

***Couplage de l'Adm1 cinétique avec
le modèle piston avec dispersion
axiale***

***Vérification de l'applicabilité du
Comsol Multiphysics***

Presenté par: Hmissi Maha

Encadré par: Jerome Harmand

Introduction

Le modèle piston avec dispersion axiale, appelé aussi, **diffusionnel piston**, a été développé pour caractériser les écoulements dans les réacteurs tubulaires dont les comportements sont très proches de l'écoulement piston.

Loi de Fick:

$$J = -D \frac{\partial C}{\partial z}$$

Modèle piston avec dispersion axiale

- ❖ Le fluide se déplace à travers le réacteur à une vitesse uniforme U égale à la vitesse moyenne du fluide dans le réacteur étant modélisé
- ❖ Dispersion se produit dans la direction axiale. L'étendue de la dispersion est suffisante pour tenir compte des effets combinés de tous les phénomènes de dispersion (mélange moléculaire turbulent, et des vitesses non uniformes) dans le réacteur réel.

L'écriture du bilan de matière en traceur en régime non permanent s'écrit :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

La solution de l'équation dépend mathématiquement du nombre sans dimension appelé nombre de Péclet

Un réacteur est généralement caractérisé par son Péclet.

$$Pe = \frac{UL}{D} = \frac{\text{flux convective}}{\text{flux dispersive}}$$

Avec :

U la vitesse d'écoulement du fluide
dans le réacteur tubulaire ;

L la longueur du réacteur ;

D le coefficient de dispersion axiale.

- Si $Pe \longrightarrow 0$ le coefficient de dispersion $\longrightarrow \infty$
alors l'écoulement tend vers celui du réacteur
parfaitement agité
- Si le coefficient de dispersion D est égal à zéro, il
s'agit d'un écoulement piston.

Couplage de l'ADM1 cinétique avec le *Modèle dispersif*

- Notre travail se manifeste dans le couplage du modèle cinétique de l'ADM1 avec le modèle hydrodynamique (Modèle de dispersion axiale)
- Le modèle à paramètres distribués prend en compte le même état dynamique de ADM1 pour un réacteur parfaitement mélangé (CSTR)

Anaerobic digestion model no. 1 (ADM1)

- ❖ 10 Equations différentielles (ED) pour modéliser l'évolution des substrats solubles de la phase liquide
- ❖ 2 ED pour modéliser le CI et NI
- ❖ 12 ED pour décrire le comportement dynamique de la matière particulaire et les concentrations de la biomasse en phase liquide
- ❖ 6 ED pour modéliser les réactions acide-base, afin de déterminer le pH des effluents et pour calculer les formes ionisées des AGV, l'azote en ammoniac libre et des concentrations de dioxyde de carbone.

1. Phase Liquid

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D(z, t) \frac{\partial C_i(z, t)}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial z} (u(z, t) C(z, t)) + r_i, -M_i$$

Avec:

- Premier terme caractérise le terme dispersive
- Le second terme caractérise le transport convectif de composant C_i suivant la direction axiale
- Les deux derniers termes déterminent le taux de biotransformation et le transfert de gaz pour le composant C_i

Conditions aux limites de Danckwerts

- $D_i(z, t) \frac{\partial C_i}{\partial z} = u_i(z, t) (C_{i(z=0)} - C_{i,in}), z = 0$
- $\frac{\partial C_i}{\partial z} = 0, z = H$

2 . Phase gazeuse

$$\frac{\partial S_{gas}(z, t)}{\partial t} = \frac{V_{liq}}{V_{gas}} r_T(z, t) - \frac{1}{V_{gas}} \frac{\partial}{\partial z} (q_{gas}(z, t) S_{gas}(z, t))$$

q_{gas} est le débit volumétrique de biogas il est egal à :

$$q_{gas} = \frac{RT}{P_{atm} - p_{gas, h2o}} V_{liq} \int_0^H \sum M_{T,i} dz$$

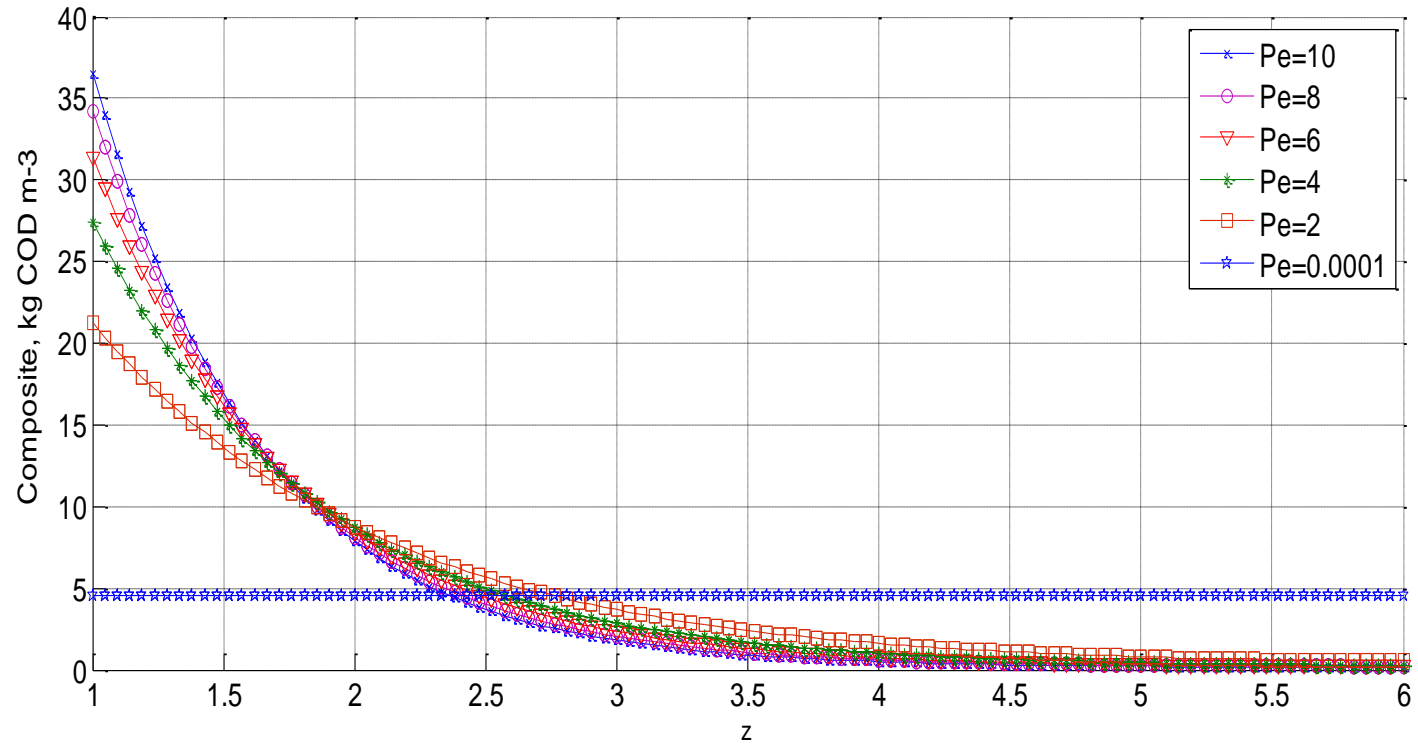
Vérification de l'applicabilité du comsol Multiphysics

