

# Modélisation et simulation d'une opération de cristallisation : application à la précipitation d'un minéral en vue de l'optimisation de ses propriétés fonctionnelles

## Contexte

En vue de contrôler les propriétés du solide obtenu par une opération de cristallisation (ex. distribution de taille et rendement), il est nécessaire de développer des modèles afin de simuler cette opération unitaire. Un modèle déterministe (bilans de matière, bilan de population a minima) est souvent développé. Les simulations ainsi développées permettent aussi d'explorer des conditions opératoires variées et éventuellement d'envisager leurs extrapolations et le changement d'échelle du procédé. Pour exploiter le modèle, des données fiables (taille, concentration en solution) sont nécessaires.

## Exemple : Cristallisation de $\alpha$ -bassanite à partir de gypse

### Auteurs

Fabien BAILLON,  
Fabienne ESPITALIER  
Christophe COQUELET  
Alain GAUNAND

### Trois étapes

#### 1- Expériences

##### Mesurer

- Développer un équipement de mesure, une procédure et des méthodes d'analyse (propriétés thermodynamiques, cinétique)
- Caractériser les effets des paramètres opératoires (Température, additifs, pH...)

#### 2- Modéliser

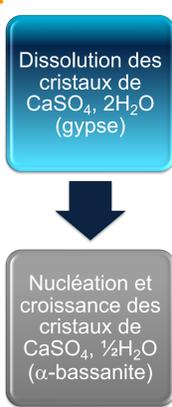
##### Comprendre

- Identifier les constantes d'équilibre, les solubilités
- Identifier les mécanismes de transformation

#### 3- Simuler

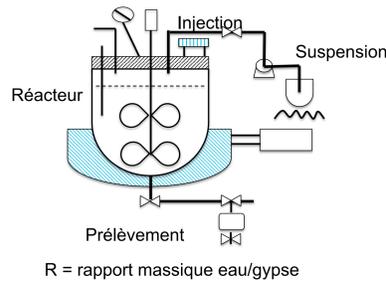
##### Valider

- Proposer des modèles pour calculer les équilibres liquide-solide
- Vérifier ces mécanismes et leur associer des expressions cinétiques

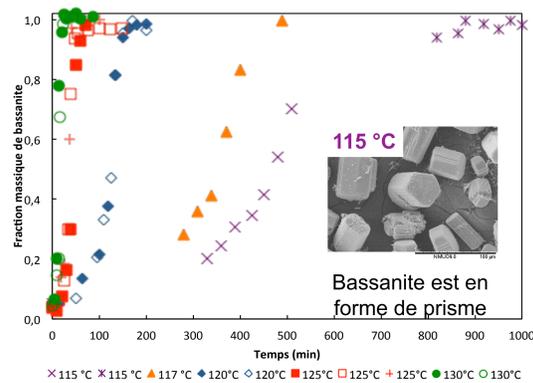


#### Système de réaction mis en œuvre

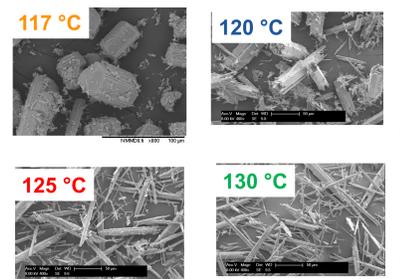
- Réacteur fermé
- Conditions strictement isothermes
- Résultats répétables



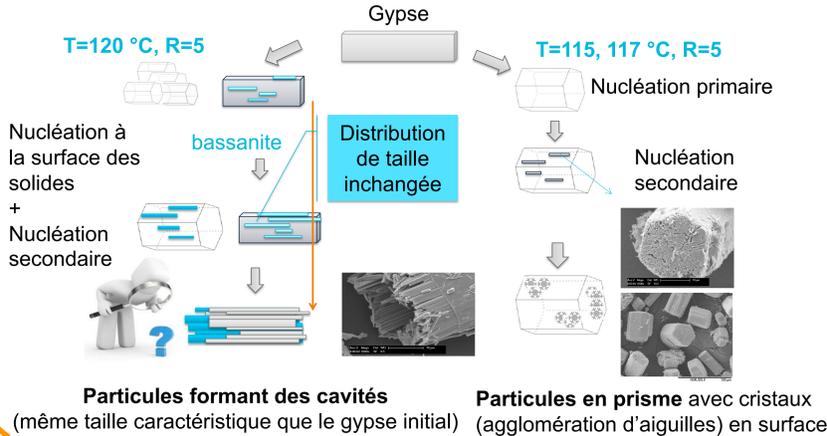
#### Évolution de la fraction massique de bassanite



