



# EXTRAPOLIS



# EXTRAPOLIS



Mise à l'échelle industrielle des Réacteurs-Echangeurs Multifonctionnels pour l'amélioration de l'efficacité énergétique des procédés chimiques

## PARTENAIRES DU PROJET

		<p><b>Pr.Christophe Gourdon</b>  <b>Laboratoire de Génie Chimique (LGC) UMR 5503</b>  <b>CNRS/INPT/UPS</b>          Institut National Polytechnique de Toulouse          5, rue Paulin Talabot - BP 1301          31106 Toulouse Cedex, France</p> <p><u>Autres participants du laboratoire</u>  <b>Pr Michel CABASSUD</b>  <b>Zoé ANXIONNAZ, ½ doctorante</b></p>
<p><b>Dr.Dominique Della Valle (coordinatrice)</b>  <b>Laboratoire de Thermocinétique de Nantes (LTN) UMR 6607 CNRS</b>          Ecole Polytechnique de l'Université de Nantes B.P 50609, rue C. Pauc F-44306, Nantes cedex 3, France</p>	<p><u>Autres participants du laboratoire</u>  <b>Pr.Hassan PEERHOSSAINI</b>  <b>Dr.Thierry LEMENAND,MC</b></p>	<p><b>Dr.Michel Gonzalez</b>  <b>Complexe de Recherche Interprofessionnelle en Aérothermochimie (CORIA) UMR 6614 CNRS,</b>          Université de Rouen, site du Madrillet BP 12 76801 Saint-Etienne du Rouvray, France</p> <p><u>Autres participants du laboratoire</u>  <b>Dr.Pierre PARANTHOEN</b></p>
<p><b>Dr. Patrice Tochon</b>  <b>CEA/LETh- GRETh</b>          17, rue des Martyrs 38054 Grenoble Cedex 9, France</p>	<p><u>Autres participants du laboratoire</u>  <b>Dr Jean-François FOURMIGUE</b>  <b>Zoé ANXIONNAZ, ½ doctorante</b></p>	<p><b>Dr.Philippe Carrière</b>  <b>Laboratoire de Mécanique des Fluides et Acoustique (LMFA) UMR 5509 CNRS</b>          Ecole Centrale de Lyon 36 avenue Guy de Collongue, BP 163 69131 Ecully Cedex</p> <p><u>Autres participants du laboratoire</u>  <b>Dr.Florence RAYNAL</b>  <b>Pr. Mikhaël GOROKHOVSKY</b>  <b>Frédéric PLAZA</b></p>





# EXTRAPOLIS

## objectifs du projet



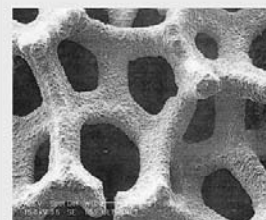
- *Comprendre l'évolution des performances dans l'augmentation de taille des échangeurs/réacteurs multifonctionnels*
- *Trouver des solutions pour le maintien des performances obtenues au laboratoire dans l'exploitation industrielle, notamment pour les réactions rapides/exothermiques*
- *Concevoir et réaliser un prototype qui permet de maintenir au mieux les capacités d'échange dans le changement d'échelle*



(a) Chaotic advection



(d) OSF



(b) Metallic foam



(e) plate



(c) HEV



(f) DEANHEX



# EXTRAPOLIS

## Structure du projet



### VOLET THEORIQUE



**Problématique  
de  
l'extrapolation**



**Mécanismes  
fondamentaux  
du mélange**



**Micromélange  
et extrapolation**



### VOLET EXPERIMENTAL



**Échangeur  
DEANHEX**



**Échangeur HEV**



**Fabrication  
d'un prototype  
innovant :  
EXTRAPOLEX**





# EXTRAPOLIS

Analyse dimensionnelle



Analyse basée sur les équations advection/diffusion/réaction en réacteurs ouverts

## Hypothèses :

Facteur d'échelle sur la productivité

Conservation du temps de séjour (temps de réaction)

## Classes de problèmes:

Régime laminaire/turbulent

Réactions lentes/rapides

## Géométries:

Plaques

Tubes de section circulaire

Chaotiques

Recombinaison de flux



On ne peut pas conserver la DTS  
et les transferts de masse/chaueur  
dans une similitude géométrique

Le nombre de Nusselt augmente  
proportionnellement au Reynolds





# EXTRAPOLIS

Solutions étudiées pour le maintien des performances dans l'extrapolation de taille



- *Effet d'une alimentation pulsée vs stationnaire*
  - micromélange*
  - macromélange*
  - fréquences efficaces*
- *Géométries « classiques » favorables à l'extrapolation*
  - échangeur coudé DEANHEX*
  - générateurs de vortex type HEV*
- *Géométrie innovante : développement d'un prototype à recombinaison de flux*



# EXTRAPOLIS

Écoulement pulsé : méthode de la persistance de l'étirement et l'orientation du gradient de scalaire