Comportement hydrodynamique  Comsol Multiphysics

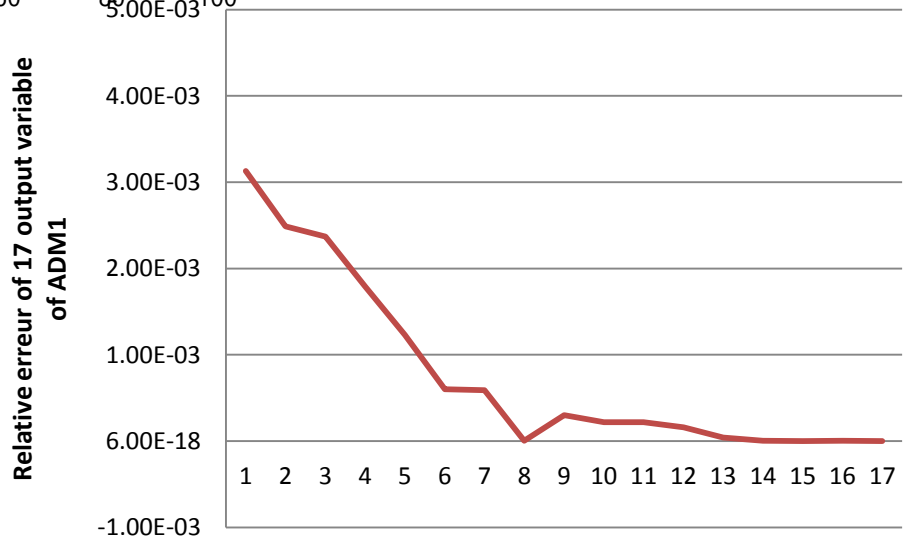
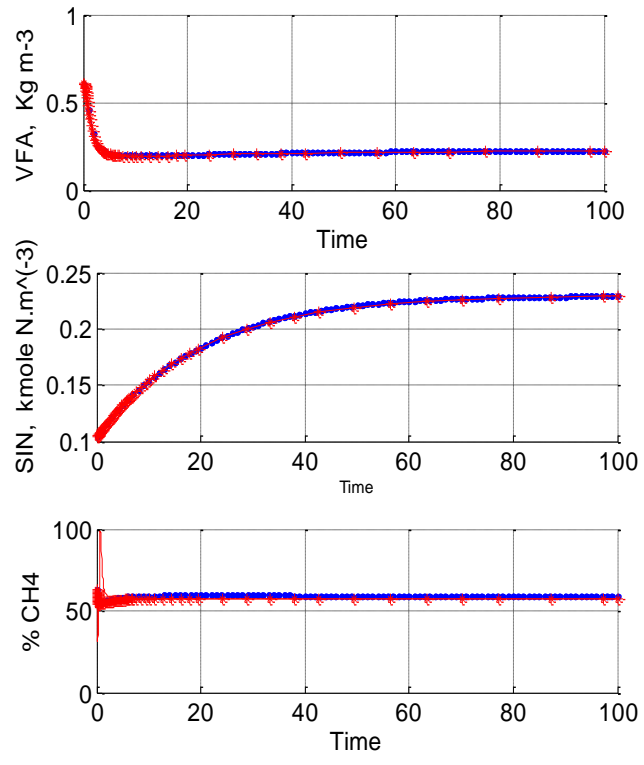
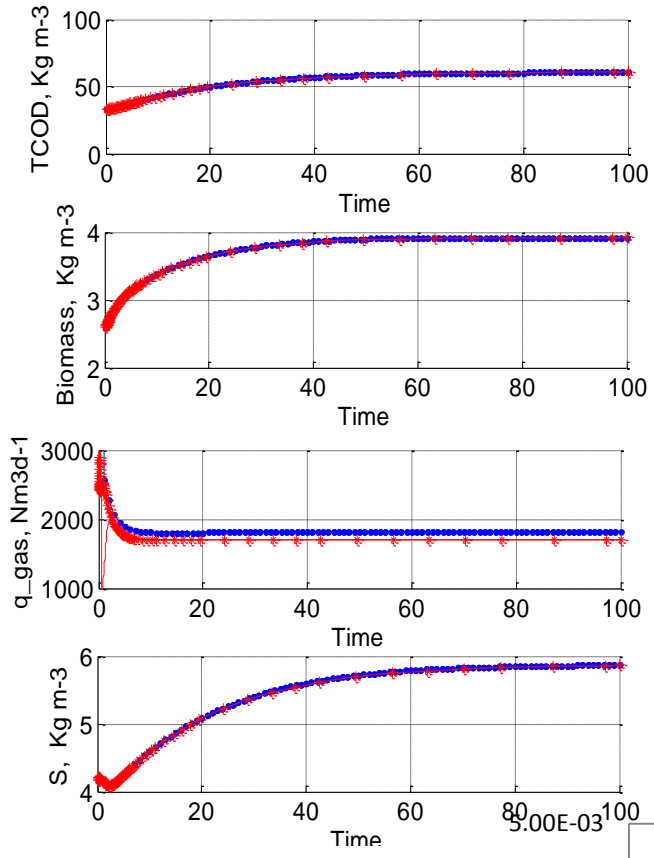
 résoudre un système d'équations différentielles partielles

 Éléments finis

1. Nombre de Peclet

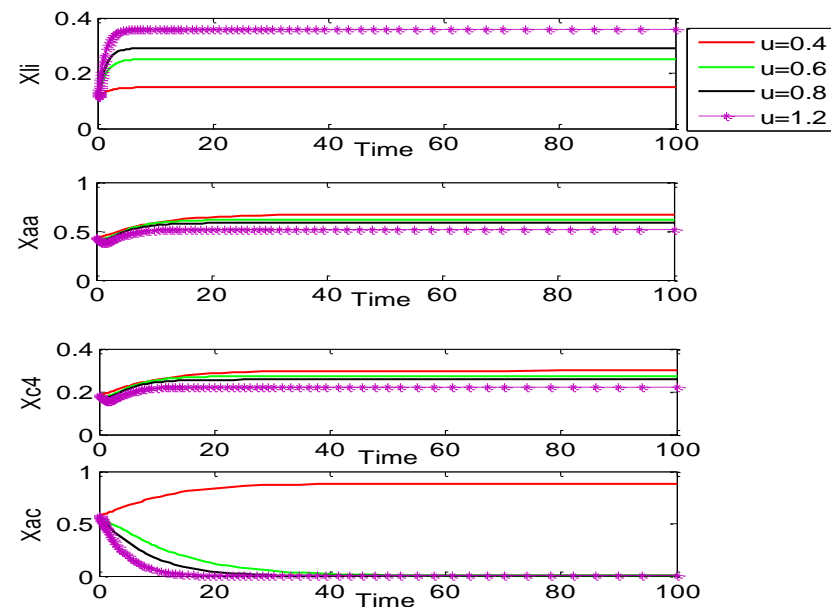
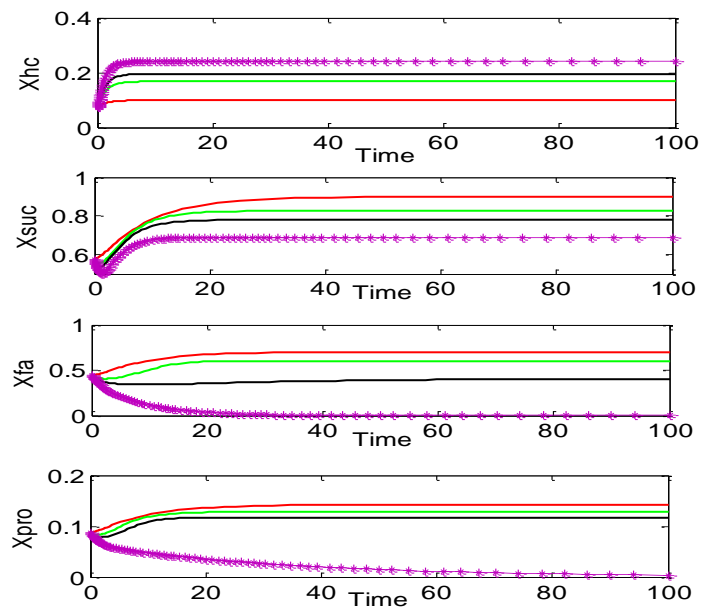
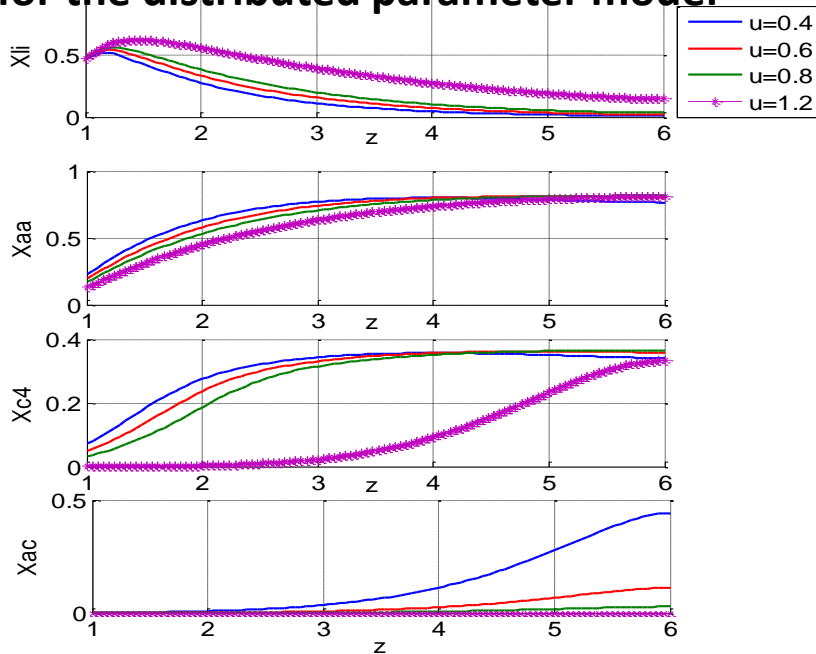
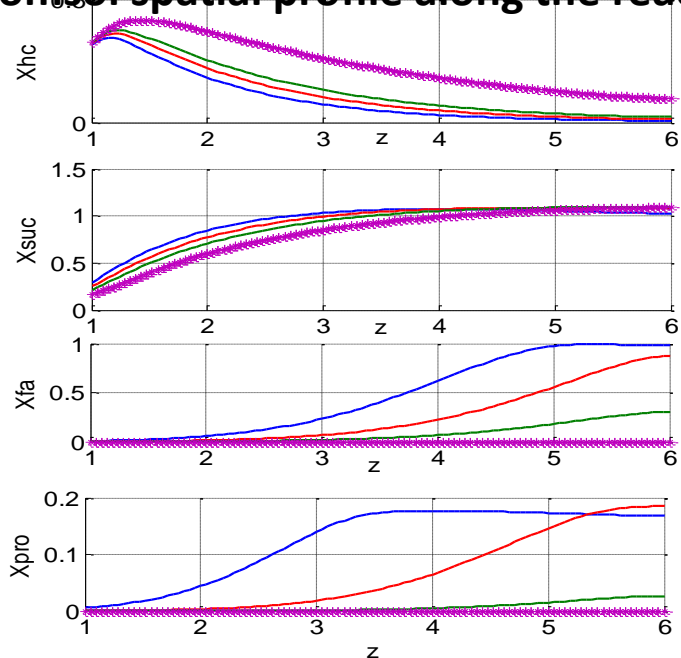