#### Évolution de du faciès des cristaux de bassanite



#### Mécanismes



#### Correction de la taille mesurée

$$k = L_{\min} / L_{\max}$$

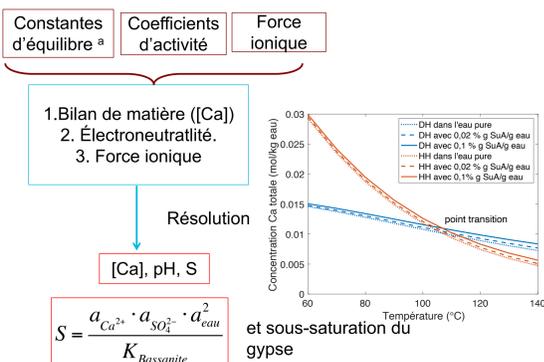
$$\phi_{v,HH} = \frac{3\sqrt{3}}{8} k^2$$

$$\phi_{s,HH} = \frac{3\sqrt{3}}{4} k^2 + 3k$$

Température (°C)	$\phi_{v,HH}$	$\phi_{s,HH}$ [4,3]	$L_{\text{corrigée}}$ (μm)
115	0,251	2,365	82
117	0,196	2,041	80
120	0,047	0,905	61
125	0,017	0,513	55
130	0,009	0,379	46

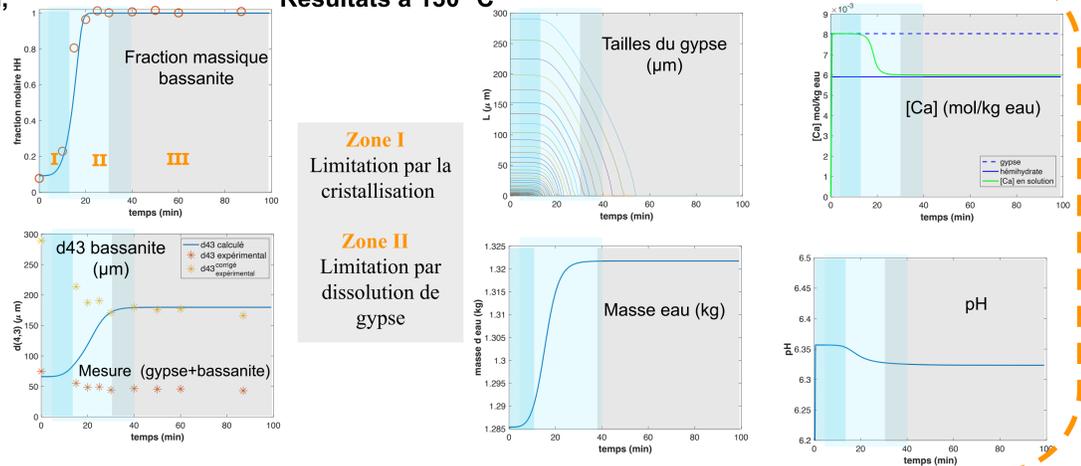
Écriture du modèle : dissolution gypse + nucléation et croissance de la bassanite

#### Simulation : Sursaturation et sous saturation, bilans de matière, bilans population



\*Données : Thermodem V1.10 Code version 1.07\_2.06, Thermochemical Database from the BRGM institute (french geological survey)

#### Résultats à 130 °C



### Parties prenantes

### Références

-thèse Y. Rong, PSL, 2018  
-N.Macedo Portela da Silva et al.JCG, 2017

## Conclusion et perspectives

Développer un outil de décision pour le dimensionnement, le contrôle et l'optimisation d'opérations de cristallisation et plus largement d'opérations unitaires qui combinent :

- modèle déterministe
  - modèle d'apprentissage
- notamment pour les procédés dans lesquels la composition de l'alimentation est variable (minerai, plantes, matériaux recyclés...)



Contacts : Fabien.Baillon@mines-albi.fr, Fabienne.Espitalier@mines-albi.fr