Apport de la modélisation numérique dans la caractérisation et l'amélioration de réacteurs de biolixiviation

Céline Loubière, ingénieur docteur, chercheur post-doctorant.

BRGM, direction de l'Eau, de l'Environnement, des Procédés et Analyses (DEPA), unité Déchets et Matières Premières (DMP)
3 av. Claude Guillemin – BP 36009
45060 Orléans Cedex 2 – France
Tel. : +33 (0)2 38 64 34 12
c.loubiere@brgm.fr

Aujourd'hui, un intérêt particulier est porté à la biolixiviation en raison de la demande croissante en métaux. Elle consiste en l'utilisation de micro-organismes dans une solution acide pour récupérer les métaux, et représente une alternative là où les procédés usuels ne sont pas viables économiquement. La biolixiviation en bassin agité et aéré a récemment été identifiée comme un procédé innovant, basé sur un compromis entre coût et vitesses de réactions. Néanmoins, l'utilisation d'un agitateur flottant implique des mouvements de fluides et des transferts de chaleur spécifiques, dépendant de la conception et des conditions opératoires. La caractérisation de ces transferts de matière et d'énergie, et leur impact sur la capacité des micro-organismes à croître et extraire les métaux doivent être mieux compris, afin d'améliorer le procédé dans son ensemble. D'un côté, la mécanique des fluides numériques (CFD) permet de construire des modèles fournissant une description précise des phénomènes physiques liés à ces mouvements. D'un autre côté, un bilan de chaleur global permet de mieux appréhender les phénomènes dominant les flux de chaleur, et de prédire la température d'équilibre dans le bassin. Ces travaux de recherche portent sur la construction et le couplage de ces deux modèles dans un domaine où la modélisation est encore peu présente, dû à la complexité du mélange (liquide, solide, gaz) et des phénomènes physiques mis en jeu (locaux et couplés). Ce développement est réalisé en vue d'une conjecture avec la "réponse" de la composante biologique.

Mots clés : Biolixiviation, modélisation, agitateur flottant, mécanique des fluides numériques (CFD), bilan thermique.

Introduction

Le monde fait aujourd'hui face à une demande croissante en métaux, aussi bien pour les applications industrielles que domestiques. Il est attendu que celle-ci se poursuive, notamment par l'influence de [1] :

- La croissance de la population dans le monde, dont l'augmentation est prédite à hauteur de 30 % d'ici 2050.
- Le développement économique des pays en voie de développement.
- L'évolution des modes de vie impliquant une utilisation plus grande utilisation des ressources.
- La transition vers les ressources liées aux énergies renouvelables, aux appareils électroniques…

Il a été estimé que l'ensemble des minerais extraits des mines durant les trente dernières années correspond à la même quantité extraite durant toute la période précédente dans l'histoire humaine. Combinée à un épuisement des gisements miniers à haute teneur, cette forte demande motive l'exploitation des minerais à faible teneur et des ressources minérales secondaires (déchets miniers), généralement non-traités via les procédés traditionnels comme la pyrométallurgie pour des raisons économiques et environnementales.

1. La biolixiviation, une alternative viable

2.1 Définition

La biolixiviation est un procédé trouvant son origine dans la civilisation antique romaine [2]. Aussi désignée bio-hydrométallurgie extractive, elle consiste en l'utilisation de microorganismes pour favoriser l'extraction de métaux, tels que le cuivre ou l'or, des ressources minérales sulfurées métallifères. Ces microorganismes agissent en tant que catalyseur permettant de régénérer les agents de lixiviation, et plus particulier le couple Fe^{2+} / Fe^{3+} et l'acide (Eqs. (2) et (3)). Ces derniers permettent alors d'oxyder les métaux et de les rendre accessibles sous forme dissoute (Eq. (1)).

$$2\,Fe^{3+} + MeS \rightarrow 2Fe^{2+} + Me^{2+} + S^0 \tag{1}$$

$$2\,Fe^{2+} + 2H^+ + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow 2Fe^{3+} + H_2O \tag{2}$$

$$S^0 + \frac{3}{2}O_2 + H_2O \rightarrow 2H^+ + SO_4^{2-} \tag{3}$$

Ce pseudo-cycle de réactions nécessite de placer les minéraux et les microorganismes en condition acide (pH ≈ 1 – 2), à une température adaptée pour la croissance biologique, et en présence d'oxygène. Il se produit à l'état naturel, mais sans intervention de l'Homme pour favoriser ces conditions opératoires, les cinétiques de réactions restent lentes.

2.2 Avantages économiques et environnementaux

La biolixiviation représente une alternative à l'extraction des minerais à faible teneur ou contenant des concentrations élevées de contaminants comme l'arsenic. Elle est aujourd'hui appliquée à l'échelle industrielle pour la production de cuivre (environ 15% de la production globale) et d'or (environ 5% de la production globale), mais aussi pour le cobalt, le nickel, le zinc et l'uranium [1,3]. Cet essor a été possible grâce certains avantages économiques :

- L'exploitation de minerais non traités par les procédés traditionnels (coût trop élevé),
- Une mise en place plus simple et moins restrictive (CAPEX réduit et conditions opératoires moins contraignantes),
- Une demande énergétique en général réduite (OPEX réduit),
- Une diminution du prix de revient du métal,
- Une récupération sélective,
- L'absence de dépenses supplémentaires pour un traitement environnemental.

Ce dernier point met en évidence l'impact environnemental réduit de ce type de technique, en accord avec les stratégies de développement durable encouragées par les politiques depuis ces dernières années.

2. De la culture en tas au réacteur agité et aéré

3.1 La culture en tas

La plupart des procédés aujourd'hui mis en place à l'échelle industrielles sont basés sur le phénomène de percolation. Les minerais sont concassés puis disposés en tas de plusieurs mètres de longueur. Une solution acide contenant les bactéries et les nutriments est alors distribuée au-

dessus du tas. Une fois qu'elle a traversé l'amas solide, elle est soit recyclée pour traverser à nouveau le tas et se concentrer en métaux, soit neutralisée et les minéraux d'intérêt sont récupérés par précipitation. Cette technique est simple à mettre en place et peu coûteuse, mais les cinétiques sont très lentes (plusieurs mois, voire années dans certains cas) et les conditions physico-chimiques peuvent être très hétérogènes [4]. Des bactéries au cœur du tas peuvent subir des températures pouvant monter jusqu'à 90 °C dans certaines situations, inhibant alors localement les réactions [5].