**Comparaison entre les sorties d'un ADM1
homogène et celui spatialisé avec une
dispersion assez grande**



Consol spatial profile along the reactor for the distributed parameter model

2. Dilution

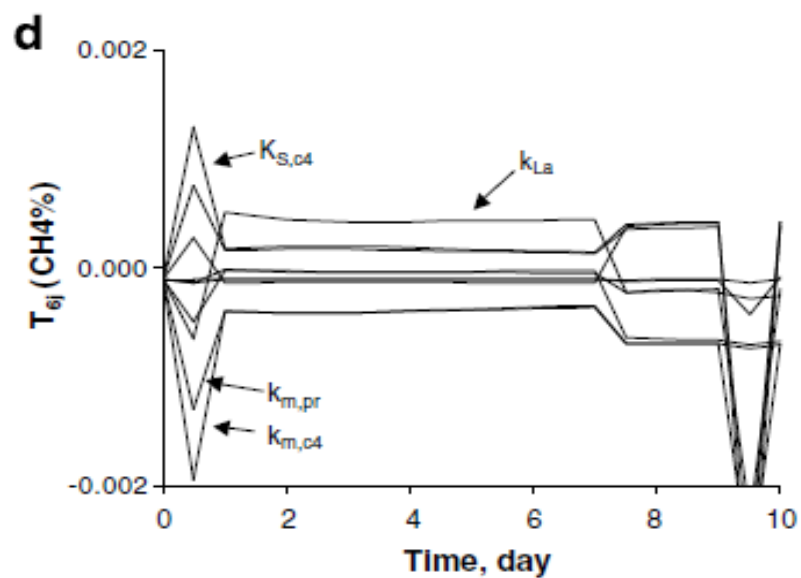
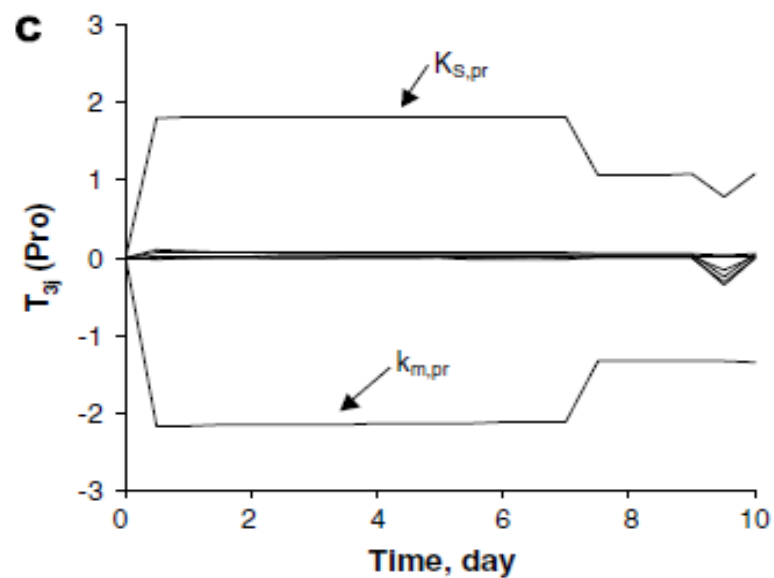
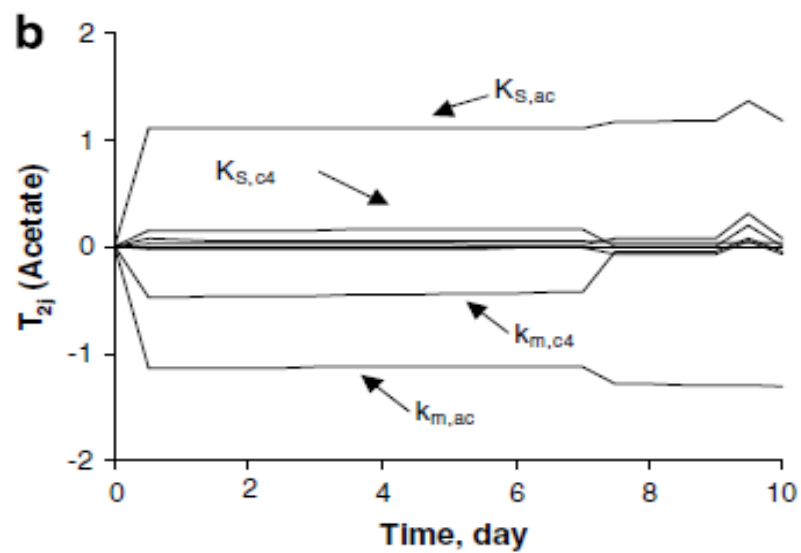
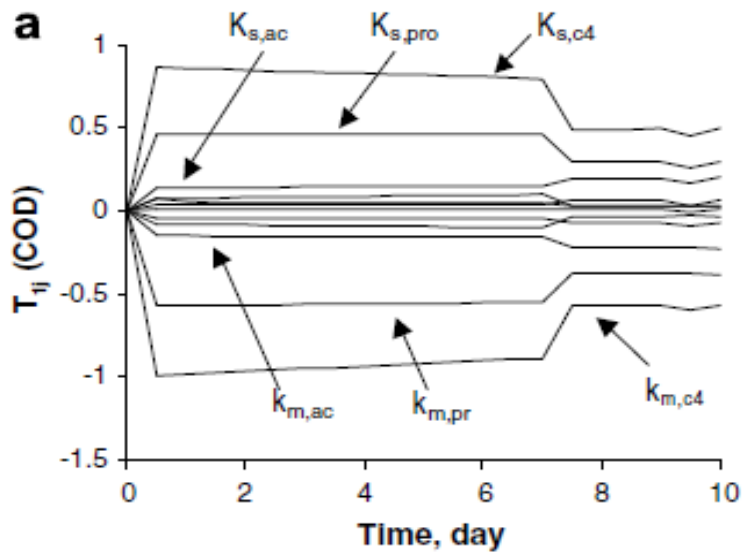


Temporal profile for the ADM1 (CSTR)

3. *Etude comparative avec les travaux de Tartakovsky*

- Une étude de sensibilité a été faite sur différents paramètres cinétiques pour voir leur l'influence sur les 4 sorties DCOs, Acetate, Propionate et Methane

