

N° d'ordre : 3087

# THÈSE

PRÉSENTÉE À

## L'UNIVERSITÉ BORDEAUX 1

ÉCOLE DOCTORALE DES SCIENCES PHYSIQUES ET DE  
L'INGÉNIEUR

par **Tseheno Nirina RANDRIANARIVELO**

POUR OBTENIR LE GRADE DE

### DOCTEUR

SPÉCIALITÉ : Mécanique

---

#### ÉTUDE NUMÉRIQUE DES INTERACTIONS HYDRODYNAMIQUES FLUIDES/SOLIDES : APPLICATION AUX LITS FLUIDISÉS

---

Soutenue le : 8 Décembre 2005

Après avis de :

MM. F. BERTRAND, Professeur, Université Polytechnique de Montréal, Canada **Rapporteur**

O. MASBERNAT, Chargé de Recherche CNRS, LGC, Toulouse **Rapporteur**

Devant la commission d'examen formée de :

MM. O. SIMONIN, Professeur, INP, Toulouse **Président**

P. SNABRE, Directeur de Recherche CNRS, CRPP, Pessac **Rapporteur**

F. BERTRAND, Professeur, Université Polytechnique de Montréal, Canada **Examineur**

O. MASBERNAT, Chargé de Recherche CNRS, LGC, Toulouse **Examineur**

J.-P. CALTAGIRONE, Professeur, Université Bordeaux 1, Bordeaux **Directeur**

S. VINCENT, Maître de Conférence, ENSCPB, Pessac **Directeur**



# Remerciements

Ce travail de thèse a été réalisé grâce à une allocation de recherche du Ministère de l'Education Nationale, de la Recherche et de la Technologie (MENRT). Il a été mené au laboratoire Transferts Ecoulements Fluides Energétique (TREFLE) sur le site de l'Ecole Nationale Supérieure de Chimie Physique de Bordeaux (ENSCP).

Tous mes remerciements vont tout d'abord à mon directeur de thèse, Stéphane VINCENT, Maître de Conférence de l'ENSCP qui m'a accordé sa confiance et son soutien permanent au cours de ces trois années de thèse (et même plus puisque qu'il m'a convaincu d'effectuer mon stage de DEA sous sa direction). Bien qu'ayant des responsabilités grandissantes et, du coup, une disponibilité fléchissante, il a toujours accordé une oreille attentive à toutes mes sollicitations. Pour tout cela, je lui exprime toute ma reconnaissance.

Je tiens également à remercier très vivement Jean-Paul CALTAGIRONE, Professeur de l'université Bordeaux 1 et co-directeur de cette thèse. Grâce à nos nombreuses discussions, ses suggestions et ses conseils, j'ai pu mener à bien ce travail.

Mes remerciements vont aussi aux membres du jury qui ont accepté de juger ce travail. Je remercie notamment Patrick SNABRE, Directeur de Recherche du Centre de Recherche Paul Pascal de Pessac d'avoir participé à l'évaluation de cette thèse. Je remercie également François BERTRAND, Professeur de l'université polytechnique de Montréal et Olivier MASBERNAT, Chargé de Recherche du laboratoire de Génie Chimique de Toulouse, qui m'ont fait l'honneur d'être rapporteur de ce mémoire. J'adresse un remerciement particulier à Olivier SIMONIN, Professeur à l'Institut National Polytechnique de Toulouse, qui a contribué énormément à la concrétisation de ce travail de recherche.

Au cours de ces années passées au MASTER devenu plus tard le TREFLE, j'ai eu

---

l'opportunité de côtoyer une équipe formidable sans que l'ambiance, parfois chahuteuse mais toujours fort agréable, ne serait pas ce qu'elle est. Tout d'abord les permanents : Marie-Paule Dupays, Mejdî Azaiëz, Jean Toutain, Eric Arquîs, Bernad Duguay, Stéphane Glockner, Mohamed Rady et David Runcoat. Puis les "thésards" (bien que certains ne le soient plus !) : pour les anciens, Boris, Claude, Damien, Guillaume, les compères Cédric et Pierre ; ensuite les contemporains, Stéphanie, Nicolas, Christophe, Eric et Cyril, Sylvain, Nicolas, Delphine, Aurélie et Grégoire. Puis enfin les nouveaux : Guillaume, Hamza et Etienne. Merci à vous tous !