3.2 Le réacteur agité et aéré

A partir des année 1980, l'utilisation de réacteurs mécaniquement agités et aérés a été approfondie afin de réduire la durée du procédé pour traiter une quantité donnée de minerais, et de mieux maîtriser les conditions environnementales vues par les bactéries. Pour ce faire, le minerai est concassé et broyé (taille de particules < 100 µm) afin d'augmenter la surface qui sera en contact avec le milieu acide et les bactéries. Une étape préliminaire de flottation (séparation de particules solides, à partir de la différence de leurs densités dans un milieu liquide) peut avoir lieu pour enrichir en sulfures la phase à traiter. Ce solide est finalement envoyé en réacteur pour l'étape de biolixiviation décrite précédemment. Mélangé avec la phase aqueuse il constitue la pulpe (Figure 1).

Figure 1: Photographie d'une série de culture à l'échelle laboratoire.

Les réactions faisant intervenir les bactéries nécessitent un apport en oxygène. Dans le cas de traitement de pyrite, on estime que la demande monte à 1 kg d'oxygène pour traiter 1 kg de pyrite. Si l'utilisation de réacteurs agités et aérés permet d'accélérer les cinétiques de réactions, il est nécessaire d'assurer un apport suffisant pour répondre à la demande en oxygène sur ce laps de temps. Un apport d'oxygène par la surface de la pulpe n'étant pas suffisant, il est nécessaire de mettre en place un *sparger* qui permettra d'apporter des bulles d'air (enrichies ou non en oxygène) en fond de cuve [6].

Le système d'agitation consiste ici en la mise en rotation d'un mobile d'agitation (hélice, turbine…) afin de mettre en suspension le solide, d'homogénéiser la phase aqueuse (pH, température, nutriments…) et de disperser le gaz injecté dans l'ensemble de la cuve.

A ce jour, de nombreuses connaissances et données ont été recueillies autour de ce type de réacteur dans le domaine du génie de procédés et dans de nombreuses applications industrielles. Son implémentation est relativement simple, compatible avec une montée en échelle et un développement bien documenté en génie chimique. Mais plus particulièrement, l'application du réacteur agité et aéré en biolixiviation nécessite une attention particulière sur la mise en

suspension du solide, la bonne dispersion du gaz injecté, et le maintien d'un environnement propice au développement des micro-organismes. Parmi les succès de ce type d'application, le procédé BIOX® pour le traitement de concentrés d'or réfractaires a permis la mise en service de 13 usines à travers le monde en 30 ans.

2.3 Avantages et limites du réacteur agité

Les deux avantages majeurs de cette technologie sont la diminution importante de la durée nécessaire pour traiter le minerai (quelques jours) et la possibilité de contrôler et réguler les conditions de culture (pH, température, oxygène dissous…). Cette méthode nécessite un investissement et des coûts opératoires plus élevés que la méthode en tas, mais elle reste économiquement attractive en comparaison des méthodes de lixiviation traditionnelles. Le réacteur agité et aéré est particulièrement adapté pour les minerais réfractaires et les minerais à teneur relativement faible pour être économiquement avantageuse (Figure 2).

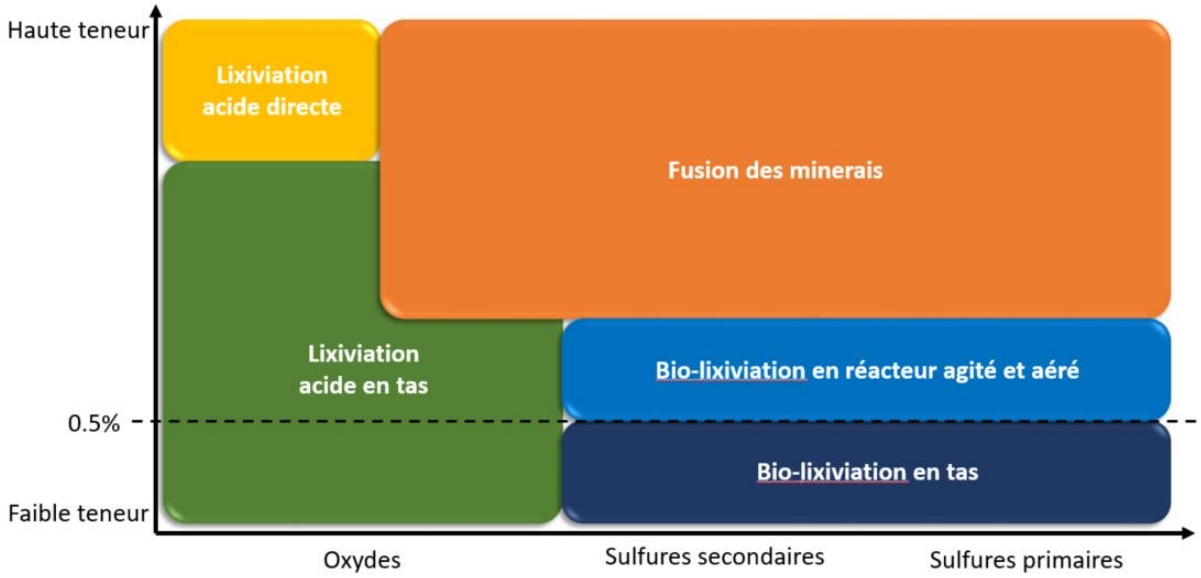


Figure 2: Technologies appliquées pour l'extraction de cuivre en fonction de la teneur dans le minerai (adapté de Clark, et al., 2006) [7].

3. La biolixiviation en réacteur, une recherche d'actualité

3.1 Des améliorations possibles…

Si la culture en réacteur agité et aéré a fait ses preuves à l'échelle industrielle, des verrous restent à lever pour mieux comprendre les mécanismes mis en jeu lors de la biolixiviation et leur sensibilité à leur environnement, afin d'améliorer les performances du procédé. Le procédé de biolixiviation implique quatre "compartiments", comme présenté Figure 3 : la phase aqueuse (solution acide), la phase solide (minerai à traiter), la phase gaz (air enrichi ou non en oxygène) et les microorganismes. Chacun de ces compartiments doit être compris et caractérisé de façon isolée, mais également en prenant en compte les interactions qu'il peut avoir avec les autres compartiments. La difficulté à caractériser l'ensemble de ce procédé provient notamment du nombre important de ces interactions, ainsi que de la complexité que représente la phase biologique à elle seule.

Aujourd'hui, de plus en plus de travaux de recherche sont menés autour de l'optimisation de la biolixiviation en réacteur, incluant les paramètres physique, chimiques et cinétiques [8,9]. Le nombre de publications sur le sujet est passé de moins d'une centaine dans les années 1990 à plus de 900 ces dernières années [3].