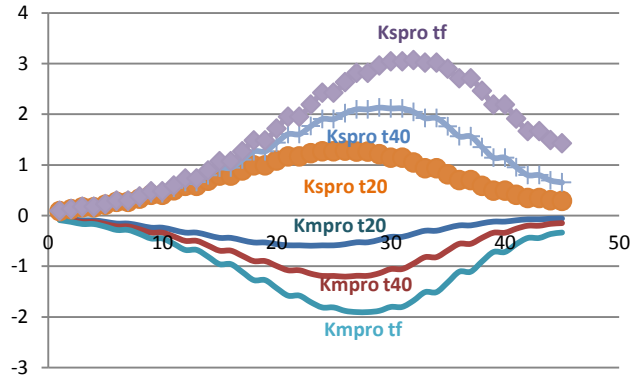
$$T_{ij} = \frac{\partial C_i / C_i}{\partial p_j / p_j} \approx \frac{(C_i(t, p_j + \partial p_j) - C_i(t, p_j)) / C_i(t, p_j)}{\partial p_j / p_j}$$



Etude de sensibilité (Tartakovsky)

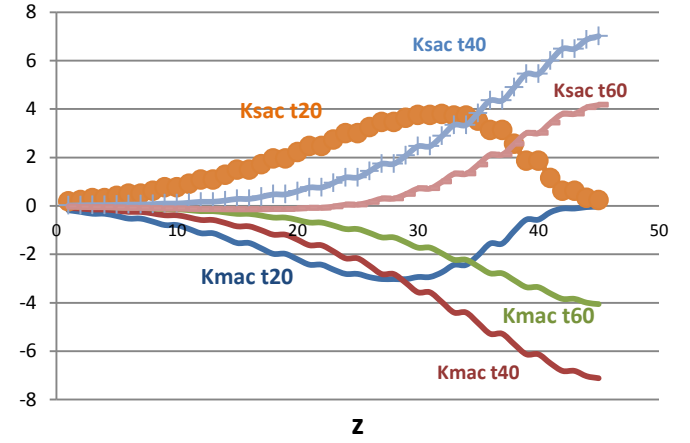
Sensitivity functions (local-relative) of the Propionate to the model parameters Kmpro and Kspro

Sensitivity Functions Propionate

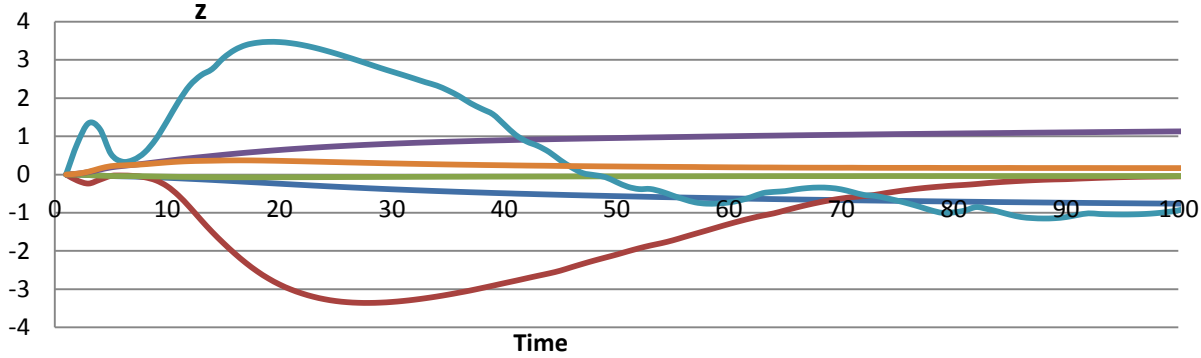


Sensitivity functions (local-relative) of the Acetate to the model parameters Kmac and Kscac

Sensitivity Functions Acetate

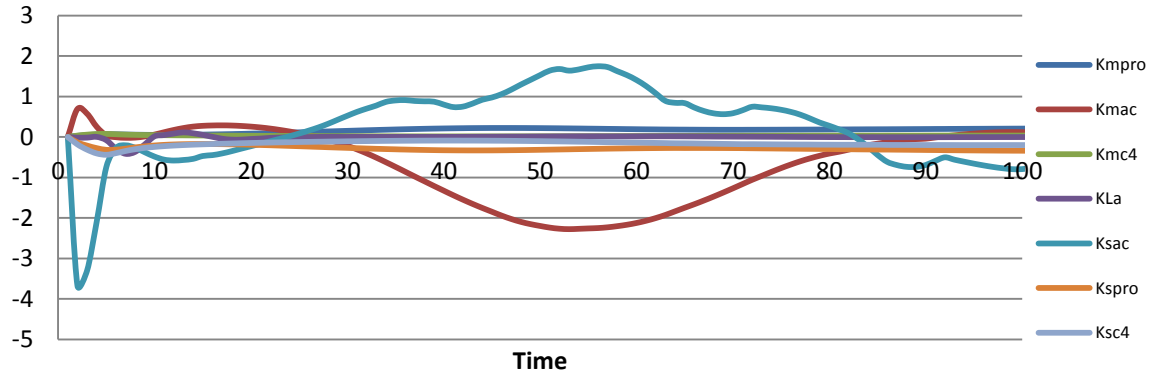


Sensitivity Functions of SCOD to the model parameters



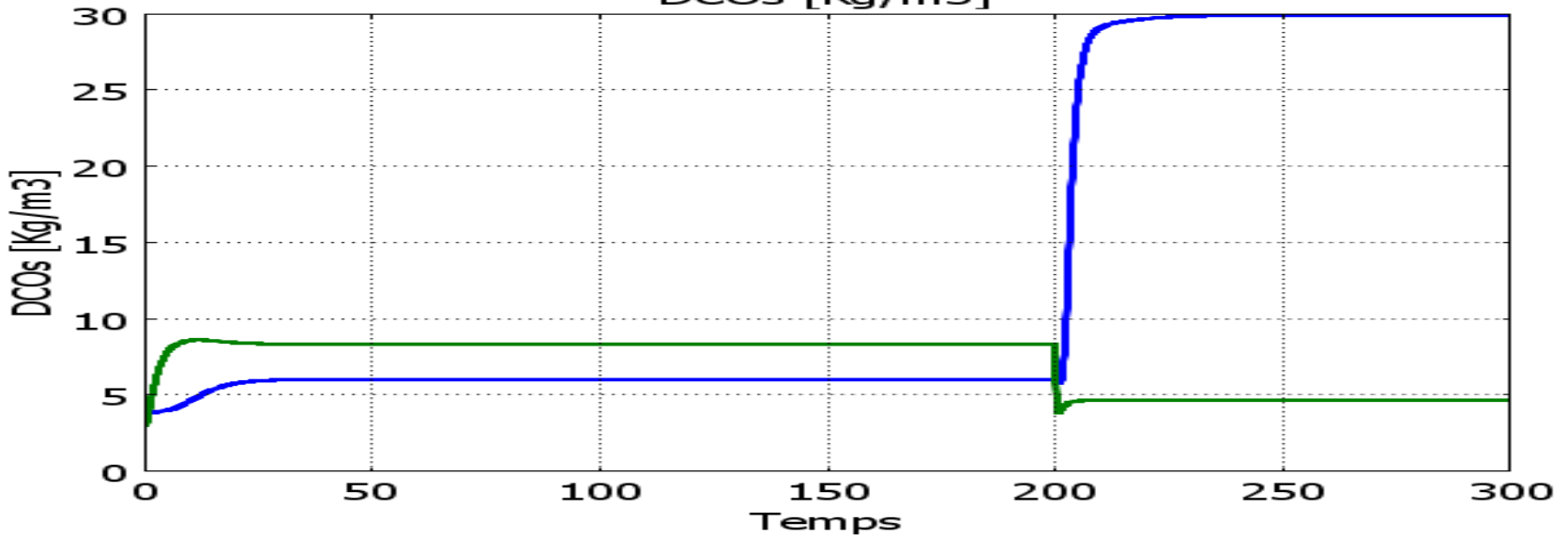
- Kmpro
- Kmac
- Kmc4
- Kspro
- Ksac
- Ksc4

