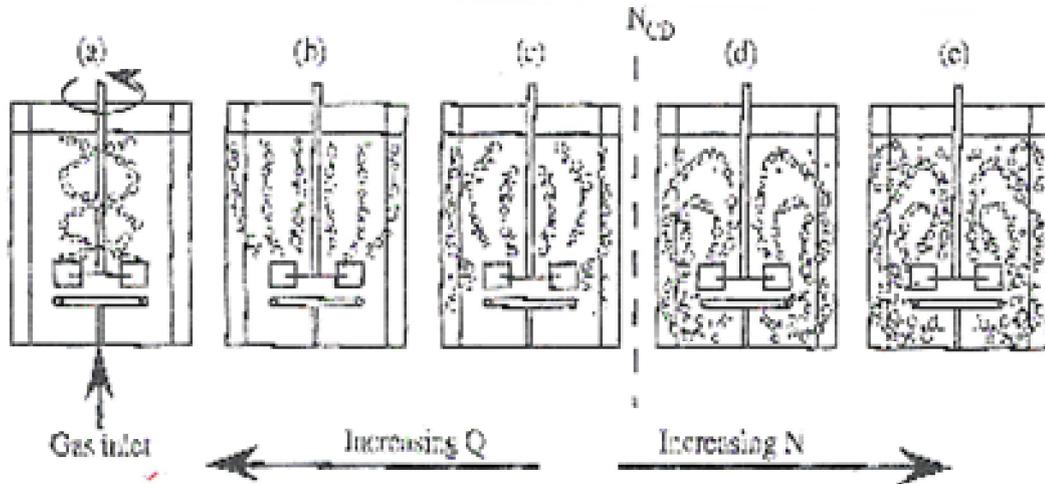


Figure V-1: Dispersion de la phase gazeuse en fonction de la vitesse et du débit.

Pour une cuve standard telle que $T < 1,8m$, agitée par une turbine à six pales, Nienow et al. (1978) propose l'évaluation de N_{CD} par :

$$N_{CD} = 3 \frac{Q_g^{0,5} T^{0,25}}{D^2} \quad (V-3)$$

avec Q_g débit volumique du gaz et les longueurs exprimées en mètres.

3°/ L'interface en écoulements diphasiques gaz-liquide:

L'interface joue un rôle important en écoulements diphasiques. Elle peut se présenter sous diverses formes allant de l'unique surface connexe séparant les deux phases jusqu'à l'ensemble des surfaces de toutes les petites bulles de gaz en suspension dont les formes et dimensions présentent une grande diversité. Elle peut être utile par son rôle de séparateur en déformation perpétuelle, ou par son rôle de lieu d'échange inter-phasique lors de l'écoulement.

Il existe des applications pour lesquelles, l'interface est importante par sa dynamique en tant que surface séparant deux milieux différents (évolution de grosses bulles motrices dans un réacteur air-lift,...) et d'autres applications où elle est importante par la valeur de son aire, ce qui est le cas pour la fermentation en cuve agitée où la phase gazeuse est à l'état de petites bulles générant ainsi une grande surface d'échange.

4°/ Les échanges cinétiques et thermiques :

A travers l'interface s'opèrent des échanges cinétiques (mécaniques) selon des lois dont une déclinaison est intégrée au modèle eulérien multiphasique à phase dispersée ainsi que des échanges thermiques qui peuvent être importants pour la croissance de la culture. Ce dernier aspect n'est pas abordé dans cette étude.

En ce qui concerne l'échange cinétique (échange de quantité de mouvement), la phase secondaire dispersée sous forme de bulles, il est exprimé par [36] :

$$K_{GL} = \frac{\alpha_L \alpha_G \rho_G}{\tau_G} f \quad (V-4)$$

où f est la fonction de traînée, τ_G est donné par $\tau_G = \frac{\rho_G d_G^2}{18\mu_L}$, d_G étant le diamètre

des bulles. Différentes définitions de la fonction de traînée f sont données en fonction d'un coefficient C_D décliné selon plusieurs modèles dont ceux de Schiller et Naumann donnés dans [36] (utilisé éventuellement par défaut dans le code de calcul utilisé et d'un usage acceptable pour un mélange fluide-fluide) s'exprime par :

$$f = \frac{C_D \text{Re}}{24} \quad (V-5)$$

où Re est le nombre de Reynolds relatif de la phase secondaire dispersée. Ce nombre s'exprime à travers la vitesse de glissement $\vec{v}_G - \vec{v}_L$ de celle-ci, par :

$$\text{Re} = \frac{\rho_L \|\vec{v}_G - \vec{v}_L\| d_G}{\mu_L} \quad (V-6)$$

et dans ce cas parmi d'autres, comme mentionné par Ranade dans [5], le coefficient de traînée s'exprime par :

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{\text{Re}} (1 + 0,15 \text{Re}^{0,687}) & \text{pour } \text{Re} < 1000 \\ 0,44 & \text{pour } \text{Re} > 1000 \end{cases} \quad (V-7)$$

En plus de la force de traînée, d'autres forces agissent sur la phase dispersée. Ce sont :

- les forces de portance (the lift force) : Elles sont dues à la vorticit   ou au cisaillement et pour un   coulement homog  ne, elles s'expriment par :

$$F = -C \rho_L \alpha_G \bar{v}_G (\bar{U}_G - \bar{U}_L) \times (\nabla \times \bar{U}_L) \quad (V-8)$$

où C est un coefficient empirique valant 0,5 pour des particules sphériques et un écoulement potentiel selon Drew et Lahey (1979) [5].

- les forces de masse virtuelle (the virtual masse forces) : Elles sont occasionnées par la prise d'une accélération relative de la phase continue qui est due à celle de la dispersée. Une inertie additionnelle de la phase continue est modélisée par :

$$\bar{F}_{vm} = - \left(\frac{DI}{Dt} + I \cdot \nabla U_L \right) \text{ avec } I = C_{vm} \bar{v}_G (\bar{v}_G - \bar{v}_L) \text{ à vérifier} \quad (V-9)$$

où l'expression recommandée par Wijngaarden (1976) de C_{vm} est [5] :

$$C_{vm} = C_{vmG} (1 + 2,78 \alpha_G) \quad (V-10)$$

avec C_{vmG} dans l'intervalle 0,25---0,5.

- les forces de Basset (the history forces) : Ce sont des forces qui expriment l'histoire dynamique des bulles à travers les accélérations subies dans leur évolution. L'expression de ces forces se présente sous la forme:

$$\bar{F} = C \int_0^t f(t, t', u_b, u_L) dt' \quad (V-11)$$

où C est une constante, f est une fonction des vitesses des bulles u_b , du liquide u_L et du temps t .

Ces divers termes correctifs sont négligés dans cette étude principalement pour réduire le temps de calcul.

5°/ L'échange massique :

Cet échange, fortement impliqué dans une bio-réaction, s'opère entre les deux phases et s'exprime en fonction de la concentration de l'oxygène dissout dans le mélange par :

$$r'_{O_d} = \frac{dO_d}{dt} = k_l a (O_d^* - O_d) \quad (V-12)$$

relation dans laquelle O_d^* est la concentration de saturation de la phase continue en oxygène dissout. Dans l'expression du coefficient $k_l a = k_l \times a$, la quantité a est la surface volumique de l'interface impliquée dans l'échange et k_l est le

coefficient d'échange surfacique. Dans notre étude, $k_1 a$ vaut $63h^{-1}$ pour le modèle de Contois, mais l'auteur rapporte qu'il a varié *entre* $80h^{-1}$ et $43h^{-1}$.

a) Le coefficient k_1 : Globalement évalué à $k_1 a = 63h^{-1}$ dans les chapitres précédents, ce coefficient d'échange apparent dépend réellement de l'état et des conditions locales du lieu où il acte. Son caractère global n'est pas réaliste pour beaucoup d'applications et il doit différer significativement entre une zone à faible viscosité et une autre trop visqueuse où les bulles restent prisonnières de leurs couches voisines qui ne se renouvellent pas. Il dépend toujours du coefficient de diffusion D du liquide mais aussi des conditions hydrodynamiques et thermodynamiques du lieu.

b) Le « volume » de l'échange: La surface de l'interface est un facteur important dans l'échange et sa quantité volumique est inversement proportionnelle au diamètre des bulles. Dans une formulation simplificatrice où les bulles sont des sphères de même diamètre d et où la fraction volumique locale (rétention gazeuse) de la phase dispersée est α_G , l'aire de cette interface est donnée par :

$$a = \frac{6\alpha_G V}{d} \quad (V - 13)$$

La présence de la rétention gazeuse dans cette expression est aussi un facteur de disparité dans la contribution des zones de la cuve en matière d'échange. Ce qui renforce l'intérêt de considérer le caractère local de cette contribution et celui de l'étendue des zones mortes.

II- LES COEFFICIENTS k_1 ET $k_1 a$ DANS LA LITTERATURE :

De nombreuses configurations ont été proposées pour représenter les conditions d'échange au voisinage de l'interface. La plus ancienne est la configuration de la théorie des deux films proposée par Withman en 1923. On reprend ici sommairement quelques méthodes dont on peut trouver des exposés détaillés dans [12].

1°/ Les modèles d'échange gaz-liquide :

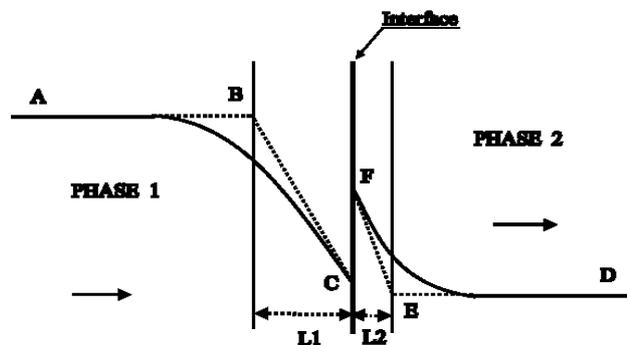
a) Le modèle des deux films [12]: Whitman (1923) est le premier a avoir essayé de modéliser le transfert massique entre deux fluides en écoulement et en contact l'un de l'autre. Il suppose l'existence, dans le voisinage immédiat de l'interface, d'écoulements laminaires relayés au-delà par les effets de la **turbulence** sur le mouvement aléatoires des molécules. Ainsi la résistance au transfert diminue progressivement. Dans ce voisinage immédiat, le transfert est dû à la diffusion moléculaire, le gradient de concentration y est linéaire et nul ailleurs. L'équilibre des phases est supposé exister à l'interface en C et F et C_∞ désigne la concentration loin de celle-ci. De la première loi de Fick (V-1), appliquée des deux côtés de l'interface figure V-2, il vient que, :

$$\frac{D_1}{L_1}(C_{\infty 1} - C_{G_{int}1}) = N_G = \frac{D_2}{L_2}(C_{\infty 2} - C_{G_{int}2}) \quad (V-14)$$

d'où

$$\frac{C_{\infty 2} - C_{G_{int}2}}{C_{\infty 1} - C_{G_{int}1}} = \frac{D_1 L_2}{D_2 L_1} \quad (V-15)$$

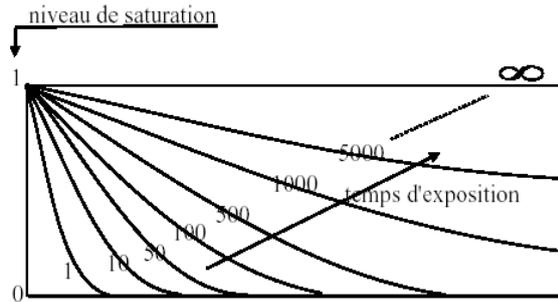
Figure V-2: Illustration de la méthode des deux films.



b) Le modèle de la pénétration de Higbie: Elaborée en 1935, en supposant que chaque élément de surface du liquide est exposé au gaz le temps de passage de la bulle, en fonction de son diamètre et sa vitesse. Pendant ce temps, estimé en fonction du diamètre de la bulle et de sa vitesse, le transfert résulte de la diffusion moléculaire instationnaire dans le liquide. La figure V-3 fournit le profil des calculs de Higbie en fonction de la distance à l'interface en mettant en avant le temps d'exposition. Les détails du modèle se trouvent dans [12].

Figure V-3:

Illustration de la méthode de pénétration de Higbie.



Il y est supposé que, de façon instationnaire, les tourbillons amènent les éléments de fluide qui se trouvent exposés à la phase gazeuse au niveau de l'interface pendant un intervalle de temps. L'application de la deuxième loi de Fick, donne la densité de flux molaire:

$$N_G = (C_{G_{int}} - C_{G_{\infty}}) \sqrt{\frac{D}{\pi t}} \quad (V-16)$$

pour un séjour t de l'élément de surface. Pour une durée d'exposition τ , la densité de flux :

$$\overline{N}_G = 2(C_{G_{int}} - C_{G_{\infty}}) \sqrt{\frac{D}{\pi} \tau} \quad (V-17)$$

et cette relation permet de montrer la dépendance de la concentration en gaz, du coefficient de diffusion D , et du temps d'exposition.

c) Le modèle film-pénétration: Cette théorie, inspirée des deux précédentes et suggérée par Toor H. L. et Marchello J. M. (1958), reprend certaines idées des deux modèles précédents dont l'aspect instationnaire du transfert et laminaire du voisinage de l'interface avec renouvellement de ce voisinage par les tourbillons. Cette théorie conduit à la conclusion qu'avec une erreur inférieure à 10%, le taux est donné par les expressions (V-18) citées avec plus de détail dans [12].

$$\begin{aligned} \text{Si } \pi \leq \frac{L^2}{Dt} < \infty \quad \text{alors } N_G &= (C_{G_{int}} - C_{G_{\infty}}) \sqrt{\frac{D}{\pi t}} \\ \text{Si } 0 \leq \frac{L^2}{Dt} \leq \pi \quad \text{alors } N_G &= (C_{G_{int}} - C_{G_{\infty}}) \frac{D}{L} \end{aligned} \quad (V-18)$$

Il est à noter particulièrement que, comme les relations précédentes, celles-ci n'endossent pas expressément l'agitation siégeant dans l'écoulement et les caractéristiques de celui-ci.

d) Autres modèles: A côté de ces modèles construits autour des lois de Fick, de la participation ou non des tourbillons, d'autres ont été proposés par Kishinevskij M. K. (1951) et par Bakowski S. (1954). Par ailleurs, inspirés de l'expérience, certains modèles sont développés autour de la turbulence. Ce travail intègre, pour tenir compte de la non-homogénéité du coefficient $k_{i,a}$, la non-homogénéité du taux de sa dissipation visqueuse, et qui est impliqué dans certaines expressions rencontrées dans la littérature.

2°/ Tour d'horizon des coefficients d'échange massique dans la littérature:

Dans le transfert d'oxygène dans un milieu aqueux, exprimé par (V-12), les coefficients d'échanges se présentent, pour une bonne partie d'entre eux et sous des conditions d'utilisation particulières parfois, sous des formes empiriques [84], telles l'expression de Middelton (1992):

$$k_{i,a} = \alpha \left(\frac{P}{V} \right)^\beta V_S^\gamma \quad (V-19)$$

pour $\alpha = 1,2$; $\beta = 0,7$ et $\gamma = 0,6$.

_ avec les premières considérations globales de la viscosité apparente sous la forme :

$$k_{i,a} = \alpha \left(\frac{P}{V} \right)^\beta V_S^\gamma \mu_{app}^\delta \quad (V-20)$$

présentées par Ryu et Humphrey (1972) et Hickman et Nienow (1986) avec $\delta = -0,86$ et $\delta = -0,5$ respectivement [18].

_ avec la vitesse d'agitation N telles les expressions de Aiba et al. citant Cote:

$$k_{i,a} \sim \left(\frac{P}{V} \right)^{0,4} V_S^{0,5} N^{0,5} \quad (V-21)$$

_ et de la fraction volumique ϕ d'un constituant, telle l'expression empirique donnée par Nielson et al. (2003) et citée par Clarke et Correia dans [87] :

$$k_{i,a} = 650 \left(\frac{P}{V} \right)^{0,31} V_S^{0,7} (1-\phi)^{1,7} \quad (V-22)$$

A côté de ces types de coefficients dont une large gamme est proposée dans [87], on trouve des coefficients qui n'incluent pas de façon explicite ou implicite la surface d'échange et parmi lesquels ceux que la démarche de l'étude explore: **les modèles utilisant la turbulence.**

Des simulations de la distribution du coefficient de transfert massiques sont présentées dans les travaux de Marko Laakkonen (2007) [20] à partir d'expressions du genre cité plus haut. L'objet de l'étude est d'intégrer ce type d'approche de transfert massique en fermentation à partir des mêmes expressions citées par Laakkonen et al dans [20,21].

III- LE MODELE ADOPTE ET SES CARACTERISTIQUES :

1°/ L'importance de la turbulence : le taux de dissipation visqueuse $\underline{\varepsilon}$:

(a) La turbulence dans les modèles de coefficients d'échange gaz-liquide k_l :

Dans l'élaboration des théories sur l'échange massique, les phénomènes de turbulence sont toujours présents dans le processus constructif de ces théories sans l'être explicitement. Le développement de modèles plus adaptés et de plus en plus poussés de celle-ci d'une part, et la maîtrise croissante des mélanges multiphasiques d'autre part, ont contribué à l'émergence de modèles de ces coefficients utilisant l'énergie turbulente et sa dissipation ainsi que la composition phasique de l'écoulement. Le coefficient d'échange volumétrique $k_l a$ quantifie l'échange dans son aspect phénoménologique par le coefficient k_l et dans sa portée quantitative liée à la surface d'échange a .

(b) Quelques modèles:

Dans [22], Moilanen et al. (2008) présentent une expression du coefficient k_l basée sur les hypothèses de Kawase et al. (1992), citée par Linek (2004) et Laakkonen (2006). Dans le but d'inclure la non-homogénéité de l'échange massique dans le modèle élaboré et l'influence du régime, l'étude se propose ici d'utiliser l'expression telle qu'elle se présente sans aucune adaptation à la fermentation modélisée par Znad et al.[33], déjà simulée par la CFD avec un coefficient $k_l a$ constant de $63 h^{-1}$, mais qui évolue réellement dans l'intervalle $[43 ; 80] h^{-1}$. Une variation de ce coefficient dans cet intervalle est considérée comme sans effet sur le déroulement de la fermentation.

2°/ L'expression du modèle adopté :

Le modèle adopté pour la simulation est celui cité dans [22] et donné par:

$$k_t = C_1 \sqrt{D_L} \left(\frac{\varepsilon \rho_c}{\mu_c} \right)^{0.25} \quad (V - 23)$$

où $D_L = 1,98 \times 10^{-9} \text{ m}^2 / \text{s}$ est la diffusivité de l'oxygène à 20°C dans l'eau, ε ($\text{w} / \text{kg}_{(\text{liquide})}$) ou (m^2 / s^3) est le taux de dissipation de l'énergie turbulente, ρ_c (kg / m^3) et μ_c (Pa.s) sont la masse volumique et est la viscosité de la phase continue c (eau). Ce coefficient endosse les effets de l'écoulements par le biais de ε_L et μ_c et permettra la mise en œuvre de l'influence de l'hydrodynamique sur le transfert massique et par-là sur la bio-réaction.

3°/ L'implémentation informatique :

Elle consiste, pendant l'écoulement, stationnaire ou non, à disposer du champ scalaire de la dissipation visqueuse ε , évalué à partir du champ des vitesses par les équations de la turbulence. Il est non évolutif pour un écoulement stationnaire mais le devient pour un écoulement instationnaire. Ce champ est utilisé, par le biais des fonctions-utilisateur (UDF) dans l'évaluation de la valeur locale du coefficient k_t . Une étude de la distribution des valeurs de ce champ sera faite ainsi que celles des distributions du coefficient d'échange surfacique, de la surface volumique d'échange et du coefficient d'échange massique lui-même.

IV- LES RESULTATS ET LA MISE EN EVIDENCE DE L'INTERACTION

REACTION-ECOULEMENT :

1°/ Les quatre grandeurs hydrodynamiques :

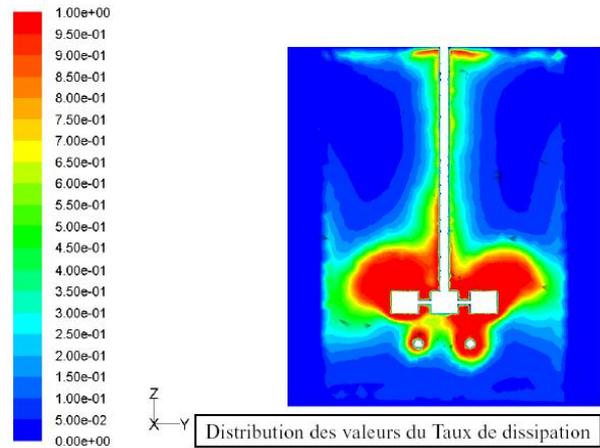
Les résultats du calcul par la CFD exploitant le modèle ci-dessus sont présentés en termes d'images et de distributions de fractions volumiques dans la cuve. L'annexe A1 présente un condensé de 52 valeurs (lignes) de chacune de ces grandeurs, extraites d'un fichier de données de 326395 lignes correspondantes aux valeurs aux centres des mailles du maillage utilisé.

(a) Les valeurs du taux de dissipation ε_L :

i- Le champ des valeurs de ε_L : La figure V-4 présente une zone de fortes valeurs de la dissipation visqueuse autour des sources cinétiques

(mécaniques). Le fond de la cuve ainsi que les zones de faibles vitesses offrent les plus faibles valeurs de ce taux.

Figure V-4: Champs des valeurs du taux de dissipation visqueuse ε_L (m^2 / s^3):



ii- Distribution volumique des valeurs de ε_L : Ce champ peut être analysé de plusieurs façons. La figure V-5 propose la distribution volumique de l'intensité des valeurs obtenues. Elle peut permettre l'obtention de l'intensité cumulée de ces valeurs et la valeur médiane de la distribution.

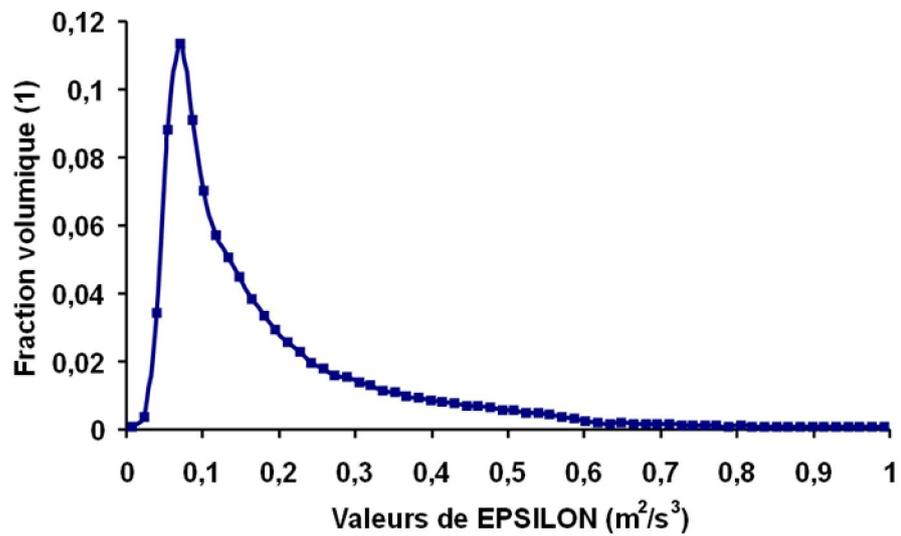


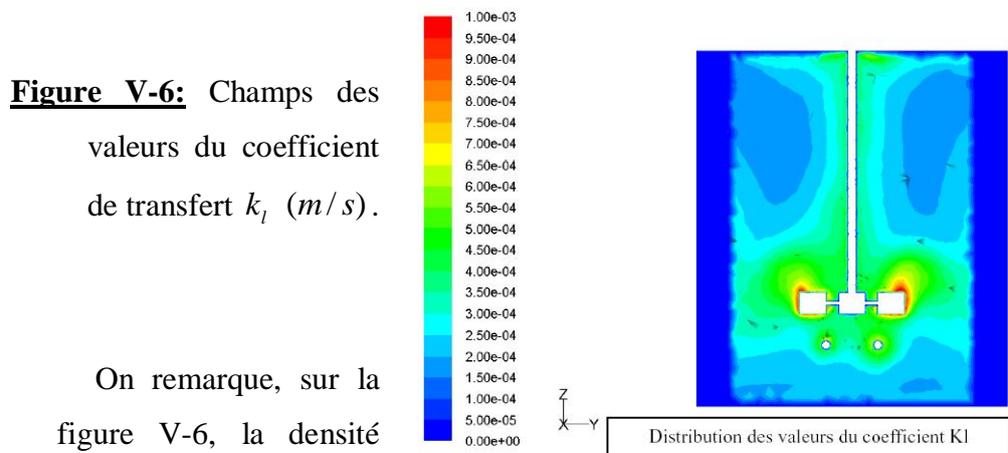
Figure V-5:

Fractions volumiques de la dissipation visqueuse ε_L :

iii-La moyenne volumique de ε_L : La moyenne volumique calculée de ε_L est d'environ $0,22 m^2 / s^3$. Ce qui concorde avec la distribution de ses valeurs dans le volume de la cuve.

(b) Les valeurs du coefficient de transfert k_l :

i- Le champ des valeurs du coefficient de transfert k_l :



ii- Distribution volumique des valeurs de k_l :

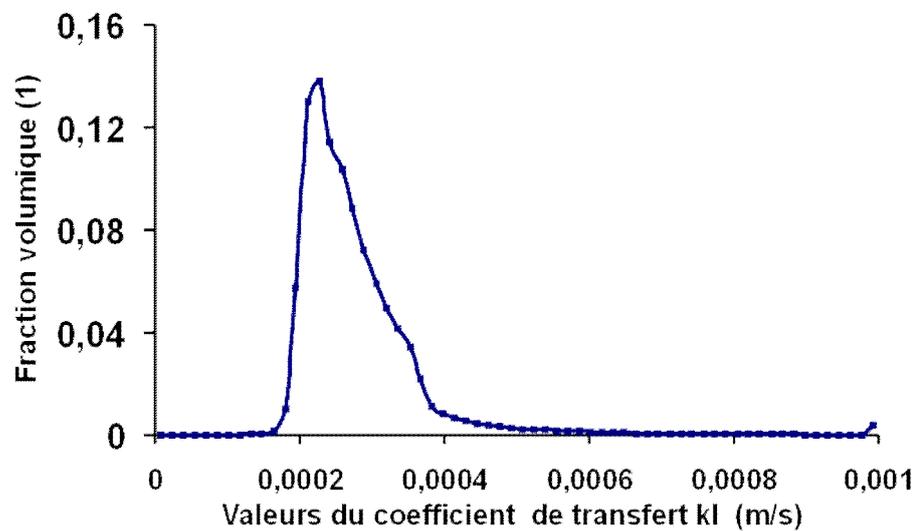


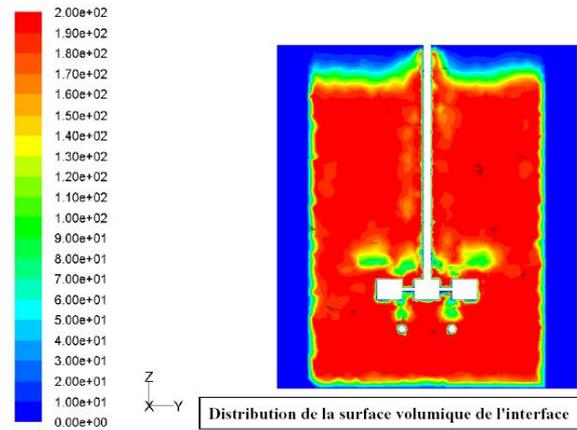
Figure V-7: Fractions volumiques du coefficient de transfert k_l (m/s) :

iii-La moyenne volumique de k_l : La moyenne volumique calculée de k_l est d'environ $0,00027\text{ m/s}$. Ce qui concorde avec la distribution de ses valeurs dans le volume de la cuve.

(c) Les valeurs de la surface volumique d'échange a :

i- Le champ des valeurs de a : La figure V-8 donne le champ des valeurs de la surface volumique d'échange qui présente une forme d'uniformité sauf autour de la turbine.

Figure V-8: Champs des valeurs de la surface volumique d'échange a (m^2/m^3).



ii- Distribution volumique des valeurs de a : Ce champ peut être analysé de plusieurs façons. La figure suivante V-9 propose la distribution volumique de l'intensité des valeurs obtenues. Elle peut permettre l'obtention l'intensité cumulée de ces valeurs.

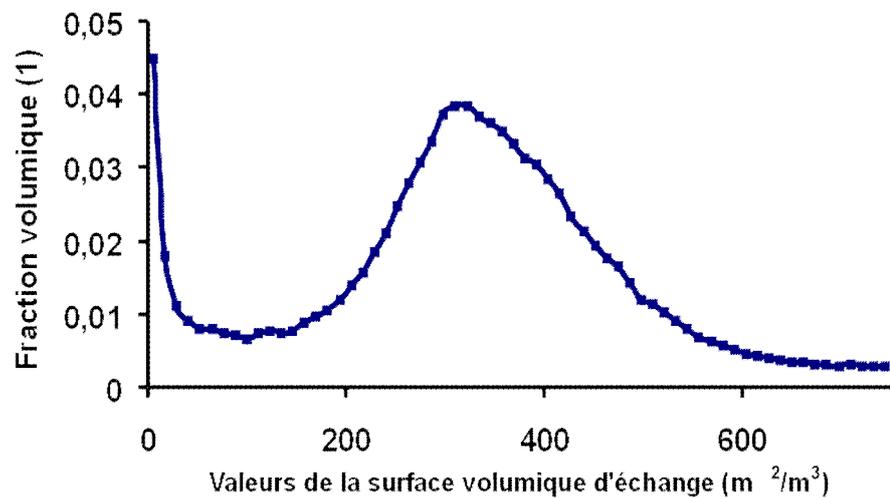
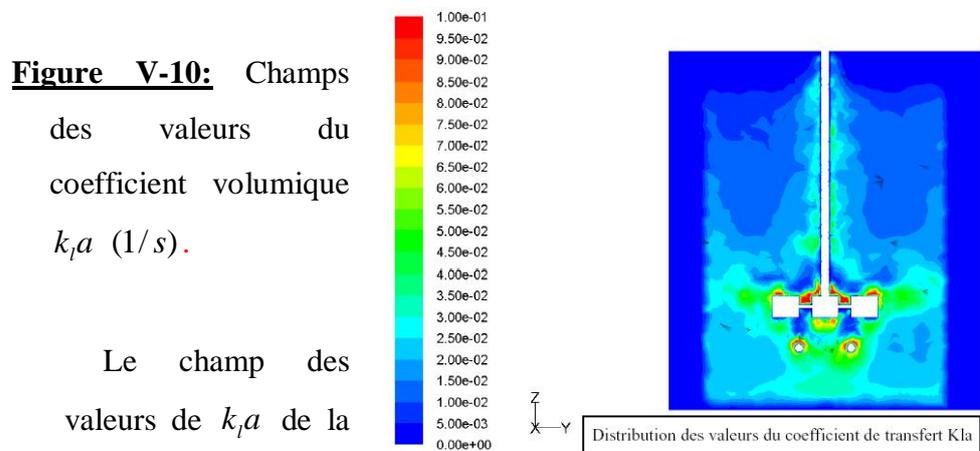


Figure V-9: Fractions volumiques de la surface volumique d'échange a (m^2/m^3):

iii- La moyenne volumique de a : La moyenne volumique de la surface volumique de l'interface est de $321 m^2/m^3$.