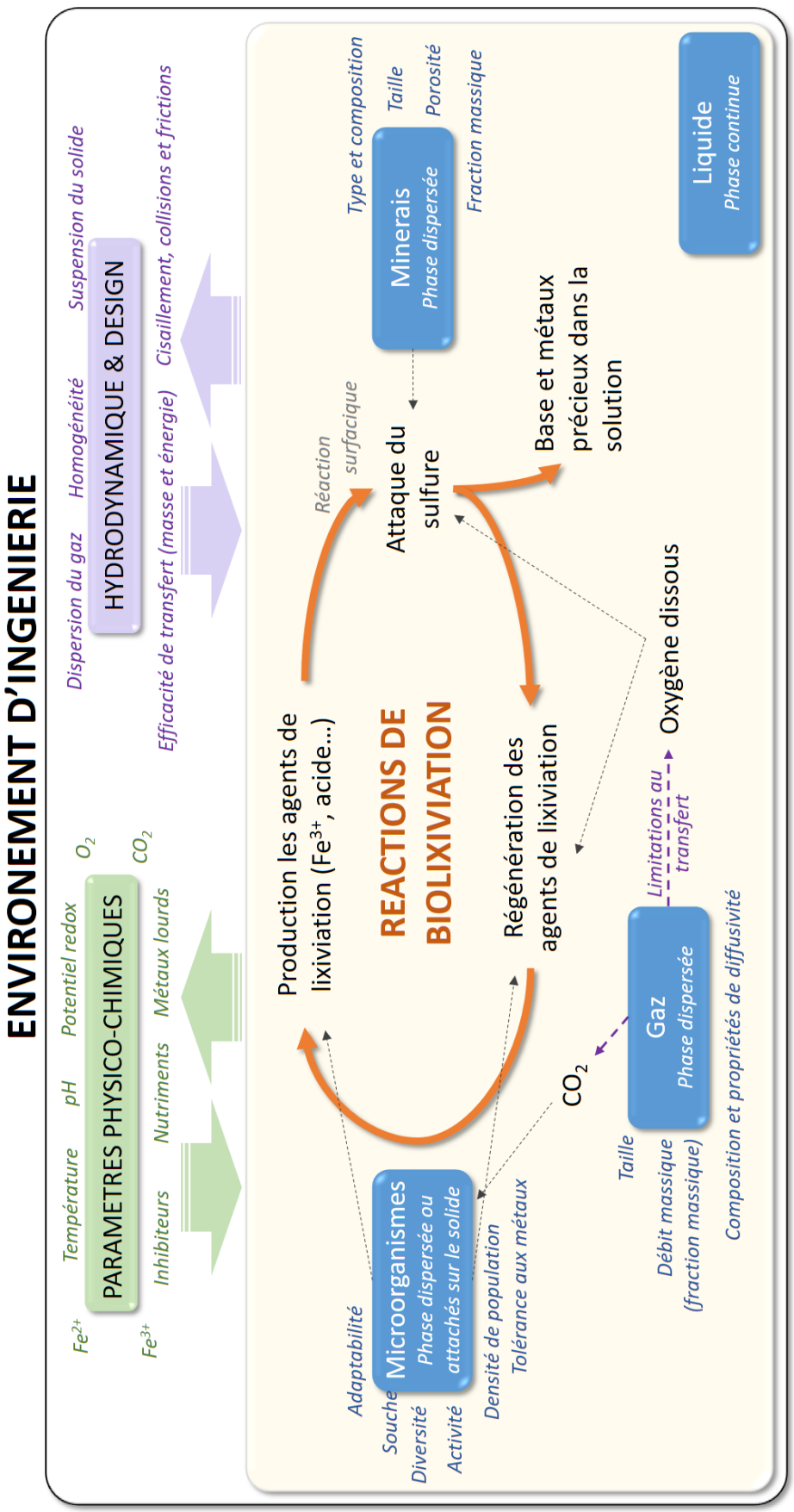


Figure 3: Interactions entre les différents 'compartiments' lors d'un procédé de biolixiviation en réacteur agité et aéré.

3.2 … grâce à la modélisation numérique

De façon plus générale, dans le domaine de la fermentation réalisée en réacteur agité, la modélisation a démontré une complémentarité aux caractérisations expérimentales. Elle permet de mieux comprendre les phénomènes et leurs impacts sur la réponse biologique [10,11,12]. Pourtant, la littérature dédiée à la biolixiviation en système agité a été, jusqu'ici, principalement sujette à des caractérisations expérimentales. Les aspects de modélisation restent encore rarement abordés en comparaison des autres applications de fermentation et bioprocédés. Parmi ceux existants, la plupart des modèles ont été développés avant les années 2000 et la grande majorité d'entre eux est restreinte à la description des cinétiques. Par ailleurs, ces modèles sont basés sur des phénomènes décrits à l'échelle du réacteur et ne prennent pas en compte les hétérogénéités potentielles au sein de la cuve, bien que celles-ci puissent impacter de façon significative la croissance et le rendement. En conséquence, le microenvironnement "vu" par les micro-organismes n'est pas correctement décrit. Le potentiel des approches couplant hydrodynamique et biologie a déjà fait ses preuves pour l'optimisation de performances de bioprocédés [13,14,15], mais reste encore un défi dans le domaine de la biolixiviation, dû à la complexité des phénomènes (individuels et couplés) et à la nature du mélange tri-phasique.

4. Applications dans le projet européen NEMO H2020

4.1 Contexte du projet

Le projet NEMO "*Neat-zero-waste recycling of low-grade sulphidic mining waste for critical-metal, mineral and construction raw-material production in a circular economy*" est financé par l'Europe dans le cadre des projets d'action innovante H2020. Il s'articule autour de la valorisation de *'tailings'* (résidus miniers) afin de récupérer des métaux d'intérêts et métaux critiques, concentrer les éléments dangereux et extraire le soufre sous forme de sulfates. Le minerai restant, devenu 'propre', serait ensuite lui-même valorisé en ciment, béton ou produit de construction.

4.2 Développement d'un procédé innovant

Parmi les tâches identifiées dans ce projet, le BRGM intervient entre autre dans la caractérisation et la mise en place d'un procédé innovant pour la biolixiviation. Pour répondre à celle-ci, une étude couplant modélisation et manipulations expérimentales est menée autour de l'utilisation d'agitateurs flottants en bassin (LFA) pour la biolixiviation. Ce concept a récemment été développé et validé à un niveau de TRL 4 sans détecter d'effet délétère sur les micro-organismes, menant au dépôt d'un brevet impliquant Air liquide, Milton Roy Mixing et le BRGM [16]. Il se place à l'intermédiaire entre la technologie en tas, décrite section 3.1, et la technologie en réacteur agité et aéré, décrite section 3.2. Son implémentation s'opère en bassin creusé dans le sol, à ciel ouvert. Cela permet de s'affranchir des contraintes coûteuses de fabrication de cuves et de maintenance des réacteurs agités traditionnels, tout en conservant les avantages de l'agitation sur les cinétiques de culture. Les systèmes d'agitation et d'aération sont plongés et maintenus dans la phase aqueuse, un peu en dessous de la surface, grâce à des bouées, comme le montre la Figure 4. Selon la taille du bassin, un ou plusieurs agitateurs flottants sont envisagés. De même, l'ensemble du procédé peut faire intervenir un ou plusieurs bassins connectés.