Sensitivity Functions of methane to the model parameters

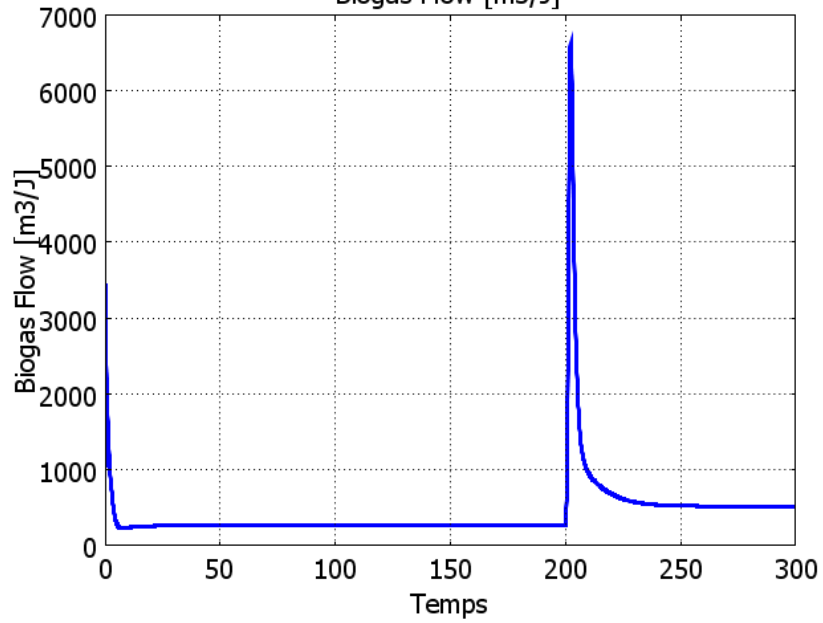


- Kmpro
- Kmac
- Kmc4
- KLa
- Ksac
- Kspro
- Ksc4

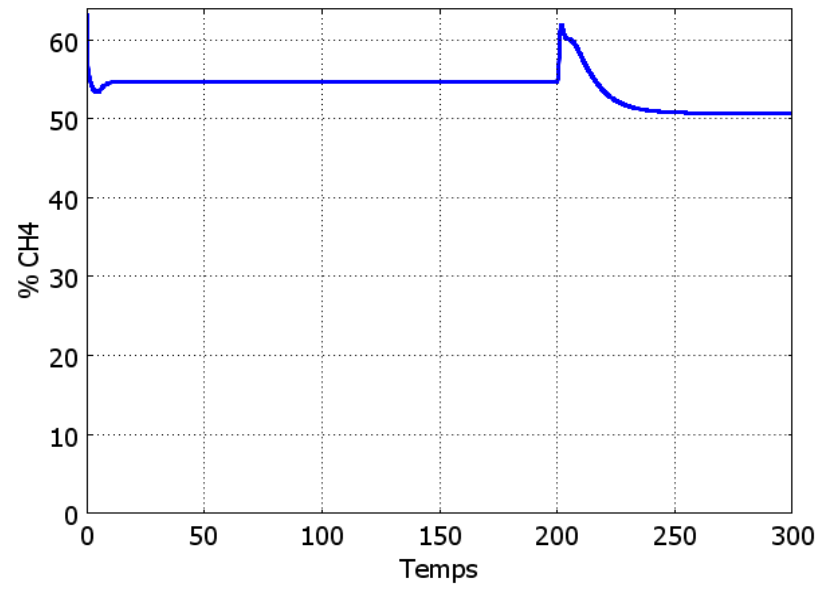
DCOs [Kg/m3]

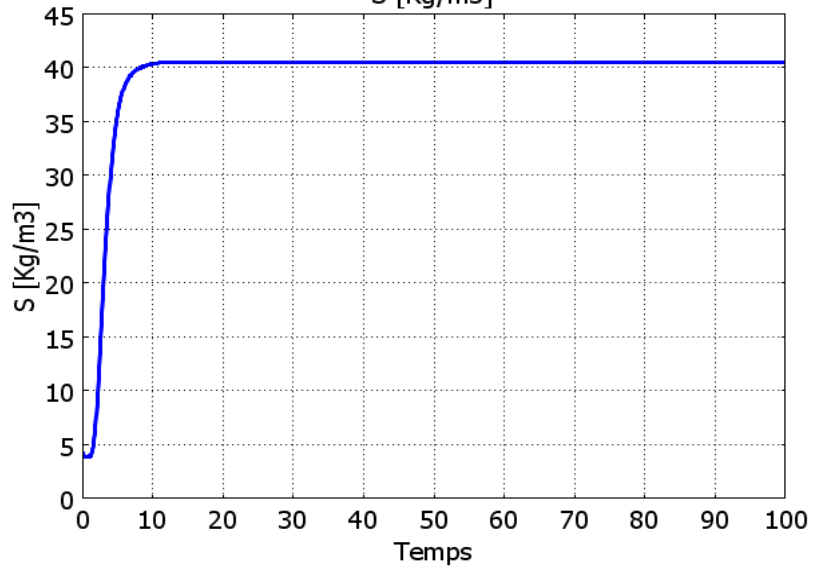
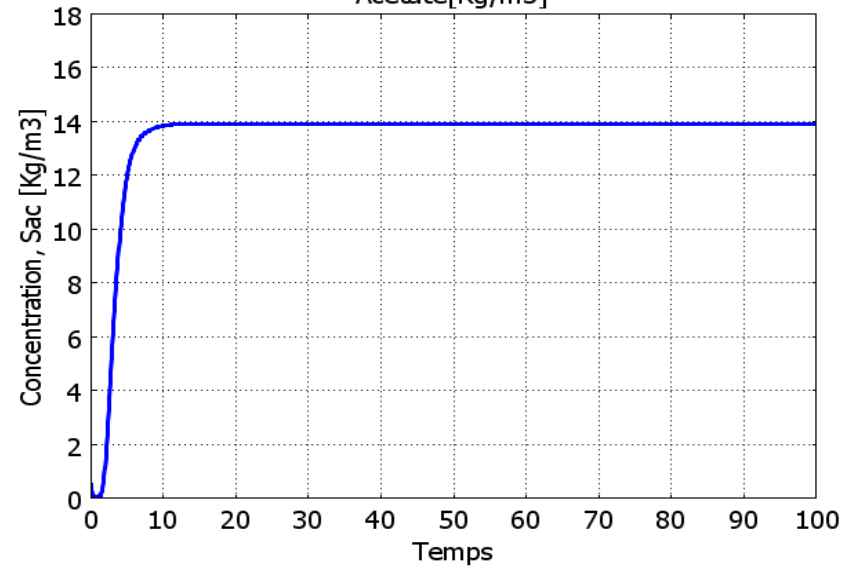
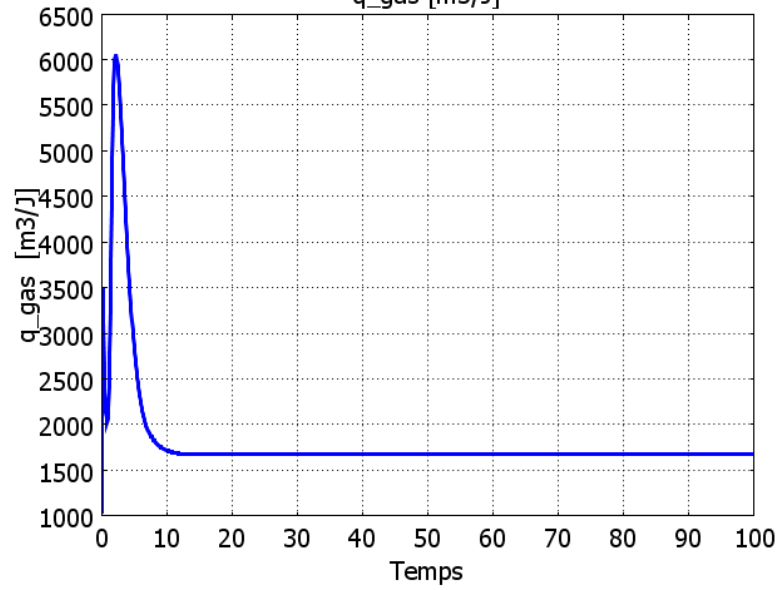
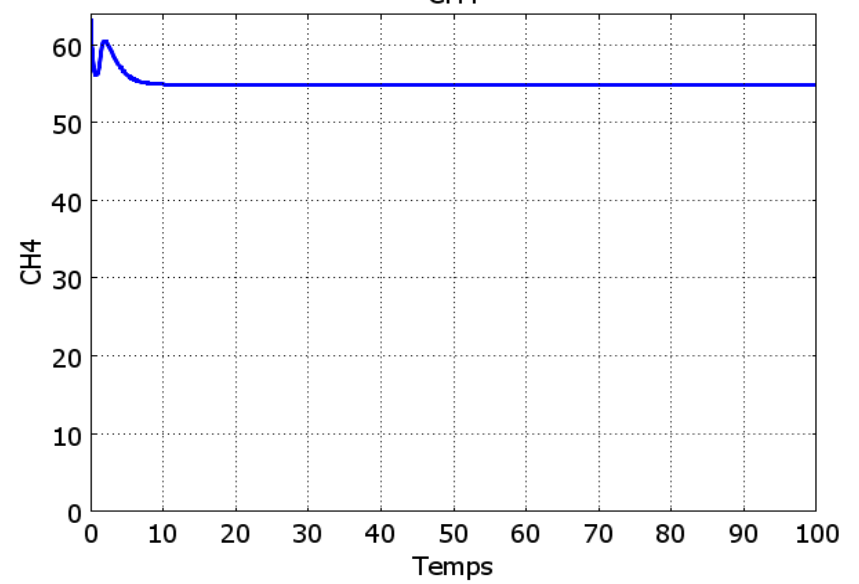