(d) Les valeurs du coefficient volumique d'échange $k_l a$ (1/s) :

i- Le champ des valeurs de $k_l a$:



ii- Distribution volumique des valeurs de $k_l a$:

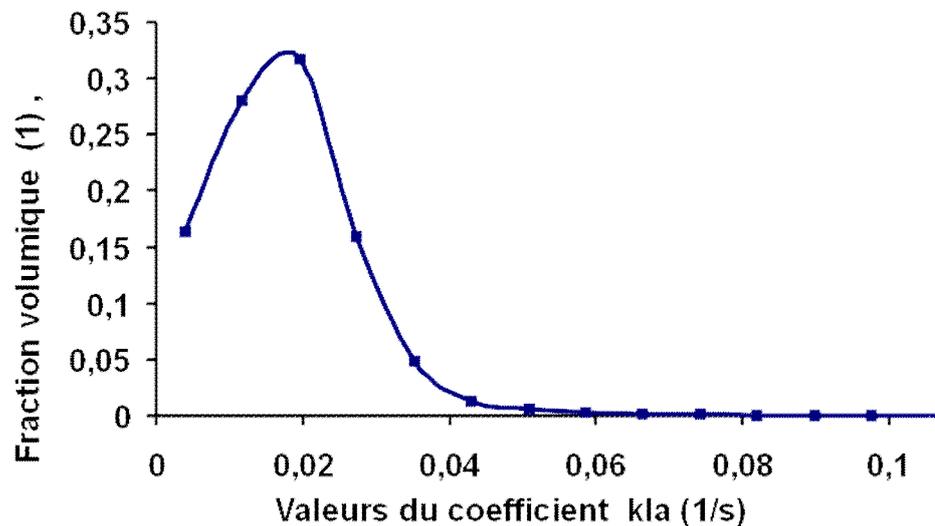


Figure V-11: Fractions volumiques de $k_l a$ (1/s):

iii- La moyenne volumique de $k_l a$: Les valeurs du coefficient $k_l a$ sont concentrées dans l'intervalle [0 ;0,05] sur la figure V-11 et la moyenne volumique obtenue est d'environ $0,015s^{-1}$.

iii- Les équipotentielles de k_1a :

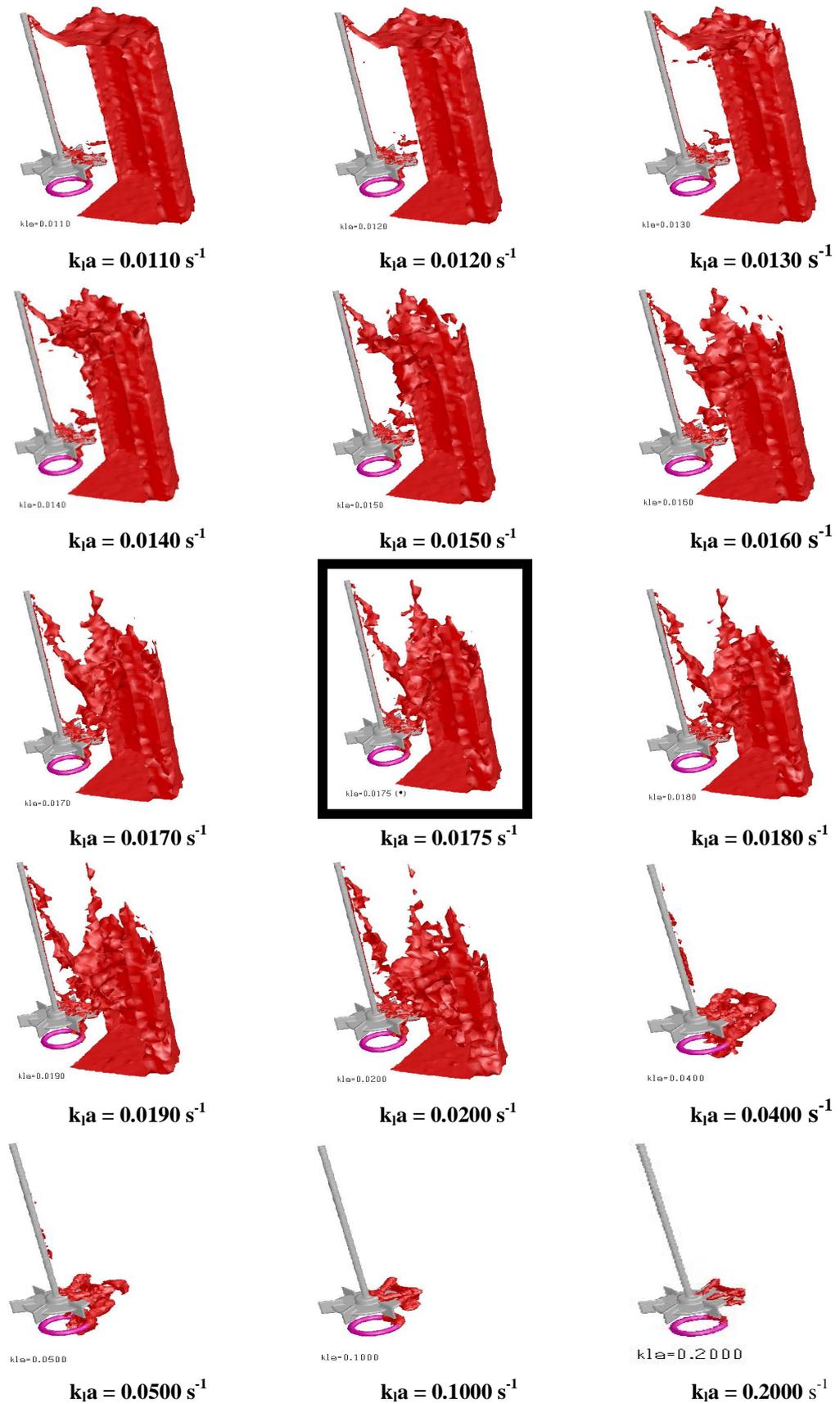


Figure V-12: Les équipotentielles: Iso-surfaces $k_1a = \text{Constante}$

La figure V-12 présente les équipotentielles de ce coefficient correspondantes à des valeurs presque régulièrement réparties dans l'intervalle $[0,01 ; 0,2] s^{-1}$. On y remarque particulièrement l'effondrement de ces surfaces pour les grandes valeurs sur les sources cinétiques et gazeuse.

(e) Les valeurs cumulées et les médianes des champs de ε_L, k_l, a et $k_l a$: Il

s'agit, dans ce paragraphe, à travers des calculs statistiques, de mettre en avant pour ces grandeurs, la notion de valeur médiane qui correspond, pour le champ d'une grandeur scalaire, à la valeur pour laquelle, 50% des valeurs du champ lui sont inférieures et 50% lui sont supérieures. Cette notion constitue au sein des considérations statistiques, une alternative aux notions de moments (moyennes) dans l'étendue des valeurs de la grandeur considérée. On obtient donc, par calcul, à partir des distributions volumiques précédentes, les valeurs cumulées des volumes en fonction des valeurs croissantes de chacune d'elles. L'intersection de ces deux courbes fournit la médiane de la distribution statistique. La figure V-13 fournit ces différentes courbes pour chacune des quatre grandeurs ε, k_l, a et $k_l a$.

Les valeurs obtenues des médianes confortent les valeurs moyennes calculées précédemment. L'évaluation de certaines grandeurs peut être affinée davantage et permettre ainsi des évaluations plus précises.

2°/ La 1^{ère} pièce du puzzle:

Il est établi, à travers ces résultats, que la teneur en oxygène dissout dans un réacteur est dépendante de la turbulence consécutive à l'agitation dans le modèle en cours d'élaboration. Ceci constitue la première pièce de l'interaction recherchée entre l'écoulement et la bioréaction.

Par ailleurs, ans une étude statistique plus détaillée du volume des données obtenues après traitement numérique, on peut trouver « une image » de la géométrie de l'agitateur utilisé. La prise en compte de l'aspect local des grandeurs étudiées permet la mise en évidence de cette image.

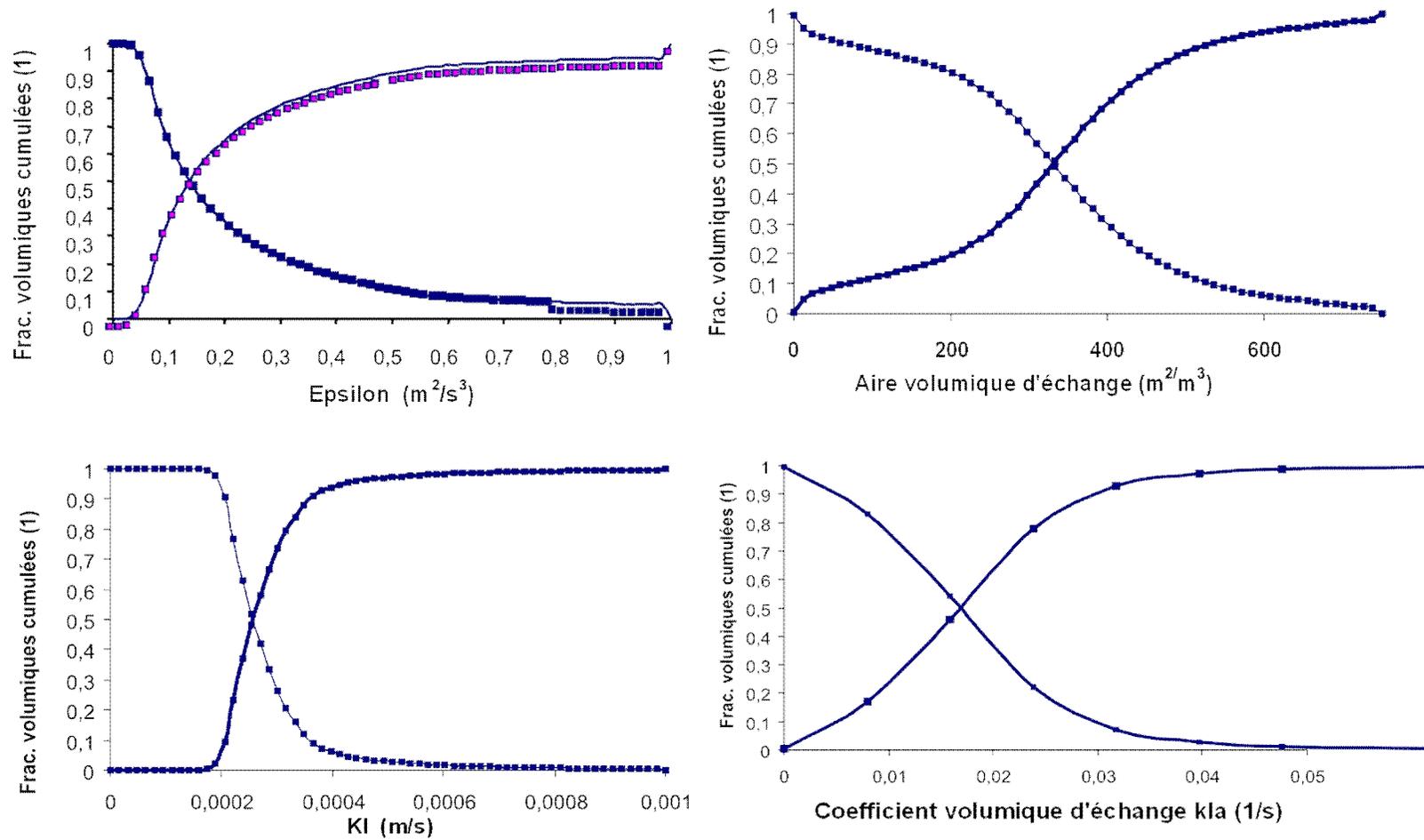


Figure V-13: Valeurs approchées des médianes de ε_L , k_l , a et $k_l a$

Grandeur	ε_L	k_l	a	$k_l a$
Médiane \approx	$0,13 \text{ m}^2 / \text{s}^3$	$0,00026 \text{ m/s}$	$320 \text{ m}^2 / \text{m}^3$	$0,018 \text{ s}^{-1}$

V- CONCLUSION : On constate l'effet direct de l'agitation et de l'aération sur la charge éventuelle du milieu en oxygène dissout par le biais de la dissipation visqueuse et de l'apport gazeux. Cet effet se répercute sur le taux de croissance μ_x et la vitesse de croissance. *Il reste à confirmer en plus, par une étude en faisant varier la vitesse de rotation de la turbine, et la double contribution conséquente à l'aération sur l'agitation et la surface d'échange.* Il en est de même du débit d'oxygène, autre volet de l'aération participant à la respiration de la culture par l'intermédiaire de la surface volumique de l'interface et qui constitue une autre possibilité de contrôle. Un aspect pédagogique non négligeable peut être mis à profit de l'élaboration de modèles pour des situations plus simples.

Remarquons cette influence indirecte de l'écoulement sur la bioréaction, dans une configuration avec faible valeur de la vitesse de rotation N . Une telle vitesse induit un taux de dissipation faible et par-là de faibles valeurs de k_l et. Ce qui traduit une culture en carence respiratoire et entraîne la baisse de sa vitesse de croissance et de son taux d'accroissement. Les écoulements laminaires conviendront donc pour les cultures anaérobies dans l'abondance des autres limitants.

CHAPITRE VI

INTEGRATION DE LA VISCOSITE

INTRODUCTION :

Le contenu de ce chapitre est réalisé pour son caractère méthodologique. Sa validation expérimentale n'est pas totalement établie. Seul son volet numérique, exécuté avec succès, initie donc son existence. Cette validation expérimentale se trouve justifiée en partie par la restitution du modèle d'évolution de la viscosité en fonction de la concentration en biomasse, modèle inspiré par un résultat expérimental dû à Sato (1961) [96] et qui est utilisé ici. Les effets hydrodynamiques attendus sont livrés par le calcul qui se déroule favorablement à l'idée directrice. Ceci appuie l'intégration numérique de la viscosité dans le modèle numérique d'une fermentation. Par ailleurs, Marcel Lesueur, dans [71] dit, à propos de la CFD :

« Celle-ci est devenue un outil expérimental, au même titre que l'expérimentation au laboratoire, et elle est en passe de supplanter la modélisation statistique classique pour les applications industrielles ».

L'objectif donc de ce chapitre est d'activer l'effet de la viscosité sur la bioréaction. Cet effet, perceptible à travers le nombre de Reynolds, est conséquent de la charge progressive du milieu agité en biomasse qui le rend de plus en plus visqueux. Le milieu agité, matérialisé par la phase continue est considéré comme une suspension dont la fraction volumique en biomasse augmente.

I- LA VISCOSITE EN ECOULEMENTS :

1°/ La viscosité apparente d'une émulsion:

Le contenu d'une cuve en fermentation, est nécessairement non newtonien. On retient pour les besoins de l'étude en cours, la présence de concentrations évolutives de plusieurs constituants au sein du mélange. Chacun d'eux influe sur la viscosité du milieu et on adopte donc une viscosité apparente μ_a de ce milieu. La notion de viscosité se trouve largement abordée dans [83, 88, 93, 94]. Dans le cas de la

prépondérance de l'un des constituants dans une phase liquide L , la viscosité de celle-ci est plutôt fonction de la fraction volumique ϕ de ce constituant et s'exprime par:

$$\mu_L = \mu_0 f(\phi) \quad (VI-1)$$

où la fonction $f(\phi)$ est en général, déterminée expérimentalement et μ_0 est la viscosité du solvant (ici l'eau).

La viscosité, n'étant plus constante, les équations des Navier-Stokes doivent être modifiées par l'adjonction d'un terme correctif dépendant de cette variation comme suggéré dans [9].

Cependant, cette modification ne sera faite ici, et on procèdera, lors du calcul numérique, par stationnarisation progressive au cours des itérations concernant l'évolution biologique de la fermentation, en supposant que la variation de cette viscosité reste très faible.

2°/ La viscosité en biotechnologies et le modèle adopté:

Parmi les modèles régissant la viscosité apparente des milieux comportant des suspensions sous forme de billes ou de micelles à des faibles concentrations, on cite celui d'Einstein (1906 et 1911) [95]:

$$\mu = \mu_0(1 + 2,5\phi) \quad (VI-2)$$

où la fraction volumique varie entre 0 et une valeur $\phi^* \approx 0,3$. Pour des fractions volumiques supérieures à ϕ^* , la viscosité suit un modèle d'Arrhenius. Ce modèle est corrigé par Ball et Richmond [95] et donne la loi rhéologique suivante :

$$\mu = \mu_0(1 - K\phi)^{\frac{2,5}{K}} \quad \text{avec } K = 1,57 \quad (VI-3)$$

Des modèles phénoménologiques se développent sous la forme :

$$\mu = \mu_0(1 + 2,5\phi + k_2\phi^2 + k_3\phi^3 + \dots) \quad (VI-4)$$

où $k_2 = 6,2$ a été calculé par G.K.Batchlor (1977) [89].

Le modèle de viscosité utilisé dans cette étude pour la forme finale de la fermentation numérique est un modèle du genre ci-dessus. La viscosité apparente y est exprimée en fonction de la concentration X en cellules par (μ_0 étant la viscosité de l'eau) :

$$\mu_L = \mu_0(1 + X^{2,26}) \quad (VI-5)$$

Ce modèle justifie des qualités mathématiques (fonction dérivable infiniment) souhaitées pour les besoins du calcul numérique et fournit le profil attendu d'après Sato [96]. Il est possible de prendre en compte d'autres variables telles les autres concentrations, la température ou les concentrations d'autres additifs influents sur la viscosité du milieu agité. Ceci n'est pas considéré dans la présente étude.

3°/ La viscosité et la turbulence:

L'énergie cinétique turbulente moyenne \bar{k} et son taux de dissipation visqueuse ε en milieu incompressible sont donnés par :

$$\bar{k} = \frac{1}{2} \overline{u_i'^2} \quad \text{et} \quad \varepsilon = \frac{1}{2} \frac{\mu}{\rho} \overline{\left(\frac{\partial u_i'}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j'}{\partial x_i} \right)^2} \quad (\text{VI} - 6)$$

et par conséquent, puisque la masse volumique moyenne du milieu reste constante, ε décroît dans l'évolution possible d'un écoulement de nature turbulente vers un régime laminaire. Cette évolution s'installe progressivement avec le développement croissant de la culture et donc aura un effet réducteur sur le coefficient d'échange massique entre la phase gazeuse et la phase liquide. Ce dernier doit donc décroître avec l'avancement de la fermentation.

II- LE GRADIENT DE LA VISCOSITE ET SA GESTION :

1°/ La dynamique des fluides à viscosité variable :

Lorsque la viscosité est variable et sans le terme correctif, son gradient introduit probablement des sauts conséquents dans l'évaluation des champs de l'écoulement. Les calculs utilisant une viscosité dépendante de la **concentration locale (champs de viscosité)** n'ont pas pu être menés à terme dans le cadre de la présente étude. Une solution moins contraignante a consisté à considérer le milieu agité, globalement visqueusement homogène, avec une **viscosité moyenne** qui varie en fonction de la **concentration moyenne en biomasse**.

2°/ Adoption de la forme « phase primaire liquide à viscosité homogène »:

La culture support de l'étude est celle de *Aspergillus Niger*. Afin de procéder à l'intégration des effets visqueux dans le modèle de l'écoulement supportant la réaction biologique en interaction avec celui-ci, la viscosité du milieu agité est supposée suivre la loi (VI - 5) précédente pour $X < X_{\max}$ pour $X_{\max} \approx 10$ à 12 g/l .

Le paragraphe suivant concerne l'évolution de ε_L , k_l , a , et $k_l a$ lors d'un écoulement dont la viscosité évolue dans un intervalle de l'ordre de $[\mu_0 ; 600\mu_0]$.

On se propose de simuler cet écoulement, d'en visualiser l'évolution des conditions qui règnent dans la cuve en termes des paramètres impliqués dans la respiration des organismes, d'en exprimer en graphiques l'évolution dans l'intervalle $[\mu_0 ; 10\mu_0]$, ainsi qu'une évaluation du pourcentage des zones mortes qualifiées ainsi en termes de vitesses locales faibles des deux phases. Les résultats obtenus sont les suivants.

III- LES RESULTATS :

MISE EN EVIDENCE DE L'INTERACTION REACTION-ECOULEMENT:.

1°/ Evolution des vitesses des deux phases (0,0015 < μ_L < 0,1) Pa.s :

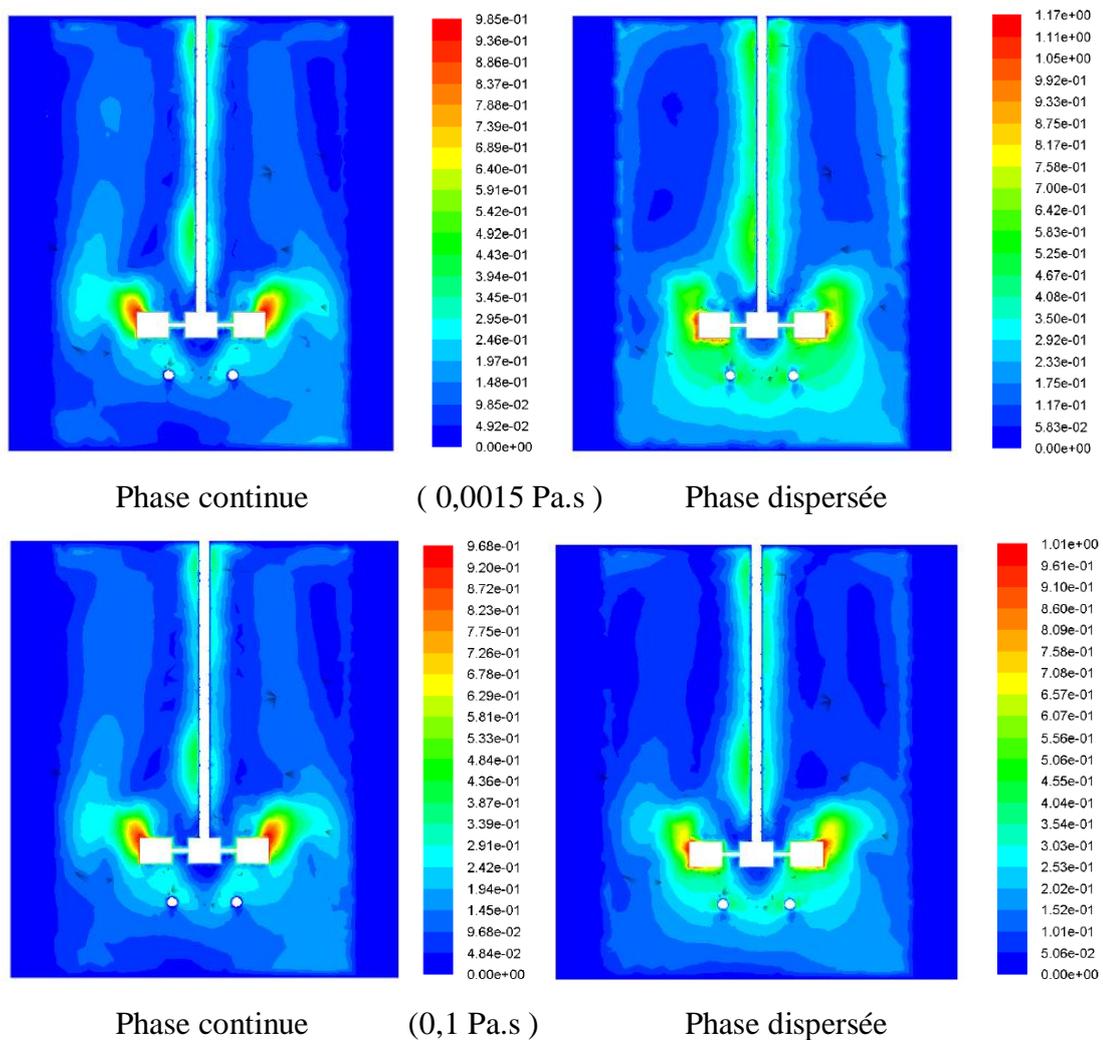


Figure VI-1: Evolution des champs des vitesses (en m/s) des deux phases en fonction de la viscosité de la phase continue (0,0015 < μ_L < 0,1) Pa.s .

Sur la figure VI-1, on remarque l'évolution du champ des vitesses consécutive à l'augmentation de la viscosité. L'effet sur l'évolution des grandeurs impliquées dans le coefficient $k_L a$ et sur lui-même sont perceptibles à travers les images des champs de ces grandeurs sur les figures VI-2-3-4-5. On y constate la présence de surfaces plus grandes correspondantes aux mêmes seuils entre le début et la fin. Ceci traduit pour chacune des grandeurs, un volume plus important correspondant au moins au seuil supérieur affiché.

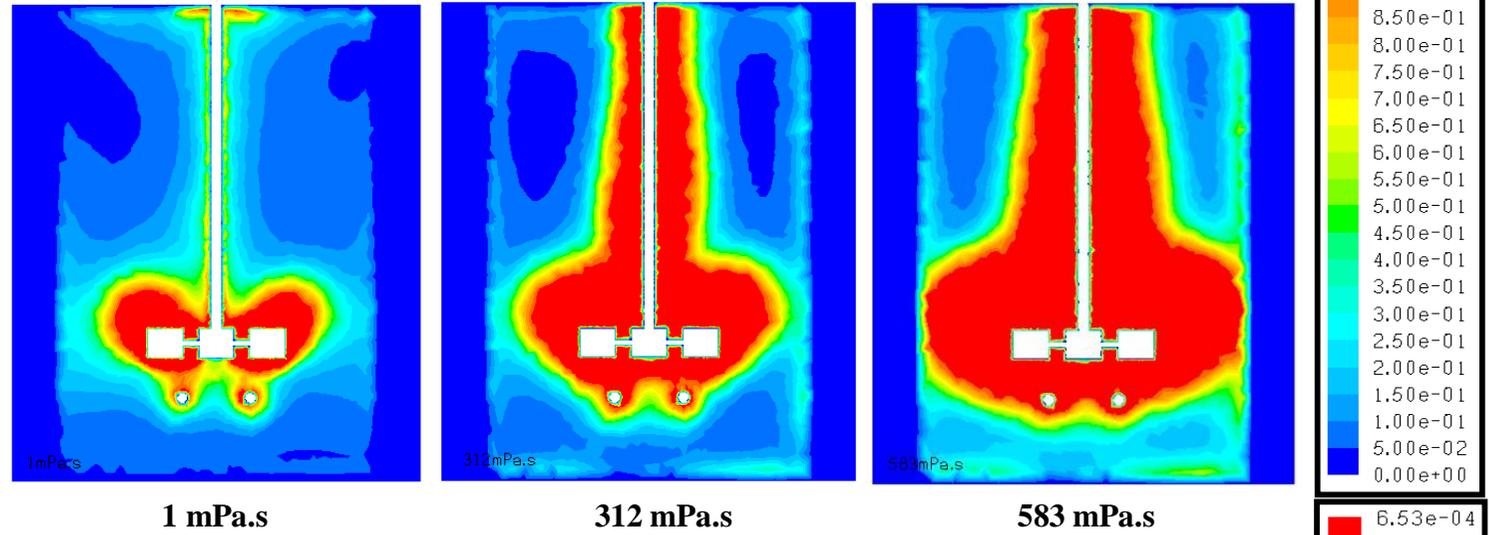
2°/ Evolution des champs de ε_L , k_L , a , et $k_L a$ en images (0,001 < μ < 0,583) Pa.s :

Afin d'appréhender l'effet de la viscosité et ses conséquences sur les champs des grandeurs ε_L , k_L , a , et $k_L a$, la simulation est prolongée par évolution de la viscosité jusqu'à 0,5 Pa.s. Les figures VI-2,3,4 et 5 suivantes présentent les champs des scalaires concernés et il en ressort une augmentation des valeurs de ε_L , k_L et $k_L a$ accompagnée sur les graphiques d'une réduction de portée volumique.

Les images suivantes concernent l'écoulement dans la cuve agitée lorsque la viscosité vaut respectivement $1mPa.s$, $312mPa.s$ et $583mPa.s$ dont les valeurs extrêmes correspondent au début et à la fin de la fermentation.

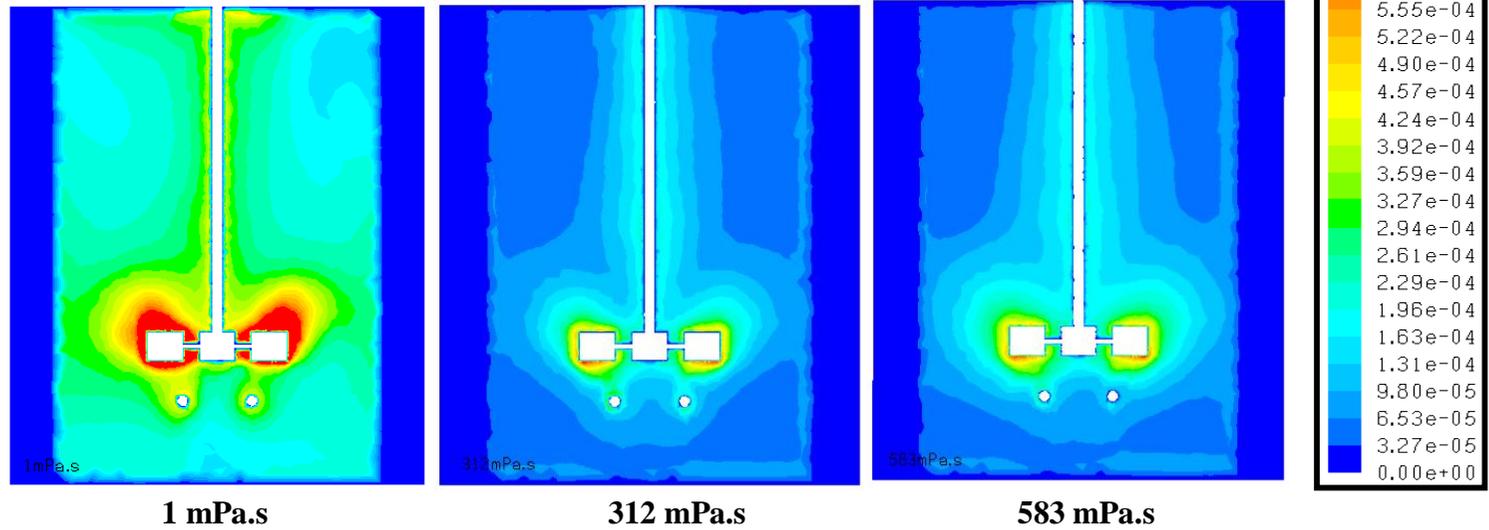
(a) Le taux de dissipation visqueuse :

Figure VI-2: Champ de ε_L (m^2/s^3) en fonction de la viscosité de la phase continue



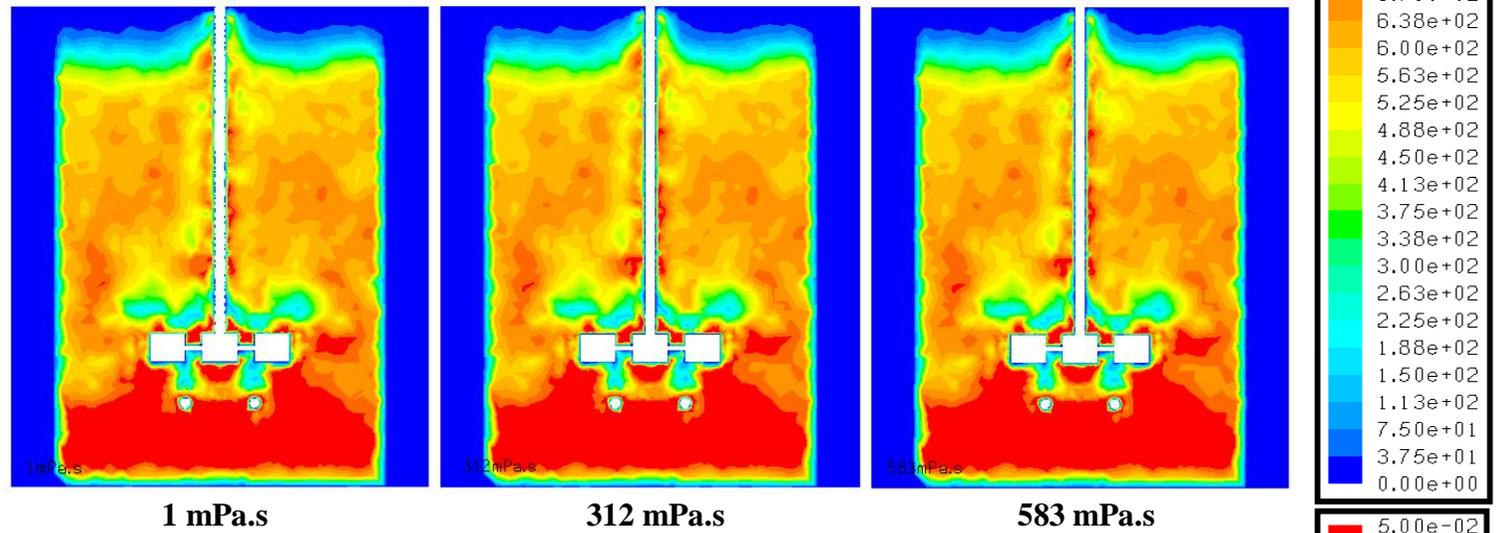
(b) Le coefficient de transfert

Figure VI-3: champs de k_l (m/s) en fonction de la viscosité de la phase continue



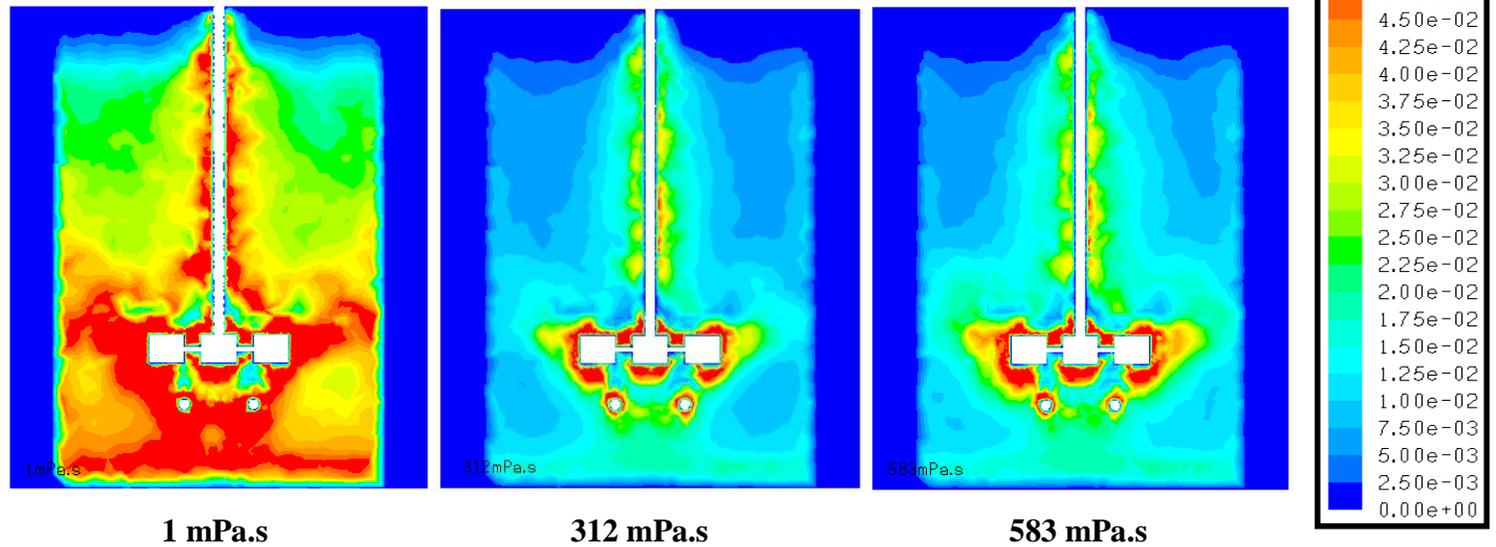
(c) La surface volumique de l'interface

Figure VI-4: champs de a (m^2/m^3) en fonction de la viscosité de la phase continue



(d) Le coefficient d'échange

Figure VI-5: champs de $k_f a$ ($1/s$) en fonction de la viscosité de la phase continue



3°/ Evolution des distributions des fractions volumiques des grandeurs

ε_L , k_l , a , et $k_l a$ pour une suite de viscosités de valeurs μ_0 , $2,5\mu_0$, $5\mu_0$, $7,5\mu_0$ et $10\mu_0$; Les résultats obtenus sont donnés dans les figures VI-6-7-8-9 et correspondent respectivement aux cas et aux courbes C_α pour $\alpha = 1, 2, 3, 4$ et 5 .