(A) (B)

Figure 4: Photographie (A) et schéma (B) de l'agitateur flottant.

Les travaux menés aujourd'hui prennent place à travers une nouvelle étape dans le développement de la technologie LFA et portent essentiellement sur l'optimisation et l'établissement du design. Un premier verrou scientifique est identifié à travers la nécessité d'améliorer la caractérisation du microenvironnement, toujours dans le but de mieux comprendre les impacts des potentiels gradients sur la réponse biologique. Pour cela, la mécanique des fluides numériques (CFD) est utilisée pour résoudre les équations gouvernant les écoulements (phénomènes de transport, transfert de matière et d'énergie) et proposer un modèle hydrodynamique robuste. A partir de ce modèle, l'impact des conditions opératoires et du design sur les transferts est caractérisé. Deux stratégies principales sont engagées : (i) une approche locale via l'utilisation de simulations CFD potentiellement couplées avec un modèle biologique ou cinétique, et (ii) un bilan d'énergie global. A moyen terme, les deux stratégies seront couplées afin de caractériser des paramètres clés qui permettront la montée en échelle du bioréacteur. Il est en effet évident que les interactions entre mélange, transfert et réactions doivent être clarifiées avant et pendant l'établissement de la méthode de montée en échelle, qui représente un second verrou scientifique (phénomènes dominants, échelles temporelles et spatiales).

5. Modèle de bilan thermique

5.1 Description du modèle

Le bilan thermique établit dans le cadre du projet NEMO est un exemple d'application de modèle global dynamique. L'aspect global signifie qu'on se place à l'échelle du bassin. On va alors calculer les 'entrées' et 'sorties' d'énergie entre le bassin entier et l'extérieur. En se positionnant à cette échelle, on suppose que la température est homogène dans le bassin. Cette hypothèse est raisonnable tant que l'agitation est suffisante pour que la vitesse de mélange de la pulpe soit plus rapide que la vitesse de transfert de chaleur. L'intégration dynamique signifie, quant à elle, que le modèle tient compte du temps, avec ici la variation des conditions météorologiques selon l'heure de la journée et selon la période de l'année.

Ce bilan d'énergie a été établi et codé sous *Matlab* en favorisant l'utilisation de modèles mécanistiques pour caractériser les phénomènes de transfert. Ceux-ci ont l'avantage de permettre l'identification des phénomènes physiques dominants, apportant des informations dans la compréhension de la réponse biologique. Par ailleurs, ils sont facilement transposables

lorsque l'on souhaite comparer différents scénarios, par exemple pour vérifier l'impact de la température extérieure sur les performances du procédé. Concernant les réactions biologiques et chimiques, un modèle empirique a été établi à partir de mesures expérimentales de culture de micro-organismes réalisées dans les laboratoires du BRGM.

Les sources de chaleur impliquent :

- Les réactions bio-chimiques (hautement exothermiques, par exemple la dégradation totale d'un kilogramme de pyrite en sulfate ferrique et acide sulfurique génère 12.9 MJ de chaleur) H_b,
- La puissance dissipée dans le fluide par l'agitation H_p,
- Les radiation solaire et atmosphériques $H_{rad\ gain}$.

Concernant les pertes de chaleur, le modèle intègre :

- Les émissions radiatives $H_{rad\ loss}$,
- L'aération H_{ae},
- La convection / conduction aux parois H_{tw},
- La convection de surface H_c,
- L'évaporation H_{ev},
- L'arrivée d'une pulpe froide en entrée et le retrait d'une pulpe chaude en sortie $H_{in\ out}$.

L'ensemble de ces contributions est résumé Figure 5. L'intégration a été réalisée à partir des données météorologiques à proximité de la mine de Sotkamo en Finlande.

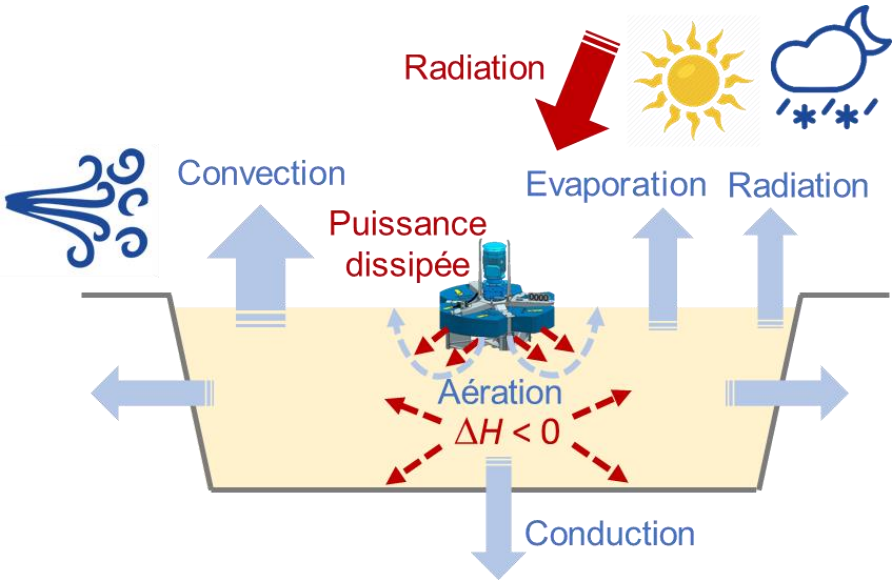


Figure 5 : Schéma des phénomènes impliqués dans le bilan de chaleur.

5.2 Identification des paramètres clés du procédé

Les résultats ont permis de mettre en évidence l'impact dominant des conditions directement liées au procédé (alimentation en pulpe, injection de gaz) par rapport aux conditions liées à l'environnement (évaporation favorisée par le vent, température de l'air extérieur…). Le modèle a ainsi permis d'identifier des leviers qui permettront de piloter le procédé en fonction des besoins thermiques. Une élévation de la température dans le bassin peut affecter le procédé et les performances de biolixiviation, à travers l'activité et la composition de la communauté microbienne, la vitesse de réaction, la formation de précipités et la solubilité des composés gazeux [17,18,19].

5.3 Impact des conditions opératoires sur le taux de conversion

Par ailleurs, une analyse de divers scenarios a permis de démontrer que, si des conditions opératoires menaient à la même température dans la pulpe, cela ne signifiait pas que les performances en terme de conversion du minerai à traiter étaient équivalente. La Figure 6 présente une exemple où les transferts de chaleur ont été comparés aux mois de janvier et de juillet, à des conditions opératoires identiques. Le taux de conversion des minerais est corrélé à la chaleur générée par les réactions biologiques H_b. Dans cet exemple, il est démontré qu'opérer en hiver mène à un meilleur rendement. Cela se justifie par le fait que les conditions météorologiques permettent une meilleure évacuation de la chaleur (température de l'air plus faible et air plus sec).