Biogas Flow [m3/J]



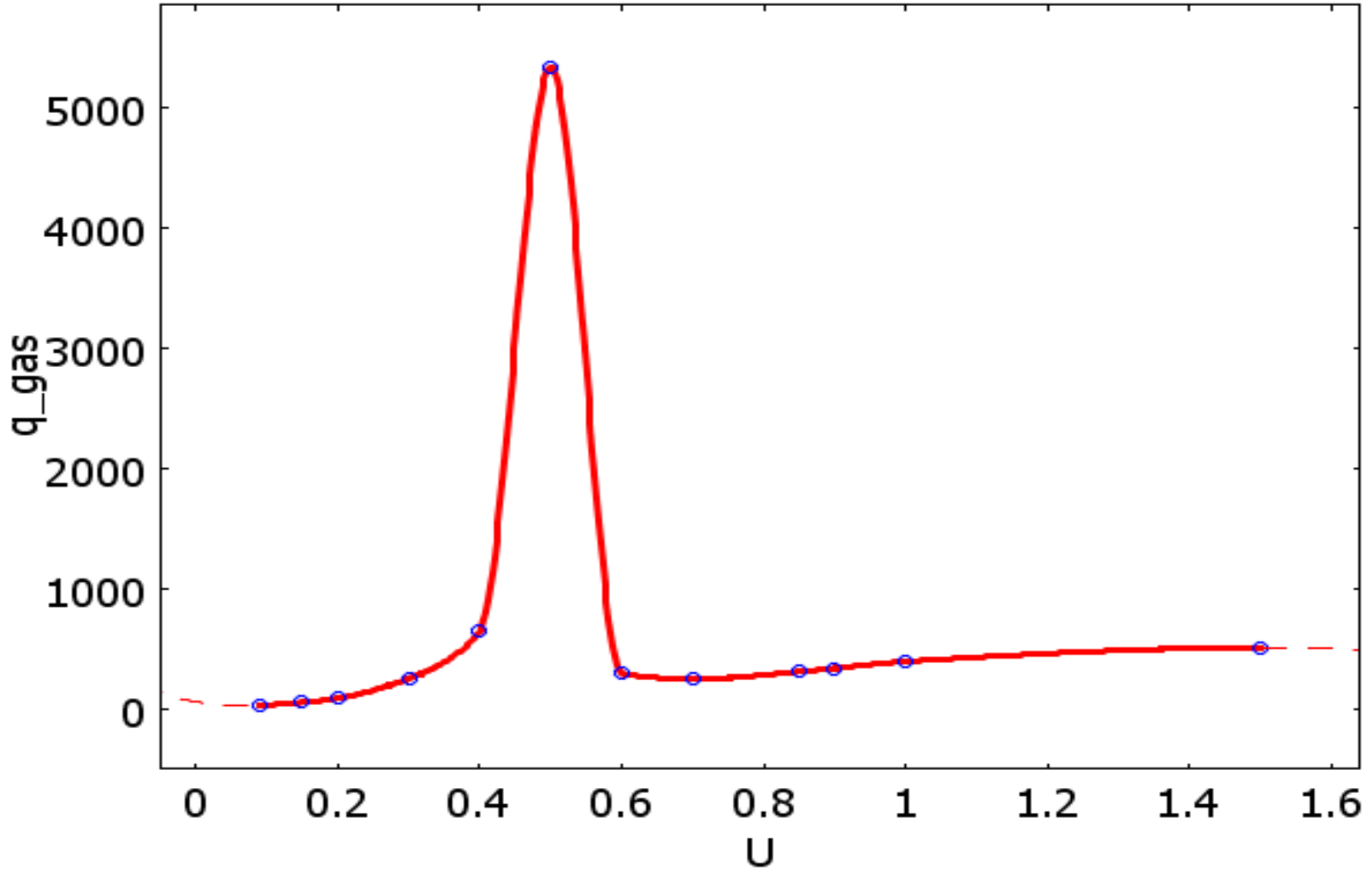
% CH4

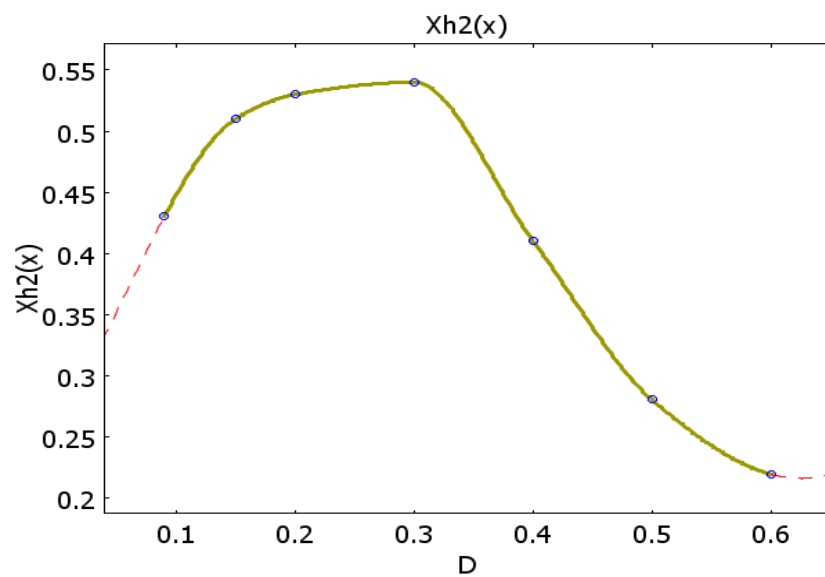
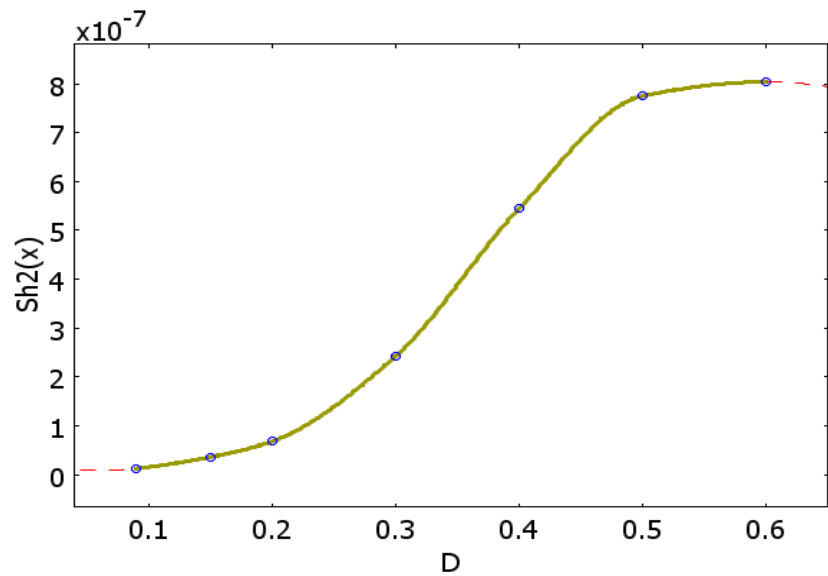
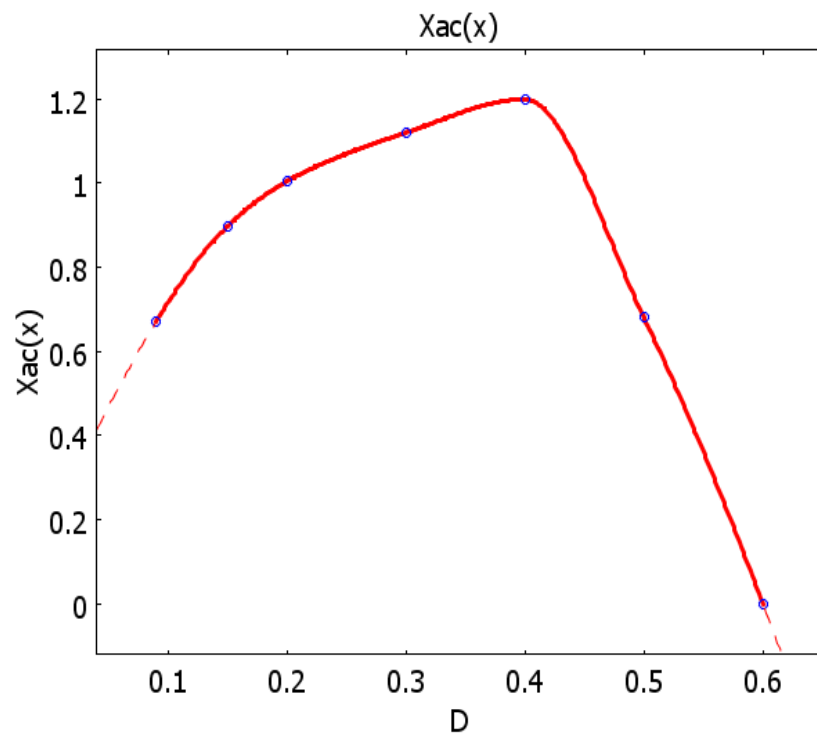
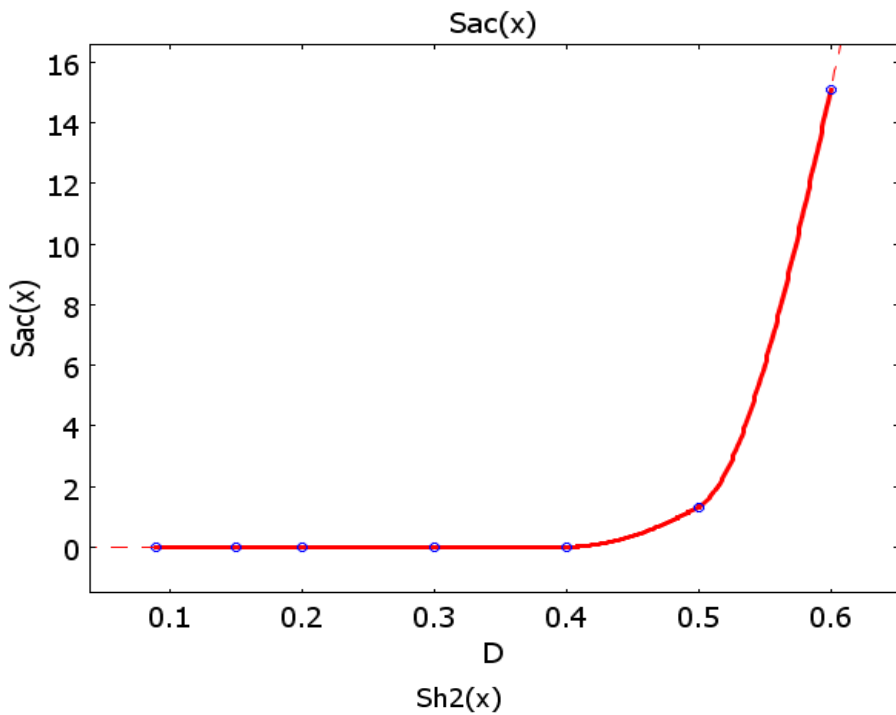