Alohan'ny ahatanterahan'ity fisaorana ity dia misaotra betsaka ny fianakaviana rehetra. Misaotra anareo rehetra nanampy sy nanotrona ahy nandritry ny fianarako satria raha tsy nisy anareo dia tsy ho tanteraka izany. Misaotra any Ony, Maeva ary Papa sy Maman.

Enfin, je dédie ce manuscrit à Sandrine qui m'accompagne depuis le début de mes études et qui m'a soutenu lors des instants les plus difficiles mais également lors des moments les plus heureux.

Nirina

# Sommaire

<b>Nomenclature</b>	<b>1</b>
<b>Introduction générale</b>	<b>5</b>
<b>I Introduction aux lits fluidisés</b>	<b>7</b>
I.1 Définitions . . . . .	7
I.1.1 Le lit fluidisé . . . . .	7
I.1.2 Historique et applications . . . . .	8
I.1.3 Avantages et inconvénients . . . . .	9
I.1.4 Régime de fluidisation . . . . .	10
I.2 Modélisation d'un écoulement de lits fluidisés . . . . .	15
I.2.1 Force appliquée à une particule . . . . .	16
I.2.2 Modélisation empirique . . . . .	18
I.2.3 Modèle diphasique . . . . .	20
I.2.4 Approche Euler/Euler . . . . .	21
I.2.5 Approche Euler/Lagrange . . . . .	26
I.3 Apport de la simulation numérique directe . . . . .	31
I.3.1 Trainee . . . . .	32
I.3.2 Force de masse ajoutée . . . . .	32
I.3.3 Fonction d'encombrement $g_0$ . . . . .	33
I.4 Conclusion . . . . .	34
<b>II Modélisation de l'ensemble diphasique solide/fluide par une méthode de domaines fictifs</b>	<b>37</b>
II.1 Choix du maillage . . . . .	38
II.1.1 Maillage adapté à la géométrie . . . . .	38

---

II.1.2	Maillage fixe indépendant de la géométrie . . . . .	39
II.2	Méthode des domaines fictifs . . . . .	41
II.2.1	Définition de la méthode . . . . .	41
II.2.2	Techniques de pénalisation . . . . .	42
II.3	Du "Navier-Stokes" partout . . . . .	48
II.3.1	Modèle initial . . . . .	48
II.3.2	Modèle physique . . . . .	49
II.3.3	Pénalisation par la viscosité . . . . .	52
II.4	Conclusion . . . . .	55
<b>III</b>	<b>Méthodologie Numérique</b>	<b>57</b>
III.1	Suivi d'interface . . . . .	57
III.1.1	Méthode de type suivi de Volume de Fluide (V.O.F.) . . . . .	58
III.1.2	Méthodes de suivi de front . . . . .	59
III.1.3	Méthode mixte : suivi eulérien-lagrangien . . . . .	60
III.1.4	Définition des caractéristiques du mélange diphasique . . . . .	69
III.2	Discrétisation des équations . . . . .	70
III.2.1	Discrétisation spatiale . . . . .	70
III.2.2	Discrétisation temporelle . . . . .	74
III.2.3	Linéarisation et Découplage des équations . . . . .	75
III.2.4	Conditions aux limites . . . . .	79
III.2.5	Résolution du système matriciel . . . . .	80
III.3	Validations . . . . .	81
III.3.1	Sédimentation d'une particule cylindrique . . . . .	81
III.3.2	Sédimentation d'une particule entre deux parois parallèles dans le régime de Stokes : effet du confinement . . . . .	96
III.3.3	Sédimentation d'un disque à un nombre de Reynolds élevé entre deux parois parallèles . . . . .	102
III.3.4	Sédimentation d'une particule vers une paroi : force de lubrification	107
III.4	Conclusions . . . . .	111
<b>IV</b>	<b>Applications aux lits fluidisés</b>	<b>113</b>
IV.1	Réseau de particules fixes alignées . . . . .	113
IV.1.1	Dans le sens de l'écoulement . . . . .	114
IV.1.2	Perpendiculairement à l'écoulement . . . . .	115