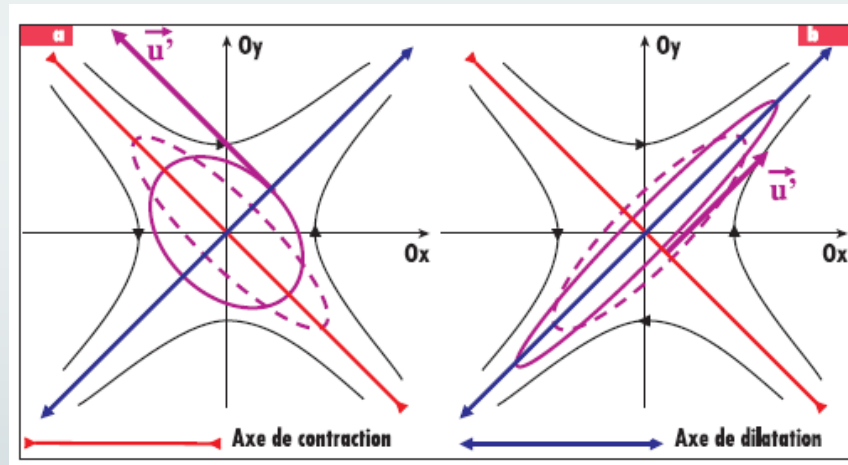


- **Cadre de travail :**

- Étudier les variations lagrangiennes des propriétés de gradient de vitesse et l'effet de ces variations sur les propriétés de mélange de l'écoulement.

- ↪ **Approche :**

- Introduite par **Lapeyre et al.(1999)** et reprise par **Garcia et al.(2005,2007)**
- Alignement du gradient avec l'axe de compression



d'après Lapeyre et al (1999)

- Angle relatif entre le gradient et l'axe de compression

$$\xi = 2(\theta + \phi)$$



# EXTRAPOLIS

Écoulement pulsé : méthode de la persistance de l'étirement et l'orientation du gradient de scalaire



Facteur  $r$  : paramètre de persistance de l'écoulement

$$r = \frac{\omega + 2 \left( \frac{D\phi}{Dt} \right)}{\sigma}$$

Équation de l'orientation du gradient de scalaire

$$\frac{1}{\sigma} \frac{d\zeta}{dt} = r - \cos \zeta$$

Le paramètre  $r$  exprime le rapport de la rotation effective locale (vorticité + rotation des axes principaux) et l'intensité de l'étirement local.

**Le paramètre  $r$  permet de définir trois régimes :**

- $r^2 < 1$  régime à déformation dominante Pas d'évolution de la norme du gradient et alignement le plus probable 45°
- $r^2 = 1$  régime déformation-rotation effective Évolution linéaire de la norme du gradient
- $r^2 > 1$  régime à rotation dominante Évolution exponentielle de la norme du gradient
- $r^2 = 0$  Alignement du gradient avec l'axe de compression

Etude sur des écoulements 2D définis numériquement ou analytiquement

Par exemple : eclt de Gosh *et al*

$$\begin{cases} u_1 &= -y + A_{11}y^2 + x^2y - \frac{2}{3}y^3 + 3\beta xy^2 \sin(\omega t) \\ u_2 &= -xy^2 - \beta y^2 \sin(\omega t) \end{cases}$$



- $A_{11}$  **taille de la bulle**
- $\omega$  **fréquence de la perturbation**
- $\beta$  **amplitude de la perturbation**

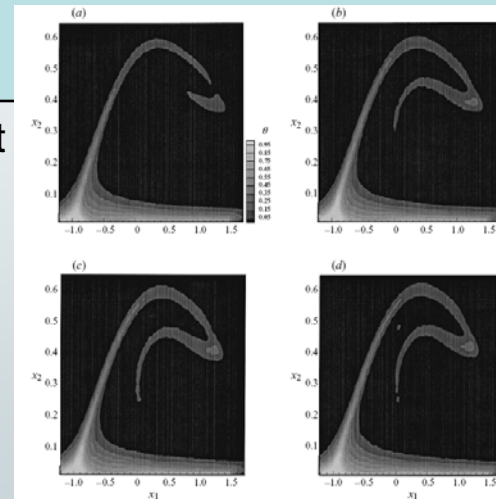


FIGURE 3. Scalar field for  $\beta = 0.6$ ,  $\omega = 0.72$ ,  $Pe = 2.5 \times 10^4$ , at (a)  $t = 5T$ , (b)  $t = 10T$ , (c)  $t = 20T$ , (d)  $t = 30T$ ,  $T = 2\pi/\omega$ .



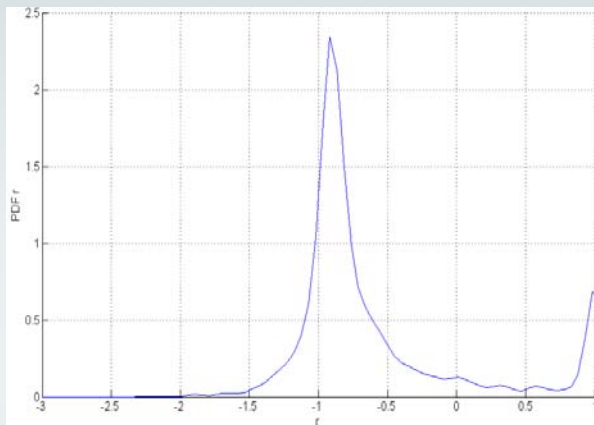


# EXTRAPOLIS

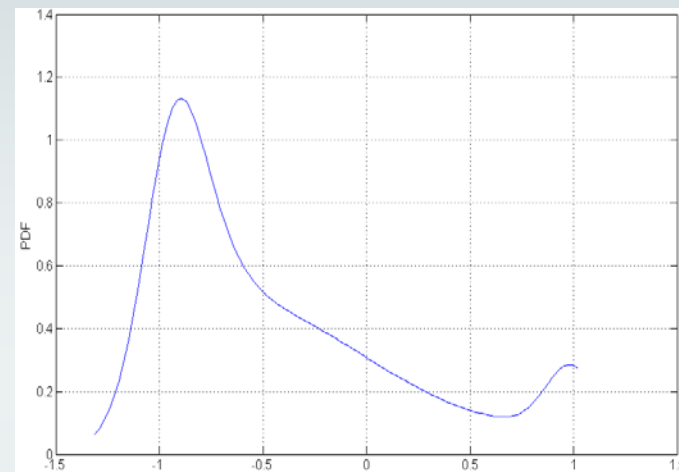
Ecoulement pulsé : méthode de la persistance de l'étirement et l'orientation du gradient de scalaire