La gestion des échanges de chaleur est cruciale pour assurer des conditions optimales pour les réactions de biolixiviations. Celle-ci peut passer par le choix des conditions opératoires (débits et composition de la pulpe et du gaz, agitation…), mais aussi par une conception judicieuse dès l'étape de construction du bassin (dimensions, nombre…)

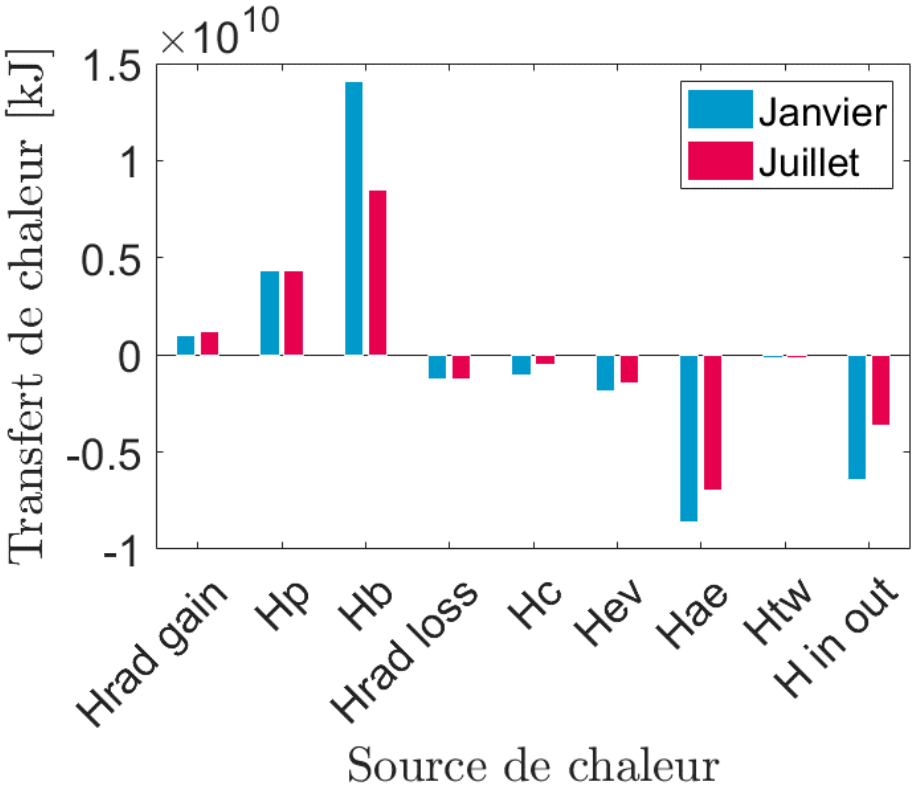


Figure 6 : Simulation de différents scenarios menant à des contributions significativement différentes en terme d'énergie générée ou consommée en un mois.

6. Modèle CFD

6.1 Hydrodynamique en réacteur de biolixiviation

L'hydrodynamique, ou dynamique des fluides, représente l'étude des mouvements des fluides. Plusieurs aspects doivent être considérés dans le cas d'un procédé impliquant trois phases comme la biolixiviation, et des technologies d'agitation et d'aération [20]. Ceux-ci sont résumés Tableau 1, avec des exemples de questions auxquelles la résolution numérique du phénomène pourra répondre.

Tableau 1: Phénomènes devant être pris en compte lors de la réalisation d'une simulation CFD en réacteur agité de fermentation (questions non-exhaustives).

Phénomène	***Exemples de question en lien à se poser pour la biolixiviation***
Macro-mélange	La pulpe est-elle homogène dans tout le bassin ?
Méso-mélange	Lorsqu'on injecte de la pulpe, de l'acide ou des nutriments, sont-ils rapidement mélangés au reste de la pulpe dans le bassin ?
Micro-mélange	Quelle déformation du fluide aux plus petites échelles impactant la diffusion moléculaire ?
Aération	Comment les bulles de gaz modifient-t-elles l'écoulement de la pulpe ? Quelles tailles de bulles ?
Interactions liquide-solide	La suspension de solide affecte-t-elle la circulation du fluide ? Le minerai s'accumule-t-il dans certaines zones ?
Transfert gaz-liquide	Arrive-t-on à fournir et rendre accessible suffisamment d'oxygène et de CO_2 pour les micro-organismes ?
Rhéologie	Lorsque la pulpe est soumise à une contrainte, se comporte-t-elle comme de l'eau en terme de viscosité ?
Réactions biologiques en phase aqueuse	Quelles concentrations locales dans le bassin ? Les micro-organismes ont-ils tous accès aux nutriments, et les réactions peuvent-elles se réaliser ?
Transfert de chaleur	Comment est transportée la chaleur produite par les réactions chimiques dans le bassin ?
Turbulence	L'agitation ne risque-t-elle pas de d'altérer les micro-organismes ? De provoquer des décès cellulaires ?

6.2 Mécanique des fluides numérique

La mécanique des fluides numérique (*Computational Fluids Dynamics*, CFD) consiste en la résolution numérique des équations régissant le·s fluide·s, comme les équations de Navier-Stokes. Le système étudié, ici le bassin, est divisé en un certain nombre de sous-volumes, constituant le maillage. Les équations sont résolues dans chacun de ces volumes, permettant ensuite de reconstruire l'écoulement dans l'ensemble du bassin en tenant compte des gradients. Par analogie à la photographie, ces petits volumes sont à la CFD ce que le pixel est à la photographie. Pour le bassin, plusieurs millions de sous-volumes ont été construits pour atteindre la précision nécessaire au problème.

Un travail de développement doit être réalisé en amont de chaque simulation afin de définir judicieusement la constructions des petits volumes de calcul, le choix des modèles qui vont permettre de caractériser les phénomènes identifiés Tableau 1, et la méthode de résolution numérique. Une fois paramétrée, et selon les ressources de calcul, une simulation impliquant plusieurs phases peut nécessiter plusieurs jours de calcul en continu avant de pouvoir traiter les résultats. Ces résultats sont ensuite comparés à des données expérimentales ou issues de la littérature pour valider ou orienter une adaptation du modèle CFD.

6.3 Un guide pour la montée en échelle et le design

Dans le cadre du projet NEMO, le modèle CFD a tout d'abord été développé à l'échelle d'un réacteur pilote sur lequel des essais expérimentaux sont menés. Ceux-ci permettent d'alimenter et valider le modèle (Figure 7). Dans ce pilote, l'agitateur a été conçu à l'échelle 1:4 par rapport à la taille réelle en bassin. La stratégie a consisté en l'utilisation de ce modèle pré-validé à échelle réduite pour réaliser une montée en échelle numériquement. Ce faisant, l'impact du design sur l'écoulement a été caractérisé pour guider la conception d'une unité de démonstration à l'échelle industrielle. Il est en effet admis qu'un criblage de conditions ou une optimisation à

cette échelle ne peut se faire exclusivement expérimentalement. L'investissement matériel et financier serait trop élevé.