IV.1.3	Suivant une direction oblique à l'écoulement . . . . .	116
IV.1.4	Conclusion . . . . .	118
IV.2	Réseau de particules fixes dans un arrangement Cubique Face Centrée (CFC)	119
IV.2.1	Présentation du cas . . . . .	121
IV.2.2	Imposition de l'écoulement et calcul de la traînée . . . . .	123
IV.2.3	Résultats des simulations . . . . .	126
IV.2.4	Conclusion . . . . .	141
IV.3	Réseaux aléatoires . . . . .	143
IV.3.1	Présentation du cas . . . . .	143
IV.3.2	Imposition de l'écoulement . . . . .	146
IV.3.3	Résultats . . . . .	146
IV.3.4	Conclusion . . . . .	158
IV.4	Conclusion . . . . .	161
<b>Conclusion générale</b>		<b>163</b>
<b>A Étude thermique du réseau Cubique Face Centrée et du réseau aléatoire</b>		<b>167</b>
A.1	Equation de l'énergie . . . . .	168
A.2	Imposition de la température et calcul du nombre de Nusselt . . . . .	170
A.3	Réseau Cubique Face Centrée . . . . .	172
A.4	Réseau aléatoire . . . . .	176
<b>B Modélisation numérique du mouvement de particules solides par une nouvelle méthode de pénalisation</b>		<b>179</b>
B.1	INTRODUCTION . . . . .	180
B.2	NEW FORMULATION OF THE STRESS TENSOR AND TENSORIAL PENALTY METHOD . . . . .	181
B.2.1	An original formulation of stress tensor . . . . .	181
B.2.2	Generalized UZAWA algorithm for ITPM . . . . .	182
B.2.3	Numerical solution . . . . .	183
B.3	VALIDATIONS AND APPLICATIONS . . . . .	184
B.3.1	Couette's flow . . . . .	184
B.3.2	Settling of solid particles in Stokes' regime . . . . .	184
B.3.3	Unsteady 3D simulations of a sphere settling in a tank. . . . .	185
B.4	CONCLUSION AND PROSPECTS . . . . .	186

---

B.5	References . . . . .	186
<b>C</b>	<b>Méthode de lagrangien augmenté variable pour les écoulements 3D en présence de plusieurs phases</b>	<b>189</b>
C.1	Introduction . . . . .	191
C.2	Uzawa algorithms for predictor velocity fields . . . . .	194
C.2.1	Standard augmented Lagrangian (SAL) . . . . .	195
C.2.2	Adaptative augmented Lagrangian (AAL) . . . . .	196
C.2.3	Numerical solver . . . . .	198
C.3	Simulation of three-dimensional multimaterial flows . . . . .	198
C.3.1	The 2D Laplace law . . . . .	199
C.3.2	Flow induced by a spherical particle . . . . .	200
C.3.3	Wave breaking in shallow water . . . . .	201
C.4	Conclusions . . . . .	203
C.5	References . . . . .	203
C.6	Figures . . . . .	206
	<b>Bibliographie</b>	<b>215</b>



# Nomenclature

## Lettres Latines

$Ar$	: Nombre d'Archimède .....	$m^2.s^{-1}$
$C$	: concentration .....	it adim.
$c_p$	: capacité calorifique massique à pression constante .....	$m^2.s^{-2}.K^{-1}$
$C_p$	: coefficient de confinement .....	it adim.
$C_d$	: coefficient de traînée .....	it adim.
$C_{Schiller}$	: coefficient de traînée de Schiller .....	it adim.
$C_{MA}$	: coefficient de masse ajoutée .....	it adim.
$C_w$	: coefficient de correction pour le confinement .....	it adim.
$d_p$	: diamètre .....	m
$F_H$	: Force d'histoire .....	N
$F_{MA}$	: Force de masse ajoutée .....	N
$g$	: fonction de répartition de paire .....	<i>adim.</i>
$Ga$	: nombre de Gallilée .....	<i>adim.</i>
$h$	: coefficient de convection .....	$W.m^{-2}$
$m$	: masse .....	kg
$Nu$	: nombre de Nusselt .....	<i>adim.</i>
$P$	: pression .....	Pa