👉  $A_{11}=3$



👉  $A_{11}=4,5$



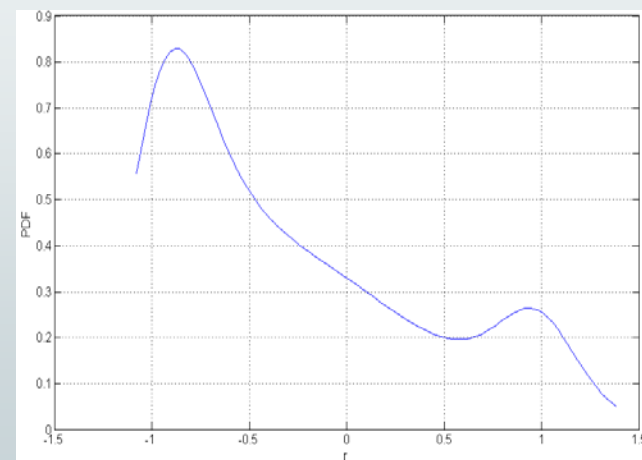
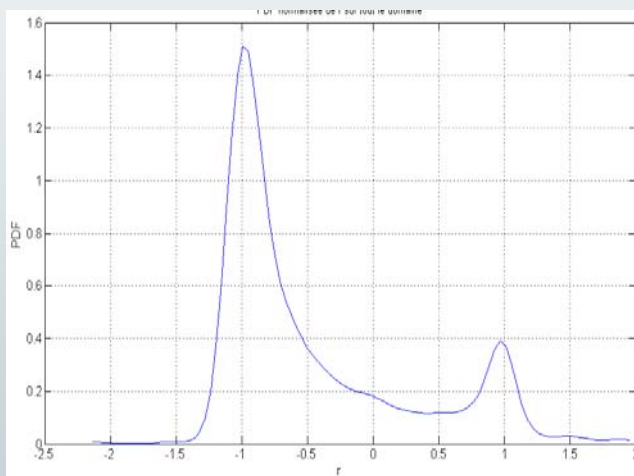
PDF de la persistance de l'étirement « r »

Régime stationnaire

Régime instationnaire

Amplitude : = 0,6  
Fréquence = 0,72

$t=5T$





# EXTRAPOLIS

Géométries classiques favorables à l'extrapolation



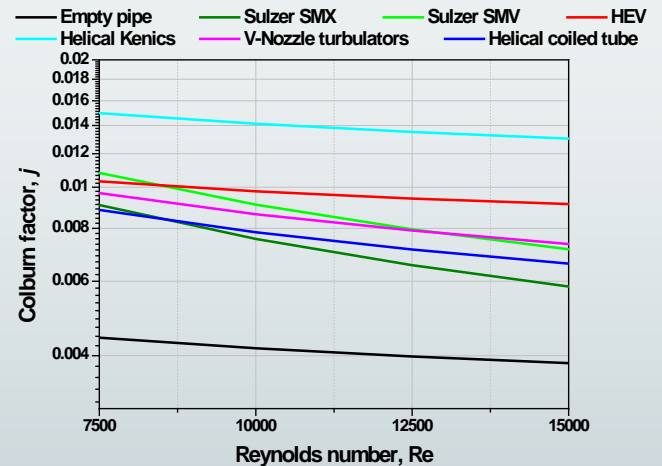
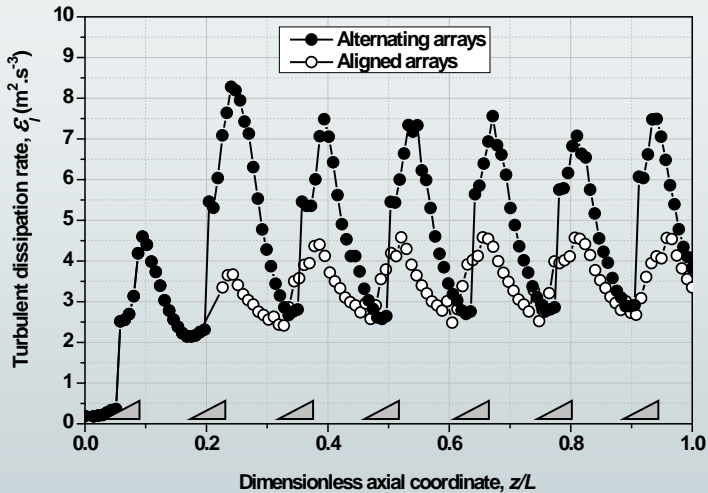
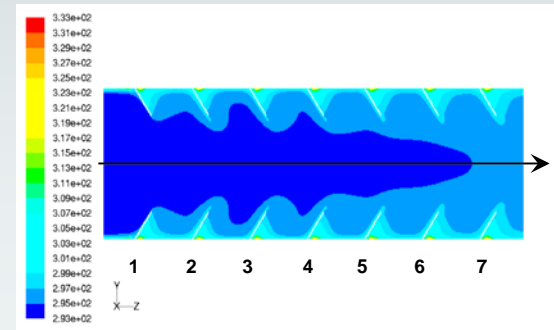
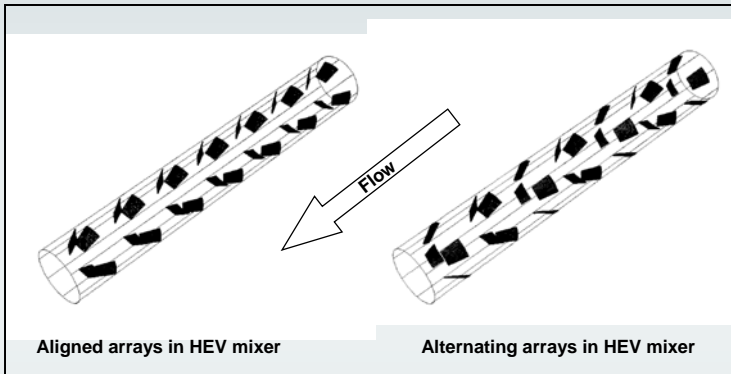
Etude hydrodynamique