(A) (B)

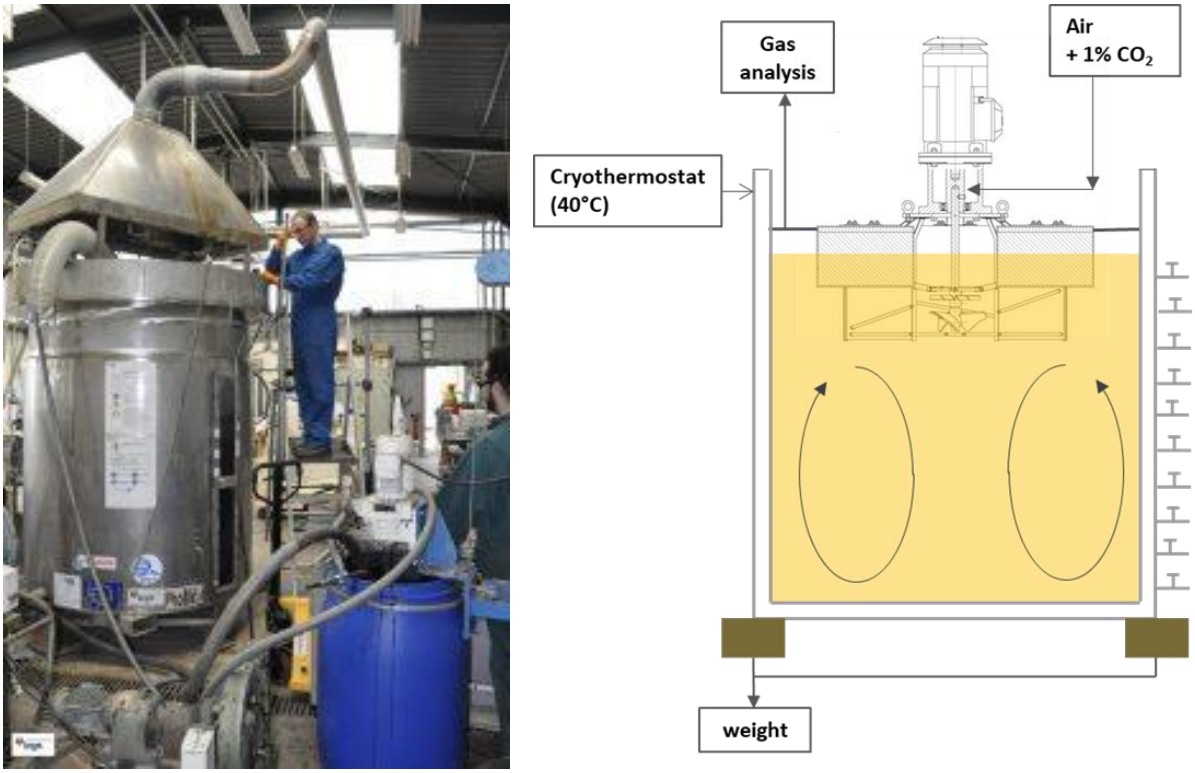
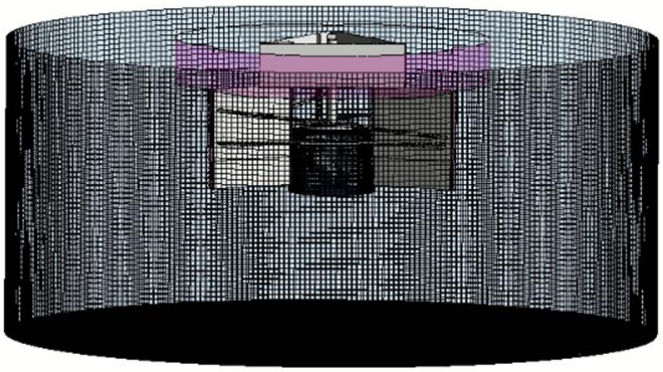


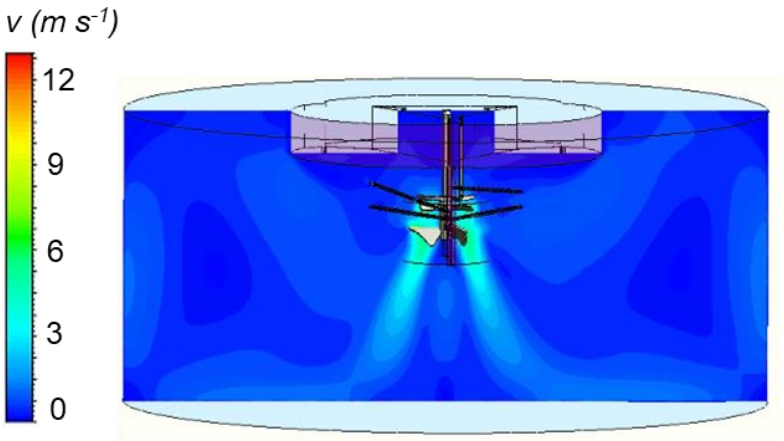
Figure 7: Photographie (A) et représentation schématique (B) du réacteur pilote de biolixiviation de 2 m^3.

La Figure 8 présente un exemple de résultat après traitement de données calculées par CFD, pour une simulation réalisée à l'échelle pilote, en n'impliquant que la phase liquide. Ces premiers résultats préliminaires ont permis de construire le modèle, en sélectionnant judicieusement les équations permettant de décrire les écoulements, et notamment les phénomènes de turbulence, les conditions limites, et la méthode de résolution. Les premiers contours autour d'un agitateur ont été précisés, avec la définition des boucles de circulation, représentant le chemin emprunté par le fluide, ainsi que les potentielles zones d'accumulation de solide.

(A)



(B)



(C)

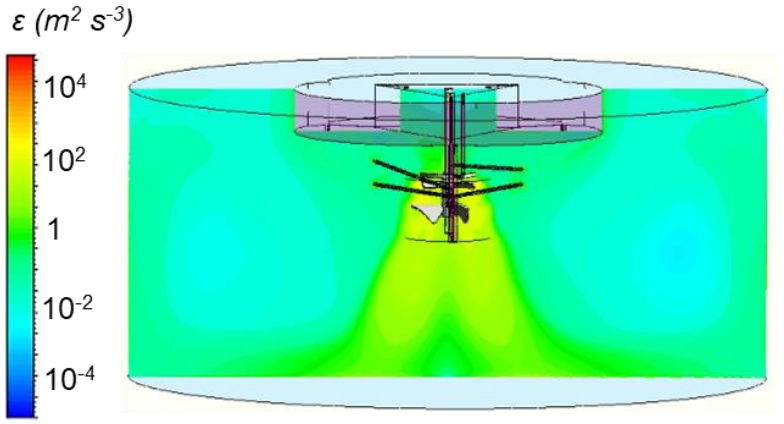


Figure 8: Maillage (A) et résultats issus d'une simulation CFD à l'échelle du pilote, représentant les champs de vitesse (A) et de taux de dissipation de l'énergie cinétique (B) dans la phase liquide.