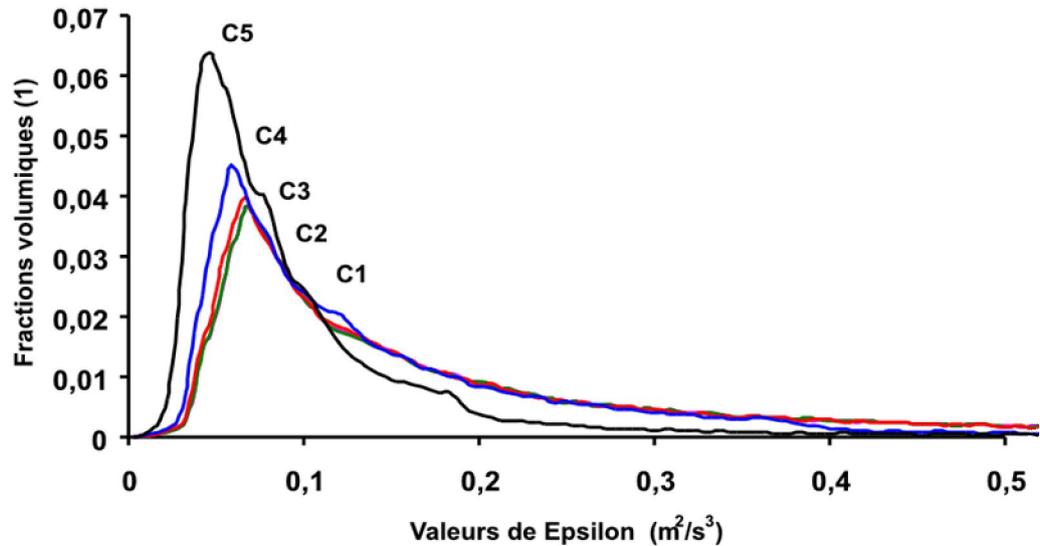


Figure VI-6: Evolution des fractions volumiques de ε_L en fonction de la

$$\text{viscosité de la phase continue. } \mu_\alpha = \frac{9\alpha - 5}{4} \mu_0 \text{ pour } \alpha = 1, 2, 3, 4, 5$$

On remarque sur cette figure la présence d'une zone d'intersection de toutes les courbes au voisinage de la valeur de $\varepsilon_0 \approx 0,1 \text{ m}^2 / \text{s}^3$ présente dans environ 2,5% du volume total de la cuve. Une extrapolation de ces courbes dans les tendances des viscosités décroissantes (fluides parfaits) d'une part et des viscosités croissantes (fluides pâteux) d'autre part, conduit à la prépondérance des valeurs inférieures à celle-ci dans le premier cas et celles supérieures à elle dans le second.

Dans cette évolution, on lit la substitution progressive d'un spectre étendu de grandes valeurs à faible densité par un spectre concentré de petites valeurs à forte densité. Il en est de même pour les valeurs de k_l , comme le montre la figure VI-7.

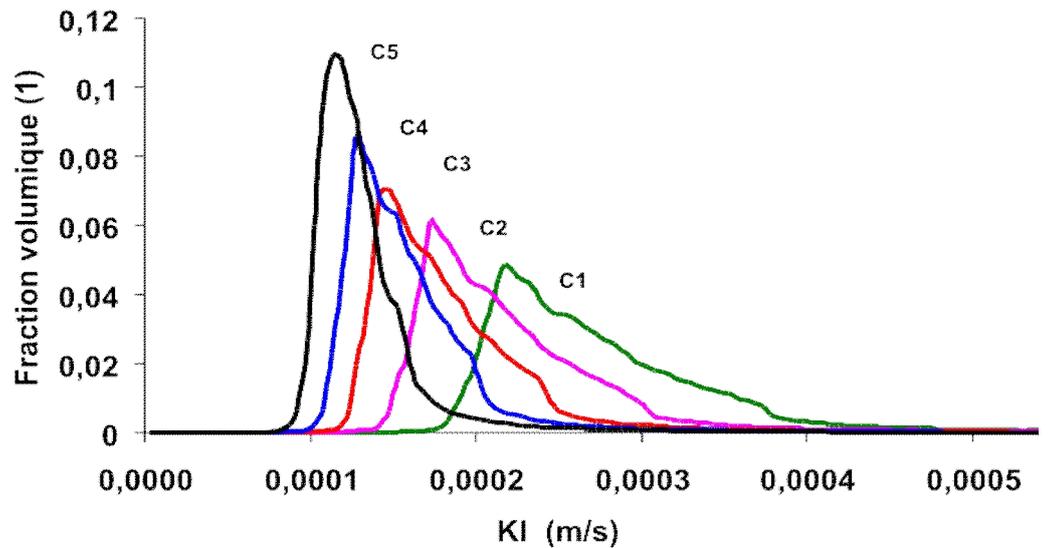


Figure VI-7: Evolution des fractions volumiques de k_i en fonction de la viscosité de la phase continue $\mu_\alpha = \frac{9\alpha - 5}{4} \mu_0$ pour $\alpha = 1, 2, 3, 4, 5$.

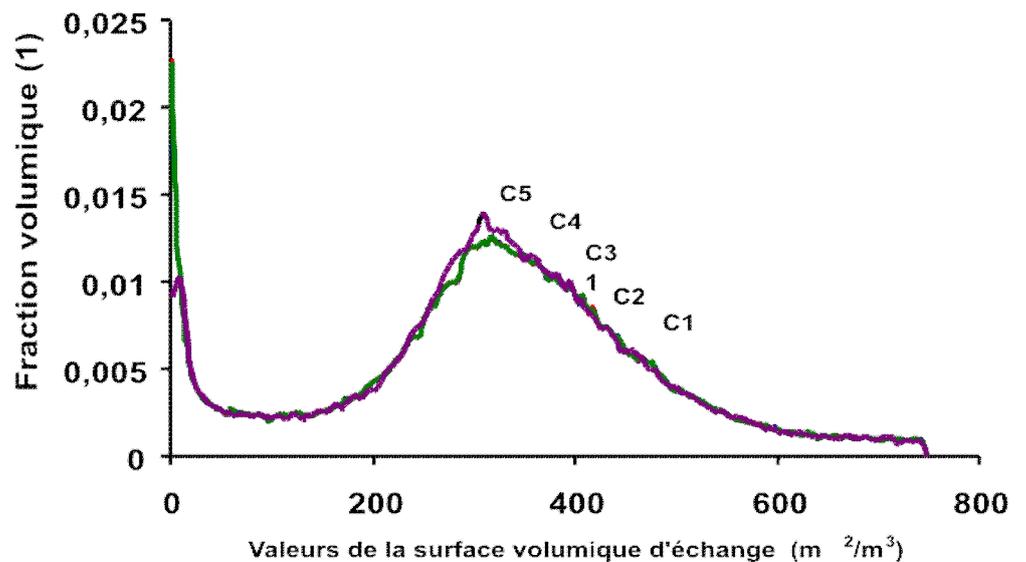


Figure VI-8: Evolution des fractions volumiques de a en fonction de la viscosité de la phase continue $\mu_\alpha = \frac{9\alpha - 5}{4} \mu_0$ pour $\alpha = 1, 2, 3, 4, 5$.

La figure VI-8 montre que la distribution volumique de la surface volumique de l'interface d'échange, dans les conditions adoptées pour le calcul, est indépendante (ou évolue très lentement en fonction) de la viscosité. Ceci confirme surtout l'aspect globalement homogène de l'écoulement dans la cuve. La non-uniformité de cette distribution est à lier à celle de la rétention gazeuse et à

l'injection continue de la phase dispersée. La forme commune des courbes est dépendante de l'unicité du diamètre de toutes les bulles d'air présentes dans la cuve

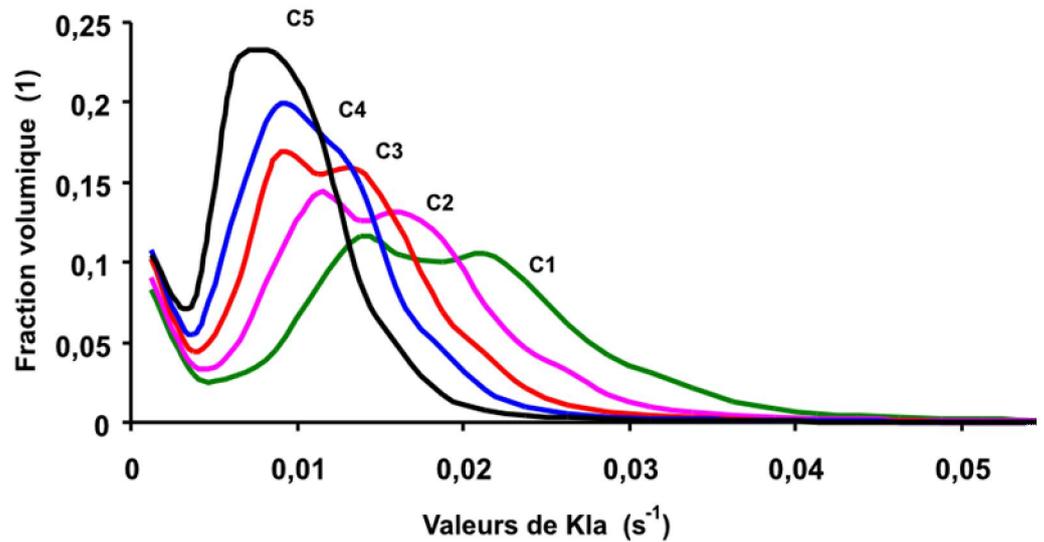


Figure VI-9: Evolution des fractions volumiques de $k_L a$ en fonction de la viscosité de la phase continue $\mu_\alpha = \frac{9\alpha - 5}{4} \mu_0$ pour $\alpha = 1, 2, 3, 4, 5$.

L'analyse de l'évolution des valeurs de $k_L a$ paraît moins évidente et varie de l'uniformité d'une unique valeur pour les très faibles viscosités (fluides presque parfaits) celle de la prépondérance d'une seule valeur de plus en plus basse.

4°/ Evolution des zones mortes dans la cuve :

L'évaluation des zones mortes est faite ici en fonction de la vitesse des deux phases et sera considérée comme zone morte, tout « pseudo-réacteur » (maille) dans lequel la vitesse d'une phase est inférieure à $0,01 R\omega$. On obtient l'évolution suivante de ces zones en fonction de la viscosité :

Cas n°	1	2	3	4	5
Viscosité	μ_0	$2,5\mu_0$	$5\mu_0$	$7,5\mu_0$	$10\mu_0$
Phase porteuse (%)	2,1172	2,3732	5,1425	9,2669	32,5312
Phase dispersée (%)	0,0065	0,0065	0,0148	0,0354	0,2639

Tableau VI-1: Pourcentage des zones mortes en fonction de la viscosité.

On remarque dans le tableau V-1, que le pourcentage des zones mortes correspondantes à la variation de la viscosité dans la cuve durant la fermentation, et qui a lieu dans l'intervalle $[\mu_0 ; 10\mu_0]$ passe d'un état de cuve presque sans zones mortes à celui d'une cuve dont le tiers de la phase liquide est quasi-immobile. L'effet de ceci sur le renouvellement du milieu ambiant des cellules qui y vivent et de leur approvisionnement en nutriments est de plus en plus déterminant pour leur développement et leur survie.

5°/ La 3^{ème} pièce manquante du puzzle :

Le but recherché dans la présente étude était l'établissement d'une influence mutuelle des deux volets hydraulique et biologique d'une fermentation qui se déroule au sein d'un réacteur agité. Cette influence est établie dans le sens hydrodynamique vers biologique par le biais de l'agitation qui agit sur la rétention gazeuse d'une part et de la turbulence d'autre part. Dans le sens contraire, cette influence se fait par le biais de la charge en culture du milieu qui agit sur la viscosité et par-là sur l'hydrodynamique de l'écoulement.

Remarque: Il est utile de s'intéresser à l'effet d'une agitation variable et d'installer un seuil compatible avec le déroulement d'une culture dans un écoulement laminaire par exemple ou de procéder à une analyse, éventuellement corrective, en termes d'automatique, afin que le modèle qui en résulte puisse s'exécuter en toute indépendance de la nature de l'écoulement.

IV- CONCLUSION : Le lien ainsi établi entre l'évolution du milieu de culture et l'écoulement dans la cuve permet, en conjugaison avec le précédent lien turbulence-transfert d'oxygène dissout permettent de mettre au point un modèle de fermentation « numérique » qui formera un tout dont les composants principaux sont dépendants les uns des autres. C'est l'objet du chapitre suivant dans lequel, le modèle du chapitre IV est complété par ces deux liens ainsi que le transport des quatre scalaires par la phase liquide continue.

CHAPITRE VII

APPLICATIONS DU MODELE INTEGRAL « LA FERMENTATION NUMERIQUE »

INTRODUCTION: L'objectif de l'étude porte sur les milieux hétérogènes réactionnels aérobies concernant une culture libre. Elle s'est intéressée à la modélisation «dynamique» des phénomènes de transfert massique et d'écoulement ainsi qu'à leur impact sur la cinétique de la réaction biologique. L'effet réciproque de cette dernière a été aussi abordé et établi dans une moindre mesure. Les retombées attendues, à travers un modèle endossant ces qualités, visent l'étude, l'accompagnement et aussi à la diminution des temps de mise au point de tels procédés à l'échelle industrielle. Le bio-réacteur doit, pour sa part, permettre d'augmenter les performances de production tout en répondant aux critères d'extrapolation industrielle et de qualité de produit. Le niveau optimal de sophistication du procédé sera également à confronter au niveau de sa fiabilité.

Le modèle de bio-réacteur « numérique » mis en œuvre dans ce chapitre, est un modèle relativement plus proche de la réalité que les démarches monophasiques entreprises pour simuler un écoulement d'une part, et la résolution théorique du modèle biologique (mathématique), une fois établi d'autre part. Les démarches par modèles multiphasiques, récemment entreprises et quoique plus réalistes, ne prenaient pas en charge la réaction biologique elle-même qui constitue l'essentiel d'une fermentation.

Ce bioréacteur « numérique » intègre, en mode fermé (batch), les principaux volets de la fermentation, notamment la convection des constituants, l'échange massique interphasique, la bioréaction ainsi que les interactions de cette dernière avec l'écoulement. Il permet de surcroît, d'en suivre l'évolution en temps réel à la vitesse de déroulement du calcul numérique. Il bénéficie donc de toute la souplesse que procure, par les temps modernes, l'outil informatique doté de bonnes caractéristiques matérielles et logicielles, et des méthodes de calcul numérique adéquates. Il reste possible, par le biais de cette souplesse informatique, de le faire évoluer vers une activité en mode semi-fermé ou ouvert.

I- LE MODELE INTEGRAL DE CONTOIS PAR LA CFD:

1°/ Récapitulation:

Ce paragraphe présente l'aboutissement logique de la démarche entreprise dans les chapitres IV, V et VI pour la production de l'acide gluconique par *Aspergillus Niger* et conformément à l'étude expérimentale présentée dans [33]. Le modèle résultant de l'adjonction des deux liens de dépendance entre les deux volets de la bio-réaction établis précédemment, se trouve simulé dans cette partie sous sa forme intégrale avec un $k_l a$ exprimé en fonction du taux de la dissipation visqueuse et un milieu agité dont la viscosité est fonction du niveau moyen de concentration atteint en biomasse représentée essentiellement par la concentration en organismes. Il constitue une image plus conforme au déroulement réel de la fermentation. Les quatre étapes de l'exécution du modèle sont reproduites à l'identique. Le pas Δt_F utilisé pour l'écoulement est constant durant toute l'opération et chacune des étapes se déroule avec un pas spécifique en fonction de sa durée réelle et de ses spécificités. Ces pas sont donnés dans le tableau suivant:

ETAPE	E1	E2	E3	E4
Δt (s)	$\Delta t_F = 0.032$	$2 \times 10^4 \Delta t_F$	$200 \Delta t_F$	$10^3 \Delta t_F$

Tableau VII-1: Pas temporels adoptés pour les étapes du traitement.

L'étape E1 reste une étape de lancement de calcul et sans significations mécanique ou biologique. Son but -purement mathématique- est de générer à son issue, un écoulement turbulent "stationnaire" initial, formé par une phase liquide chargée de 150 g/l de sucre et 1,5 mg/l d'oxygène dissout, et subissant, par injection, une phase gazeuse sous forme de bulles de 1 mm de diamètre avec un débit de 8 litres par minute. Le mélange est agité par une turbine Rushton avec une vitesse de 300 rpm .

La succession des trois autres étapes décrit le reste de la fermentation dans l'évolution de ses aspects dynamique et biologique et leurs interactions mutuelles selon les considérations des chapitres précédents.

2°/ Les résultats attendus:

Dans ce calcul, d'une part, le coefficient d'échange gazeux volumétrique $k_l a$ est une fonction du taux de dissipation visqueuse ε_L et de la surface volumique d'échange de l'interface gaz-liquide a et d'autre part, la viscosité du milieu agité est une fonction de sa concentration volumique moyenne X en culture présente dans la mixture.

Lors de l'évolution de la bio-réaction, la viscosité augmente, le coefficient d'échange k_l diminue et par conséquent le coefficient $k_l a$ diminue aussi. La variation marginale de $k_l a$ en fonction de X est négative. En ce qui concerne la variation marginale de $k_l a$ par rapport à ε_L , on retrouve dans les conditions de turbulence isotrope, à côté des valeurs théoriques de celle-ci, des expressions telles que :

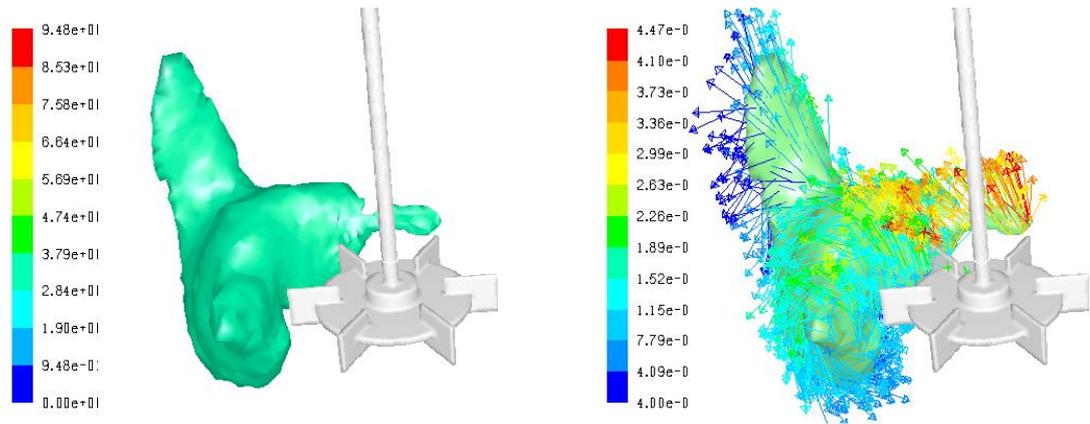
$$\varepsilon = \frac{15}{2} \nu \overline{\left(\frac{\partial u'_x}{\partial y}\right)^2} = 15 \nu \overline{\left(\frac{\partial u'_x}{\partial x}\right)^2} \quad (VII - 1)$$

et un résultat expérimental
$$\varepsilon = \frac{u'^3}{L_f} = \frac{u'^2}{L_f / u'} = \frac{u'^2}{\Theta} \quad \text{p169 (VII - 2)}$$

où L_f et Θ sont l'échelle intégrale de la turbulence et le temps d'extinction de celle-ci et qui incitent à penser à une baisse de $k_l a$ avec la dissipation de l'énergie turbulente, nécessairement présente pour la validité du modèle. L'agitation créée dans le réacteur modélisé ici, doit nécessairement engendrer donc un écoulement turbulent. Une baisse de cette agitation fera évoluer le système vers un régime laminaire et vers l'annulation des fluctuations des vitesses. La diminution de ces fluctuations entraîne celles de ε_L , k_l et $k_l a$.

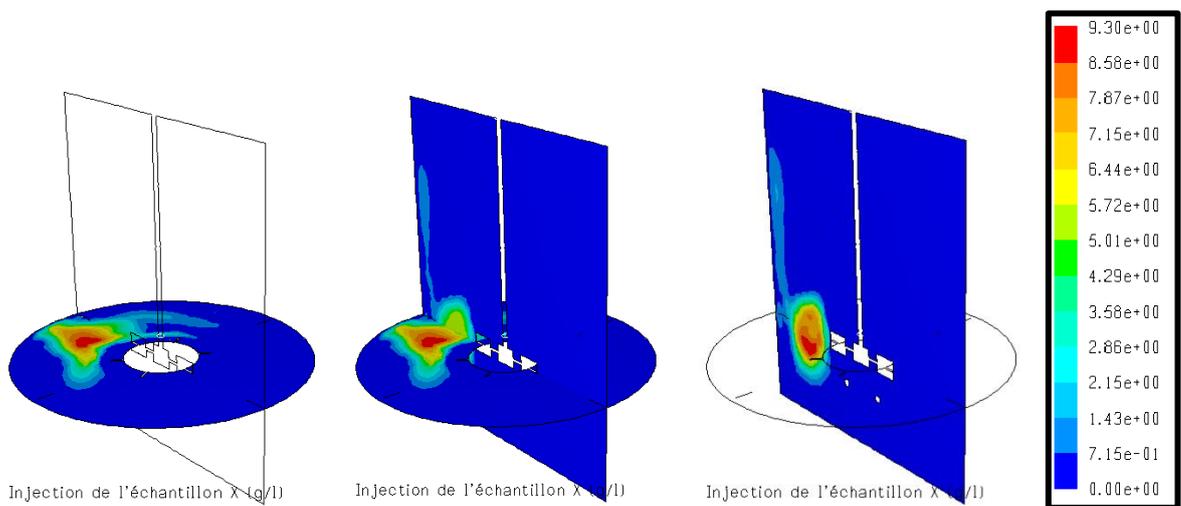
3°/ Quelques résultats en images:

(a) L'étape de l'injection : La figure VII-1 présente quelques aspects de l'étape III et qui mettent en évidence l'aspect convectif de l'activité interne à la cuve actant sur l'échantillon injecté localement (a) et (c), par le biais du champ des vecteurs-vitesse de la phase liquide continue (b).



(a) Equipotentielle de l'échantillon de biomasse $X=3$ g/l

(b) Champs des vecteurs de la phase liquide sur cette équipotentielle (convection).



(c) Coupes horizontale et verticale de l'échantillon

Figure VII-1 : Echantillon et convection.

(b) Les champs de X , S , O_d et P en fin de fermentation :

Les champs reproduits sur la figure VII-1 concernent les champs des quatre scalaires de l'écoulement. Ils mettent en avant le rôle de l'agitation mécanique et par injection gazeuse.

On remarque, sur ces résultats, la persistance, lors de la fermentation, de la topographie du champ des concentrations en oxygène dissout, entretenu par l'injection gazeuse et l'agitation mécanique. Ces champs correspondent à la fin de l'opération. Un extrait de l'ensemble des calculs concernant les modèles de Contois et de Monod se trouve en annexe 2.

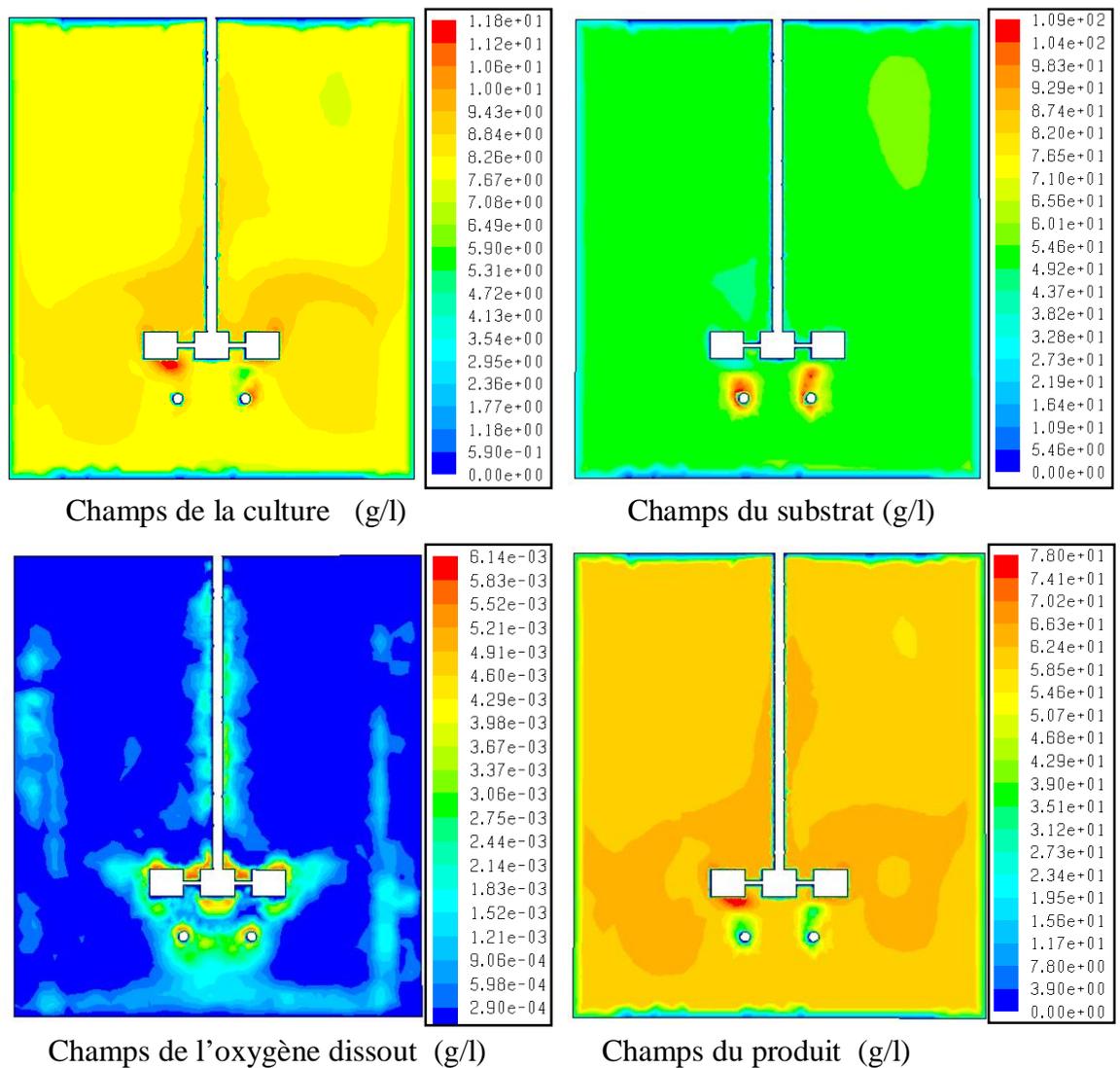


Figure VII-2 : Fin de la fermentation : Champs des concentrations des quatre constituants intervenant dans la bioréaction.

II- COMMENTAIRES DES RESULTATS DU MODELE INTEGRAL (CONTOIS):

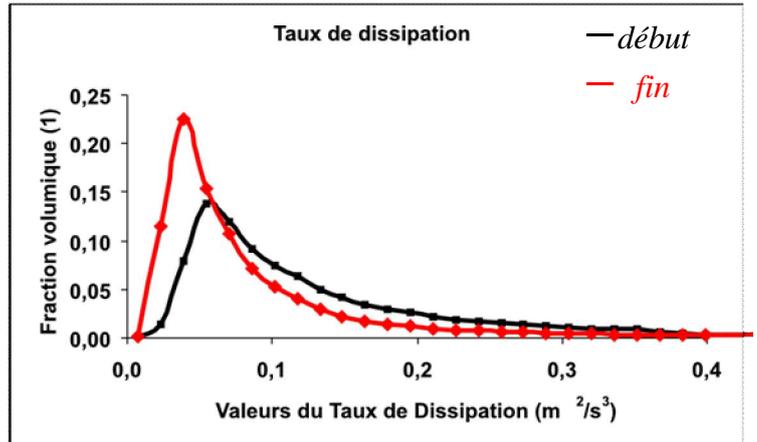
1°/ Les distributions volumiques et les valeurs médianes de ε_L , k_l , a et $k_l a$:

[a] Les distributions volumiques : Au cours de la fermentation, la valeur de la viscosité varie de $\mu_0 = 0,003 Pa.s$ à $\mu_{max} = 0,117 Pa.s$ correspondante à une concentration finale en biomasse voisine de 8,2 g/l. Ceci induit des distributions de chacune des grandeurs ε_L , k_l , a et $k_l a$ (fractions volumiques occupées par chacune des valeurs du spectre de la grandeur) qui évoluent au cours de l'avancement de celle-ci. Les figures VII-a,b,c,d présentent ces fractions volumiques au début et à la fin de la fermentation.