LDV  
Sonde chimique  
CFD

HEV

Etude thermique

CFD



Intensification en alternant les rangées d'ailettes



Facteur de Colburn x2,5 par rapport au tube droit, bien classé parmi les échangeurs commerciaux





# EXTRAPOLIS

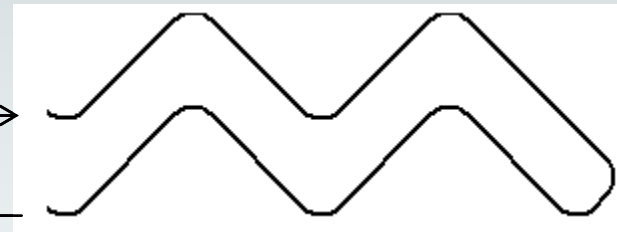
Géométries classiques favorables à l'extrapolation



## DEANHEX

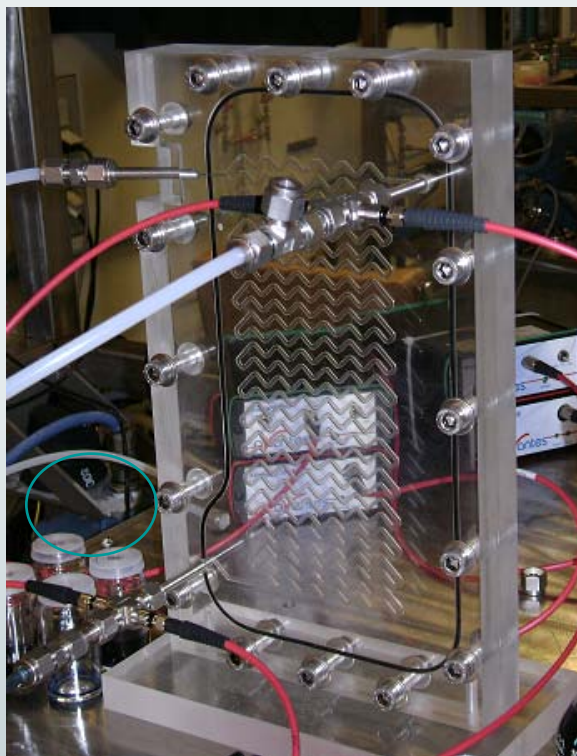
Entrée fluide →

← Sortie fluide



$$R_{c_{ext}} = R_c + \frac{b}{2}$$

$$R_{c_{int}} = R_c - \frac{b}{2}$$



	Maquette 'e'	Maquette 'f'	Maquette 'g'
Longueur développée (m)	3,40		
Angle des coudes	45°		
Longueur droite, L <sub>d</sub> (mm)	20,28		
Rayon de courbure à la fibre neutre (mm)	4		
Hauteur du canal, a (mm)	2	4	4
Largeur du canal, b (mm)	2	2	4
Facteur de forme, b/a	1	0,5	1
Diamètre hydraulique, d <sub>h</sub> (mm)	2	2,67	4
Plage de débit (kg.h <sup>-1</sup> )	1 à 15	1 à 20	2 à 25
Plage de vitesse (m.s <sup>-1</sup> )	0,07 à 1,04	0,03 à 0,70	0,03 à 0,43
Plage de Reynolds	140 à 2080	80 à 1870	120 à 1720