A partir de cette base, la montée en échelle a été réalisée à partir d'une similitude géométrique et d'une conservation de la puissance dissipée par unité de volume. Le modèle pré-validé a été appliqué sur une série de simulations, en changeant les dimensions du volume de fluide autour d'un unique agitateur. L'objectif était de déterminer jusqu'à quelle distance l'agitateur a encore suffisamment d'influence sur l'écoulement (Figure 9). A plus long terme, et combinée avec le modèle de bilan thermique, cette information permettra ensuite de définir si un bassin doit contenir plusieurs agitateurs, et à quelle distance ils doivent être placés les uns des autres. Pour l'application en biolixiviation, cette information est très importante compte tenu que l'agitation et l'aération représentent les dépenses les plus importantes dans les coûts opératoires.

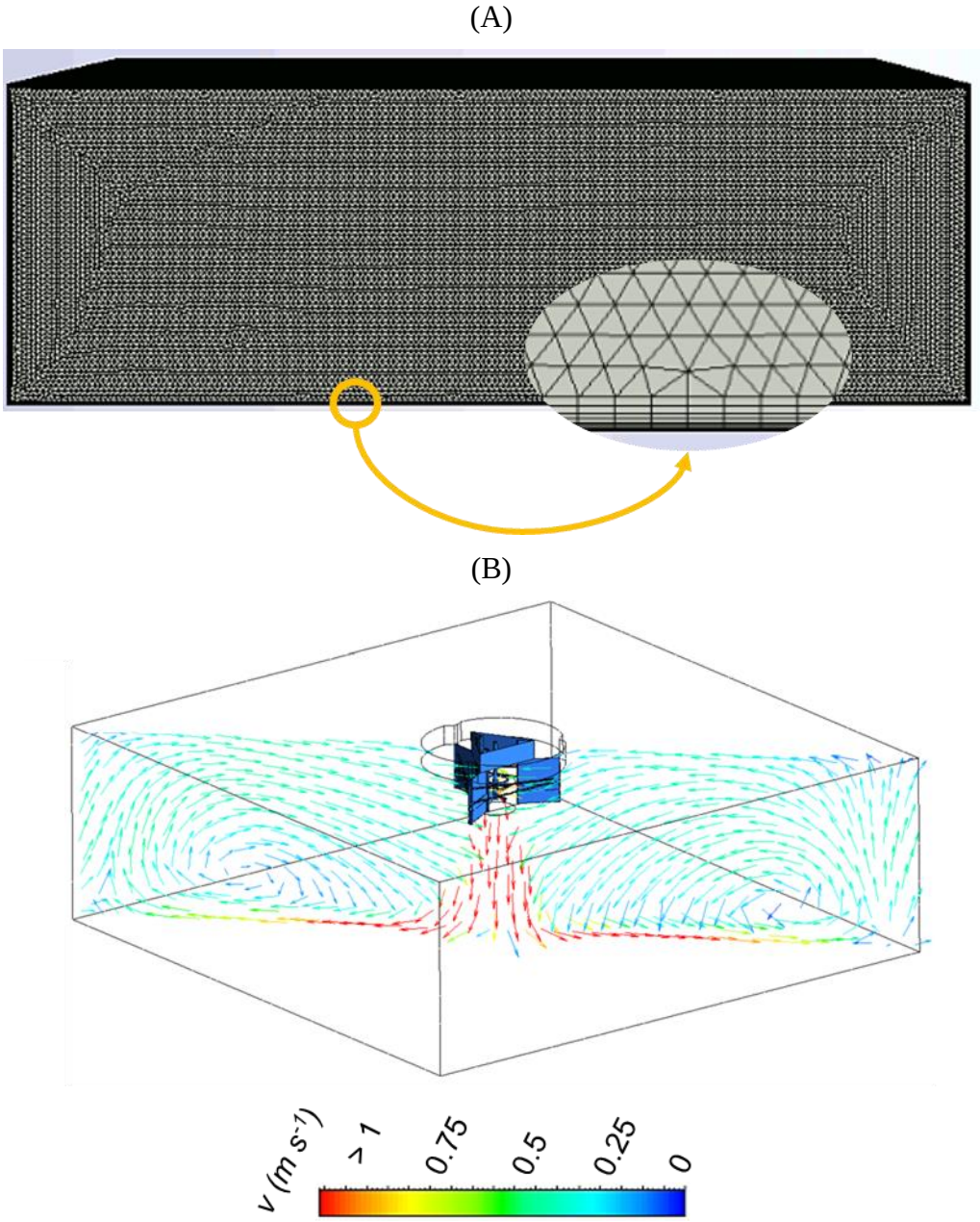


Figure 9: Maillage (A) et résultats issu d'une simulation CFD à l'échelle du bassin, représentant les vecteurs vitesses du fluide sur un plan médian (B).

6.4 Une source d'informations locales

La CFD permet plus particulièrement d'identifier les phénomènes de façon locale dans la cuve. On connaît ainsi les vitesses, les concentrations dans chaque volume de calcul. Si la pulpe peut paraitre bien mélangée et bien aérée à l'échelle laboratoire, des gradients significatifs peuvent être observés suite à une montée en échelle. Les temps de mélange sont plus grands. Par exemple, une mesure d'oxygène dissous satisfaisante en un point n'implique pas nécessairement qu'il y a de l'oxygène accessible dans l'ensemble du bassin. La CFD permet de simuler les écoulements et vérifier si les conditions de mélanges souhaitées sont satisfaisantes dans l'ensemble du volume étudié. Ces analyses peuvent être cruciale lors de la recherche de design de la cuve et du système d'agitation (dimensions, types de mobiles, positions…).

Dans cette optique, les résultats présentés Figure 9, issus d'une simulation toujours effectuée en condition monophasique, ont permis d'identifier les zones où les vitesses du fluide sont plus faibles. Deux zones ont été mises en évidence : les coins de la géométrie cubique, représentant les points de rencontre des boucles de circulation d'agitateurs voisins, et un cône directement placé sous l'agitateur, au fond du bassin. En comparant ces vitesses aux vitesses terminales de chute des particules solides traitées dans le réacteur, une première estimation de la bonne mise en suspension du solide est obtenue. De cette façon, des géométries considérées comme prometteuses sont sélectionnées pour de futures simulations faisant intervenir plusieurs phases. Ces simulations poly-phasiques nécessitant plus de ressources numériques, l'étape de pré-sélection en conditions monophasique est essentielle.