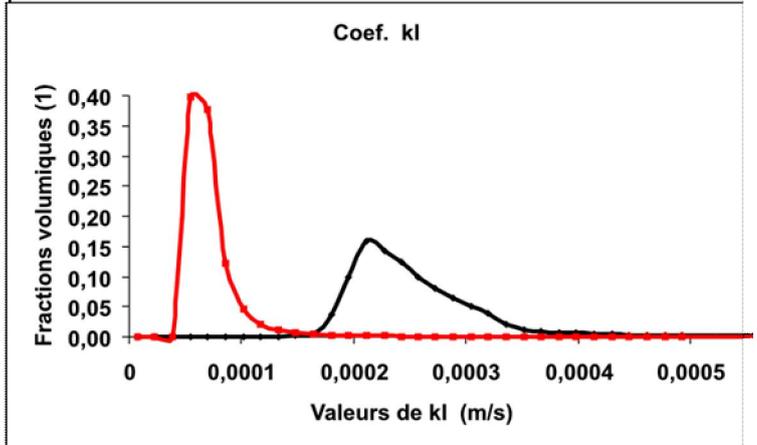
Figure VII-3 :

Distributions volumiques de ε_L , k_l , a et $k_l a$ en début et fin de la fermentation

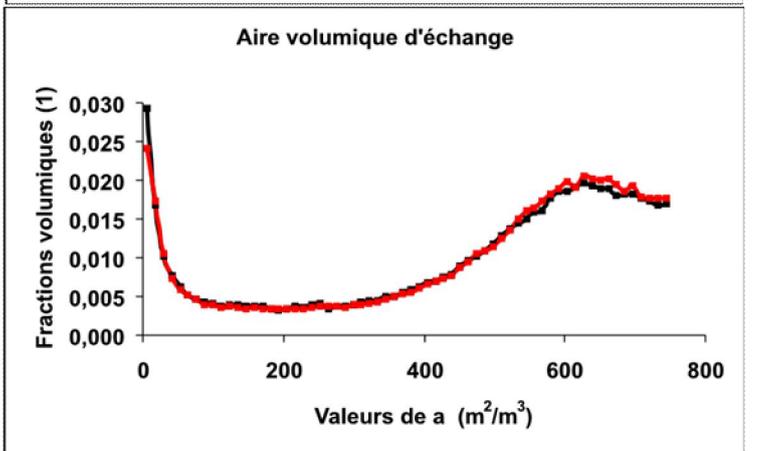
(a) Taux de dissipation visqueuse ε_L .



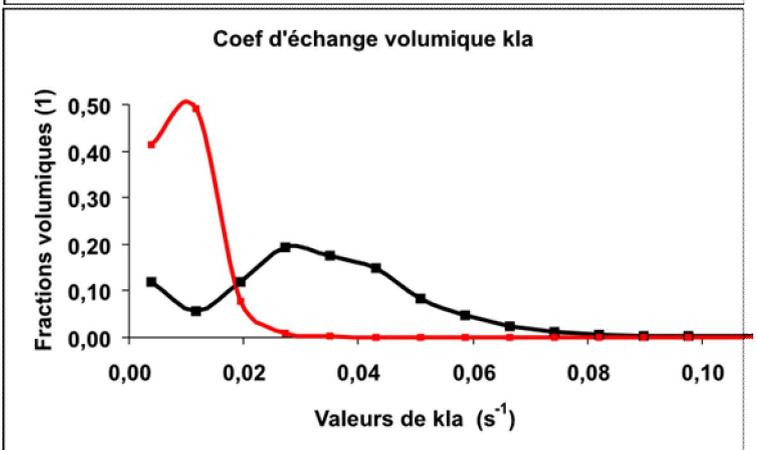
(b) Coefficient d'échange k_l .



(c) Surface volumique d'échange a .



(d) Coefficient volumique d'échange $k_l a$.

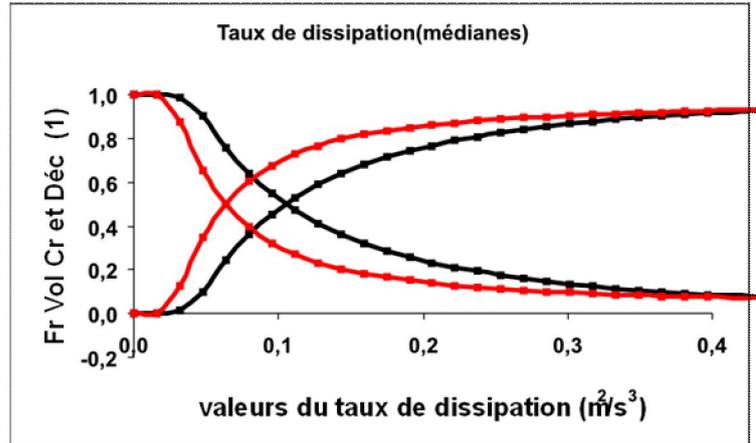


[b] Les médianes :

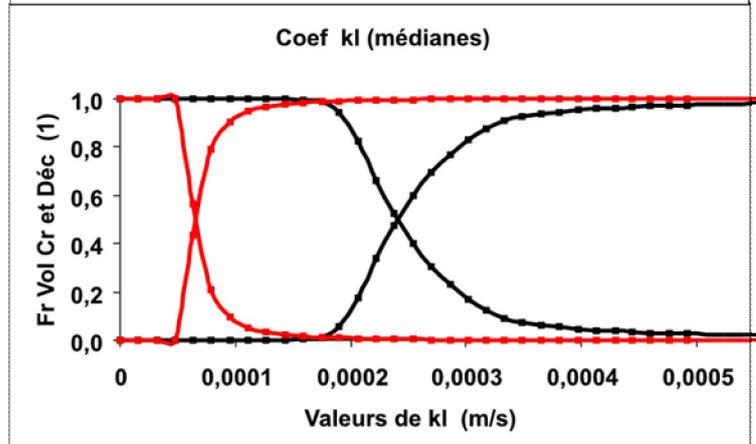
Figure VII-4:

Médianes de ε_L , k_l ,
 a et $k_l a$ en début et fin de
 la fermentation.

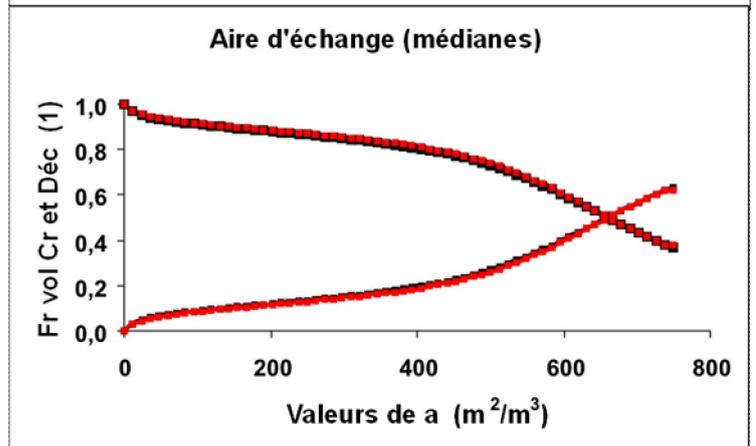
(a) Taux de dissipation
 visqueuse ε_L



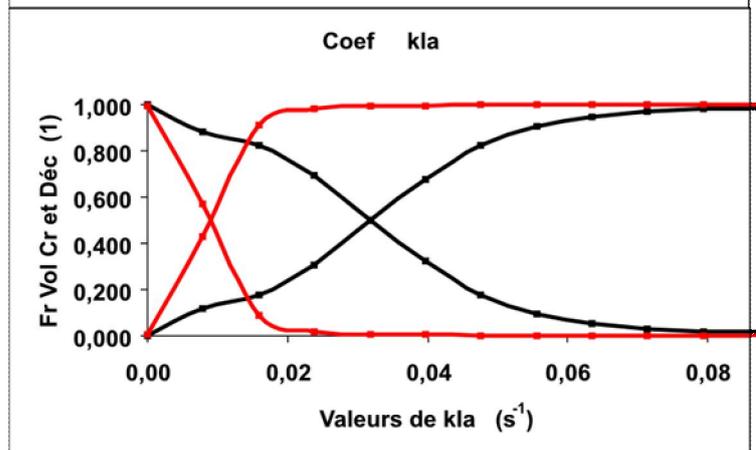
(b) Coefficient
 d'échange k_l



(c) Surface volumique
 d'échange a



(d) Coefficient
 volumique
 d'échange $k_l a$



Commentaire: Dans le cadre de cette étude, le modèle utilisé pour la viscosité est

$$\mu = \mu_0(1 + X^{2,26}) \quad (VII - 3)$$

donné par :

Ce modèle est inspiré par celui proposé par SATO dans [96] et traduit l'évolution de la viscosité d'un milieu en fonction de sa charge en biomasse exprimée ici en termes de concentration volumique X (g/l).

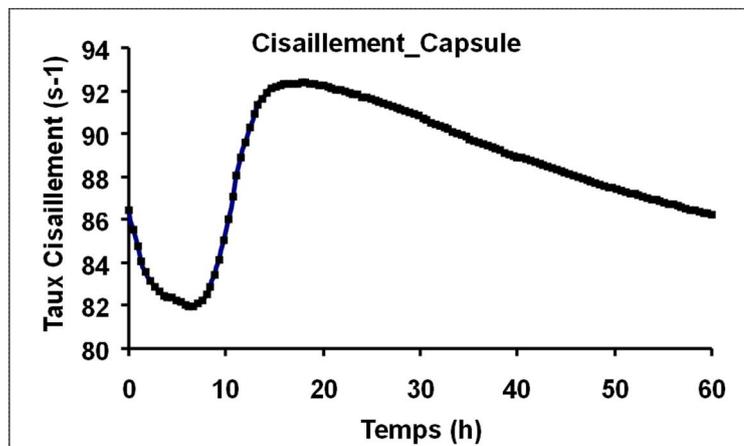
Cette évolution entraîne celle des champs des grandeurs ε_L, k_l, a et $k_l a$ qui sont impliquées dans l'échange massique comme le montre les figures VII-3 et qui se traduit par le déplacement des valeurs de trois des médianes de ces grandeurs ε_L, k_l et $k_l a$ sur la figure VII-4. Le maintien de la valeur médiane de a est conséquent de l'alimentation gazeuse et des deux formes d'agitation. Cette évolution est confirmée numériquement par les courbes des valeurs moyennes de ces grandeurs au cours de la fermentation.

2°/ Les profils des moyennes volumiques des taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ (Contois):

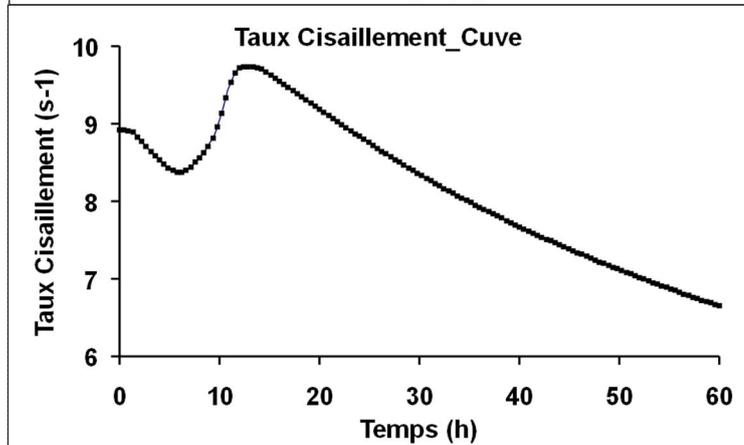
Figure VII-5:

Evolution du taux de cisaillement pendant la fermentation.

(a) Taux du cisaillement au voisinage de la turbine (Capsule).



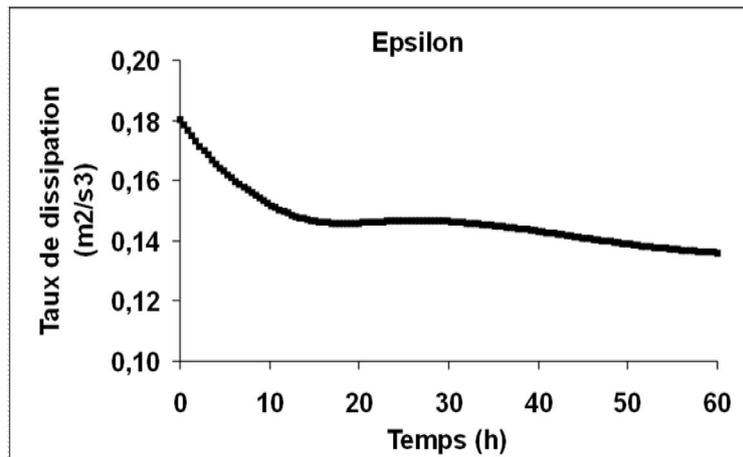
(b) Taux du cisaillement loin de la turbine.



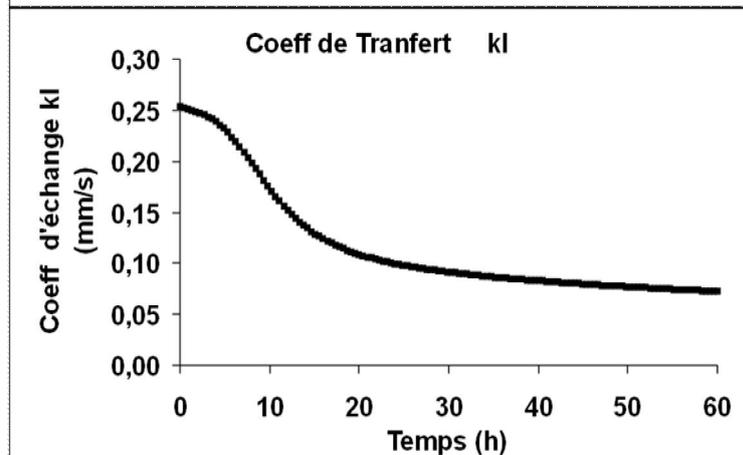
3°/ Les profils des moyennes volumiques de $\varepsilon_L, k_l, a, k_l a$ (Contois):

Figure VII-6:
Evolution des grandeurs ε_L, k_l, a et $k_l a$ au cours de la fermentation.

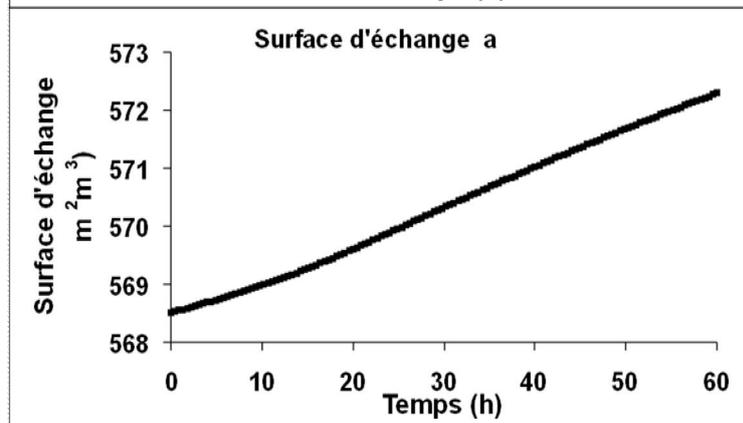
(a) Evolution de ε_L



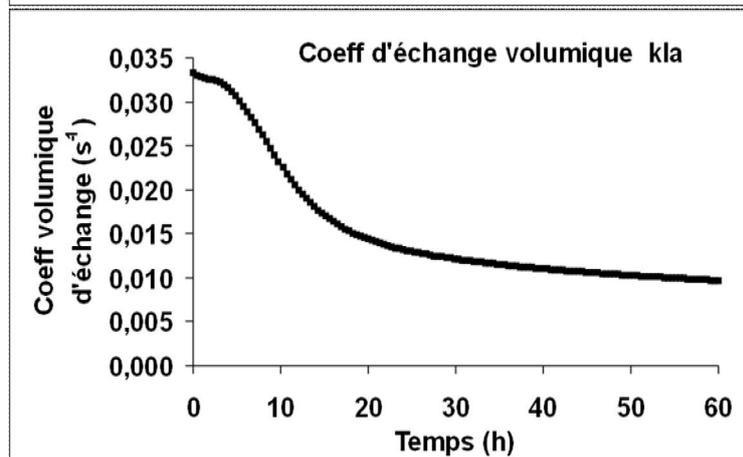
(b) Evolution de k_l



(c) Evolution de a



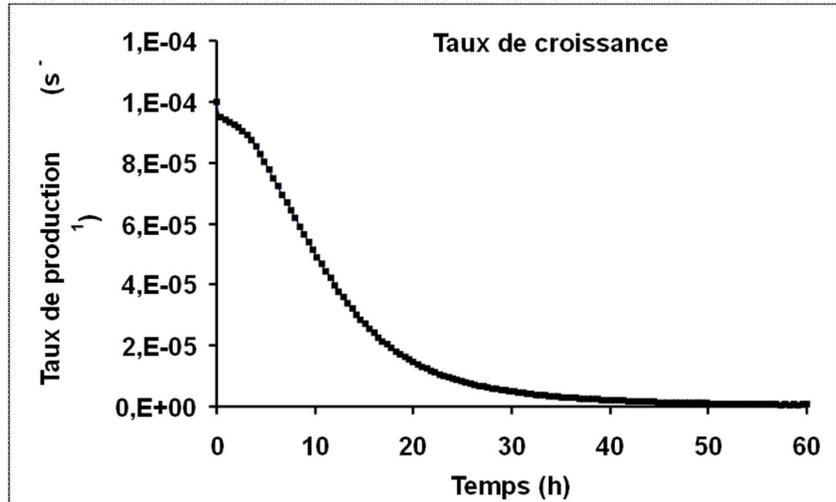
(d) Evolution de $k_l a$



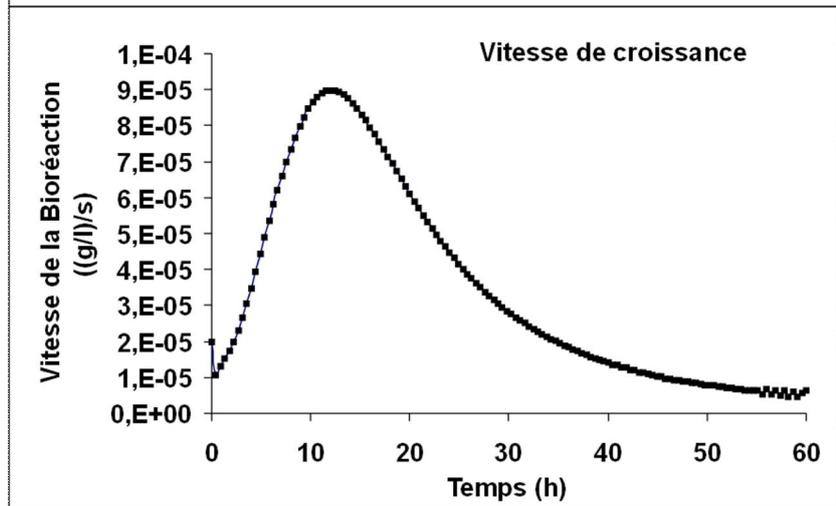
4°/ Les profils des moyennes volumiques de μ_x et τ_x (Contois): Parmi les autres profils accessibles dans la masse des données récoltées lors d'une fermentation, ceux du taux de croissance de la réaction μ_x et de sa vitesse r_x qui sont reproduits sur la figure VII-6.

Figure VII-7:
 Profil de μ_x et r_x
 (CONTOIS)

(a) Evolution de
 μ_x



(b) Evolution de r_x

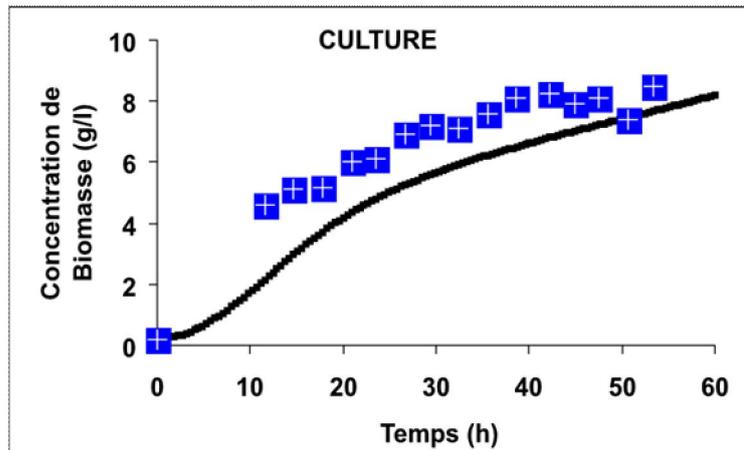


5°/ Les profils des moyennes volumiques de X , S , O_d et P (Contois):

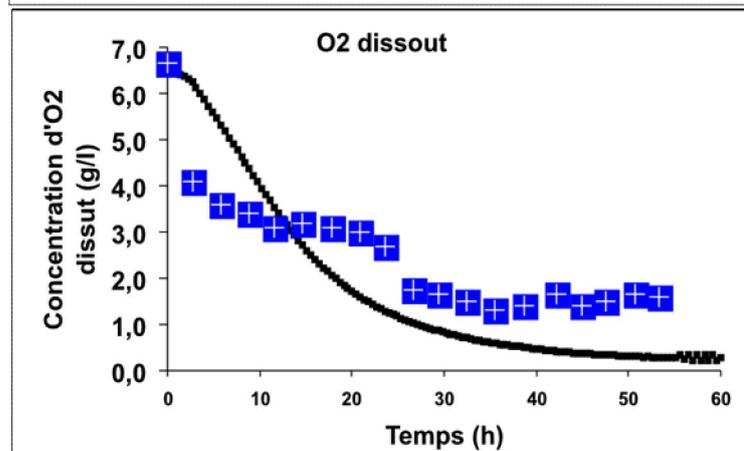
Figure VII-8:

Profils des concentrations des quatre scalaires X , S , O_d et P (Contois).

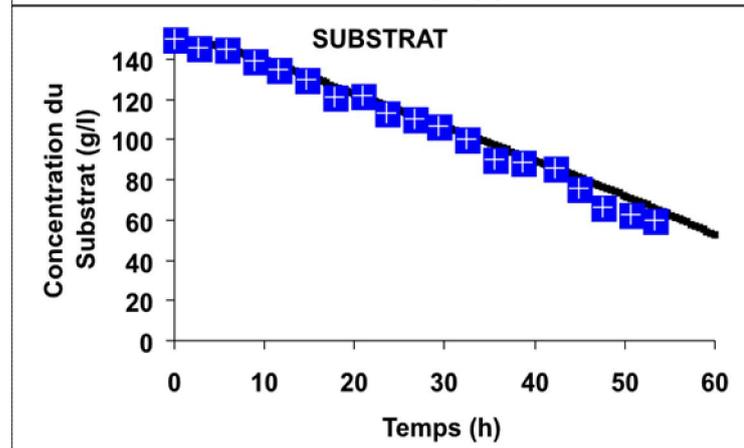
(a) Concentration de la biomasse X



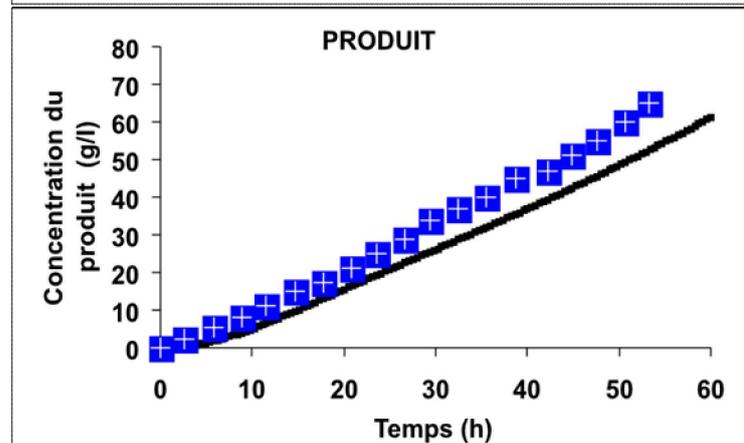
(b) Concentration d'oxygène dissout O_d



(c) Concentration du substrat S



(d) Concentration du produit P



L'évolution du taux de croissance μ_x coïncide avec la cadence des phases caractéristiques d'une culture en général. Celle de la vitesse de croissance r_x présente une phase d'accélération suivie d'une phase de ralentissement de la croissance.

Les quatre autres profils sont ceux des concentrations de la culture, du sucre, de l'oxygène dissout et de l'acide gluconique. Tous les graphiques de ces figures sont obtenus à partir des fichiers numériques dont une partie est reproduite en annexe A2.

Bien que la simulation dans les cas pseudo-laminaire et pseudo-turbulent fournit des résultats plus cohérents avec ceux des figures IV-2 et IV-3, leurs résultats sont néanmoins non réalistes dans leurs considérations concernant le coefficient d'échange massique $k_l a$ et la viscosité μ_L . Les résultats du modèle intégral de Contois, en retrait concernant les concentrations de la culture et en conséquence du sucre aussi, demeurent plus prometteurs quant à la prise en charge de l'aspect turbulent de l'écoulement et de l'influence de cette turbulence sur la fermentation.

6°/ Courbes de la viscosité en fonction du temps et en fonction de la concentration

volumique moyenne **en cellules (Contois):**

Figure VII-9:

Profil de la viscosité du milieu en fonction du temps pendant la fermentation.

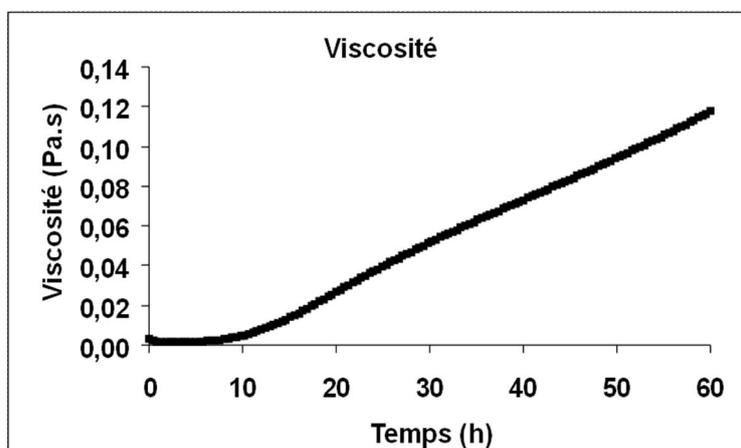
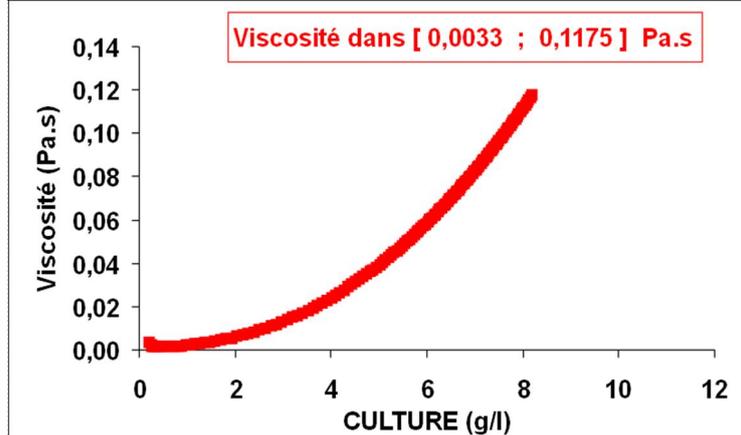


Figure VII-10:

Profil de la viscosité du milieu en fonction de la concentration volumique moyenne en culture.



Sur les graphiques des figures VII-9 et 10, on constate que l'évolution de la courbe de la viscosité du milieu suit celle de sa concentration volumique moyenne en culture. La deuxième figure confirme, par sa reproduction du modèle de Sato, l'intégrité des calculs, malgré leur volume élevé; ceci dénote le faible effet du phénomène de la propagation des erreurs par exemple et le bon conditionnement du problème.

III- LE MODELE INTEGRAL DE MONOD PAR LA CFD:

1°/ Le modèle biologique de Monod et le calcul local:

On se propose de simuler la production de l'acide gluconique par *Aspergillus Niger* selon le même article [33] mais tel que les résultats sont rendus par le modèle de Monod dont on reproduit les équations et les paramètres numériques. Les résultats de la résolution du système différentiel ont été présentés conjointement à ceux du modèle de Contois sur la figure IV-2:

$$\left\{ \begin{array}{l} r_x = \frac{dX}{dt} = \mu X \quad \text{où} \quad \mu = \mu_m \frac{S}{K_s + S} \frac{O_d}{K_{O_d} + O_d} \quad \text{avec} \quad \mu_m = 0,668 h^{-1} \\ \\ r_s = \frac{dS}{dt} = -\gamma \frac{dX}{dt} - \lambda X \quad \text{avec} \quad \gamma = 2,1241 \quad \text{et} \quad \lambda = 0,2320 h^{-1} \\ \\ r_{O_d} = \frac{dO_d}{dt} = k_L a (C_{O_d}^* - C_{O_d}) - \delta \frac{dX}{dt} - \phi X \quad \text{avec} \quad \delta = 0,27824 \quad \text{et} \quad \phi = 0,0487 h^{-1} \\ \\ r_p = \frac{dP}{dt} = \alpha \frac{dX}{dt} + \beta X \quad \text{avec} \quad \alpha = 2,922 \quad \text{et} \quad \beta = 0,1314 h^{-1} \end{array} \right. \quad (VII - 4)$$

La résolution numérique du système différentiel dans les «pseudo-réacteurs» formés par les mailles de la cuve s'effectue de la même façon que précédemment. Si X_0, S_0, O_{d0}, P_0 et μ_0 , sont leurs valeurs respectives à l'instant t_0 , dans une maille, leurs valeurs à l'instant t_1 sont :

$$\begin{aligned}
X_1 &= X_0 e^{\mu_0 \Delta t} \\
S_1 &= -(\gamma \mu_0 + \lambda) X_0 \Delta t \\
O_{d1} &= O_{d0} + \left[O^* - O_{d0} - \frac{(\delta \mu_0 + \varphi)}{k_L a} X_0 \right] (1 - e^{-k_L a \Delta t}) \quad (\text{VII-5}) \\
P_1 &= (\alpha \mu_0 + \beta) X_0 \Delta t \\
\text{et} \quad \mu_1 &= \mu_{\max} \frac{S_1}{K_S + S_1} \frac{O_{d1}}{K_O + O_{d1}}
\end{aligned}$$

ce qui permet d'actualiser l'évolution des diverses valeurs dans la cuve. Le coefficient $k_L a$ ainsi que la viscosité sont ceux du modèle intégral et varient donc au cours de la fermentation. Le coefficient $k_L a$ est dépendant des conditions locales en termes de dissipation visqueuse ε_L et de la surface volumique d'échange a .

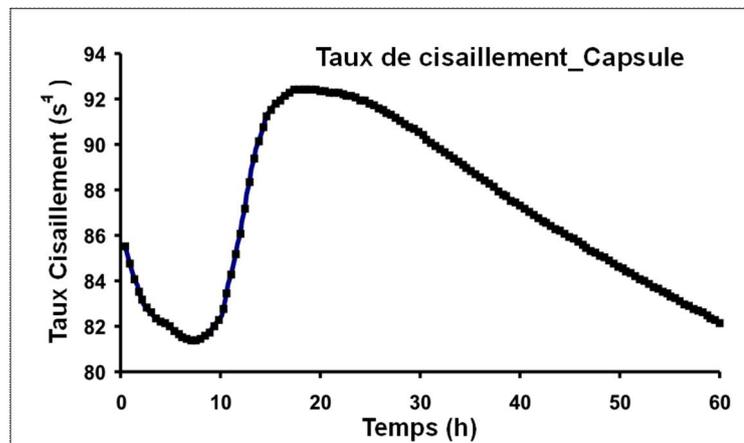
2°/ Les profils des moyennes volumiques des taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ (Monod):

Les résultats obtenus pour le modèle de Monod traduisant les mêmes données expérimentales de l'article [33] sont donnés en termes de graphiques des grandeurs suivantes :

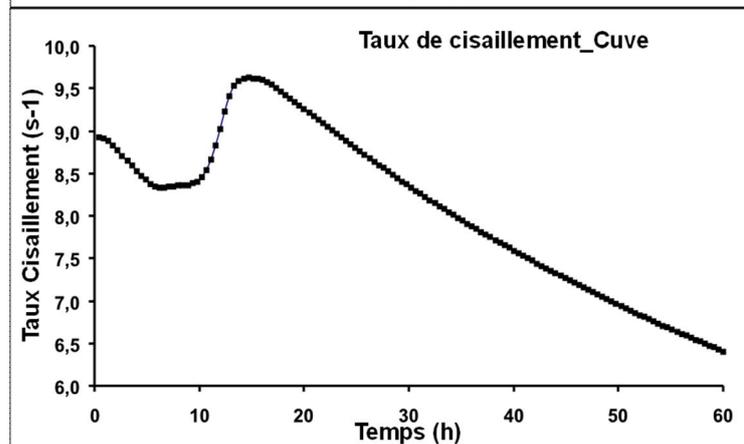
Figure VII-11:

Evolution du taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ au cours de la fermentation.

(a) Taux du cisaillement au voisinage de la turbine (Capsule).



(b) Taux du cisaillement loin de la turbine.