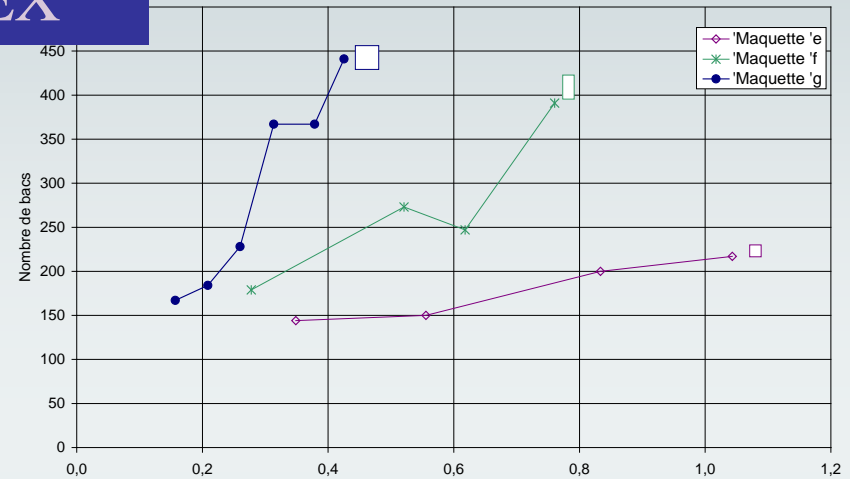


# EXTRAPOLIS

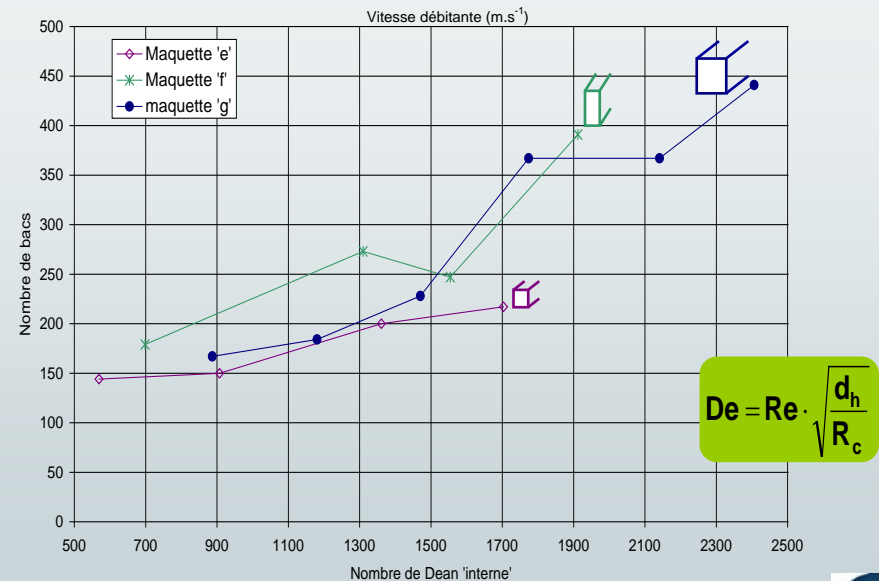
Géométries classiques favorables à l'extrapolation



## DEANHEX



La DTS est maintenue en extrapolant sur le nombre de Dean basé sur le rayon de courbure intérieur



$$De = Re \cdot \sqrt{\frac{d_h}{R_c}}$$



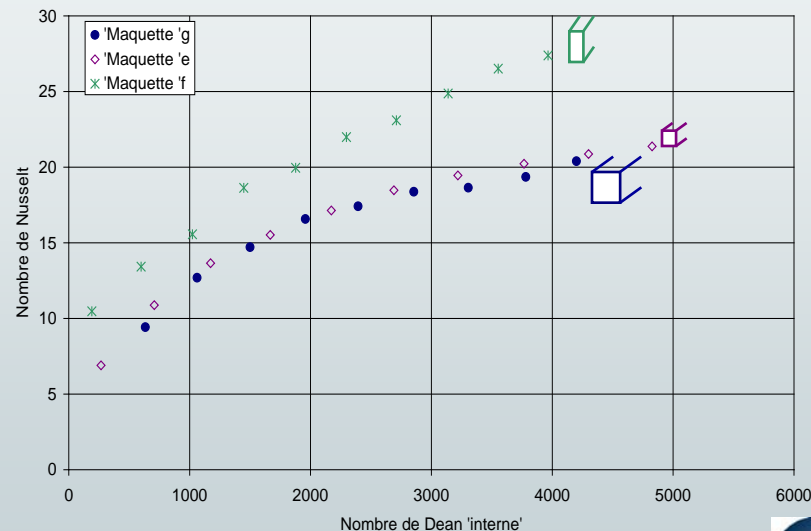
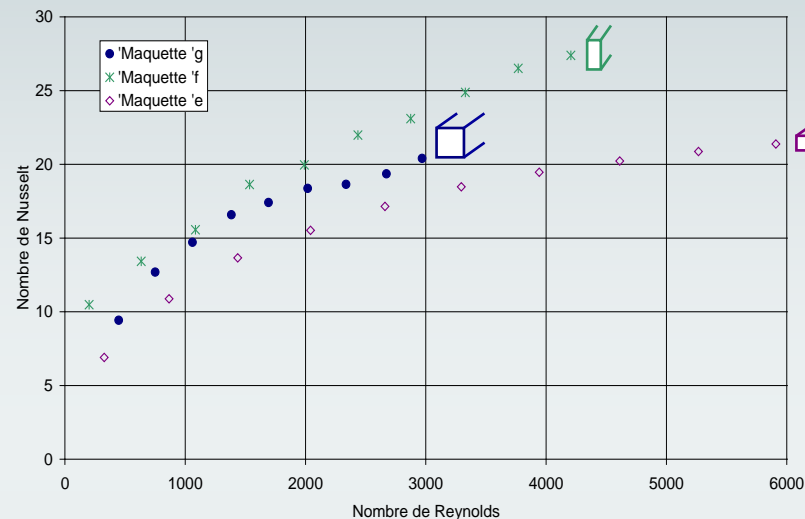
# EXTRAPOLIS