$Pr$	: nombre de Prandtl .....	<i>adim.</i>
$Re$	: nombre de Reynolds .....	<i>adim.</i>
$R_p$	: rayon de la particule .....	m
$Re_t$	: nombre de Reynolds terminal.....	<i>adim.</i>
$Re_{surf}$	: nombre de Reynolds superficiel .....	<i>adim.</i>
$S$	: terme source ou puits de changement de phase .....	$W.m^{-3}$
$\mathcal{S}$	: surface .....	$m^2$
$T$	: température .....	K
$t$	: temps .....	s
$U_{mb}$	: Vitesse minimale de bullage .....	$m.s^{-1}$
$U_{mf}$	: Vitesse minimale de fluidisation .....	$m.s^{-1}$
$\mathcal{V}$	: volume .....	$m^3$
$Ze$	: Nombre de Zenz .....	<i>adim.</i>

## Lettres grecques

$\alpha$	: fraction volumique .....	<i>adim.</i>
$\eta$	: viscosité de rotation .....	$^\circ$
$\kappa$	: viscosité de cisaillement .....	Pa.s
$\lambda$	: viscosité de compression .....	Pa.s
$\lambda_c$	: conductivité thermique .....	$kg.m.s^{-3}.K^{-1}$
$\mu$	: viscosité dynamique .....	Pa.s
$\nu$	: viscosité cinématique $\nu = \mu/\rho$ .....	$m^2.s^{-1}$
$\chi$	: fonction indicatrice de phase .....	<i>adim.</i>

---

$\rho$	: masse volumique .....	$\text{kg.m}^{-3}$
$\tau$	: échelle de temps caractéristique .....	s

## Vecteurs

$\vec{\omega}$	: vecteur de rotation .....	$\text{rad.s}^{-1}$
$\vec{n}$	: normale sortante .....	<i>adim.</i>
$\bar{\sigma}$	: tenseur des contraintes .....	$\text{N.m}^{-2}$
$\bar{\Lambda}$	: tenseur d'élongation .....	$\text{N.m}^{-2}$
$\bar{\Theta}$	: tenseur de cisaillement .....	$\text{N.m}^{-2}$
$\bar{\Gamma}$	: tenseur de rotation .....	$\text{N.m}^{-2}$
$\bar{\Sigma}$	: tenseur des contraintes .....	$\text{N.m}^{-2}$
$\bar{D}$	: tenseur des taux de déformations .....	$\text{N.m}^{-2}$
$\bar{l}g$	: multiplicateur de lagrange .....	$\text{N.m}^{-2}$

## Indices et exposants

$i$	: relatif à la particule $i$
$k$	: relatif à la phase $k$
$f$	: relatif au fluide
$s$	: relatif au solide



# Introduction générale

La compréhension de la physique intrinsèque des écoulements multiphasiques est un enjeu important pour les groupes industriels mais également pour la communauté scientifique. Grâce aux progrès effectués pour augmenter la capacité de calcul des machines, la simulation numérique directe est devenue un outil important dans la compréhension des mécanismes physiques mis en jeu. Le nombre de configurations d'étude et la quantité de paramètres accessibles a permis de donner aux calculs numériques une ampleur considérable dans la compréhension et la prévision des comportements physiques.

Actuellement, le contexte particulier où la préservation de l'environnement et la diminution des ressources énergétiques est devenu un enjeu d'importance croissante, les systèmes industriels utilisant la technologie des lits fluidisés se développent de plus en plus. Néanmoins, une optimisation encore accrue de cette technique est possible. Cette étape passe tout d'abord par une meilleure compréhension des phénomènes mis en jeu. Depuis la découverte et l'utilisation industrielle de la technique du lit fluidisé, de nombreux modèles ont été mis en place pour simuler le comportement du lit. Ces modèles se sont avérés efficaces mais ils nécessitent tous un paramétrage plus ou moins complexe suivant le modèle. De plus, ils font parfois appel à des grandeurs difficiles à mesurer, voire impossibles car ils sont modélisés. La simulation numérique directe peut alors contribuer à améliorer ces modèles macroscopiques en précisant les paramètres inconnus.