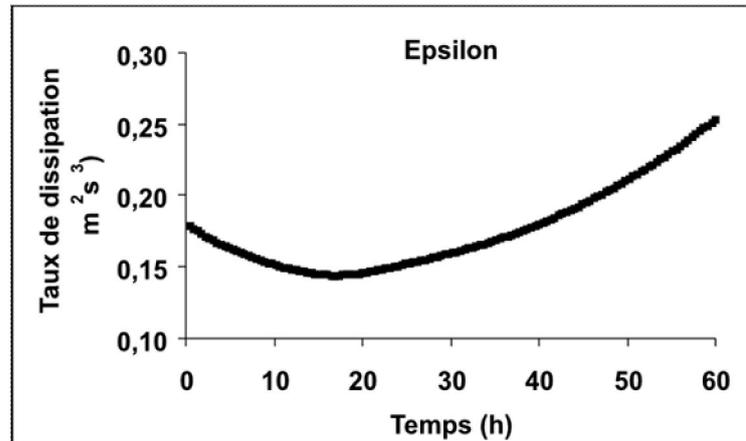


3°/ Les profils des moyennes volumiques de $\varepsilon_L, k_l, a, k_l a$ (Monod):

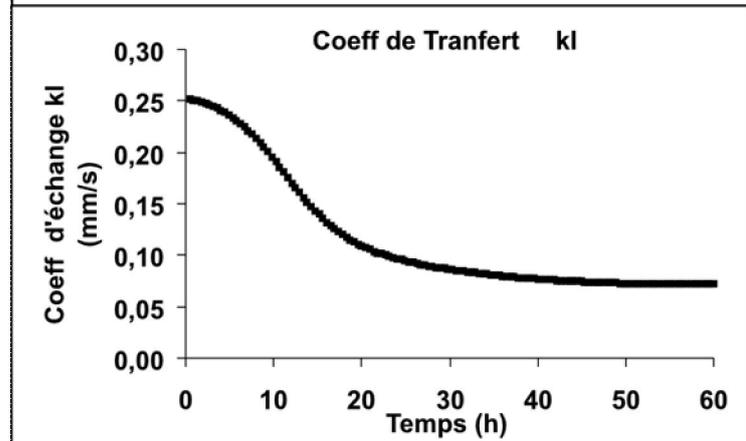
Figure VII-12:

Evolution des grandeurs ε_L, k_l, a et $k_l a$ au cours de la fermentation.

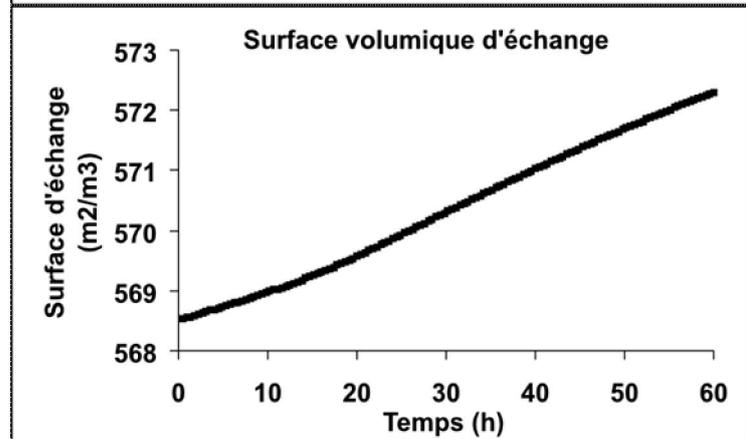
(a) Evolution de ε_L



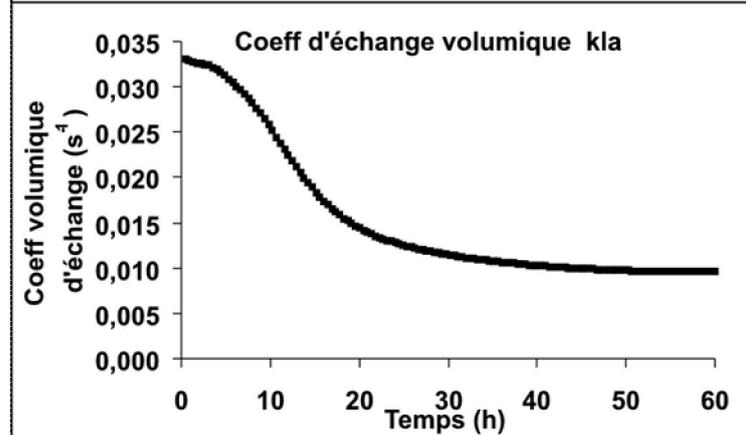
(b) Evolution de k_l



(c) Evolution de a



(d) Evolution de $k_l a$

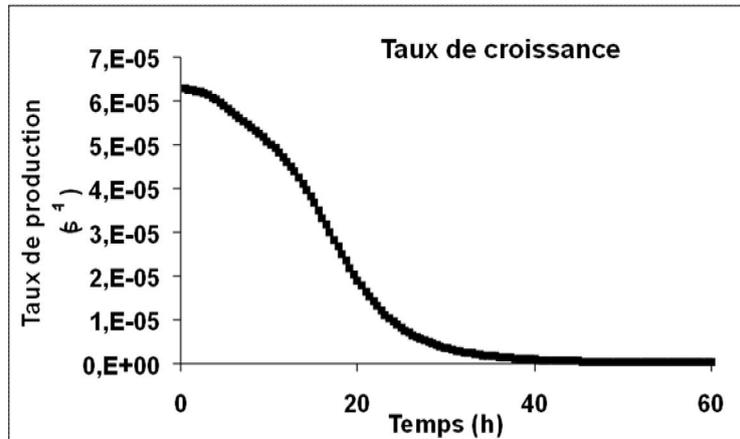


4°/ Les profils des moyennes volumiques de μ_x et r_x (Monod):

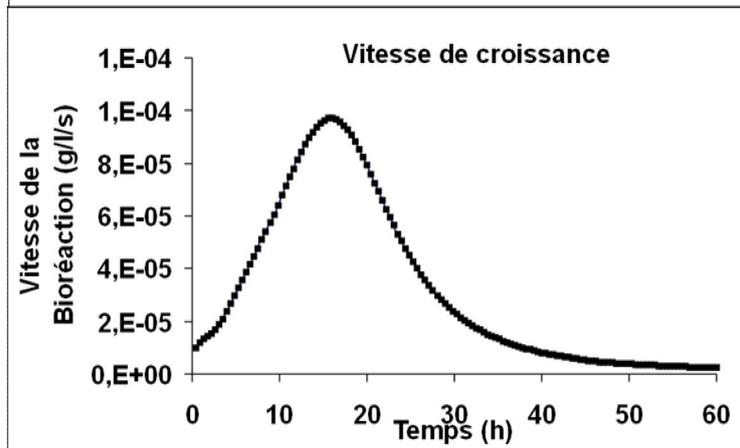
Figure VII-13 :

Taux de la bioréaction et sa vitesse de croissance selon le modèle de Monod.

(a) : le taux de croissance μ_x



(b) : La vitesse de croissance de la culture r_x



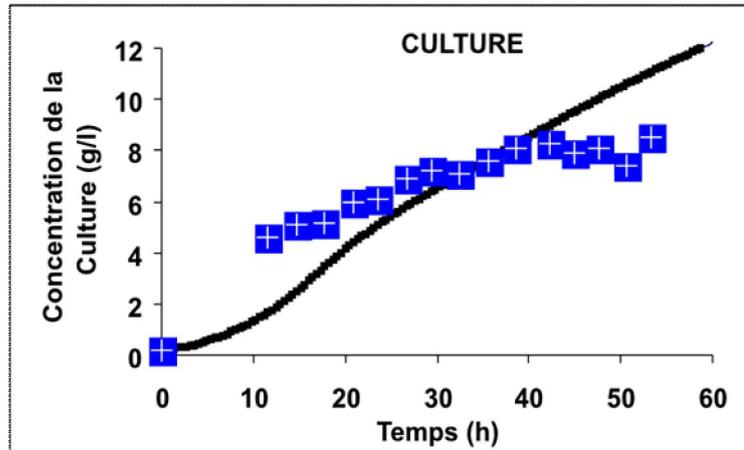
- les profils des quatre scalaires X , S , O_d et P , dont la figure IV-2 présente l'allure telle qu'elle est obtenue par Maple, sont reproduits sur la figure VII-11.

5°/ Les profils des moyennes volumiques de X , S , O_d et P (Monod):

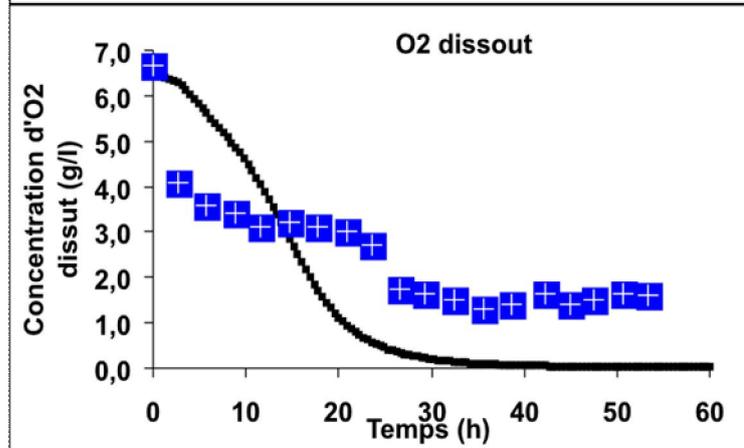
Figure VII-14:

Profils des concentrations des quatre scalaires X , S , O_d et P (Monod).

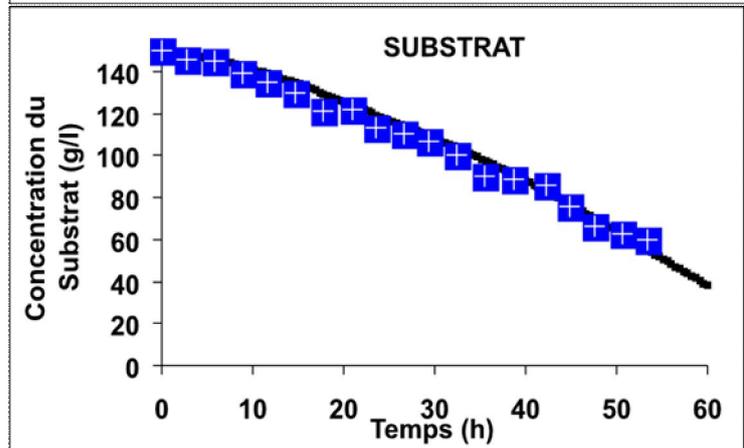
(a) Concentration de la biomasse X



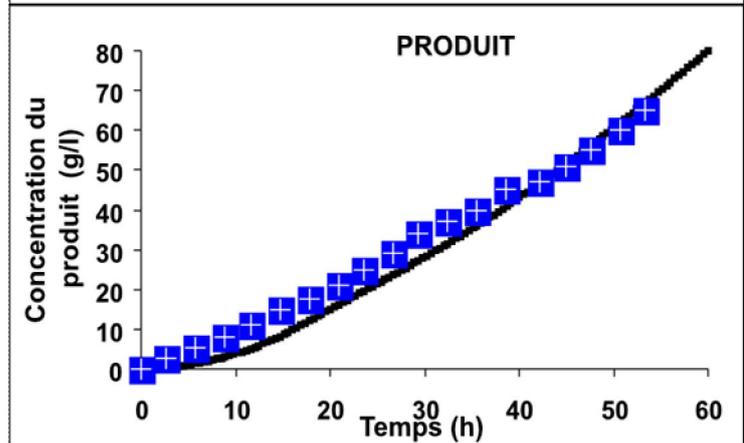
(b) Concentration d'oxygène dissout O_d



(c) Concentration du substrat S



(d) Concentration du produit P



6°/ Courbes de la viscosité en fonction du temps et en fonction de la concentration

moyenne en cellules (Monod):

Figure VII-15:

Profil de la viscosité du milieu en fonction du temps pendant la fermentation.

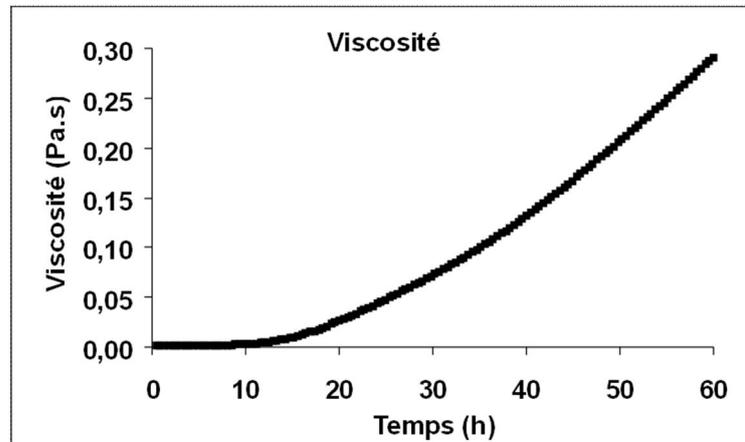
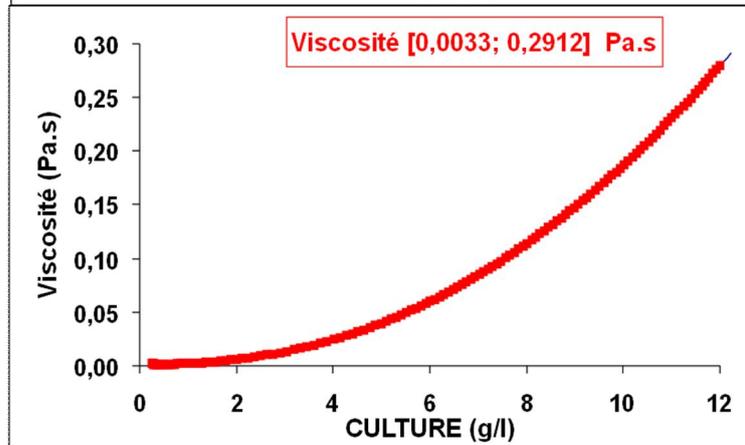


Figure VII-16:

Profil de la viscosité du milieu en fonction de la concentration volumique moyenne en culture



Remarque : A la différence des résultats du modèle de Contois présenté précédemment, la viscosité évolue ici de $\mu_0 = 0,003 Pa.s$ à $\mu_{max} = 0,291 Pa.s$ correspondante à une concentration finale en biomasse qui est voisine de 12,2 g/l. Le modèle de Monod, simulé par la CFD présente une dérive en fin de fermentation, visible en annexe 4 (Culture) et qui occasionne un écoulement plus visqueux dans la cuve pour une même durée de fermentation que le modèle précédent.

IV - COMMENTAIRE DES RESULTATS :

Les résultats obtenus par CFD pour ces modèles de « fermentation numérique » avec influence mutuelle de l'écoulement sur la bioréaction et réciproquement, paraissent reproduire l'allure attendue lors d'une fermentation en général. L'aspect des courbes d'évolution des quatre constituants de la biomasse est globalement identique, mais on

constate une meilleure corrélation dans la reproduction pour le modèle de Monod. Ces résultats, quoiqu'en retrait de ceux attendus pour le modèle de Contois, confirment dans l'aboutissement de ce couplage « écoulement-bioréaction » et l'aptitude de la CFD à endosser ce type d'opération. Une réaction biologique, comme une réaction chimique, peut donc être simulée dans son évolution en temps réel, et dans sa dépendance locale de paramètres hydrodynamiques, thermodynamiques ou autres.

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Les procédés biologiques se différencient des procédés chimiques ou pétrochimiques par, d'une part, la mise en jeu de biocatalyseurs présentant des propriétés fortement évolutives et soumis potentiellement à des phénomènes d'inhibition, d'activation, de multiplication ou encore de décès, et d'autre part, par l'utilisation de conditions hydrodynamiques et de transferts spécifiques, adaptées. Les milieux réactionnels rencontrés dans les procédés biologiques sont rarement simples. Ils comportent, le plus souvent, un grand nombre de composants et présentent des caractéristiques dont la prise en compte est indispensable à la conception, tant du bioréacteur de production (agitation, mélange, transferts, sélectivité, concentrations,...) qu'à l'étape de purification (extraction, filtration, adsorption/chromatographie,...). Par ailleurs, il arrive que ces milieux présentent un comportement rhéologiquement complexe, devenant par exemple visqueux ou gélatineux (polysaccharides, protéines,...). Les particularités des catalyseurs biologiques doivent impérativement être prises en compte pour une mise en œuvre optimale dans les procédés industriels. La nature, le mode d'action et le comportement du catalyseur peuvent être très différents selon que l'on utilise des enzymes ou des cellules microbiennes, animales ou végétales. Les réacteurs les plus nombreux à l'échelle industrielle sont ceux utilisant des micro-organismes et communément appelés fermenteurs.

L'objectif de cette thèse était la modélisation *de l'analyse locale* d'un fermenteur hétérogène aérobie gaz-liquide, et plus particulièrement visée, l'influence de l'agitation et de l'aération sur une réaction microbienne de production dans un milieu (substrat) de caractéristiques physico-chimiques évolutives. **L'agitation** doit être efficace dans le cas de mélanges visqueux ou très douce en présence de cellules très fragiles. Les systèmes d'agitation devront à la fois permettre une homogénéisation correcte du milieu mais joueront également un rôle important dans le transfert de matière, tel que celui d'oxygène. **L'aération**, qui est souvent le premier facteur limitant, notamment aux fortes concentrations cellulaires, doit être dimensionnée avec soin, et en particulier dans le cas de réacteurs très volumineux. Par contre, des systèmes d'aération doux doivent être conçus pour les procédés mettant en

œuvre des cellules très sensibles aux forces de cisaillement provoquées par les bulles d'air, et bien sûr par le mobile d'agitation.

L'objectif immédiat de ce travail était d'abord de confirmer l'aptitude de la CFD à contribuer à l'étude d'un écoulement multiphasique établi dans une cuve agitée. La validation de cette aptitude s'est faite par un rendu numérique des champs de plusieurs grandeurs hydrodynamiques ou constitutives du milieu agité. Ce rendu, est particulièrement confirmé, à travers les calculs des gradients des vitesses et des taux de cisaillement et de la confrontation de ces résultats à des données expérimentales précédemment établies en dehors de ce travail. Plusieurs démarches comparatives étaient entreprises afin d'appuyer davantage cette aptitude. Après cette étape, une démarche constructive d'un modèle était entreprise à travers l'oxygénation de la phase continue et sa charge progressive en cellules. Le but final était d'élaborer un modèle de **fermentation hétérogène numérique** apte à rendre compte, en plus de l'hydrodynamique établie dans le réacteur agité, de l'évolution biologique de la culture et de son contexte, du transfert massique entre la phase gazeuse et la phase liquide, de l'évolution de la viscosité du milieu ainsi que de l'interaction entre l'écoulement et la bio-réaction par l'intermédiaire des deux paramètres vecteurs de l'interaction que sont le coefficient de transfert de matière entre les deux phases et la viscosité de la phase liquide. A travers cette étude, il a été établi par ailleurs, la possibilité de comparer les performances de deux turbines (RUSHTON et NARCISSE) en termes d'évaluations de taux de cisaillement. L'utilisation de la CFD pour l'analyse du cisaillement dans un réacteur agité a permis aussi la génération des champs de plusieurs autres grandeurs par la résolution des EDP de la dynamique des fluides.

En conclusions d'ordre général de ce travail, on peut citer:

1. la mise en œuvre d'un modèle numérique, basé sur les équations RANS, pour l'étude d'un écoulement gaz-liquide réactionnel établi dans une cuve agitée avec transfert massique et viscosité évolutifs.
2. la validation des aptitudes de ce modèle numérique s'est faite par la restitution des champs numériques de plusieurs grandeurs hydrodynamiques ou constitutives du milieu agité (à travers les calculs des gradients des vitesses et des taux de cisaillement) et de la confrontation de ces résultats à des données expérimentales précédemment établies en de hors de ce travail.

3. Le lien est effectif et opérationnel, au sein du réacteur, entre l'hydrodynamique diphasique, le transfert entre la phase gazeuse et la phase liquide et l'évolution biologique de la culture. L'interaction se fait par le biais du coefficient de transfert de matière entre les deux phases et de la viscosité de la phase liquide.
4. La génération par le modèle ainsi conçu de courbes conformes à leurs semblables expérimentales dans la cinétique de production d'acide gluconique.

Dans un autre contexte, l'analyse hydrodynamique d'un mélange agité révèle plusieurs **affirmations concrètes et utiles**, notamment :

1. la concordance (visible sur le Tableau III-2 de la page 92) des résultats expérimentaux des mesures in situ par la sonde sphérique d'une part, et des résultats numériques obtenus par la CFD d'autre part.
2. les taux de cisaillement, pour les écoulements générés dans le cas de deux modèles différents de turbines ayant des pales respectivement plates et profilées, sont évalués et comparés aux données expérimentales obtenues par des méthodes de mesure intrusives. Le rapport (RUSHTON/NARCISSE) des moyennes des taux de cisaillement expérimentaux à des vitesses de rotation identiques des deux turbines est déterminé par les constantes correspondantes de Metzner et Otto et il vaut à 1,45 pour les mesures in situ. Son évaluation par la CFD en propose la valeur de 1,4.
3. La démarche d'évaluation par la CFD favorise, à travers la présente étude, la sélection de la turbine NARCISSE pour des applications industrielles; privilégiant son faible taux de cisaillement révélé par les mesures directes et confirmé aussi par la CFD. Cette comparaison peut être étendue à d'autres types de situations et en résultera un impact certain lors du dimensionnement.

La CFD a été appliquée aussi pour suivre l'évolution de problèmes dynamiques de transfert et réactionnels, accompagnés de variation de viscosité du milieu. **La cuve agitée** gaz-liquide abrite un écoulement polyphasique complexe, au sein duquel, le liquide est le siège d'intenses boucles de recirculation, de forts cisaillements et un degré élevé de turbulence. Par conséquent la dispersion du gaz dans ces écoulements n'est pas triviale: les bulles sont animées de mouvements chaotiques, elles coalescent

ou se rompent, et présentent en conséquence une distribution non uniforme de leurs tailles (leurs diamètres varient dans un intervalle $[d_{\min}; d_{\max}]$). Le couplage **entre l'hydrodynamique et le transfert de masse** aux interfaces des bulles est crucial et conditionne l'efficacité du fermenteur.

Des solutions complexes et à évolution locale, en présence d'un transfert gaz-liquide et une viscosité évolutive ont été obtenues. Les résultats ont montré que :

4. En supposant un diamètre unique des bulles (un diamètre moyen caractéristique), les solutions CFD représentent correctement les résultats expérimentaux, notamment les profils du substrat, d'oxygène, de biomasse et de produit.
5. La comparaison des modèles de Contois et de Monod, dans leur compétition pour la représentation de la production d'acide gluconique par *Aspergillus Niger* à été entreprise. Ces deux modèles, statiques dans leur conception, pourraient céder la place à des modèles dynamiques dans un couplage du type établi dans le présent travail. La dépendance des constituants du mélange, du coefficient de transfert de masse interphasique ainsi que d'autres échanges, des paramètres physico-chimiques des phases en présence, peuvent, dans un modèle suffisamment développé et exécuté d'une manière adéquate, rendre compte avec plus de pertinence et de précision d'une bioréaction dans une cuve agitée.
6. L'usage de la CFD permet d'estimer des influences spécifiques sur différents paramètres et qui ne sont pas détectables avec les autres méthodes, notamment leur évolution locale en fonction de l'énergie dissipée dans le système. Il a été établi à travers le modèle obtenu, que la viscosité modifie le coefficient $k_l a$ en influant surtout sa composante k_l .

En perspectives améliorant le modèle obtenu: Ce travail appelle les développements ci-dessous :

1°/ Approfondissement : Dans une suite immédiate, une étude plus détaillée du comportement de ce modèle numérique est à entreprendre, à travers une variation double des deux principaux paramètres influents sur une fermentation, selon la figure VIII-1, et qui sont:

- la vitesse de rotation Ω de la turbine d'agitation, sur un intervalle $[\Omega_{min}, \Omega_{max}]$, allant des écoulements quasi-laminaires jusqu'aux turbulents.
- le débit d'oxygène dissout Q sur un intervalle $[Q_{min}, Q_{max}]$, allant des milieux pauvres en O₂-dissout jusqu'aux milieux saturés.

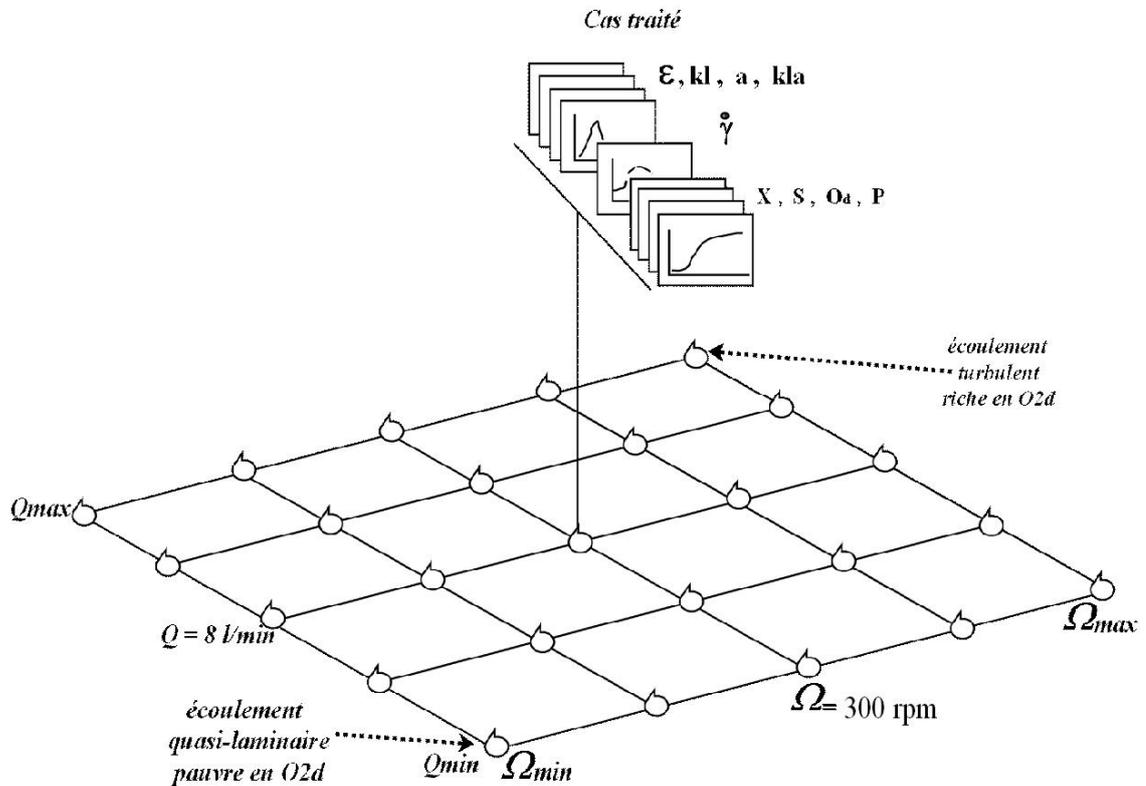


Figure VIII-1: Perspective d'étude de la pertinence du modèle.

La nature de l'écoulement ainsi que du débit entrant Q de la phase gazeuse doivent acter sur la bioréaction et fournir des profils dépendant de Ω (ou du nombre Re) et de Q .

Par ailleurs, la deuxième approximation, non utilisée dans ce travail reste à étudier afin d'améliorer le rendu du modèle numérique obtenu.

2°/ Diamètre variable des bulles: Afin de prendre en compte la réalité non singulière du diamètre des bulles de la phase gazeuse, le modèle peut être amélioré pour endosser un diamètre d de ces bulles variant dans un intervalle $[d_{min}, d_{max}]$ selon une distribution statistique ou hypothétique donnée (uniforme, de Gauss,...). L'implémentation informatique de cette amélioration est toujours possible en augmentant le nombre de phases.

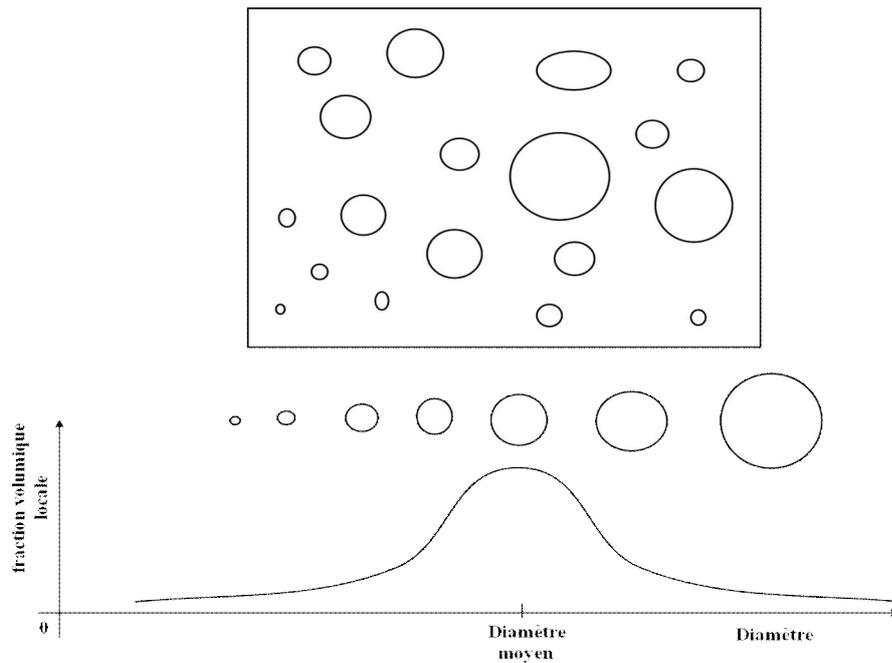


Figure VIII-2 : Perspective d'amélioration du modèle en fonction du diamètre des bulles.

On peut considérer, par exemple:

- 1- Une distribution du diamètre $d(M)$ validée par l'expérience (gaussienne ou non) au niveau de la cuve entière.
- 2- Une distribution $m(M)$, $\sigma(M)$ des paramètres statistiques de distributions locales dans l'élément de volume au point M.
- 3- Une corrélation entre la dynamique l'érosion des bulles et la « dynamique et l'érosion » des diamètres.

3°/ Cisaillement déterminant: L'évaluation prometteuse du cisaillement par la CFD incite à l'étude des réactions biologiques dans lesquelles son effet est déterminant pour les résultats, notamment l'hydrolyse enzymatique des protéines où le cisaillement est crucial. La maîtrise de la production/réduction du cisaillement aura des retombées positives sur ces réactions.

Notons pour finir, un intérêt particulier des modèles construits à partir de la CFD et qui exploitent le traitement informatique. La possibilité d'accroître leur précision en affinant l'étude. La possibilité de réaliser des fermentations en accéléré en améliorant le potentiel de calcul (calcul parallèle par exemple). Les traitements en parallèle pour des comparaisons d'éléments (plusieurs cuves agitées simultanément). Pour ces modèles,

les limitations des méthodes d'évaluation (les mesures «virtuelles» de grandeurs) ne sont plus de l'ordre d'accès à l'intérieur de la cuve, mais acquièrent une nature informatique indépendante du matériel, des processus biologiques eux-mêmes et la mesure se trouve dotée d'une autre gamme de qualités.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] - **DELHAYE J. M. (1968)**: Equations fondamentales des écoulements diphasiques: Première partie: Equations générales de conservation.; *Rapport CEA-R-3429(1)*.
- [2] - **DELHAYE J.M. (1974)**: Conditions d'interface et source d'entropie dans les systèmes diphasiques ; *Rapport CEA-R-4562*.
- [3] - **DELHAYE J.M. (1969)**: Application de la thermodynamique des systèmes en non-équilibre aux écoulements diphasiques liquide-vapeur avec changement de phase; *Rapport-CEA-3903*.
- [4] - **CROWE C., SOMMERFELD M. and TSUJI Y (1998)**: Multiphase Flows with Droplets and Particles; CRC Press.
- [5] - **RANADE V. V. (2002)** : Computational Flow Modelling for Chemical Reactor Engineering, Academic Press.
- [6] - **COMOLET R. (1982)**: Mécanique expérimentale des fluides. Tome II ; Dynamique des fluides réels. Turbomachines. Masson.
- [7] - **LANDAU L. et LIFCHITZ E. (1989)** : Physique théorique,6 : Mécanique des fluides. Editions MIR .
- [8] - **CANDEL S. (1990)**: Mécanique des Fluides ; DUNOD.
- [9] - **PADET J. (1991)**: Fluides en écoulement. Méthodes et modèles; MASSON.
- [10] - **CHEVRIN J-C et PEYRONNEAU J. (2003)**: La pression: un outil pour les sciences. CNRS-EDITIONS.
- [11] - **BAILLY C. et COMTE-BELLOT G. (2003)**: Turbulence; CNRS-Editions.
- [12] - **COULSON J. M. and RICHARDSON J.F. (1977)**: Chemical Engineering, Volume One Fluid Flow, Heat Transfer and Mass Transfer ; Pergamon Press.
- [13] - **COEURET F. (2003)**: Ingénierie des procédés électrochimiques; Ellipses.
- [14] – **MORCHAIN J. (2000)**: Etude et modélisation des couplages entre cinétiques physiques et biologiques dans les réacteurs à grand volume. Thèse-594. Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse.
- [15] - **JAAFAR W. (2006)**: Etude des Champs de vitesse dans les effluents des réseaux d'assainissement: Expérimentation et simulation numériques. Thèse. Université Louis Pasteur - Strasbourg I.

