

## **DIPLÔME NATIONAL DE DOCTORAT**

**(Arrêté du 25 mai 2016)**

Date de la soutenance : **05 novembre 2024**

Nom de famille et prénom de l'auteur : **Madame Xiaoqian HUANG**

Titre de la thèse : Purification de l'eau usée par congélation sur paroi :  
modélisation par la méthode du champ de phase

### **Résumé**



Ce travail porte sur l'étude d'un procédé de purification de l'eau usée par congélation en couche sur paroi froide. Plusieurs études montrent que la croissance de la couche de glace dépend des caractéristiques de la phase liquide (concentration initiale en soluté, température du liquide, etc) et des paramètres opératoires (vitesse de refroidissement, ensemencement, sous-refroidissement et circulation de la phase liquide, etc). En revanche, la distribution du soluté dans la phase solide, un facteur crucial pour améliorer la performance du procédé, a été peu étudiée. Une conduite précise et rigoureuse du procédé est donc nécessaire pour obtenir une pureté de la glace bien maîtrisée. Pour atteindre cet objectif, cette thèse comporte une partie expérimentale et une partie de modélisation. Dans la partie expérimentale, le mélange H<sub>2</sub>O-NaCl a été choisi comme solution modèle. Un dispositif expérimental de cristallisation sur paroi froide a été spécifiquement conçu pour ce travail. Le montage est instrumenté avec des capteurs de température et de conductivité thermique, une caméra permet également de suivre in situ la croissance de la glace au cours des manipulations. Après une recherche bibliographique sur le principe de la cristallisation et la mise en œuvre du procédé, une série de manipulations pour une étude paramétrique a été réalisée. La croissance dendritique a été observée avec une vitesse de croissance élevée. Ce phénomène est dépendant de l'effet de convection, du sous-refroidissement, du gradient de température dans la phase liquide ainsi que de la concentration initiale de la solution à purifier. Pour la partie modélisation, la méthode du champ de phase a été choisie. Elle permet de simuler la morphologie et la cinétique de croissance du

solide, l'inclusion de liquide (poches et interstices) dans le solide, ainsi que la phase liquide. Les simulations permettent de mieux comprendre les phénomènes intervenant lors de la cristallisation, tels que l'incorporation d'impuretés dans la glace. Cette méthode, peu utilisée dans le domaine du génie des procédés, a été d'abord appliquée à la congélation d'un corps pur (eau/glace) pour comprendre les équations et étudier les paramètres du modèle. Ce modèle a ensuite été élargi à la congélation d'un mélange binaire (H<sub>2</sub>O-NaCl), correspondant au produit choisi pour l'expérimentation. Afin de respecter la cohérence thermodynamique de cette méthode, le modèle de Pitzer a été choisi pour prédire l'équilibre et les propriétés thermodynamiques. A partir de ces bases de données thermodynamiques, les équations de bilan de matière, de bilan thermique et de champ de phases sont résolues. Les effets du sous-refroidissement, de la concentration et de l'anisotropie sur la croissance dendritique des cristaux sont comparés et discutés. Ce travail innovant a démontré la pertinence de la méthode des champs de phase, jusqu'alors peu développée en génie des procédés. Cette méthode permet de décrire les phénomènes développés à l'interface liquide/solide, de prédire le comportement de la phase solide pour limiter les phénomènes d'incorporation de soluté dans la glace et plus généralement de comprendre les phénomènes mis en jeu lors de l'étape de cristallisation.

**Mots-clés :** méthode du champ de phase, cristallisation en couche, modélisation