L'objectif de ce travail de thèse est donc de développer un modèle de simulation numérique directe afin de calculer les interactions hydrodynamiques entre le fluide et les particules. Ce modèle sera ensuite utilisé pour simuler des écoulements particuliers. Ce mémoire est composé de quatre chapitres.

Le premier chapitre est consacré à une étude bibliographique sur les lits fluidisés. Nous présentons notamment quelques exemples de modèles macroscopiques couramment utilisés ainsi que des exemples de paramètres que l'on peut optimiser par le biais de la simulation

numérique directe. Dans le second chapitre, nous aborderons le modèle physique que nous avons mis en oeuvre ainsi que le contexte de travail dans lequel il a été établi. Nous insisterons sur les définitions des différentes techniques de pénalisation. Nous détaillerons dans le troisième chapitre les méthodes numériques employées pour mettre en oeuvre notre modèle. Nous mettrons l'accent sur la méthode de transport des particules ainsi que sur les caractéristiques de la résolution numérique (discrétisation des équations). Ce chapitre sera complétée par les études de validations physiques et numériques sur des cas de sédimentation de particules. Finalement, nous utiliserons notre modèle pour étudier les écoulements à travers des réseaux de particules fixes et mobiles et nous aborderons l'utilisation de la simulation numérique directe pour la modélisation des lits fluidisés.

# Chapitre I

## Introduction aux lits fluidisés

Actuellement, les modèles physiques à grandes échelles de simulation des lits fluidisés ont atteint leurs limites. Pour aller plus loin dans la compréhension des phénomènes, une étude locale est à présent nécessaire. Nous devons mieux appréhender les interactions hydrodynamiques entre les particules et le fluide en simulant l'écoulement autour des particules. Le chapitre se structure en deux temps. Dans la première partie, nous présenterons les principaux modèles de lits fluidisés couramment utilisés pour simuler des systèmes de taille industrielle dans lesquels le nombre de particules mis en jeu dépasse aisément le million. Ces approches moyennées nécessitent un ajustement de paramètres obtenus expérimentalement ou à l'aide de simulations numériques. Ainsi pour affiner ce réglage, la simulation numérique directe, présentée en deuxième partie, est un outil complémentaire.

### I.1 Définitions

#### I.1.1 Le lit fluidisé

La nature présente de nombreuses situations dans lesquelles un fluide et un solide sont en interaction. Un exemple courant est le sable mouillé, constitué d'un mélange de grains solides et d'eau. De la même manière, l'évolution du relief des fonds marins ou lagunaires est dû au charriage des sédiments par l'eau en mouvement. L'érosion et le déplacement des dunes de sables désertiques résultent également de l'effet du vent sur les particules. Dans le cadre plus classique de l'industrie, les écoulements mettant en jeu des systèmes granulaires et un fluide sont aussi très nombreux. Les lits fluidisés sont, par exemple, couramment employés dans les industries lourdes de type extraction et transformation de matière

première (raffinerie de pétrole, production de charbon), les industries pharmaceutiques (enrobage de médicaments) mais également dans les industries de retraitement (traitement des eaux urbaines, effluents industriels, incinérateur d'ordures ménagères). Le lit fluidisé est un système dans lequel prennent part des réactions chimiques et de combustion sur des particules solides. Il met en jeu plusieurs phases : une phase solide constituée des particules en interaction avec une phase fluide (au sens général qui peut être un gaz ou un liquide) en mouvement. Les particules solides sont soulevées par le courant fluide ascendant, et sont ainsi "fluidisées". Elles sont mises en suspension et restent en "lévitation" sous l'action du fluide. Cet état résulte de la compensation du poids des particules par l'action du fluide sur celles-ci. Les phénomènes physiques mis en jeu dans les lits fluidisés dépendent en grande partie de la nature gazeuse ou liquide de la phase fluide et des caractéristiques de l'écoulement. Si le débit du fluide ne dépasse pas un certain seuil, la force qu'exerce le fluide sur les particules n'est pas suffisante pour supporter le poids des particules; les particules restent alors tassées au fond du réacteur. Nous constatons qu'il existe ainsi une vitesse critique, la vitesse minimum de fluidisation notée  $U_{mf}$ , au delà de laquelle apparaît le phénomène de fluidisation. De la même manière, la nature des particules solides employées dans les réacteurs influence grandement les mécanismes puisque une particule "lourde" nécessitera une force plus importante pour être soulevée qu'une particule plus "légère". L'interface entre les particules et le fluide, constituée de l'ensemble des surfaces des particules d'un lit fluidisé, représente une aire de contact considérable, ce qui rend les opérations de transferts de chaleur et de matière très efficaces. Cette caractéristique est à l'origine du succès des lits fluidisés auprès de nombreuses industries.