- [16] – **DABALIZ A.** (2002): Etude d'un réacteur (contacteur) gaz-liquide à jet vertical immergé en vue de son application dans le traitement des eaux usées. Thèse :02-ISAL-0017. Institut National des Sciences Appliquées de Lyon.
- [17] - **DUNN I.J., HEINZLE E., INGHAM J. and PRENOSIL J-E.** (1992): Biological Reaction Engineering: Principles, Applications and modelling with PC simulation; VCH.
- [18] – **REHM H.-J., REED G., PÜHLER A. and STADLER P.** (1993): Biotechnology. Volume 1-12; VCH Verlagsgesellschaft mbH. Weinheim.
- [19] – **LINEK V., KORDAC M., FUJASOVA M. and MOUCHA T.** (2004): Gas Mass Transfer Coefficient in Stirred Tanks Interpreted through Models of Idealised Eddy Structure of Turbulence in Bubble Vicinity. *Chemical Engineering and Processing* **43**, 1511-1517.
- [20] – **MOILANEN P, LAAKKONEN M., VISURI O. and AITTAMAA J.** (2007): Modelling local gas-liquid mass transfer in agitated viscous Shear-Thinning Dispersions with CFD; *Ind. Eng. Chem. Res.*, **46**, 7289-7299.
- [21] – **LAAKKONEN M., MOILANEN P., ALOPAEUS V. and AITTAMAA J.** (2007): Modeling local gas-liquid mass transfer in agitated vessel; Laboratory of *Chemical Engineering*; Vol **85**, 665-675.
- [22] – **MOILANEN P, LAAKKONEN M., VISURI O., ALOPAEUS V. and AITTAMAA J.** (2008) : Modelling mass transfer in aerated 0.2 m³ vessel agitated by Rushton, Phasejet and combijet impeller: *Chemical Engineer Science*.
- [23] - **MONOD J.** (1942): Recherches sur la croissance des cultures bactériennes. Thèse HERMANN.
- [24] - **VILLERMAUX J.** (1993): Génie de la réaction chimique : Conception et fonctionnement des réacteurs; TEC & DOC LAVOISIER.
- [25] - **SCHWEICH D.** (2001): Génie de la réaction chimique; Editions TEC & DOC.
- [26] – **MEZAKI R., MOCHIZOUKI M. and OGAWA K.** (2000): Engineering Data on Mixing. Elsevier Science B.V. Amsterdam.
- [27] - **XUEREB C., POUX M, et BERTRAND J.** (2006): Agitation et mélange; DUNOD.
- [28] – **VLAEV S. D. and MARTINOV M.** (1997): Impeller for Mixing complex-rheology media in the process industries. In Proceeding of *ACHEMA Session on Mechanical Process Engineering*. DECHEMA, Frankfurt am Main pp.103-105.

- [29] – **KRAITSCHEV S., LOSSEV V., VLAEV D.S., VALEVA M.(1999):** Energy-saving in gas-liquid mixing using the NS-impeller, *IChemE Symp. Ser. No. 146*, 245-252.
- [30] - **VLAEV S.D., MAVROS P., SEICHTER P. and MANN R. (2002):** Operational Characteristics of a New Energy-Saving Impeller for Gas-Liquid Mixing. *Can. J. Chem. Eng.* 80(3), 653-659, Special Issue on Mixing.
- [31] – **DANCKWERTS P. V. (1953):** Continuous Flow Systems. Distribution of Residence Time. *Chemical Engineering Science*, **2**, p.1-13.
- [32] - **BIMBENET J.J., DUQUENOY A. et TRYSTRAM G. (2002):** Génie des procédés alimentaires : Des bases aux applications; DUNOD.
- [33] - **ZNAD H., BLAZEJ M., BALES V. and MARKOS J. (2004):** A kinetic model for gluconic acid production by *Aspergillus Niger*. *Cem.Pap*, **58**, 23-28.
- [34] - **GAMBIT 2** User's Guide, FLUENT Inc New Hampshire.
- [35] - **MIXSIM 2** User's Guide, , FLUENT Inc New Hampshire.
- [36] - **FLUENT 6.18 and 6.23;** Documentation, FLUENT Inc New Hampshire.
- [37] – **CROUSEIX M. et MIGNOT A. L. (1984):** Analyse numérique des équations différentielles. Masson.
- [38] - **RAVIART P-A. et THOMAS J.M. (1998):** Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles; DUNOD.
- [39] – **SAATDJIAN E. (1998):** Phénomènes de Transport et leurs Résolutions Numériques. 2^{ème} édition, POLYTECHNICA.
- [40] - **EUVRARD D. (1994):** Résolution numérique des équations aux dérivées partielles de la physique, de la mécanique et des sciences de l'ingénieur. Différences finies, éléments finis. Problèmes en domaines non bornés; MASSON.
- [41] - **LE POURHIET A. (1988):** Résolution numérique des équations aux dérivées partielles; CEPADUES.
- [42] - **LUQUIN B. (2004):** Equations aux dérivées partielles et leurs approximations; ELLIPSES.
- [43] - **RAVIART P.-A. (1981):** Les méthodes d'éléments finis en mécanique des fluides; EYROLLES.
- [44] - **AVRIEL M. (2003):** Nonlinear Programming : Analysis and Methods. Courier Dover Publications.
- [45] - **HAZAN D. and MIRANKER W. L. (1970):** A Nongradient and Parallel Algorithm for Unconstrained Minimization; *SIAM J. Control*, **8**, 207-217.

- [46] - **REINHARD H. (1991)**: Equations aux dérivées partielles: Introduction; DUNOD.
- [47] - **MARTIN A. (1991)**: Equations aux dérivées partielles: Exercices résolus. DUNOD.
- [48] – **TAYLOR M.E. (1997)**: Partial Differential Equations I: Basic Theory. Applied Mathematical Sciences 115. Springer.
- [49] – **TAYLOR M.E. (1997)**: Partial Differential Equations II: Qualitative Studies of Linear Equations. Applied Mathematical Sciences 116. Springer.
- [50] – **TAYLOR M.E. (1997)**: Partial Differential Equations III: Nonlinear Equations. Applied Mathematical Sciences 117. Springer.
- [51] – **JENNE M. and REUSS M. (1999)**: A Critical Assessment on the Use of $k - \varepsilon$ Turbulence Models for Simulation of the Liquid Flow Induced by Rushton Turbine in Baffled Stirred-Tank Reactors. *Chemical Engineering Science*. **54**; 3921-3941.
- [52] – **ZAKRZEWSKA B. and JAWORSKI Z. (2003)**: CDF Modelling of Turbulent Jacket Heat Transfer in a Rushton Turbine Stirred Vessel. *Chemical Engineering & Technology*; Volume 27; Issue 3; p237-242.
- [53] – **SPALDING D. B. (1962)**: A Novel Finite Difference Formulation for Differential expressions involving both First and Second Derivatives . *International Journal for Numerical Methods in Engineering*; 4551-559.
- [54] – **PATANKAR S. V. (1980)**: Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Sciences; Hemisphere Pub. Corp. McGraw-Hill.
- [55] - **REISS, L.P. et HARNATTY, T.I (1962)**: Measurement of instantaneous rates of mass transfer of small sink of a wall ; *AIChE* ; **8** ; 245-247 ; .
- [56] - **REISS, L.P. et HARNATTY, T.I. (1963)**: An experimental study of unsteady nature of the viscous sublayer; *AIChE*; **9**; 154-160;.
- [57] - **RIBA, J.P. (1978)**: Thèse Doctorat d'Etat; INP Toulouse.
- [58] – **NIKOV I. and DELMAS H. (1992)**: Mechanism of liquid-solid mass transfer and shear stress in three-phase fluidized beds. *Chem. Eng. Sci.*, **42**; 673-681.
- [59] - **VLAEV S.D., NIKOV I. and MARTINOV M. (2004)**: Velocity gradients in impeller-agitated power law liquids at transitional mixing. *Paper at ISMIP5*, Sevilla, Spain, June.
- [60] - **KAMINOYAMA M., SAITO F. and KAMIWANO M. (1990)**: Flow analogy of pseudoplastic liquid in geometrically similar stirred vessels based on numerical analysis. *J. Chem.Eng. (Japan)*, **23**, 214-221.

- [61] - **WICHTERLE, K., KADLEC, M., ZAK, L. and MITSCHKA, P. (1984):** Shear rates on turbine impeller blades,. *Chem. Eng. Commun.*, **26**, 25-32.
- [62] - **PAUL, E., ATIEMO-OBENG, V. and KRESTA, S., (EDS.) (2004):** Handbook of Industrial Mixing-Science and Practice. Wiley. New Jersey.
- [63] - **KELLY, W. and GIGAS, B. (2003):** Using CFD to predict the behavior of power law fluids near axial flow impellers operating in the transitional flow regime. *Chem. Eng. Sci.*, **58**, 2141-2152.
- [64] - **MURTHY SHEKHAR, S. and JAYANTI, S. (2003):** Mixing of power-law fluids using anchors, *A.I.Ch.E.J.*, **49** (1), 30-40.
- [65] - **CHEW, C.M., RISTIC, R.I., REYNOLDS, G.K. and OOI, R.C. (2004):** Characterization of impeller driven and oscillatory mixing by spatial and temporal shear rate distributions”, *Chem.Eng. Sci.*, **59**, 1557-1568.
- [66] - **MABIT, J., FAYOLLE, F. and LEGRAND, J., (2003):** Shear rates investigation in a scraped surface heat Exchanger”, *Chem.Eng. Sci.*, **58**, 4667-4679.
- [67] – **VLAEV S. D., GEORGIEV D., NIKOV I. and ELQOTBI M. (2007):** The CFD Approach for Shear Anaysis of Mixing Reactor: Verification and Examples of Use. *Journal of Engineering Science and Technology*; Vol. 2, N°2, p177-187.
- [68] - **VAN’T RIET K. and SMITH J.M. (1975):** The trailing vortex system produced by Rushton turbine Agitators, *Chem.Eng. Sci.*, **30**, 1093-1105.
- [69] - **METZNER, A. B. and OTTO, R. (1957):** Agitation of non-Newtonian fluids, *A.I.Ch.E. Journal*, **3**, 3-10.
- [70] – **LESUEUR M. (1987):** Turbulence in Fluids: Stochastic and numerical modeling. Martinus Nijhoff Publishers.
- [71] – **LESUEUR M. (1994):** La turbulence. Presses Universitaires de Grenoble.
- [72] – **VLAEV S. D., NIKOV I. and ELQOTBI M. (2005):** Shear deformation rate in viscous batches stirred by a mixed flow double impeller.
- [73] - **VLAEV S. D., MAVROS P., SEICHTER P. and MANN R. (2002):** Operational Characteristics of a New Energy-saving Impeller of Gas-Liquid Mixing. *Can. J. Chem. Eng.*; **80**; 653-659.
- [74] - **MARTINOV M. and VLAEV S.D. (1999):** Average Shear rate and power consumption of a curve blade impeller for shear-thinning fluids. *Bulg. Chem. Commun.*, **31**; 471-476.
- [75] – **NORMAN H., MORUD K., HJERTAGER B.H., TRÄGÄRD C., LARSON G. and ENFORS S.O. (1993):** CFD Modelling and Verification of Flow and

Conversion in $1m^3$ Bioreactor: In Nienow A.W. (Eds) *Proc. 3D Int. Conf. On Bioreactor and Bioprocess Fluid Dynamics*, MEP/BHR Group, Cranfield, p: 241-258.

- [76] - **SCMALZRIEDT S. and REUSS M. (1997)**: Application of CFD to simulations of mixing and biotechnical conversion process in stirred tank bioreactors, *Récent Progrès en Génie des Procédés*, **11**(S1), 171-178.
- [77] - **DAVIDSON K.M., SUSHIL S., EGGLETON C.D. and MARTEN M.R., (2003)**: Using CFD software to estimate circulation time distribution. *Biotechnol. Prog.*, **19**, 1480-1486.
- [78] - **HRISTOV H.V., MANN R., LOSSEV V. and VLAEV S.D. (2004)**: A simplified CFD for three-dimensional analysis of fluid mixing, mass transfer and bioreaction in a fermenter equipped with triple novel geometry impellers, *Food and Bioprocess Processing*, **82**, 21-34.
- [79] - **RUDNIAK L., MACHNIEWSKI P.M., MILEWSKA A. and MOLGA E. (2004)**: CFD modeling of stirred tank chemical reactor: homogenous and heterogeneous reaction systems. *Chem. Eng. Sci.*, **59**, 5233-5239.
- [80] - **VELIZAROV S. and BESCHKOV V. (1998)**: Biotransformation of glucose to free gluconic acid by *Gluconobacter oxydans*: substrate and product inhibition situations, *Proc. Biochem.*, **33** (5), 527-534.
- [81] - **NIKOV I., DONEVA T. and VASSILIEFF C. (1998)**: Catalytic and biocatalytic oxidation of glucose to gluconic acid in a modified three-phase reactor, *Proc. 2nd Int. Symp. on Catalysis in Multiphase Reactors* (Toulouse-France, 16-18 March) pp. 383.
- [82] – **NIENOW A.W., WISDOM D.J. and MIDDLETON J.C. (1978)**: The effect of scale and geometry on flooding, recirculation and power of gassed stirred vessels, *in Second European Conference on Mixing*, BHRA , Fluid Engineering Cranfield; pp. F1-F16.
- [83] – **FRYER P.J., PYLE D.L. and RIELLY C.D. J. (1997)**: *Chemical Engineering for the Food Industry*. Blackie Academy & Professional.
- [84] – **BAKKER A. and VAN DEN AKKER H.E.A. (1994)**: A Computational Model for the Gas-Liquid flow in Stirred Reactors. *Chem. Eng. Res.* **72A**; 594-606.

- [85] – **JENNE M. and REUSS M. (1997):** Fluid Dynamic Modelling and Simulation of Gas-Liquid Flow in Baffled Stirred Tank Reactors. *Récents Progrès en Génie des Procédés*. Vol. 11 ; N° 52, pp. 201-208.
- [86] – **NIENOW A.W., WISDOM D.J. and MIDDLETON J.C. (1978):** The effect of scale and geometry on flooding, recirculation and Power in gassed, stirred vessels, *in Second European Conference on Mixing*, BHRA Fluid Engineering, Cranfield, pp. F1-F16.
- [87] – **CLARKE K.G. and CORREIA L.D.C. (2007):** Oxygen Transfer in Hydrocarbon-aqueous dispersions and its applicability to Alkane bioprocess: *A review. Biochemical Engineering Journal*; **39**, 405-429.
- [88] - **CABANE B. et HENON S. (2003):** Liquides : Solutions, dispersions, émulsions, gels; BELIN.
- [89] – **MAPLE 7 (2001)** de Waterloo Maple Inc.
- [90] – **ELQOTBI M., MONTASTRUC L., VLAEV S.D. and NIKOV I. (2006):** CFD simulation of Gluconic Acid in a Stirred Gas-Liquid Fermenter. *12th European Conference on Mixing: Bologna, 27-30 June 2006*.
- [91] – **SAREDEING R., POUX M. et XUEREB C. (2002):** Les agitateurs auto-aspirants. Partie I : Présentation et principes de fonctionnement. La houille Blanche.
- [92] – **SAREDEING R., POUX M. et XUEREB C. (2002):** Les agitateurs auto-aspirants. Partie II : Dimensionnement et extrapolation. La houille Blanche.
- [93] – **HUBBARD D.W. (1985):** Diffusion and Mixing in non-Newtonian Fluids. *Encyclopedia of Fluid Mechanics*. Vol 6: Complex Flow Phenomena and Modelling; 35-109.
- [94] – **MIDOUX N. (1993):** Mécanique et Rhéologie des fluides en génie chimique. TEC&DOC.
- [95] – **OSWALD P. (2005):** Rhéophysique ou Comment coule la matière. BELIN.
- [96] – **SATO K. (1961):** Rheological Studies of some Fermentation Broths. *J. Ferment. Technol.* **39**, p.347.
-

ANNEXES

ANNEXE 1

**Evolution des valeurs moyennes des grandeurs
impliquées dans le coefficient d'échange
volumique $k_l a$**

Taux de dissipation ε_L (m^2/s^3)		Coefficient k_l (m/s)		Surface volumique a (m^2/m^3)		Coefficient $k_l a$ ($1/s$)	
Valeurs moyennes	Fraction volumique	Valeurs moyennes	Fraction volumique	Valeurs moyennes	Fraction volumique	Valeurs moyennes	Fraction volumique
ε_L	FV_ ε_L	k_l	FV_ k_l	a	FV_ a	$k_l a$	FV_ $k_l a$
0,007813	0,001272	0,000008	0	5,859375	0,044521	0,003906	0,158185
0,023438	0,005708	0,000023	0	17,578125	0,017654	0,011719	0,232298
0,039063	0,049514	0,000039	0	29,296875	0,011006	0,019531	0,307508
0,054688	0,108083	0,000055	0	41,015625	0,008751	0,027344	0,196135
0,070313	0,117368	0,00007	0,000004	52,734375	0,007417	0,035156	0,067616
0,085938	0,0918	0,000086	0,00005	64,453125	0,00694	0,042969	0,019518
0,101563	0,071861	0,000102	0,000112	76,171875	0,006934	0,050781	0,00718
0,117188	0,062348	0,000117	0,000272	87,890625	0,006747	0,058594	0,003583
0,132813	0,054398	0,000133	0,000444	99,609375	0,006505	0,066406	0,001965
0,148438	0,043989	0,000148	0,000897	111,328125	0,005965	0,074219	0,001237
0,164063	0,038398	0,000164	0,002524	123,046875	0,006657	0,082031	0,000837
0,179688	0,033449	0,00018	0,018445	134,765625	0,006942	0,089844	0,00057
0,195313	0,027497	0,000195	0,070294	146,484375	0,00668	0,097656	0,000431
0,210938	0,024888	0,000211	0,142548	158,203125	0,006594	0,105469	0,000343

0,226563	0,021295	0,000227	0,139934	169,921875	0,007446	0,113281	0,000242
0,242188	0,019118	0,000242	0,120121	181,640625	0,008128	0,121094	0,000196
0,257813	0,017872	0,000258	0,108383	193,359375	0,00886	0,128906	0,000143
0,273438	0,015224	0,000273	0,088569	205,078125	0,009752	0,136719	0,000122
0,289063	0,014109	0,000289	0,069567	216,796875	0,011171	0,144531	0,000106
0,304688	0,012914	0,000305	0,056546	228,515625	0,01265	0,152344	0,000087
0,320313	0,012156	0,00032	0,046903	240,234375	0,013633	0,160156	0,000068
0,335938	0,010866	0,000336	0,038376	251,953125	0,016074	0,167969	0,000073
0,351563	0,010315	0,000352	0,022332	263,671875	0,018655	0,175781	0,000059
0,367188	0,009705	0,000367	0,010813	275,390625	0,021099	0,183594	0,00006
0,382813	0,008245	0,000383	0,008265	287,109375	0,023594	0,191406	0,00005
0,398438	0,008145	0,000398	0,007169	298,828125	0,026412	0,199219	0,000047
0,414063	0,007346	0,000414	0,005542	310,546875	0,028191	0,207031	0,000043
0,429688	0,006996	0,00043	0,0048	322,265625	0,03132	0,214844	0,000035
0,445313	0,0058	0,000445	0,004082	333,984375	0,033809	0,222656	0,000032
0,460938	0,004913	0,000461	0,003328	345,703125	0,034677	0,230469	0,00003
0,476563	0,004162	0,000477	0,002757	357,421875	0,034395	0,238281	0,000027
0,492188	0,003369	0,000492	0,002345	369,140625	0,033865	0,246094	0,000025
0,507813	0,002578	0,000508	0,002105	380,859375	0,032308	0,253906	0,000021
0,523438	0,002149	0,000523	0,001802	392,578125	0,031946	0,261719	0,000021
0,539063	0,00189	0,000539	0,001719	404,296875	0,030786	0,269531	0,000017
0,554688	0,001837	0,000555	0,001504	416,015625	0,028734	0,277344	0,000016
0,570313	0,001702	0,00057	0,001414	427,734375	0,028341	0,285156	0,000014
0,585938	0,001649	0,000586	0,001274	439,453125	0,026726	0,292969	0,000013
0,601563	0,001352	0,000602	0,001194	451,171875	0,025298	0,300781	0,000013
0,617188	0,001575	0,000617	0,001096	462,890625	0,023513	0,308594	0,000012
0,632813	0,001295	0,000633	0,000924	474,609375	0,020877	0,316406	0,000011
0,648438	0,001226	0,000648	0,000824	486,328125	0,019804	0,324219	0,00001
0,664063	0,001244	0,000664	0,000839	498,046875	0,017766	0,332031	0,000009

0,679688	0,001128	0,00068	0,000745	509,765625	0,01617	0,339844	0,000008
0,695313	0,001063	0,000695	0,00066	521,484375	0,015437	0,347656	0,000007
0,710938	0,001058	0,000711	0,000621	533,203125	0,013734	0,355469	0,000007
0,726563	0,001107	0,000727	0,000599	544,921875	0,012244	0,363281	0,000006
0,742188	0,001126	0,000742	0,000516	556,640625	0,010614	0,371094	0,000007
0,757813	0,000973	0,000758	0,000478	568,359375	0,010008	0,378906	0,000007
0,773438	0,000893	0,000773	0,000448	580,078125	0,00926	0,386719	0,000006
0,789063	0,000896	0,000789	0,000426	591,796875	0,008038	0,394531	0,000005
0,804688	0,000879	0,000805	0,000376	603,515625	0,007384	0,402344	0,000004
0,820313	0,000844	0,00082	0,00034	615,234375	0,00645	0,410156	0,000005
0,835938	0,000696	0,000836	0,000339	626,953125	0,005662	0,417969	0,000004
0,851563	0,000721	0,000852	0,000286	638,671875	0,005252	0,425781	0,000004
0,867188	0,000794	0,000867	0,000292	650,390625	0,005057	0,433594	0,000004
0,882813	0,000654	0,000883	0,000267	662,109375	0,004654	0,441406	0,000003
0,898438	0,000673	0,000898	0,00025	673,828125	0,003915	0,449219	0,000003
0,914063	0,000601	0,000914	0,000223	685,546875	0,003803	0,457031	0,000003
0,929688	0,000572	0,00093	0,000201	697,265625	0,00359	0,464844	0,000003
0,945313	0,000572	0,000945	0,000181	708,984375	0,003308	0,472656	0,000003
0,960938	0,000538	0,000961	0,000179	720,703125	0,003172	0,480469	0,000003
0,976563	0,000539	0,000977	0,000164	732,421875	0,003191	0,488281	0,000003
0,992188	0,000054	0,000992	0,002292	744,140625	0,039175	0,496094	0,000061
Valeurs moyennes	Fraction volumique	Valeurs moyennes	Fraction volumique	Valeurs moyennes	Fraction volumique	Valeurs moyennes	Fraction volumique
ε_L	FV_ ε_L	k_l	FV_ k_l	a	FV_ a	$k_l a$	FV_ $k_l a$

ANNEXE 2

INTEGRATION TOTALE

Tableau des calculs terminaux

(136 lignes parmi 13496 obtenues avec 13496 itérations)

t : Durée de la fermentation	μ_L : Viscosité de la phase liquide	$\mu_0 = 0,001003 Pa.s$
$\dot{\gamma}$: Taux de cisaillement évalué au voisinage de la turbine (dans la capsule) et en dehors de la capsule.		
ε_L : Taux de dissipation visqueuse.	k_l : Coefficient de transfert de masse.	
a : Surface volumique d'échange.	$k_l a$: Coefficient d'échange volumique	
μ_x : Vitesse de la réaction biologique.	τ_x : Taux de production de la culture.	
X : Culture	S : Substrat	O_d : Oxygène dissout
		P : Produit

Autres conditions :

Cuve Standard agitée par turbine Rushton.	Volume.....: 5,082 litres
Vitesses de rotation de la turbine.....: 300 rpm	
Débit d'air entrant par le distributeur.....: 8 l/min	Diamètre des bulles constant.....: 1 mm
Rétention gazeuse.....: 10% (0,1)	Concentration de saturation en oxygène dissout...: 6,75 mg/l

A2-1

**Valeurs moyennes des champs des grandeurs hydrodynamiques et biologiques du modèle
intégral de CONTOIS avec pour modèle de viscosité : $\mu = \mu_0 (1 + X^{2,26})$**

		Grandeurs hydrodynamiques							Grandeurs biologiques						
		UDS 9	UDS13	Dans capsule	hors capsule	UDS 11	UDS 12	UDS 10	UDS 5	UDS 4	UDS 6	UDS 0	UDS1	UDS2	UDS 3
N° de ligne en fichier (Fluent)	Temps	Viscosité biomasse	Taux de Cisaillement (*)		Taux de dissipation	Coefficient de transfert	Aire volumique	Coefficient d'échange	Vitesse locale	Taux culture	CULTURE	SUBSTRAT	O2 dissout	Produit	
	t	μ_L	$\dot{\gamma}$		ε_L	k_t	a	$k_t a$	μ_x	τ_x	X	S	O_d	P	
	(h)	(Pa.s)	(s^{-1})		(m^2/s^3)	(mm/s)	(m^2/m^3)	(s^{-1})	(s^{-1})	$((g/l)/s)$	(g/l)	(g/l)	(mg/l)	(g/l)	
1	0,00	0,00333	86,47	8,92	0,18036	0,2543	568,51	0,0334	9,99E-05	1,98E-05	0,218	150,01	6,750	0,000	
100	0,44	0,00217	85,52	8,93	0,17843	0,2523	568,53	0,0331	9,49E-05	1,05E-05	0,248	149,92	6,488	0,049	
200	0,89	0,00195	84,74	8,91	0,17663	0,2508	568,55	0,0328	9,40E-05	1,31E-05	0,268	149,80	6,442	0,109	
300	1,33	0,00177	84,07	8,89	0,17487	0,2496	568,57	0,0327	9,31E-05	1,53E-05	0,282	149,59	6,401	0,177	
400	1,78	0,00163	83,55	8,83	0,17314	0,2485	568,59	0,0326	9,24E-05	1,75E-05	0,296	149,27	6,363	0,250	
500	2,22	0,00155	83,17	8,77	0,17148	0,2472	568,61	0,0325	9,15E-05	2,00E-05	0,317	148,91	6,314	0,334	
600	2,67	0,00151	82,86	8,71	0,16991	0,2457	568,63	0,0324	9,05E-05	2,29E-05	0,348	148,52	6,237	0,433	
700	3,11	0,00152	82,63	8,65	0,16841	0,2438	568,65	0,0322	8,90E-05	2,64E-05	0,390	148,10	6,133	0,554	
800	3,56	0,00154	82,44	8,59	0,16699	0,2415	568,67	0,0319	8,72E-05	3,05E-05	0,442	147,67	6,011	0,699	
900	4,00	0,00158	82,37	8,53	0,16563	0,2388	568,69	0,0316	8,52E-05	3,49E-05	0,502	147,24	5,874	0,869	
1000	4,44	0,00164	82,35	8,48	0,16434	0,2357	568,71	0,0311	8,27E-05	3,95E-05	0,567	146,79	5,733	1,061	
1100	4,89	0,00171	82,27	8,43	0,16310	0,2322	568,73	0,0307	8,02E-05	4,42E-05	0,638	146,31	5,597	1,274	
1200	5,33	0,00180	82,15	8,40	0,16193	0,2283	568,75	0,0301	7,76E-05	4,90E-05	0,714	145,81	5,460	1,507	
1300	5,78	0,00191	82,03	8,37	0,16080	0,2240	568,77	0,0295	7,50E-05	5,36E-05	0,794	145,29	5,322	1,760	

1400	6,22	0,00205	81,97	8,37	0,15973	0,2194	568,79	0,0289	7,23E-05	5,80E-05	0,879	144,73	5,181	2,030
1500	6,67	0,00222	81,98	8,40	0,15870	0,2145	568,81	0,0283	6,96E-05	6,22E-05	0,967	144,17	5,041	2,318
1600	7,11	0,00243	82,08	8,44	0,15771	0,2093	568,83	0,0276	6,69E-05	6,61E-05	1,060	143,57	4,906	2,623
1700	7,56	0,00266	82,26	8,51	0,15676	0,2040	568,86	0,0269	6,43E-05	6,99E-05	1,156	142,97	4,773	2,944
1800	8,00	0,00294	82,54	8,56	0,15584	0,1985	568,88	0,0262	6,17E-05	7,34E-05	1,256	142,36	4,639	3,281
1900	8,44	0,00326	82,84	8,62	0,15495	0,1929	568,90	0,0255	5,92E-05	7,67E-05	1,360	141,73	4,505	3,633
2000	8,89	0,00362	83,43	8,71	0,15408	0,1872	568,92	0,0247	5,66E-05	7,96E-05	1,466	141,09	4,368	4,001
2100	9,33	0,00402	84,13	8,82	0,15325	0,1816	568,94	0,0240	5,41E-05	8,23E-05	1,576	140,44	4,231	4,384
2200	9,78	0,00448	85,03	8,96	0,15246	0,1761	568,97	0,0232	5,16E-05	8,46E-05	1,688	139,77	4,092	4,780
2300	10,22	0,00499	86,05	9,14	0,15170	0,1708	568,99	0,0225	4,91E-05	8,65E-05	1,803	139,09	3,953	5,188
2400	10,67	0,00555	87,09	9,34	0,15099	0,1657	569,02	0,0218	4,67E-05	8,79E-05	1,919	138,40	3,814	5,606
2500	11,11	0,00616	88,03	9,53	0,15033	0,1608	569,04	0,0212	4,44E-05	8,90E-05	2,037	137,70	3,678	6,034
2600	11,56	0,00683	88,92	9,66	0,14971	0,1563	569,06	0,0206	4,21E-05	8,96E-05	2,155	136,99	3,543	6,470
2700	12,00	0,00755	89,60	9,72	0,14915	0,1520	569,09	0,0200	3,99E-05	8,98E-05	2,273	136,28	3,412	6,914
2800	12,44	0,00833	90,32	9,74	0,14863	0,1479	569,12	0,0195	3,78E-05	8,97E-05	2,391	135,56	3,285	7,363
2900	12,89	0,00915	90,95	9,74	0,14816	0,1442	569,14	0,0190	3,58E-05	8,92E-05	2,509	134,84	3,161	7,819
3000	13,33	0,01001	91,36	9,73	0,14774	0,1407	569,17	0,0185	3,39E-05	8,85E-05	2,626	134,10	3,041	8,281
3100	13,78	0,01093	91,62	9,72	0,14736	0,1374	569,19	0,0181	3,20E-05	8,75E-05	2,743	133,35	2,926	8,747
3200	14,22	0,01188	91,90	9,70	0,14703	0,1343	569,22	0,0177	3,03E-05	8,62E-05	2,858	132,60	2,813	9,218
3300	14,67	0,01287	92,11	9,67	0,14674	0,1314	569,25	0,0173	2,86E-05	8,48E-05	2,972	131,83	2,706	9,692
3400	15,11	0,01390	92,15	9,63	0,14649	0,1288	569,28	0,0170	2,70E-05	8,32E-05	3,085	131,07	2,602	10,169
3500	15,56	0,01496	92,25	9,59	0,14628	0,1263	569,31	0,0167	2,55E-05	8,14E-05	3,196	130,30	2,502	10,649
3600	16,00	0,01606	92,29	9,55	0,14612	0,1239	569,33	0,0164	2,41E-05	7,95E-05	3,305	129,54	2,406	11,131
3700	16,44	0,01717	92,30	9,51	0,14599	0,1218	569,36	0,0161	2,27E-05	7,76E-05	3,411	128,78	2,315	11,613
3800	16,89	0,01831	92,31	9,47	0,14589	0,1197	569,39	0,0158	2,15E-05	7,56E-05	3,516	128,01	2,227	12,097
3900	17,33	0,01947	92,33	9,43	0,14584	0,1178	569,42	0,0156	2,03E-05	7,35E-05	3,619	127,25	2,144	12,580
4000	17,78	0,02064	92,37	9,39	0,14581	0,1161	569,45	0,0153	1,92E-05	7,14E-05	3,719	126,49	2,064	13,064
4100	18,22	0,02182	92,37	9,35	0,14580	0,1144	569,48	0,0151	1,81E-05	6,93E-05	3,816	125,72	1,988	13,547
4200	18,67	0,02300	92,34	9,31	0,14582	0,1128	569,51	0,0149	1,72E-05	6,72E-05	3,911	124,96	1,915	14,029
4300	19,12	0,02422	92,29	9,27	0,14585	0,1113	569,54	0,0147	1,62E-05	6,51E-05	4,006	124,19	1,844	14,521
4400	19,56	0,02542	92,28	9,23	0,14590	0,1099	569,57	0,0145	1,54E-05	6,30E-05	4,096	123,42	1,778	15,002
4500	20,01	0,02662	92,26	9,19	0,14596	0,1086	569,60	0,0144	1,46E-05	6,10E-05	4,185	122,66	1,714	15,483
4600	20,45	0,02782	92,20	9,15	0,14602	0,1074	569,64	0,0142	1,38E-05	5,90E-05	4,270	121,90	1,654	15,962
4700	20,90	0,02901	92,13	9,11	0,14609	0,1063	569,67	0,0141	1,31E-05	5,71E-05	4,354	121,14	1,596	16,441