S [Kg/m³]Acetate[Kg/m³]q_gas [m³/J]CH₄

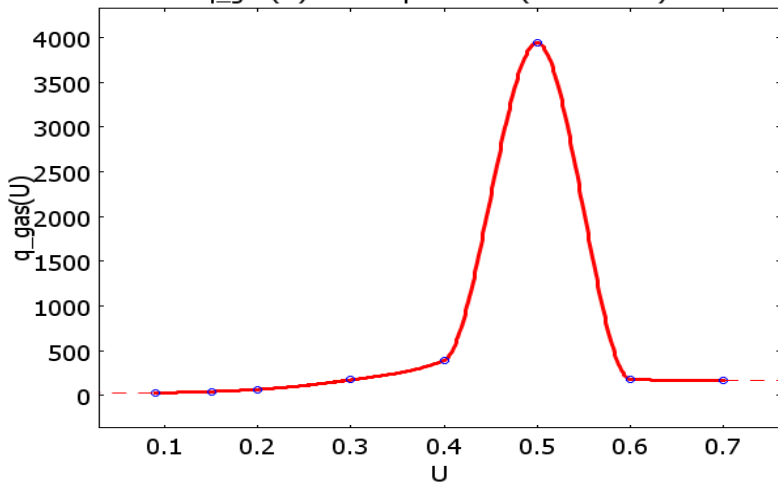
Evolution de la production de biogaz en fonction de la vitesse d'écoulement

q_gas(x)

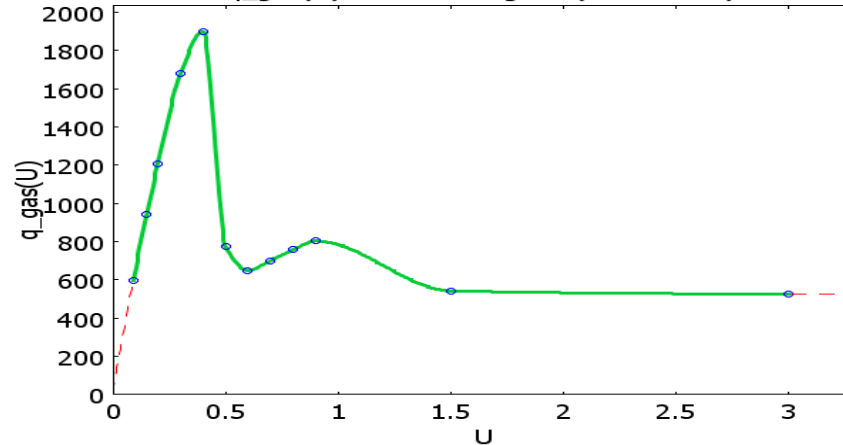




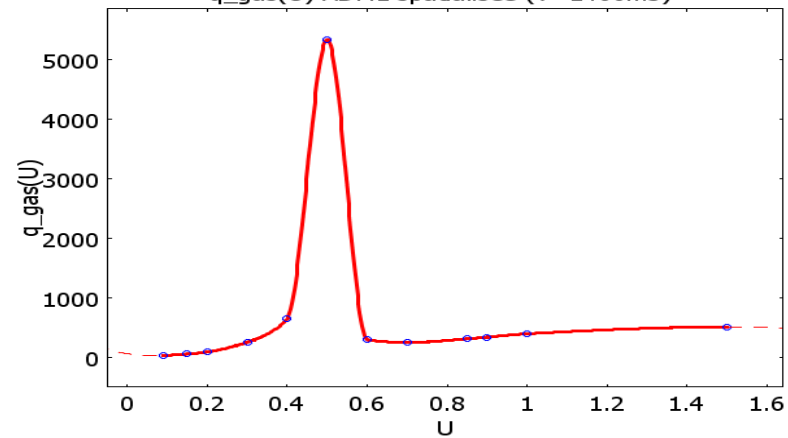
q_gas(U) ADM1 spatialisée (V=1000m3)



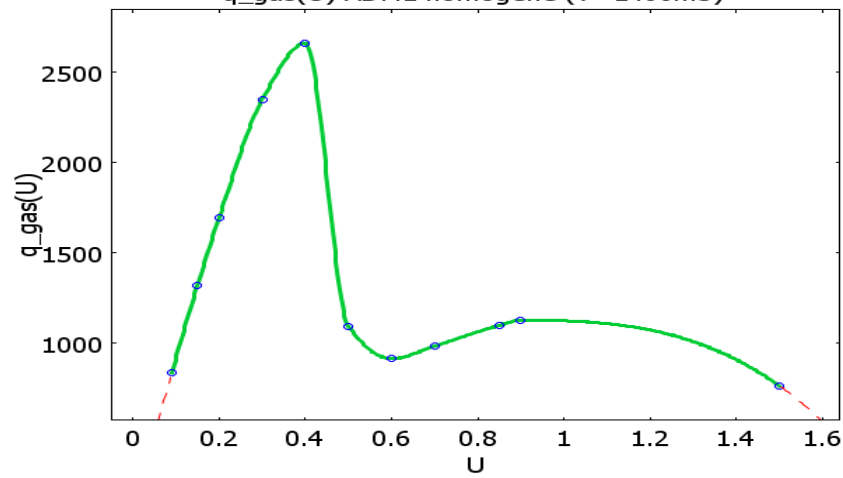
q_gas(U) ADM1 homogène (V=1000m3)