### I.1.2 Historique et applications

L'historique de la fluidisation ne débute réellement qu'au  $XX^e$  siècle avec le développement des industries liées au charbon puis celles liées au pétrole. Cependant, des traces écrites datant du  $XVI^e$  siècle font déjà mention d'une technique de purification du minerai de fer par une mise en suspension des particules solides. Au  $XIX^e$ , la purification de l'eau des villes à usage domestique est réalisée en filtrant l'eau à travers une couche compacte de sable. L'accumulation des impuretés obstrue ainsi peu à peu le filtre. Une manière de "nettoyer" le filtre simplement est d'inverser l'écoulement afin de fluidiser l'empilement sableux. Les impuretés sont alors entraînées avec l'écoulement. L'utilisation commerciale du procédé de fluidisation commence vers les années 1920. Le premier brevet



industriel déposé en 1910 décrit un réacteur à catalyseur fluidisé pour la transformation du gaz, puis en 1921 ce procédé est commercialisé pour la gazéification du charbon. Le réacteur mesurant 13 m de haut pour une section de 12 m<sup>2</sup> contenait du charbon que l'on fluidisait avec du gaz. Le rendement de ce système était assez faible comparé à celui des technologies actuelles puisque le dispositif consommait une quantité excessive d'oxygène et que les pertes de charbon étaient trop importantes (de l'ordre de 20 %). Ensuite vers les années 40, la "ruée vers l'or noir" a permis de développer la recherche sur les lits fluidisés et les réacteurs à charbon ont été un peu délaissés au profit des réacteurs utilisant des dérivés pétrolifères. Depuis, le champ d'application des lits fluidisés s'est élargi. Dans le secteur du génie chimique, le procédé de fluidisation est utilisé pour favoriser les réactions chimiques au sein du réacteur. Dans le cas de la production de polyéthylène, le gaz réactif d'éthylène est injecté avec une vitesse trois à six fois supérieure à la vitesse minimale de fluidisation dans un lit de particules réactives de polyéthylène. Des particules de silice servent de catalyseur afin d'augmenter la vitesse des réactions chimiques. Actuellement, la préservation et la protection de l'environnement constituant un réel enjeu politique et économique d'importance croissante, le développement de techniques diminuant les rejets nocifs est de première importance. L'utilisation des lits fluidisés est une solution alternative intéressante pour les usines d'incinération d'ordures ménagères car elle permet une combustion plus complète des déchets et limite ainsi les rejets nocifs dans l'atmosphère. Ce procédé est également utilisé dans les usines de retraitement des eaux usées. Un lit de boues contenant les bactéries responsables de la dégradation des polluants est fluidisé par l'eau à traiter. Grâce aux lits fluidisés, l'action des bactéries est améliorée car celles-ci sont en contact plus direct avec l'eau à traiter.

### I.1.3 Avantages et inconvénients

Comme nous venons de le voir, le champ d'application des lits fluidisés est très vaste. L'explication réside dans les nombreux avantages que procure cette technique, à savoir :

- Le comportement régulier voire quasi liquide de l'écoulement des particules favorise l'injection ou l'extraction des solides de manière continue.
- La température du lit est très uniforme grâce aux brassages qui favorisent le mélange rapide des particules.

- Les coefficients d'échanges thermiques entre le lit et les surfaces immergées sont très élevés comparés aux autres méthodes de mise en contact.