Géométries classiques favorables à l'extrapolation



## DEANHEX

Le nombre de Nusselt est conservé dans l'extrapolation basée sur le Dean interne







# EXTRAPOLIS



Géométrie innovante à recombinaison de flux



EXTRAPOLEX

Référence Chen & Gray, Physics of Fluids,( 2007)

Caractérisation thermohydraulique CFD 3D

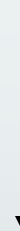


Fabrication de 3 maquettes avec intégration des utilités



- Intensification thermique d'un facteur 4 à 5 /canal droit équivalent
- Augmentation de pression limitée (+20%) / canal droit équivalent

Différents procédés métallurgiques testés



Dépôt d'un brevet dans le cadre du projet EXTRAPOLIS



# EXTRAPOLIS

## Bilan



L'ensemble des géométries et solutions étudiées permet de couvrir différentes classes de procédés selon la gamme de nombres de Reynolds

$Re < 10$

Grande viscosité- Peu de diffusion



Chaotique

EXTRAPOLEX

$Re < 1000$

Régime inertiel



Echangeur coudé

DEANHEX

$Re > 5000$

Régime turbulent



Générateur de vortex

HEV



# EXTRAPOLIS

## avancement du projet



	LOT 1 Etudes théoriques	LOT 2 Etude Expérimentale DEANHEX	LOT 3 Etude Expérimentale HEV	LOT 4 EXTRAPOLEX
AE1	Revue théorique de l'extrapolation par analyse dimensionnelle	Etude expérimentale du réacteur DEANHEX : optimisation géométrique <ul style="list-style-type: none"> <li>➢ Micromélange</li> <li>➢ DTS</li> <li>➢ Thermique</li> <li>➢ chimie</li> </ul>	Performances du HEV <ul style="list-style-type: none"> <li>➢ Micromélange</li> <li>➢ DTS</li> <li>➢ thermique</li> </ul>	Design d'un réacteur sur des critères de bon maintien des performances
AE2	Alignement gradients/vorticité r- factor	Crières de choix du prototype	Extrapolation des performances à l'échelle 2,5	Réalisation d'une maquette
AE3	Implémentation micromélange dans les codes de calcul	<ul style="list-style-type: none"> <li>➢ performances</li> <li>➢ effusivité</li> <li>➢ régimes pulsés</li> </ul>		Test d'un prototype ?
AE4		Proposition de règles d'extrapolation en approche globale		
partenaires	<b>LTN</b> CEA CORIA LMFA	<b>LGC</b> CEA	<b>LTN</b> CEA	<b>CEA</b> LMFA



# EXTRAPOLIS

## Communications- Publications

### Communications

- **EXTRAPOLATION OF MULTIFUNCTIONAL HEAT EXCHANGERS AT INDUSTRIAL SCALE - THE EXTRAPOLIS PROJECT (D.Della Valle), GPE-EPIC Venise, 10-15 juin 2009**
- **INVESTIGATION OF LOCAL STIRRING THROUGH THE BEHAVIOUR OF TRACER GRADIENT (M..Gonzalez) GPE-EPIC Venise, 10-15 juin 2009**
- **EVOLUTION OF LENGTH SCALES AND TURBULENCE SPECTRA IN THE EXTRAPOLATION OF EXCHANGER SIZE (T.Lemenand) GPE-EPIC Venise, 10-15 juin 2009**
- **Hydrodynamic study and optimization of the geometry of a Heat Exchanger/Reactor (Z.Anxionnaz). GPE-EPIC Venise, 10-15 juin 2009**
- **Intensifying the turbulent kinetic energy dissipation rate by redistributing the streamwise vorticity (C.Habchi) GPE-EPIC Venise, 10-15 juin 2009**
- **Mélange local et comportement non-stationnaire du gradient d'un scalaire passif(M.Gonzalez,P.Paranthoen), 19eme congrès français de Mécanique, Marquille ,24-28 août 2009**

### Publications dans des revues internationales à comité de lecture

- C. Habchi, et al., Alternating mixing tabs in multifunctional heat exchanger-reactor, Chem. Eng. Process. (2009), doi:10.1016/j.cep.2009.07.003
- M.Gonzalez, P.Paranthoen, On the role of unsteady forcing of tracer gradient in local stirring, accepted in EJM, DOI available in 2 weeks(2010)
- Nonstationary aspects of passive scalar gradient behaviour, A. Garcia, M. Gonzalez \*,P.Paranthoën, European Journal of Mechanics B/Fluids 27 (2008) 433–443
- Heat exchanger/reactors (HEX reactors): Concepts, technologies: State-of-the-art, Z. Anxionnaz,, M. Cabassud,\*, C. Gourdon, P. Tochon, Chemical Engineering and Processing 47 (2008) 2029–2050



# EXTRAPOLIS

Publications communes envisagées dans le cadre du projet  
EXTRAPOLIS



## A. Des pistes pour l'extrapolation des MHE (CEA, LTN, LGC, LTN)

1. Introduction : appliquer le concept de l'intensification aux réacteurs industriels, compenser la perte d'efficacité par rapport à l'échelle labo en introduisant des éléments d'intensification, par exemple jouer des coudes, générer des vortex, réaliser des géométries innovantes à recombinaison de flux (ce qui sera montré en exemple ici) *Patrice-Michel C-Zoé-Christophe*
2. les principes de l'extrapolation des transferts et des réactions chimiques dans les réacteurs ouverts : où l'on voit que les transferts de masse (chimie) et de chaleur ne suivent pas le nombre de Reynolds *Philippe-Christophe*
3. Exemples de démarches d'extrapolation
  - 3.1 Tube coudé (DEANHEX) CEA(LGC)
  - 3.2 Générateurs de vortex (HEV) LTN
  - 3.3 Recombinaison de flux (EXTRAPOLEX) CEA-LMFA
4. Conclusions et perspectives