7. Perspectives : La dimension biologique

Les deux modèles présentés dans cet article, le modèle thermique et le modèle hydrodynamique, permettent de mieux comprendre l'impact des conditions opératoires et du design du système sur les transferts de matière et de chaleur. En biolixiviation, cas particulier de fermentation impliquant trois phases, les micro-organismes sont sensibles aux variations d'environnement induites par le mélange et l'équilibre thermique. La finalité des travaux de post-doctorat est de bien prendre en compte cet aspect biologique. Par exemple, le taux de dissipation de l'énergie cinétique ε présenté Figure 8 – C est proportionnel à puissance dissipée dans le fluide, et donc en lien direct au cisaillement perçu par les particules et les micro-organismes. Pour s'assurer de préserver ces derniers, ce paramètre doit être suffisamment faible. Mais celui-ci augmente avec l'agitation, qui nécessaire pour bien disperser le gaz et mettre en suspension la phase solide. L'enjeu est donc de trouver les conditions menant à un compromis entre un bon mélange (d'un point de vue physique, mais aussi économique) et un microenvironnement sain pour les micro-organismes.

Conclusion

Ces travaux s'inscrivent dans un contexte de valorisation des déchets miniers, au sein du projet européen NEMO H2020. Les apports de la modélisation dans cette application du domaine des industries minérales peuvent se résumer à travers les deux points suivants :

- La compréhension locale et globale des phénomènes physiques en jeu, permettant d'identifier les conditions opératoires ou phénomènes dominants, c'est-à-dire les plus influents sur les performances de biolixiviation. La modélisation permet de compléter les données issues de la littérature, parfois difficiles à obtenir expérimentalement.
- Une portée concrète et en lien avec les enjeux industriels avec la prédiction d'un design optimal pour le traitement de minerais par biolixiviation, ici en bassins équipés d'agitateurs flottants. La stratégie numérique basée sur la CFD permet notamment de s'affranchir d'un nombre trop élevé d'essais expérimentaux, qui sont financièrement ou matériellement rarement réalisables à l'échelle industrielle.

Références bibliographiques

[1] Johnson, D. B. (2018). The evolution, current status, and future prospects of using biotechnologies in the mineral extraction and metal recovery sectors. *Minerals*, *8*(8), 343.

[2] Secundus. (79 C.E.). *Naturalis historae libri XXXVII*.

[3] Kaksonen, A. H., Boxall, N. J., Gumulya, Y., Khaleque, H. N., Morris, C., Bohu, T., Cheng, K. Y., Usher, K. M., & Lakaniemi, A.-M. (2018). Recent progress in biohydrometallurgy and microbial characterisation. *Hydrometallurgy*, *180*, 7–25.

[4] Morin, D. (2013). *Biotechnologies dans la métallurgie extractive—Microbiologie et extraction des métaux*. 23

[5] Arpalahti, A., & Lundström, M. (2018). The leaching behavior of minerals from a pyrrhotite-rich pentlandite ore during heap leaching. *Minerals Engineering*, *119*, 116–125.

[6] Guezennec, A. G., *et al.* (2017). Influence of dissolved oxygen on the bioleaching efficiency under oxygen enriched atmosphere. *Minerals Engineering*, *106*, 64-70.

[7] Clark, M. E., Batty, J. D., van Buuren, C. B., Dew, D. W., & Eamon, M. A. (2006). Biotechnology in minerals processing: Technological breakthroughs creating value. *Hydrometallurgy*, *83*(1), 3–9.

[8] Deveci, H., Akcil, A., & Alp, I. (2003). *Parameters for Control and Optimization of Bioleaching of Sulfide Minerals*. 15.

[9] Ilyas, S., Bhatti, H. N., Bhatti, I. A., Sheikh, M. A., & Ghauri, M. A. (2010). Bioleaching of metal ions from low grade sulphide ore: Process optimization by using orthogonal experimental array design. *African Journal of Biotechnology*, *9*(19), 2801-2810–2810.

[10] Lapin, A., Müller, D., & Reuss, M. (2004). Dynamic Behavior of Microbial Populations in Stirred Bioreactors Simulated with Euler−Lagrange Methods: Traveling along the Lifelines of Single Cells. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, *43*(16), 4647–4656.

[11] Morchain, J., Gabelle, J.-C., & Cockx, A. (2013). Coupling of biokinetic and population balance models to account for biological heterogeneity in bioreactors. *AIChE Journal*, *59*(2), 369–379.

[12] Haringa, C., Noorman, H. J., & Mudde, R. F. (2017). Lagrangian modeling of hydrodynamic–kinetic interactions in (bio)chemical reactors: Practical implementation and setup guidelines. *Chemical Engineering Science*, *157*, 159–168.

[13] Olmos, E., et al. (2013). Effects of bioreactor hydrodynamics on the physiology of Streptomyces. *Bioprocess and biosystems engineering*, 36(3), 259-272.

[14] Kaboré, A. K., Olmos, E., Blanchard, F., Fick, M., Delaunay, S., & Guedon, E. (2015). Impact of gas–liquid mass transfer on organic acids production by Corynebacterium glutamicum in unbaffled shake flasks—ScienceDirect. *Biochemical Engineering Journal*, *101*, 237–247

[15] Loubière, C., Delafosse, A., Guedon, E., Toye, D., Chevalot, I., & Olmos, É. (2019). Optimization of the Impeller Design for Mesenchymal Stem Cell Culture on Microcarriers in Bioreactors. *Chemical Engineering & Technology*, *42*(8), 1702-1708.

[16] Guezennec, A. G., *et al.* (2017). *U.S. Patent US20170175223A1*.

[17] Mahmoud, A., Cézac, P., Hoadley, A. F., Contamine, F., & d'Hugues, P. (2017). A review of sulfide minerals microbially assisted leaching in stirred tank reactors. *International Biodeterioration & Biodegradation*, *119*, 118-146.

[18] van Hille, R. P., van Wyk, N., Froneman, T., & Harrison, S. T. (2013). Dynamic evolution of the microbial community in BIOX leaching tanks. In *Advanced Materials Research* (Vol. 825, pp. 331-334). Trans Tech Publications Ltd.

[19] Hedrich, S., Joulian, C., Graupner, T., Schippers, A., & Guézennec, A. G. (2018). Enhanced chalcopyrite dissolution in stirred tank reactors by temperature increase during bioleaching. *Hydrometallurgy*, *179*, 125-131.

[20] Haringa, C., Mudde, R. F., & Noorman, H. J. (2018). From industrial fermentor to CFD-guided downscaling: What have we learned? *Biochemical Engineering Journal*, *140*, 57–71.