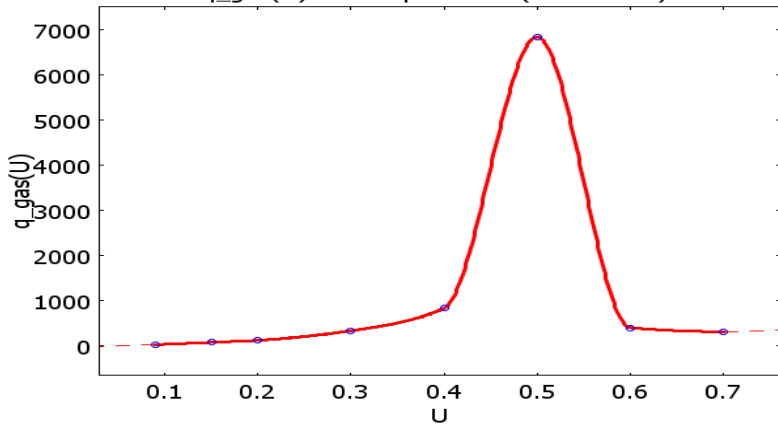
q_gas(U) ADM1 spatialisée (V=1400m3)



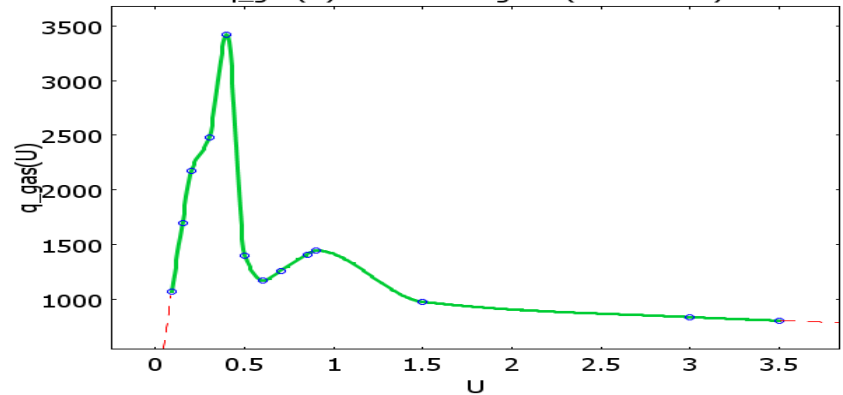
q_gas(U) ADM1 homogène (V=1400m3)



q_gas(U) ADM1 spatialisée (V=1800m3)



q_gas(U) ADM1 homogène (V=1800m3)



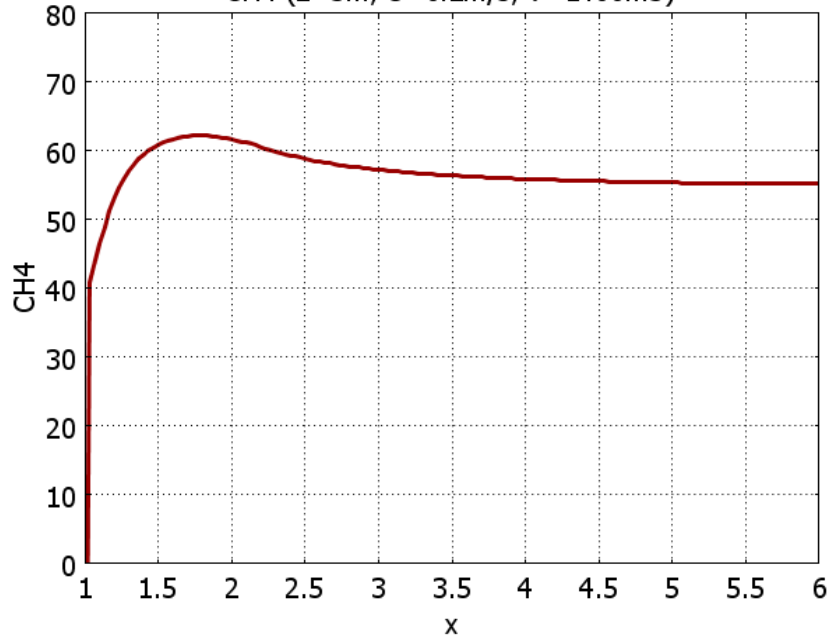
Conclusion

- Le travail mené jusqu' à présent a consisté à :
- La vérification de l'applicabilité du Comsol
- Suivre la production de biogaz dans différents conditions

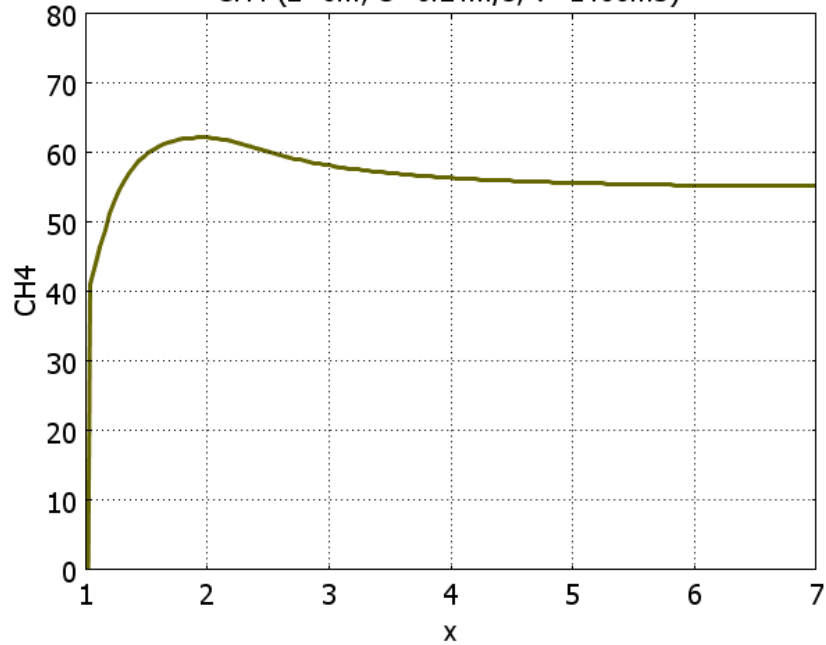
Perspectives:

- Déterminer le rôle du pH dans un ADM1 spatialisé
- Valider le modèle spatialisé

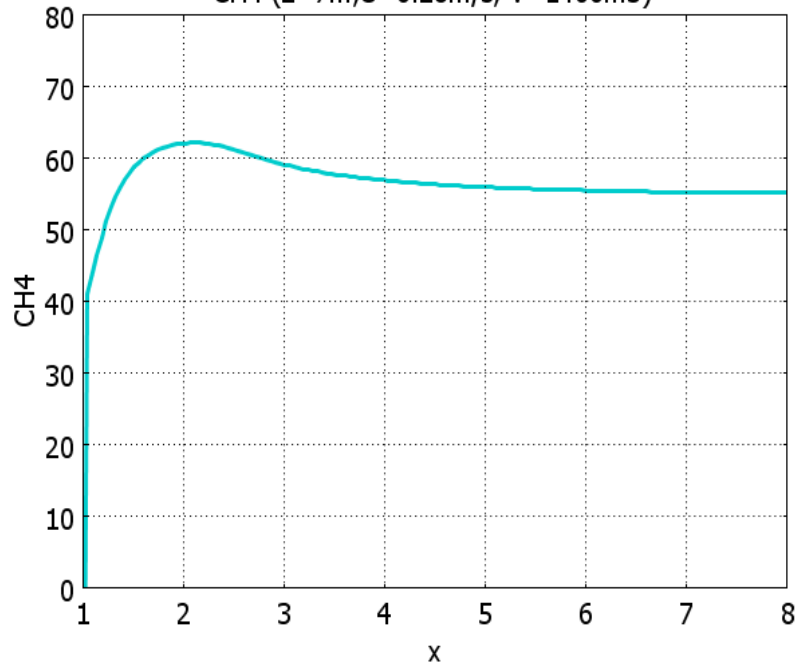
CH4 (L=5m, U=0.2m/s, V=1400m3)



CH4 (L=6m, U=0.24m/s, V=1400m3)



CH4 (L=7m, U=0.28m/s, V=1400m3)



CH4 (L=8m, U=0.32, V=1400m3)