Réponses possibles à la demande industrielle selon les gammes de Reynolds *Patrice-Michel C-Christophe-Zoé*

## B. Intensification du mélange par écoulement pulsé : approche par analyse de l'étirement local (CORIA, LTN)

Le facteur  $r$  et sa pdf comme indicateur de mélange : comparaison stationnaire/permanent périodique





# EXTRAPOLIS

Publications communes potentielles dans le cadre du projet  
EXTRAPOLIS

## C. Conception et optimisation d'échangeurs/réacteurs en phase liquide par introduction d'un modèle de micromélange dans les codes CFD (CEA, LGC, CORIA, LTN)

Modèle de Fox

Cas d'école (mise au point sur une réaction rapide acide/base)

Validation sur la sonde chimique en canal rectangulaire (données S.Ferouillat) *avec ou sans inserts?*

## D. Approche numérique pour le macro-mélange et le micro-mélange dans l'extrapolation des réacteurs chimiques (LMFA, CEA, LGC, CORIA, LTN)

### Aspects méthodologiques

DTS numérique (LMFA)

Implémentation du micromélange dans les codes CFD : laminaire (LMFA), turbulent (CEA, LTN)

## E. Réalisation et test de performances d'une géométrie de réacteur chimique à recombinaison de flux à des fins d'extrapolation (LMFA, CEA, LGC)

1. Géométries de Chen Meiers : principe du mélangeage (*Philippe*)
2. Fabrication du prototype : techniques testées et retenues (*Raphaël*)
3. Modélisation numérique (*Jean-François, Zoé*)
4. Test de performances (*Patrice, Raphaël*)



# EXTRAPOLIS

## Rapport final –mai 2010

Chaque chapitre correspond à un rapport de 5 pages

Épreuves avril 2010

Problème du format : assembler des fichiers pdf?

1.Synthèse du coordonnateur (5 pages)

2.LMFA

-l'extrapolation dans les réacteurs ouverts

-géométries à recombinaison de flux

3.CORIA/LTN

Les capacités de transfert par analyse des étirements locaux

4.LGC/CEA

Extrapolation de l'échangeur coudé

5. LTN

Extrapolation des échangeurs à générateurs de vortex

6.CEA

Conception et test d'un échangeur à recombinaison de flux



# EXTRAPOLIS

## structure du projet

### AXE THEORIQUE: études génériques

-**position du problème de l'extrapolation « en débit ».** Revue des performances dans les combinaisons suivantes :

- Réacteur ouvert/fermé
- Régime laminaire/turbulent
- Réaction chimique rapide/lente

-**étude des mécanismes fondamentaux du mélange.** L'approche mécanique de la production de gradient scalaire par l'alignement vorticités/étirement permet de s'affranchir du régime d'écoulement.

-**étude de l'extrapolation du micromélange .** L'implémentation d'un modèle de micromélange dans un code CFD (Fluent) permet de prendre en compte le micromélange (qui est crucial dans les réactions rapides) dans l'extrapolation

### AXE APPLIQUE : étude de géométries spécifiques

#### Etude de l'extrapolation de l'échangeur à plaques DEANHEX

Mesures sur différentes géométries pour l'optimisation et le calcul des performances équilibre/hors équilibre avec le simulateur GC :

- La DTS
- La perte de charge
- Le transfert thermique
- Le micromélange
- Le temps de mélange global

**Echangeurs chaotiques.** Etude théorique et numérique des performances.

**Echangeur HEV.** Comparaison des performances à deux échelles

**EXTRAPOLEX .** réalisation d'un prototype extrapolable sur la base d'une géométrie chaotique



# EXTRAPOLIS

## LOT 1 AE1 Analyse dimensionnelle



Rapport 46 pages de Philippe Carrière

« Lois d'extrapolation en débit des réacteurs chimiques »

- Réacteurs ouverts/fermés
- Flux unique/divisé
- Régimes laminaire/turbulent
- Chimie rapide/lente
- Exothermicité