4800	21,34	0,03020	92,06	9,07	0,14616	0,1052	569,70	0,0139	1,24E-05	5,51E-05	4,435	120,38	1,541	16,918
4900	21,79	0,03139	92,01	9,03	0,14623	0,1041	569,73	0,0138	1,18E-05	5,33E-05	4,513	119,63	1,487	17,393
5000	22,23	0,03256	91,97	8,99	0,14630	0,1032	569,76	0,0137	1,12E-05	5,14E-05	4,590	118,88	1,437	17,868
5100	22,68	0,03373	91,92	8,95	0,14637	0,1022	569,79	0,0135	1,06E-05	4,97E-05	4,665	118,13	1,387	18,341
5200	23,12	0,03489	91,85	8,91	0,14643	0,1013	569,83	0,0134	1,01E-05	4,80E-05	4,737	117,38	1,341	18,814
5300	23,56	0,03604	91,80	8,87	0,14649	0,1005	569,86	0,0133	9,61E-06	4,63E-05	4,808	116,64	1,296	19,286
5400	24,01	0,03719	91,72	8,83	0,14654	0,0997	569,89	0,0132	9,13E-06	4,47E-05	4,877	115,90	1,254	19,759
5500	24,45	0,03833	91,67	8,80	0,14659	0,0989	569,92	0,0131	8,70E-06	4,32E-05	4,945	115,16	1,212	20,230
5600	24,90	0,03946	91,62	8,76	0,14663	0,0982	569,96	0,0130	8,28E-06	4,16E-05	5,010	114,42	1,173	20,701
5700	25,34	0,04057	91,54	8,72	0,14666	0,0974	569,99	0,0129	7,90E-06	4,02E-05	5,074	113,68	1,135	21,170
5800	25,79	0,04167	91,46	8,68	0,14668	0,0968	570,02	0,0128	7,53E-06	3,88E-05	5,136	112,95	1,100	21,639
5900	26,23	0,04276	91,39	8,65	0,14669	0,0961	570,05	0,0127	7,19E-06	3,75E-05	5,197	112,22	1,065	22,107
6000	26,68	0,04384	91,32	8,61	0,14669	0,0955	570,08	0,0127	6,86E-06	3,62E-05	5,256	111,50	1,033	22,575
6100	27,12	0,04491	91,26	8,57	0,14668	0,0949	570,12	0,0126	6,56E-06	3,50E-05	5,314	110,77	1,001	23,042
6200	27,56	0,04597	91,19	8,54	0,14666	0,0943	570,15	0,0125	6,26E-06	3,38E-05	5,370	110,05	0,971	23,509
6300	28,01	0,04703	91,11	8,50	0,14664	0,0937	570,18	0,0124	5,99E-06	3,27E-05	5,426	109,33	0,942	23,976
6400	28,45	0,04807	91,04	8,47	0,14660	0,0932	570,21	0,0124	5,73E-06	3,15E-05	5,480	108,61	0,915	24,444
6500	28,90	0,04910	90,96	8,43	0,14655	0,0926	570,24	0,0123	5,49E-06	3,05E-05	5,533	107,89	0,887	24,912
6600	29,34	0,05013	90,89	8,40	0,14649	0,0921	570,28	0,0122	5,25E-06	2,95E-05	5,585	107,17	0,863	25,380
6700	29,80	0,05117	90,82	8,36	0,14642	0,0916	570,31	0,0122	5,04E-06	2,85E-05	5,637	106,46	0,836	25,858
6800	30,24	0,05218	90,74	8,33	0,14634	0,0911	570,34	0,0121	4,83E-06	2,76E-05	5,687	105,74	0,814	26,327
6900	30,68	0,05319	90,64	8,30	0,14625	0,0907	570,37	0,0120	4,63E-06	2,67E-05	5,736	105,02	0,790	26,797
7000	31,13	0,05418	90,53	8,26	0,14616	0,0902	570,40	0,0120	4,45E-06	2,59E-05	5,785	104,31	0,770	27,268
7100	31,57	0,05518	90,45	8,23	0,14606	0,0898	570,44	0,0119	4,27E-06	2,50E-05	5,832	103,59	0,748	27,739
7200	32,02	0,05616	90,35	8,20	0,14596	0,0893	570,47	0,0119	4,11E-06	2,43E-05	5,879	102,87	0,729	28,211
7300	32,46	0,05714	90,27	8,17	0,14584	0,0889	570,50	0,0118	3,94E-06	2,35E-05	5,925	102,15	0,709	28,684
7400	32,91	0,05811	90,20	8,13	0,14573	0,0885	570,53	0,0118	3,79E-06	2,28E-05	5,970	101,43	0,692	29,157
7500	33,35	0,05908	90,10	8,10	0,14560	0,0881	570,56	0,0117	3,64E-06	2,20E-05	6,015	100,71	0,672	29,632
7600	33,80	0,06005	90,02	8,07	0,14547	0,0877	570,59	0,0117	3,51E-06	2,14E-05	6,059	99,98	0,657	30,107
7700	34,24	0,06101	89,93	8,04	0,14534	0,0873	570,62	0,0116	3,38E-06	2,07E-05	6,102	99,25	0,638	30,584
7800	34,68	0,06196	89,84	8,01	0,14520	0,0869	570,66	0,0116	3,25E-06	2,01E-05	6,145	98,53	0,624	31,062
7900	35,13	0,06291	89,76	7,98	0,14505	0,0866	570,69	0,0115	3,13E-06	1,94E-05	6,187	97,78	0,607	31,540
8000	35,57	0,06385	89,66	7,95	0,14490	0,0862	570,72	0,0115	3,02E-06	1,89E-05	6,229	97,05	0,595	32,019
8100	36,02	0,06480	89,58	7,92	0,14474	0,0858	570,75	0,0114	2,91E-06	1,83E-05	6,270	96,32	0,578	32,500

8200	36,46	0,06573	89,52	7,89	0,14458	0,0855	570,78	0,0114	2,81E-06	1,78E-05	6,311	95,58	0,568	32,981
8300	36,91	0,06667	89,45	7,86	0,14442	0,0852	570,81	0,0113	2,71E-06	1,72E-05	6,351	94,85	0,551	33,464
8400	37,35	0,06760	89,35	7,84	0,14425	0,0848	570,84	0,0113	2,61E-06	1,67E-05	6,391	94,11	0,543	33,948
8500	37,80	0,06852	89,29	7,81	0,14408	0,0845	570,87	0,0112	2,52E-06	1,62E-05	6,430	93,37	0,526	34,433
8600	38,24	0,06945	89,21	7,78	0,14391	0,0842	570,90	0,0112	2,43E-06	1,58E-05	6,469	92,63	0,520	34,919
8700	38,68	0,07037	89,12	7,75	0,14373	0,0838	570,93	0,0112	2,35E-06	1,53E-05	6,507	91,88	0,503	35,407
8800	39,13	0,07129	89,06	7,72	0,14355	0,0835	570,96	0,0111	2,27E-06	1,49E-05	6,545	91,14	0,497	35,896
8900	39,57	0,07221	88,98	7,70	0,14336	0,0832	570,99	0,0111	2,19E-06	1,45E-05	6,583	90,39	0,481	36,386
9000	40,02	0,07312	88,91	7,67	0,14317	0,0829	571,02	0,0110	2,11E-06	1,40E-05	6,620	89,64	0,477	36,877
9100	40,47	0,07406	88,88	7,64	0,14298	0,0826	571,05	0,0110	2,04E-06	1,36E-05	6,658	88,89	0,461	37,380
9200	40,92	0,07497	88,79	7,62	0,14279	0,0823	571,09	0,0110	2,01E-06	1,35E-05	6,695	88,14	0,449	37,875
9300	41,36	0,07589	88,72	7,59	0,14259	0,0820	571,12	0,0109	1,90E-06	1,28E-05	6,732	87,38	0,441	38,371
9400	41,80	0,07681	88,65	7,56	0,14240	0,0818	571,15	0,0109	1,88E-06	1,27E-05	6,768	86,62	0,431	38,869
9500	42,25	0,07773	88,58	7,54	0,14220	0,0815	571,17	0,0108	1,78E-06	1,21E-05	6,804	85,86	0,422	39,370
9600	42,69	0,07865	88,51	7,51	0,14200	0,0812	571,20	0,0108	1,76E-06	1,21E-05	6,840	85,10	0,414	39,872
9700	43,14	0,07957	88,47	7,49	0,14181	0,0809	571,23	0,0108	1,66E-06	1,14E-05	6,876	84,34	0,405	40,376
9800	43,58	0,08050	88,39	7,46	0,14161	0,0806	571,26	0,0107	1,65E-06	1,14E-05	6,912	83,57	0,397	40,883
9900	44,03	0,08143	88,32	7,44	0,14142	0,0804	571,29	0,0107	1,56E-06	1,08E-05	6,948	82,79	0,389	41,391
10000	44,47	0,08236	88,25	7,41	0,14122	0,0801	571,32	0,0107	1,55E-06	1,08E-05	6,983	82,01	0,381	41,902
10100	44,92	0,08329	88,19	7,39	0,14103	0,0799	571,35	0,0106	1,45E-06	1,02E-05	7,018	81,23	0,375	42,415
10200	45,36	0,08423	88,12	7,36	0,14083	0,0796	571,38	0,0106	1,45E-06	1,02E-05	7,054	80,45	0,366	42,929
10300	45,80	0,08517	88,05	7,34	0,14064	0,0793	571,41	0,0106	1,37E-06	9,72E-06	7,089	79,67	0,361	43,446
10400	46,25	0,08611	87,96	7,31	0,14045	0,0791	571,44	0,0105	1,36E-06	9,69E-06	7,124	78,88	0,353	43,965
10500	46,69	0,08705	87,89	7,29	0,14026	0,0788	571,47	0,0105	1,29E-06	9,21E-06	7,158	78,09	0,348	44,485
10600	47,14	0,08799	87,82	7,27	0,14007	0,0786	571,50	0,0105	1,29E-06	9,25E-06	7,193	77,29	0,340	45,008
10700	47,58	0,08894	87,75	7,24	0,13989	0,0784	571,53	0,0104	1,22E-06	8,79E-06	7,228	76,49	0,341	45,532
10800	48,03	0,08989	87,68	7,22	0,13970	0,0781	571,55	0,0104	1,21E-06	8,78E-06	7,262	75,69	0,330	46,059
10900	48,47	0,09085	87,62	7,20	0,13952	0,0779	571,58	0,0104	1,15E-06	8,38E-06	7,296	74,89	0,328	46,588
11000	48,92	0,09181	87,56	7,17	0,13934	0,0777	571,61	0,0104	1,14E-06	8,34E-06	7,331	74,08	0,321	47,119
11100	49,36	0,09277	87,51	7,15	0,13917	0,0774	571,64	0,0103	1,09E-06	8,00E-06	7,365	73,27	0,319	47,652
11200	49,80	0,09374	87,47	7,13	0,13899	0,0772	571,67	0,0103	1,08E-06	7,98E-06	7,399	72,45	0,315	48,188
11300	50,25	0,09472	87,41	7,11	0,13882	0,0770	571,70	0,0103	1,03E-06	7,63E-06	7,434	71,63	0,312	48,727
11400	50,69	0,09570	87,34	7,08	0,13865	0,0767	571,72	0,0102	1,03E-06	7,64E-06	7,468	70,81	0,304	49,268
11500	51,14	0,09669	87,30	7,06	0,13849	0,0765	571,75	0,0102	9,73E-07	7,29E-06	7,503	69,97	0,305	49,813

11600	51,58	0,09769	87,24	7,04	0,13833	0,0763	571,78	0,0102	9,75E-07	7,33E-06	7,537	69,14	0,296	50,359
11700	52,03	0,09868	87,19	7,02	0,13817	0,0761	571,81	0,0102	9,27E-07	7,01E-06	7,571	68,30	0,299	50,908
11800	52,47	0,09969	87,12	7,00	0,13802	0,0759	571,84	0,0101	9,24E-07	7,01E-06	7,605	67,46	0,290	51,460
11900	52,92	0,10070	87,07	6,97	0,13787	0,0757	571,86	0,0101	8,86E-07	6,76E-06	7,640	66,62	0,293	52,013
12000	53,36	0,10171	87,01	6,95	0,13773	0,0755	571,89	0,0101	8,87E-07	6,79E-06	7,674	65,77	0,285	52,569
12100	53,80	0,10273	86,96	6,93	0,13759	0,0753	571,92	0,0100	8,46E-07	6,51E-06	7,708	64,91	0,287	53,128
12200	54,25	0,10375	86,90	6,91	0,13746	0,0750	571,95	0,0100	8,41E-07	6,49E-06	7,742	64,05	0,281	53,688
12300	54,69	0,10478	86,85	6,89	0,13733	0,0748	571,97	0,0100	8,03E-07	6,23E-06	7,776	63,19	0,280	54,251
12400	55,14	0,10581	86,80	6,87	0,13720	0,0747	572,00	0,0100	7,99E-07	6,22E-06	7,810	62,33	0,275	54,816
12500	55,58	0,10684	86,74	6,85	0,13708	0,0745	572,03	0,0099	6,78E-07	5,32E-06	7,844	61,46	0,359	55,383
12600	56,03	0,10789	86,69	6,83	0,13696	0,0743	572,05	0,0099	8,77E-07	6,88E-06	7,879	60,58	0,236	55,954
12700	56,47	0,10895	86,63	6,81	0,13684	0,0741	572,08	0,0099	6,54E-07	5,18E-06	7,913	59,71	0,358	56,527
12800	56,92	0,11001	86,57	6,79	0,13673	0,0739	572,11	0,0099	8,30E-07	6,56E-06	7,947	58,82	0,230	57,102
12900	57,36	0,11107	86,50	6,77	0,13662	0,0737	572,14	0,0098	6,26E-07	5,01E-06	7,982	57,94	0,351	57,680
13000	57,80	0,11214	86,47	6,75	0,13652	0,0735	572,16	0,0098	7,93E-07	6,32E-06	8,016	57,05	0,231	58,261
13100	58,25	0,11322	86,42	6,73	0,13642	0,0733	572,19	0,0098	5,91E-07	4,76E-06	8,050	56,15	0,347	58,844
13200	58,69	0,11430	86,37	6,71	0,13633	0,0731	572,22	0,0098	7,52E-07	6,04E-06	8,084	55,24	0,227	59,430
13300	59,14	0,11538	86,32	6,69	0,13624	0,0730	572,24	0,0097	5,60E-07	4,56E-06	8,118	54,33	0,345	60,017
13400	59,58	0,11646	86,29	6,67	0,13615	0,0728	572,27	0,0097	7,13E-07	5,77E-06	8,152	53,43	0,222	60,608
13496	60,00	0,11749	86,25	6,65	0,13608	0,0726	572,29	0,0097	8,01E-07	6,53E-06	8,184	52,48	0,296	61,165
	t	μ_L	$\dot{\gamma}$	ϵ_L	k_l	a	$k_l a$	μ_x	τ_x	X	S	O_d	P	
	(h)	(Pa.s)	(s ⁻¹)	(m ² /s ³)	(mm/s)	(m ² /m ³)	(s ⁻¹)	(s ⁻¹)	((g/l)/s)	(g/l)	(g/l)	(mg/l)	(g/l)	

**Valeurs moyennes des champs des grandeurs hydrodynamiques et biologiques du modèle
intégral de MONOD avec pour modèle de viscosité $\mu = \mu_0(1 + X^{2,26})$**

		Grandeurs hydrodynamiques							Grandeurs biologiques						
		UDS 9	UDS13	Dans capsule	hors capsule	UDS 11	UDS 12	UDS 10	UDS 5	UDS 4	UDS 6	UDS 0	UDS1	UDS2	UDS 3
N° de ligne en fichier (Fluent)	Temps	Viscosité biomasse	Taux de Cisaillement (*)		Taux dissipation	Coefficient de transfert	Aire volumique	Coefficient d'échange	Vitesse locale	Taux culture	CULTURE	SUBSTRAT	O2 dissout	Produit	
	t	μ_L	$\dot{\gamma}$		ε_L	k_l	a	$k_l a$	μ_x	τ_x	X	S	O_d	P	
	(h)	(Pa.s)	(s ⁻¹)		(m ² /s ³)	(mm/s)	(m ² /m ³)	(s ⁻¹)	(s ⁻¹)	((g/l)/s)	(g/l)	(g/l)	(mg/l)	(g/l)	
1	0,00	0,00333	86,47	8,92	0,17997	0,2543	568,51	0,0334	6,44E-05	1,06E-05	0,218	150,00	6,750	0,000	
100	0,44	0,00218	85,52	8,93	0,17843	0,2523	568,53	0,0331	6,28E-05	9,94E-06	0,248	149,93	6,473	0,048	
200	0,89	0,00197	84,74	8,91	0,17664	0,2509	568,55	0,0329	6,26E-05	1,19E-05	0,266	149,82	6,430	0,107	
300	1,33	0,00179	84,07	8,89	0,17489	0,2498	568,57	0,0327	6,24E-05	1,33E-05	0,277	149,62	6,399	0,170	
400	1,78	0,00165	83,54	8,83	0,17317	0,2488	568,59	0,0326	6,23E-05	1,43E-05	0,288	149,32	6,375	0,236	
500	2,22	0,00155	83,17	8,77	0,17152	0,2477	568,61	0,0326	6,21E-05	1,54E-05	0,303	148,98	6,345	0,307	
600	2,67	0,00151	82,83	8,71	0,16994	0,2465	568,63	0,0325	6,18E-05	1,68E-05	0,327	148,61	6,296	0,389	
700	3,11	0,00149	82,59	8,64	0,16844	0,2449	568,65	0,0324	6,14E-05	1,87E-05	0,360	148,23	6,225	0,489	
800	3,56	0,00150	82,37	8,59	0,16701	0,2432	568,67	0,0322	6,09E-05	2,10E-05	0,400	147,84	6,137	0,606	
900	4,00	0,00152	82,22	8,52	0,16565	0,2412	568,69	0,0319	6,03E-05	2,37E-05	0,446	147,45	6,040	0,741	
1000	4,44	0,00155	82,11	8,47	0,16434	0,2390	568,71	0,0316	5,96E-05	2,66E-05	0,495	147,06	5,936	0,892	
1100	4,89	0,00158	81,98	8,42	0,16309	0,2366	568,73	0,0313	5,90E-05	2,96E-05	0,547	146,65	5,832	1,056	
1200	5,33	0,00162	81,83	8,38	0,16190	0,2340	568,75	0,0309	5,83E-05	3,26E-05	0,600	146,23	5,725	1,232	

1300	5,78	0,00167	81,68	8,35	0,16076	0,2311	568,77	0,0305	5,75E-05	3,57E-05	0,656	145,80	5,616	1,420
1400	6,22	0,00174	81,54	8,33	0,15967	0,2281	568,79	0,0301	5,68E-05	3,88E-05	0,713	145,35	5,508	1,620
1500	6,67	0,00182	81,44	8,33	0,15862	0,2248	568,81	0,0297	5,61E-05	4,18E-05	0,774	144,88	5,400	1,831
1600	7,11	0,00192	81,40	8,34	0,15761	0,2213	568,83	0,0292	5,53E-05	4,48E-05	0,837	144,40	5,292	2,055
1700	7,56	0,00204	81,40	8,35	0,15663	0,2175	568,85	0,0287	5,46E-05	4,78E-05	0,903	143,91	5,185	2,292
1800	8,00	0,00217	81,48	8,36	0,15568	0,2136	568,87	0,0282	5,39E-05	5,09E-05	0,972	143,42	5,079	2,541
1900	8,45	0,00233	81,56	8,36	0,15473	0,2093	568,90	0,0277	5,31E-05	5,41E-05	1,045	142,91	4,969	2,809
2000	8,90	0,00251	81,74	8,36	0,15383	0,2049	568,92	0,0271	5,24E-05	5,74E-05	1,121	142,40	4,857	3,086
2100	9,34	0,00272	81,97	8,38	0,15295	0,2003	568,94	0,0265	5,16E-05	6,07E-05	1,200	141,87	4,740	3,379
2200	9,79	0,00296	82,30	8,40	0,15210	0,1955	568,96	0,0258	5,08E-05	6,41E-05	1,284	141,34	4,617	3,687
2300	10,24	0,00324	82,79	8,45	0,15126	0,1905	568,98	0,0251	5,00E-05	6,77E-05	1,374	140,78	4,485	4,019
2400	10,68	0,00356	83,43	8,54	0,15048	0,1855	569,01	0,0245	4,91E-05	7,12E-05	1,467	140,22	4,347	4,362
2500	11,13	0,00392	84,28	8,66	0,14972	0,1804	569,03	0,0238	4,82E-05	7,46E-05	1,564	139,65	4,203	4,721
2600	11,57	0,00434	85,15	8,82	0,14900	0,1754	569,05	0,0231	4,72E-05	7,80E-05	1,666	139,06	4,052	5,098
2700	12,02	0,00482	86,09	9,02	0,14831	0,1705	569,08	0,0225	4,61E-05	8,12E-05	1,772	138,47	3,895	5,492
2800	12,46	0,00535	87,16	9,22	0,14767	0,1656	569,10	0,0218	4,50E-05	8,43E-05	1,882	137,86	3,733	5,903
2900	12,91	0,00595	88,33	9,41	0,14707	0,1608	569,13	0,0212	4,38E-05	8,71E-05	1,996	137,23	3,566	6,332
3000	13,35	0,00662	89,37	9,53	0,14651	0,1562	569,15	0,0206	4,25E-05	8,96E-05	2,115	136,59	3,394	6,779
3100	13,80	0,00737	90,16	9,59	0,14600	0,1518	569,18	0,0200	4,11E-05	9,19E-05	2,237	135,93	3,218	7,243
3200	14,24	0,00820	90,75	9,62	0,14555	0,1475	569,20	0,0194	3,97E-05	9,38E-05	2,364	135,25	3,040	7,725
3300	14,68	0,00911	91,22	9,62	0,14515	0,1433	569,23	0,0189	3,82E-05	9,53E-05	2,494	134,56	2,861	8,224
3400	15,13	0,01011	91,55	9,62	0,14480	0,1394	569,25	0,0184	3,66E-05	9,64E-05	2,627	133,84	2,682	8,739
3500	15,57	0,01120	91,79	9,62	0,14453	0,1357	569,28	0,0179	3,50E-05	9,70E-05	2,763	133,12	2,504	9,267
3600	16,02	0,01237	91,96	9,60	0,14432	0,1321	569,31	0,0174	3,34E-05	9,71E-05	2,901	132,38	2,331	9,809
3700	16,46	0,01364	92,14	9,57	0,14419	0,1288	569,33	0,0170	3,17E-05	9,67E-05	3,041	131,64	2,163	10,361
3800	16,91	0,01498	92,31	9,54	0,14414	0,1257	569,36	0,0166	3,00E-05	9,58E-05	3,181	130,90	2,001	10,923
3900	17,35	0,01641	92,38	9,50	0,14416	0,1228	569,39	0,0162	2,83E-05	9,44E-05	3,321	130,14	1,848	11,493
4000	17,80	0,01791	92,41	9,46	0,14426	0,1200	569,42	0,0158	2,66E-05	9,27E-05	3,461	129,38	1,704	12,068
4100	18,24	0,01948	92,43	9,42	0,14443	0,1175	569,45	0,0155	2,50E-05	9,05E-05	3,600	128,61	1,568	12,648
4200	18,68	0,02112	92,45	9,38	0,14468	0,1151	569,48	0,0152	2,34E-05	8,80E-05	3,737	127,84	1,442	13,232
4300	19,13	0,02281	92,44	9,34	0,14498	0,1129	569,51	0,0149	2,19E-05	8,53E-05	3,873	127,06	1,325	13,817
4400	19,57	0,02454	92,40	9,30	0,14534	0,1109	569,54	0,0146	2,04E-05	8,23E-05	4,007	126,28	1,217	14,402
4500	20,02	0,02632	92,37	9,26	0,14575	0,1090	569,57	0,0144	1,90E-05	7,92E-05	4,138	125,51	1,118	14,988
4600	20,46	0,02814	92,33	9,22	0,14620	0,1072	569,60	0,0142	1,77E-05	7,59E-05	4,267	124,73	1,026	15,572

4700	20,91	0,02998	92,29	9,18	0,14669	0,1055	569,63	0,0139	1,64E-05	7,26E-05	4,393	123,95	0,943	16,156
4800	21,35	0,03185	92,28	9,13	0,14721	0,1040	569,66	0,0137	1,52E-05	6,92E-05	4,516	123,18	0,866	16,738
4900	21,80	0,03375	92,25	9,09	0,14776	0,1026	569,70	0,0136	1,41E-05	6,59E-05	4,637	122,41	0,797	17,318
5000	22,24	0,03566	92,21	9,05	0,14834	0,1012	569,73	0,0134	1,31E-05	6,26E-05	4,755	121,63	0,733	17,896
5100	22,68	0,03759	92,15	9,01	0,14892	0,1000	569,76	0,0132	1,21E-05	5,94E-05	4,870	120,86	0,675	18,473
5200	23,13	0,03954	92,11	8,97	0,14952	0,0988	569,79	0,0131	1,12E-05	5,63E-05	4,983	120,10	0,622	19,049
5300	23,57	0,04150	92,06	8,92	0,15013	0,0976	569,83	0,0129	1,04E-05	5,33E-05	5,093	119,33	0,574	19,625
5400	24,02	0,04348	91,96	8,88	0,15075	0,0966	569,86	0,0128	9,63E-06	5,04E-05	5,202	118,57	0,529	20,200
5500	24,46	0,04548	91,90	8,84	0,15137	0,0956	569,89	0,0127	8,92E-06	4,76E-05	5,308	117,80	0,489	20,776
5600	24,91	0,04751	91,79	8,80	0,15200	0,0946	569,92	0,0125	8,26E-06	4,50E-05	5,413	117,03	0,452	21,354
5700	25,35	0,04955	91,70	8,76	0,15263	0,0937	569,96	0,0124	7,65E-06	4,24E-05	5,517	116,26	0,418	21,933
5800	25,80	0,05161	91,60	8,72	0,15326	0,0928	569,99	0,0123	7,09E-06	4,00E-05	5,619	115,49	0,388	22,513
5900	26,24	0,05368	91,49	8,68	0,15390	0,0920	570,02	0,0122	6,57E-06	3,78E-05	5,719	114,72	0,360	23,094
6000	26,68	0,05577	91,38	8,64	0,15453	0,0912	570,06	0,0121	6,10E-06	3,56E-05	5,817	113,94	0,334	23,676
6100	27,13	0,05787	91,29	8,60	0,15518	0,0905	570,09	0,0120	5,66E-06	3,36E-05	5,915	113,16	0,311	24,261
6200	27,57	0,06000	91,17	8,56	0,15582	0,0897	570,12	0,0119	5,26E-06	3,17E-05	6,011	112,38	0,289	24,848
6300	28,02	0,06215	91,05	8,52	0,15648	0,0890	570,16	0,0118	4,89E-06	3,00E-05	6,107	111,60	0,270	25,438
6400	28,46	0,06433	90,91	8,48	0,15714	0,0884	570,19	0,0117	4,55E-06	2,83E-05	6,202	110,81	0,252	26,032
6500	28,91	0,06654	90,78	8,44	0,15781	0,0877	570,22	0,0117	4,24E-06	2,68E-05	6,295	110,02	0,235	26,629
6600	29,35	0,06877	90,66	8,40	0,15849	0,0871	570,25	0,0116	3,95E-06	2,53E-05	6,389	109,23	0,220	27,230
6700	29,80	0,07102	90,53	8,37	0,15918	0,0865	570,29	0,0115	3,69E-06	2,40E-05	6,481	108,43	0,206	27,835
6800	30,24	0,07331	90,39	8,33	0,15989	0,0859	570,32	0,0114	3,44E-06	2,27E-05	6,573	107,63	0,193	28,443
6900	30,68	0,07562	90,22	8,29	0,16061	0,0854	570,35	0,0114	3,22E-06	2,15E-05	6,665	106,81	0,181	29,056
7000	31,13	0,07796	90,09	8,26	0,16134	0,0848	570,39	0,0113	3,01E-06	2,04E-05	6,756	106,00	0,170	29,674
7100	31,57	0,08033	89,92	8,22	0,16210	0,0843	570,42	0,0112	2,82E-06	1,94E-05	6,847	105,17	0,160	30,295
7200	32,02	0,08272	89,78	8,18	0,16287	0,0838	570,45	0,0112	2,64E-06	1,84E-05	6,937	104,34	0,151	30,921
7300	32,46	0,08515	89,63	8,15	0,16365	0,0833	570,48	0,0111	2,48E-06	1,75E-05	7,027	103,50	0,142	31,552
7400	32,91	0,08761	89,49	8,11	0,16446	0,0829	570,52	0,0110	2,33E-06	1,67E-05	7,117	102,65	0,135	32,188
7500	33,35	0,09011	89,37	8,08	0,16528	0,0824	570,55	0,0110	2,19E-06	1,59E-05	7,207	101,79	0,127	32,830
7600	33,80	0,09264	89,23	8,04	0,16612	0,0820	570,58	0,0109	2,06E-06	1,51E-05	7,296	100,92	0,120	33,477
7700	34,24	0,09521	89,10	8,01	0,16698	0,0815	570,61	0,0109	1,94E-06	1,44E-05	7,386	100,05	0,114	34,129
7800	34,68	0,09781	88,96	7,98	0,16786	0,0811	570,64	0,0108	1,83E-06	1,38E-05	7,475	99,17	0,108	34,787
7900	35,13	0,10045	88,83	7,94	0,16876	0,0807	570,68	0,0108	1,73E-06	1,31E-05	7,565	98,28	0,103	35,450
8000	35,57	0,10312	88,68	7,91	0,16968	0,0803	570,71	0,0107	1,63E-06	1,26E-05	7,654	97,38	0,098	36,119