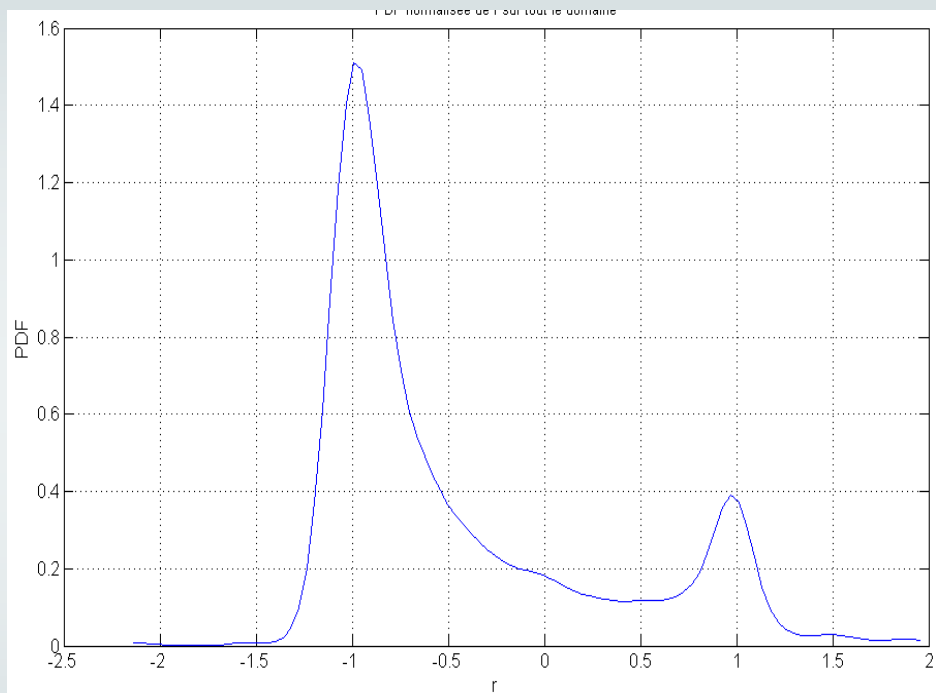
*Publication commune LGC ?*



# EXTRAPOLIS

## LOT 1 AE2 r-factor

Contrat CDI Hakim Mohand Kaci (janvier-juin 2009)



**Contradiction avec Lapeyre** ; Pas d'alignement avec la direction préférentielle

- *Reste la mise en forme des résultats*





# EXTRAPOLIS

## LOT 1 AE3 CFD et micromélange



Stage PFE 150h Maxime Poisson- Delphine Prevost

« Implémentation du micro-mélange dans Fluent pour le calcul d'écoulements turbulents réactifs »



Jury de Soutenance

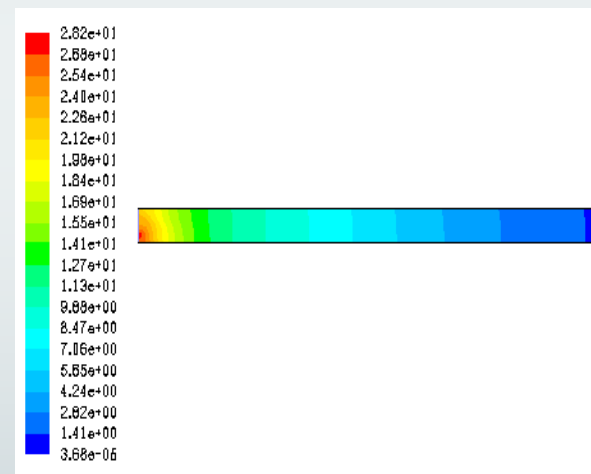
P.Mercier

H.Peerhossaini

J.Belletre

Y.Scudeller

D.Della Valle



Champ de variance du scalaire non prémélangé

*À poursuivre*

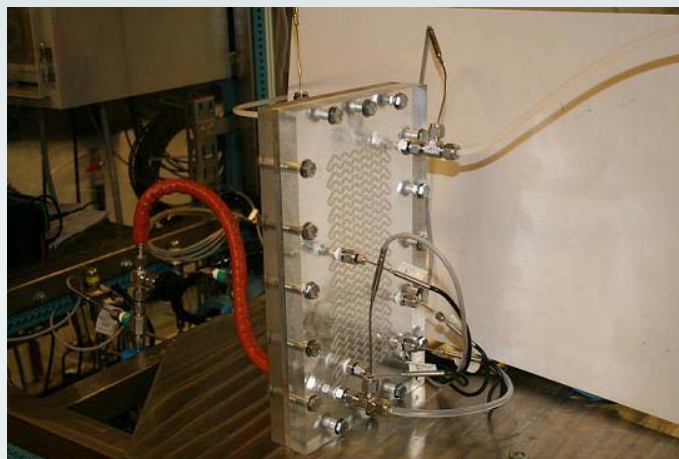




# EXTRAPOLIS

## LOT 2 AE1-AE2-AE3 DEANHEX

Thèse Zoé Anxionnaz



Sept géométries différentes sont caractérisées. Chaque géométrie, donc chaque maquette, représente la variation d'un seul paramètre parmi ceux listés ci-dessous :

Rayon de courbure ( $R_c$ )

Longueur droite ( $L_d$ )

Angle des coudes ( $\theta$ )

Facteur de forme ( $a/b = \text{largeur du canal}/\text{hauteur du canal}$ )

L'influence de ces paramètres sur les comportements hydrodynamique et thermique de la plaque "réactive" est étudiée.



# EXTRAPOLIS

## LOT 3 AE1-AE2-AE3 HEV

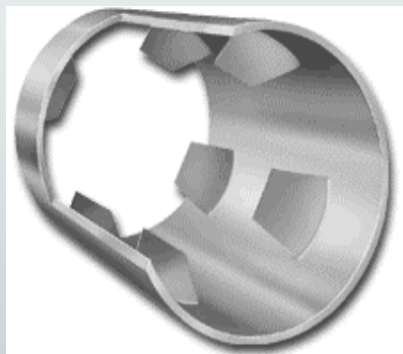


AE1 : catalogue de performances du HEV

- DTS
- Micromélange
- Transferts thermiques
- Dispersion L/L



AE2 : performances à l'échelle 2,5



AE3 : extrapolation des transferts thermiques

*Lois d'échelle?*



# EXTRAPOLIS

## LOT 4 AE1-AE2-AE3 EXTRAPOLEX

**Stage ingénieur , CEA de Grenoble:**



design, réalisation et tests d'un échangeur/réacteur multifonctionnel « extrapolable »