8100	36,02	0,10583	88,58	7,88	0,17061	0,0799	570,74	0,0107	1,54E-06	1,20E-05	7,743	96,47	0,093	36,793
8200	36,46	0,10857	88,43	7,84	0,17158	0,0796	570,77	0,0106	1,45E-06	1,15E-05	7,832	95,56	0,088	37,473
8300	36,91	0,11134	88,27	7,81	0,17256	0,0792	570,80	0,0106	1,37E-06	1,10E-05	7,921	94,63	0,084	38,158
8400	37,35	0,11415	88,12	7,78	0,17356	0,0789	570,84	0,0105	1,30E-06	1,05E-05	8,010	93,70	0,080	38,848
8500	37,80	0,11700	87,96	7,75	0,17458	0,0785	570,87	0,0105	1,23E-06	1,01E-05	8,099	92,76	0,077	39,544
8600	38,24	0,11988	87,82	7,72	0,17561	0,0782	570,90	0,0104	1,16E-06	9,64E-06	8,188	91,81	0,073	40,246
8700	38,68	0,12279	87,70	7,68	0,17667	0,0779	570,93	0,0104	1,10E-06	9,24E-06	8,276	90,85	0,070	40,953
8800	39,13	0,12575	87,55	7,65	0,17775	0,0776	570,96	0,0104	1,04E-06	8,86E-06	8,365	89,88	0,067	41,666
8900	39,57	0,12874	87,42	7,62	0,17885	0,0773	570,99	0,0103	9,89E-07	8,50E-06	8,454	88,90	0,064	42,384
9000	40,02	0,13176	87,29	7,59	0,17997	0,0770	571,02	0,0103	9,38E-07	8,16E-06	8,542	87,91	0,062	43,108
9100	40,46	0,13481	87,16	7,56	0,18111	0,0767	571,06	0,0102	8,91E-07	7,84E-06	8,631	86,91	0,059	43,837
9200	40,91	0,13790	87,05	7,53	0,18227	0,0764	571,09	0,0102	8,46E-07	7,53E-06	8,719	85,91	0,057	44,571
9300	41,35	0,14102	86,92	7,50	0,18345	0,0762	571,12	0,0102	8,04E-07	7,24E-06	8,807	84,89	0,055	45,310
9400	41,80	0,14417	86,78	7,47	0,18465	0,0759	571,15	0,0101	7,65E-07	6,96E-06	8,895	83,87	0,053	46,055
9500	42,24	0,14735	86,66	7,44	0,18586	0,0757	571,18	0,0101	7,27E-07	6,70E-06	8,983	82,85	0,051	46,805
9600	42,68	0,15057	86,53	7,41	0,18710	0,0754	571,21	0,0101	6,93E-07	6,45E-06	9,071	81,81	0,049	47,560
9700	43,13	0,15382	86,41	7,38	0,18836	0,0752	571,24	0,0101	6,60E-07	6,21E-06	9,159	80,77	0,047	48,321
9800	43,57	0,15710	86,30	7,35	0,18964	0,0750	571,27	0,0100	6,29E-07	5,98E-06	9,246	79,72	0,046	49,087
9900	44,02	0,16041	86,19	7,32	0,19095	0,0748	571,30	0,0100	6,00E-07	5,77E-06	9,334	78,66	0,044	49,858
10000	44,46	0,16374	86,07	7,30	0,19227	0,0746	571,33	0,0100	5,73E-07	5,56E-06	9,421	77,59	0,043	50,633
10100	44,91	0,16710	85,96	7,27	0,19363	0,0744	571,36	0,0099	5,47E-07	5,37E-06	9,507	76,51	0,041	51,413
10200	45,35	0,17049	85,83	7,24	0,19500	0,0742	571,39	0,0099	5,23E-07	5,19E-06	9,594	75,43	0,040	52,198
10300	45,80	0,17389	85,70	7,21	0,19640	0,0740	571,42	0,0099	5,01E-07	5,01E-06	9,680	74,34	0,039	52,986
10400	46,24	0,17732	85,58	7,18	0,19782	0,0738	571,45	0,0099	4,79E-07	4,85E-06	9,766	73,25	0,038	53,779
10500	46,68	0,18077	85,46	7,15	0,19926	0,0737	571,48	0,0099	4,60E-07	4,69E-06	9,851	72,15	0,037	54,576
10600	47,13	0,18424	85,33	7,13	0,20072	0,0735	571,51	0,0098	4,41E-07	4,55E-06	9,936	71,05	0,036	55,377
10700	47,57	0,18772	85,22	7,10	0,20220	0,0734	571,54	0,0098	4,24E-07	4,41E-06	10,021	69,93	0,035	56,182
10800	48,02	0,19122	85,11	7,07	0,20371	0,0732	571,57	0,0098	4,07E-07	4,28E-06	10,105	68,82	0,035	56,990
10900	48,46	0,19474	85,03	7,04	0,20523	0,0731	571,59	0,0098	3,92E-07	4,15E-06	10,189	67,70	0,034	57,802
11000	48,91	0,19827	84,91	7,02	0,20677	0,0729	571,62	0,0098	3,77E-07	4,04E-06	10,272	66,57	0,033	58,618
11100	49,35	0,20183	84,79	6,99	0,20833	0,0728	571,65	0,0097	3,64E-07	3,93E-06	10,355	65,44	0,033	59,437
11200	49,80	0,20540	84,65	6,96	0,20992	0,0727	571,68	0,0097	3,51E-07	3,82E-06	10,438	64,31	0,032	60,261
11300	50,24	0,20899	84,53	6,94	0,21152	0,0726	571,71	0,0097	3,39E-07	3,72E-06	10,520	63,17	0,031	61,087
11400	50,68	0,21259	84,42	6,91	0,21315	0,0725	571,74	0,0097	3,28E-07	3,63E-06	10,602	62,03	0,031	61,917

11500	51,13	0,21620	84,31	6,89	0,21481	0,0724	571,77	0,0097	3,18E-07	3,54E-06	10,683	60,89	0,031	62,750
11600	51,57	0,21983	84,21	6,86	0,21648	0,0723	571,79	0,0097	3,08E-07	3,46E-06	10,764	59,75	0,030	63,586
11700	52,03	0,22355	84,09	6,83	0,21822	0,0722	571,82	0,0097	2,98E-07	3,38E-06	10,846	58,58	0,030	64,442
11800	52,47	0,22720	83,98	6,81	0,21994	0,0721	571,85	0,0097	2,89E-07	3,30E-06	10,926	57,44	0,029	65,285
11900	52,92	0,23087	83,86	6,78	0,22170	0,0721	571,88	0,0097	2,81E-07	3,23E-06	11,005	56,29	0,029	66,130
12000	53,36	0,23456	83,74	6,76	0,22348	0,0720	571,91	0,0096	2,73E-07	3,16E-06	11,084	55,15	0,029	66,979
12100	53,80	0,23826	83,63	6,73	0,22528	0,0719	571,93	0,0096	2,65E-07	3,10E-06	11,163	54,01	0,028	67,831
12200	54,25	0,24197	83,53	6,71	0,22711	0,0719	571,96	0,0096	2,58E-07	3,03E-06	11,241	52,86	0,028	68,686
12300	54,69	0,24569	83,42	6,68	0,22897	0,0718	571,99	0,0096	2,51E-07	2,97E-06	11,319	51,72	0,028	69,544
12400	55,14	0,24943	83,29	6,66	0,23085	0,0718	572,02	0,0096	2,44E-07	2,91E-06	11,397	50,58	0,028	70,404
12500	55,58	0,25319	83,21	6,64	0,23276	0,0717	572,04	0,0096	2,38E-07	2,86E-06	11,474	49,44	0,027	71,268
12600	56,03	0,25696	83,08	6,61	0,23470	0,0717	572,07	0,0096	2,32E-07	2,80E-06	11,551	48,30	0,027	72,135
12700	56,47	0,26074	82,98	6,59	0,23667	0,0716	572,10	0,0096	2,26E-07	2,75E-06	11,627	47,16	0,027	73,004
12800	56,92	0,26453	82,90	6,57	0,23868	0,0716	572,12	0,0096	2,21E-07	2,70E-06	11,703	46,02	0,027	73,876
12900	57,36	0,26833	82,79	6,54	0,24071	0,0716	572,15	0,0096	2,15E-07	2,65E-06	11,779	44,89	0,027	74,750
13000	57,80	0,27214	82,70	6,52	0,24277	0,0716	572,18	0,0096	2,10E-07	2,60E-06	11,854	43,75	0,027	75,627
13100	58,25	0,27597	82,59	6,50	0,24487	0,0716	572,20	0,0096	2,05E-07	2,55E-06	11,929	42,62	0,027	76,507
13200	58,69	0,27982	82,50	6,47	0,24700	0,0716	572,23	0,0096	2,00E-07	2,51E-06	12,004	41,49	0,027	77,390
13300	59,14	0,28367	82,38	6,45	0,24917	0,0716	572,26	0,0096	1,96E-07	2,46E-06	12,078	40,35	0,027	78,276
13400	59,58	0,28753	82,25	6,43	0,25136	0,0716	572,28	0,0096	1,91E-07	2,41E-06	12,152	39,23	0,026	79,163
13494	60,00	0,29116	82,17	6,41	0,25346	0,0716	572,31	0,0096	1,87E-07	2,37E-06	12,221	38,17	0,026	80,000
	t	μ_L	$\dot{\gamma}$	ε_L	k_l	a	$k_l a$	μ_x	τ_x	X	S	O_d	P	
	(h)	(Pa.s)	(s ⁻¹)	(m ² /s ³)	(mm/s)	(m ² /m ³)	(s ⁻¹)	(s ⁻¹)	((g/l)/s)	(g/l)	(g/l)	(mg/l)	(g/l)	

ANNEXE 3

Structure de la fonction-utilisateur (UDF) utilisée dans le travail

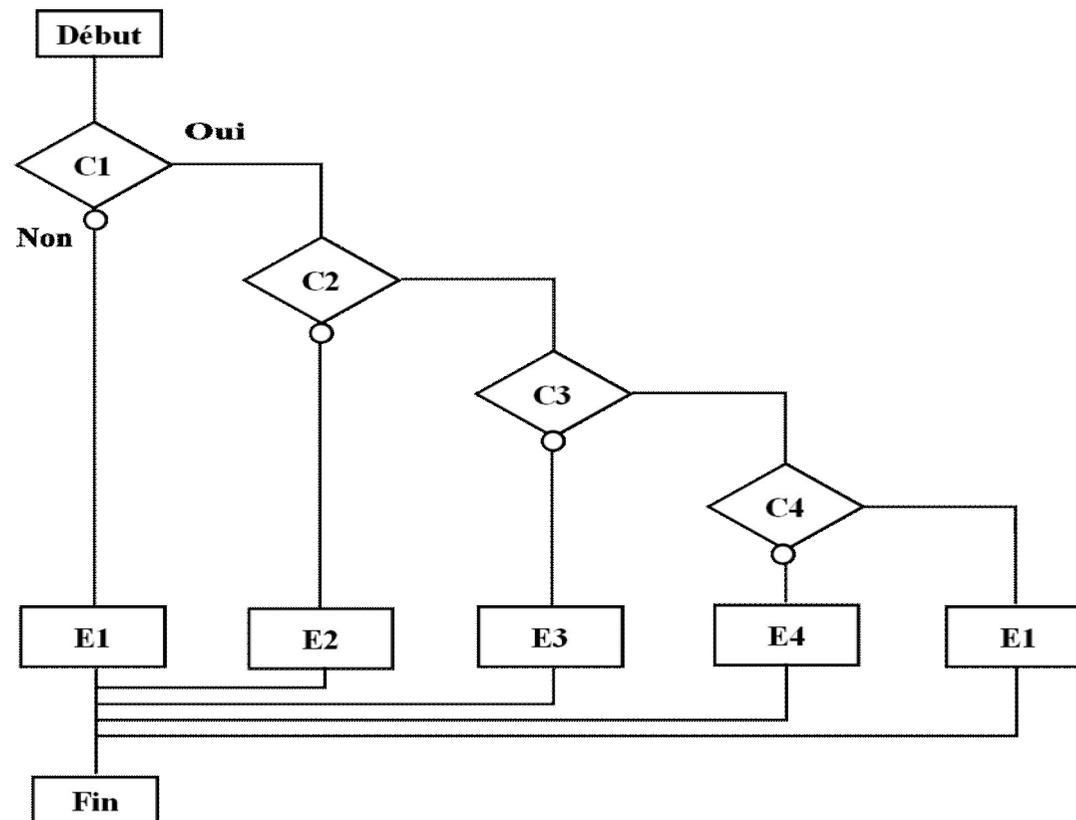
Pour les besoins de traitement de la situation particulière de la réaction biologique ainsi que du suivi du déroulement des calculs et de leur qualité, des programmes (User Defined Functions :UDFs) ont été écrits en langage C++ et compilés avec le noyau du logiciel du commerce Fluent utilisé pour résoudre le problème une fois celui-ci mis en équations. La méthodologie permettant la réalisation de ce type d'adaptation est décrite dans la documentation fournie avec le code de calcul. Cette souplesse permet, outre l'adaptation de la résolution à des situations particulières, la mise en œuvre d'une multitude de sous-programmes permettant d'accompagner, en temps réel, le traitement par affichage d'informations utiles pour surveiller la progression de celle-ci. Ceci est rendu possible par la mise à disposition d'instructions (Macros) permettant l'accès aux données utilisées par le « solveur » du code, aussi bien pour lecture que pour écriture. Seules quelques données ne sont pas accessibles et sont mentionnées. Ceci est bien sûr un complément des moyens mis à disposition par le code pour assurer le suivi de l'évolution du traitement et pour le « post-processing ».

L'UDF est donc réalisée et accrochée conformément au mode décrit dans [36]. Elle s'exécute en début de chaque itération avant la résolution :

- * des équations de quantité de mouvement et de continuité.
- * de l'équation de l'énergie.
- * des équations de la turbulence.

La dite itération précédente consiste en une boucle portant sur l'ensemble des mailles de la cuve, à l'aide d'instructions (Macros) dédiées à cet effet. Son rôle est de résoudre, dans chacune de ces mailles, le système biologique considéré, en fonction des données relatives à la maille (bioréacteur élémentaire) en question et à l'instant en cours.

Le diagramme suivant présente une structure des principales parties de l'UDF (ADJUST):



Les traitements E1, E2, E3 et E4 correspondent aux étapes données dans les tableaux du chapitre IV. Les critères C1, C2, C3 et C4 permettent de cascader ces étapes et d'assurer la transition entre elles. Dans les calculs précédents, cette cascade était faite manuellement mais des booléens C1, C2, C3 et C4 peuvent être élaborés pour assurer son automaticité. Des interprétations possibles de ces critères sont les suivantes :

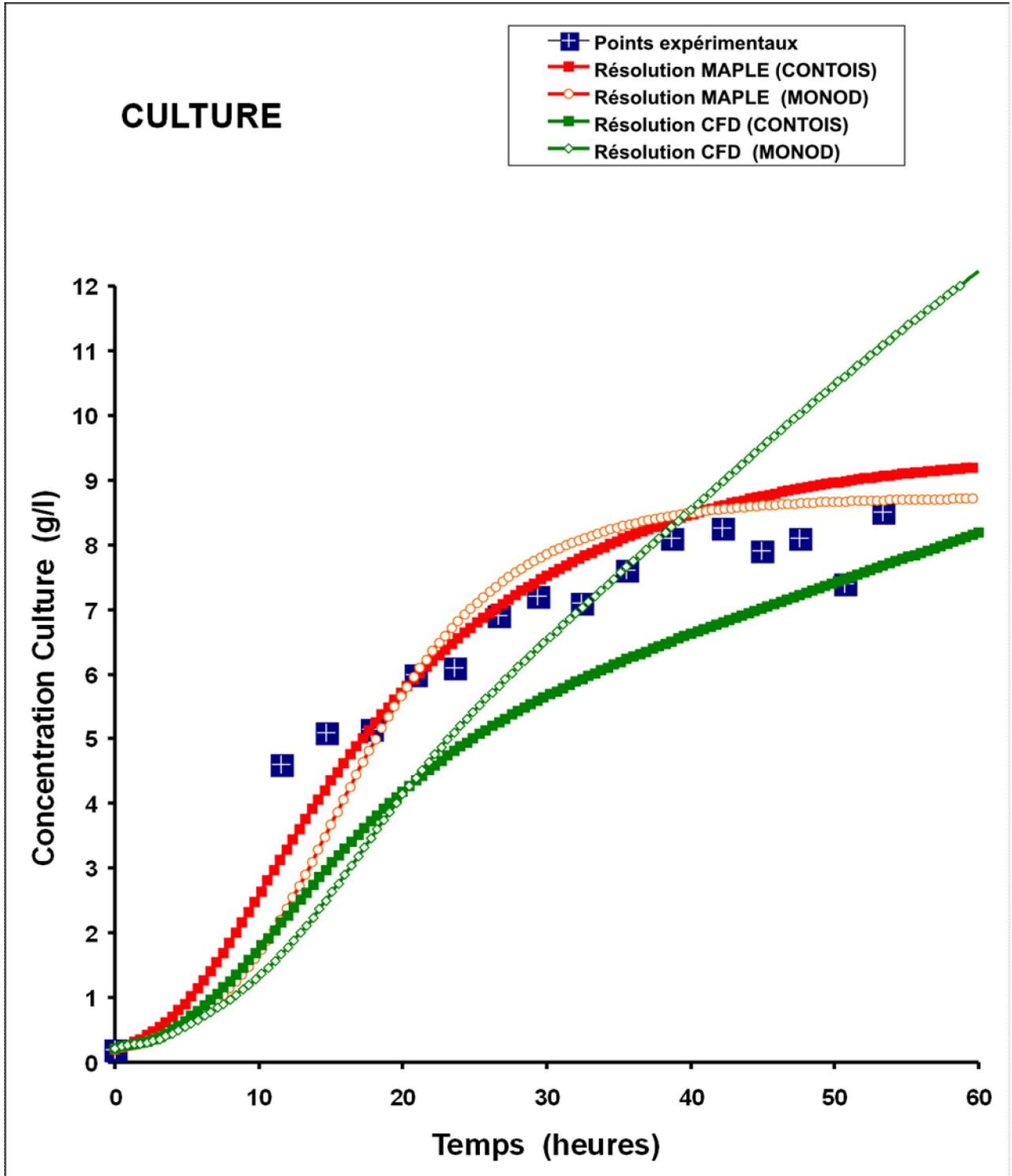
- C1 : « L'écoulement généré à partir des conditions initiales est acceptable ». On peut y utiliser les moyens que le code de calcul fournit pour suivre l'évolution du calcul et apprécier la convergence et /ou utiliser des critères adaptés à une situation particulière.
- C2 : « La saturation d'initialisation est atteinte ». Un tel critère est élaboré à partir de concentration de saturation correspondante aux conditions de déroulement de la fermentation (température, pression,...etc...).
- C3 : « La concentration initiale de culture est atteinte ». Il est en relation avec l'avancement de l'augmentation (actualisation) de la concentration dans la sphère fixe pour disposer une concentration moyenne en biomasse de 0,2 g/l dans la cuve obtenue par convection.
- C4 : « Le substrat est épuisé ». Ce critère annonce la fin de la fermentation et seule la convection est assurée par la suite si l'opération numérique continue.

Les traitements correspondent à :

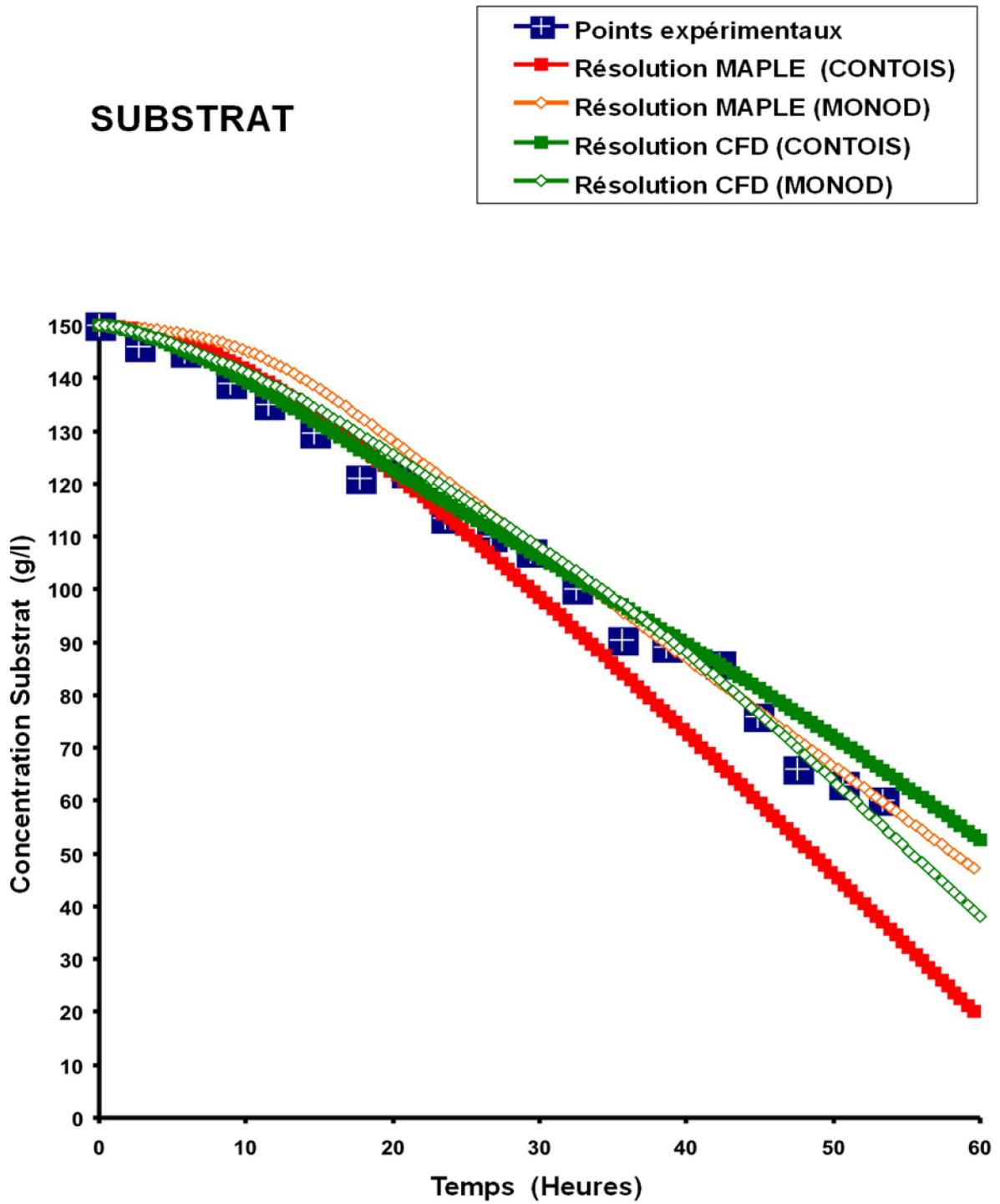
- E1 : « Aucune opération biologique ».
- E2 : « Actualisation de la concentration de O₂dissout d'après IV-10.
- E3 : « Cumul local de la concentration en Culture dans une sphère donnée dans la cuve».
- E4 : « Actualisation des quatre scalaires d'après le système biologique IV-9 ou VII-3» d'après IV-12. ou VII-4.

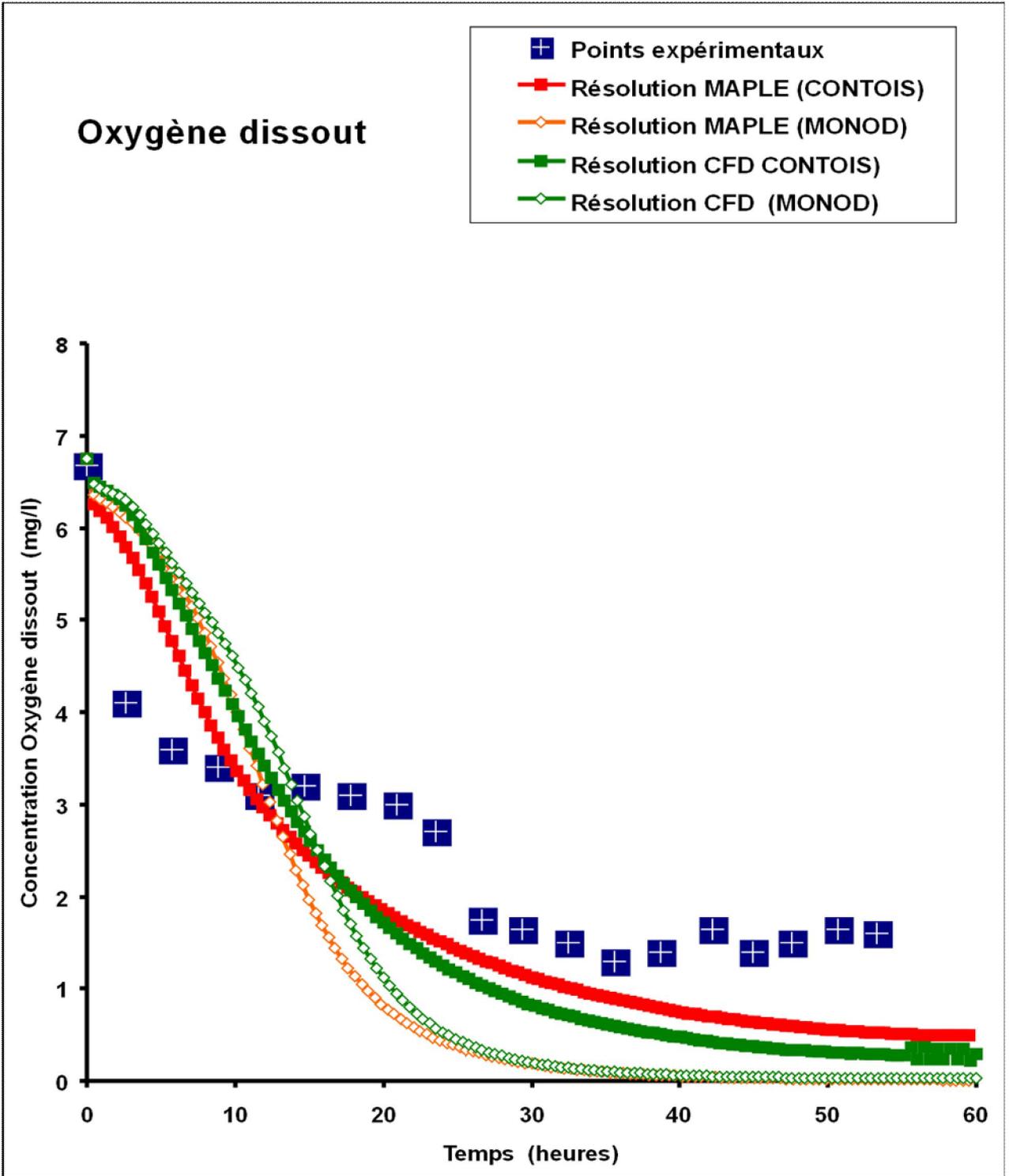
ANNEXE 4

Ensemble de tous les résultats



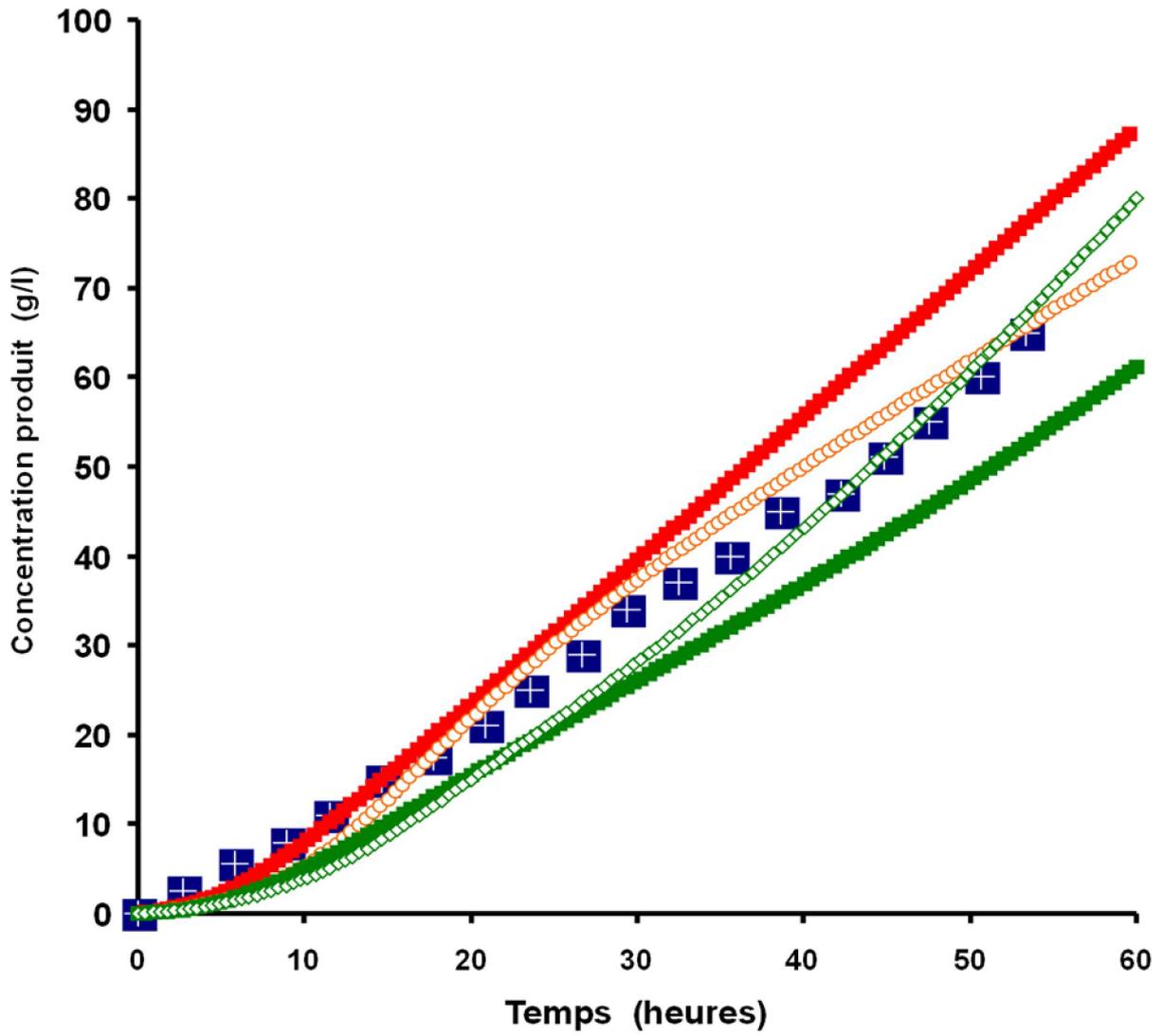
SUBSTRAT





PRODUIT

- Points expérimentaux
- Résolution MAPLE (CONTOIS)
- Résolution MAPLE (MONOD)
- Résolution CFD (CONTOIS)
- Résolution CFD (MONOD)



RÉSUMÉS

FRANÇAIS

Ce travail, dans sa progression méthodologique, vise la validation et la mise en œuvre de la contribution que peut apporter la dynamique des fluides, théorique et surtout numérique, aux procédés de fermentation en cuve agitée. Son apport dans d'autres domaines où coexistent écoulements et transformations de matières ne cessent de susciter de plus en plus d'intérêt. La description fine de l'évolution du contenu d'un réacteur propose en fin de compte le scénario à venir lors de l'exploitation industrielle de l'opération étudiée. Ce mémoire présente donc une approche de ce type pour l'activité dans un réacteur lors d'une fermentation. Le mélange multiphasique en écoulement avec ses échanges interphasiques et particulièrement ici l'aspect réactif de celui-ci font l'objet d'une intégration progressive conduisant à un modèle de «fermentation numérique». Une analyse statistique du volume de données recueillies lors du déroulement d'une telle opération, permet d'en évaluer plus d'une caractéristique, et d'en tirer des informations utiles tant pour son élaboration lors de l'étude du procédé lui-même que pour l'accompagnement de l'exploitation productive de celui-ci. L'étude et la compréhension des interactions et des cinétiques de transfert en milieu hétérogène permettront de maîtriser aussi le comportement des molécules aux interfaces et d'en tirer profit pour la mise au point de bio-séparations des produits obtenus.

La souplesse de l'outil informatique initie la compétition de cette méthode d'évaluation par simulation d'un procédé, avec la réalité elle-même du procédé pratiqué jusqu'à présent à travers le modèle de laboratoire ou le modèle-pilote largement plus coûteux sur plus d'un plan. Les méthodes numériques adaptées à ce type de problèmes se sont bien développées ces dernières décennies et le matériel supportant le calcul lui-même ne cesse de se mettre à la portée des modestes moyens d'acquisition. La réaction biologique, à l'instar de la réaction chimique aura donc la possibilité de tirer quelques profits de ce moyen d'étude non intrusif et sans dommages économiques ou même écologiques.

ENGLISH

This work, in its methodological progression, aims at validating and implementing the fluid dynamics contribution, both theoretical and numerical, to the fermentation processes in agitated vessels. Indeed, its contribution in other engineering fields, where material flows and transformations coexist, could arouse additional deep interest. The detailed description of the evolution of the reactor contents in the final analysis proposes the pattern that is realized during the industrial exploitation of the studied operation. The thesis thus presents an approach to a reactor performance during fermentation. Combining multiphase flow with its, inter-phase mass transfer kinetics and particularly with the reactive aspect of the latter is the subject of progressive integration leading to a model of "numerical fermentation". A statistical analysis over the bulk data collected in the course of such an operation allow to evaluate more than one characteristic, and to draw much useful information not only for the study in the stage of development of the process but also for the support of its productive exploitation. The flexibility of the data-processing tool thus developed initiates competition between this evaluation method for process simulation and the reality itself as far as such processes practised so far through laboratory models or pilot models are largely more expensive at more than one plane. The numerical methods adapted to such type of problems developed well in the last decade and the material that supports the calculation itself do not exclude employment of some modest means of acquisition. Not unlike chemical reaction engineering, biological reaction engineering would thus have the possibility to benefit of this nonintrusive technique of study excluding any economic or even ecological damage.