Néanmoins, elle possède quelques inconvénients :

- Les particules les plus fines sont souvent entraînées par le fluide. Il est alors nécessaire d'investir dans des équipements très onéreux pour séparer le fluide des particules à l'extérieur du lit, un cyclone par exemple.
- La présence de bulles (zones dépourvues de particules) nuit à l'efficacité des réactions car les temps de séjour des particules dans le lit peuvent varier fortement.
- Près des zones d'injection du fluide, les gradients de vitesses engendrent une érosion des particules.
- Les particules érodent prématurément les surfaces avec lesquelles elles sont en contact (parois des conduites, récipients, électrodes,...)

### I.1.4 Régime de fluidisation

Dès les premières applications industrielles, plusieurs comportements de lits ont été observés. Par exemple, la présence de zones totalement dépourvues de particules, *les bulles*, est généralement absente dans les lits fluidisés liquide-solide alors qu'elle est fréquente dans les systèmes gaz-solide. Cette distinction peut s'expliquer par le fait que les variations de concentration sont beaucoup plus marquées à cause de l'inertie des particules et de la différence de densité entre le solide et le gaz porteur. Ces divers états de fluidisation dépendent de plusieurs paramètres, comme par exemple des propriétés du fluide utilisé (masse volumique, viscosité), des conditions d'injection (débit d'injection, uniformité de la vitesse) et de la phase solide (propriétés des particules, concentration). Deux nombres sans dimension, les nombres de Zenz, peuvent caractériser l'état de fluidisation. Ils caractérisent la taille des particules et la vitesse de fluidisation.

$$Ze_s = \frac{d}{\Delta} = \left( \frac{4}{3} Ar \right)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{I.1})$$

$$Ze_v = \frac{U}{\omega} = \left( \frac{3Re^3}{4Ar} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{I.2})$$

avec les paramètres suivants :

$$\Delta = \left( \frac{3\nu_f^2 \rho_f}{4g(\rho_s - \rho_f)} \right)^{\frac{1}{3}} \quad \text{et} \quad \omega = \left( \frac{4g\nu_f(\rho_s - \rho_f)}{3\rho_f} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{I.3})$$

où  $Ar$  désigne le nombre d'Archimède. Les indices  $f$  et  $s$  sont respectivement relatifs au fluide et au solide.  $\rho$  désigne la masse volumique,  $\nu_f$  la viscosité cinématique,  $g$  la gravité et  $d$  le diamètre des particules.

### Propriétés des particules

L'état de fluidisation dépendra bien évidemment des caractéristiques des particules : taille, densité, forme et état de la surface. Une classification empirique en fonction de leur comportement en fluidisation a été réalisée par Geldart (1973). Les particules sont classées des plus fines aux plus grosses en quatre catégories :

- Type C : Particules cohésives ou poudre très fine dont la taille est inférieure à  $20 \mu m$ . Elles sont difficiles à fluidiser car les forces interparticulaires de cohésion sont plus importantes que les forces hydrodynamiques. La farine est une poudre appartenant à cette catégorie.
- Type A : Particules "aérables" de taille inférieure à  $100 \mu m$  (entre  $40$  et  $80 \mu m$ ). Ces particules sont faciles à fluidiser et se caractérisent par une zone de fluidisation homogène pour de faibles vitesses de fluidisation avant l'apparition de petites zones de bulles pour des vitesses plus importantes. Elles sont représentatives des particules utilisées comme catalyseurs.
- Type B : Particules ayant un diamètre compris entre  $100 \mu m$  et  $2000 \mu m$ . Elles sont facilement fluidisées et leur état de fluidisation se caractérise par l'apparition de bulles dès que la vitesse du fluide est supérieure à la vitesse minimum de fluidisation. Le sable constitué de particules de  $200 \mu m$  appartient à cette catégorie.
- Type D : Grosses particules ayant un diamètre supérieur à  $2000 \mu m$  et/ou une densité importante. Ces solides sont difficiles à fluidiser et se caractérisent par l'apparition de grosses bulles explosives ou du "channeling" (renardage).

Les différentes catégories sont récapitulées sur la figure (I.1)

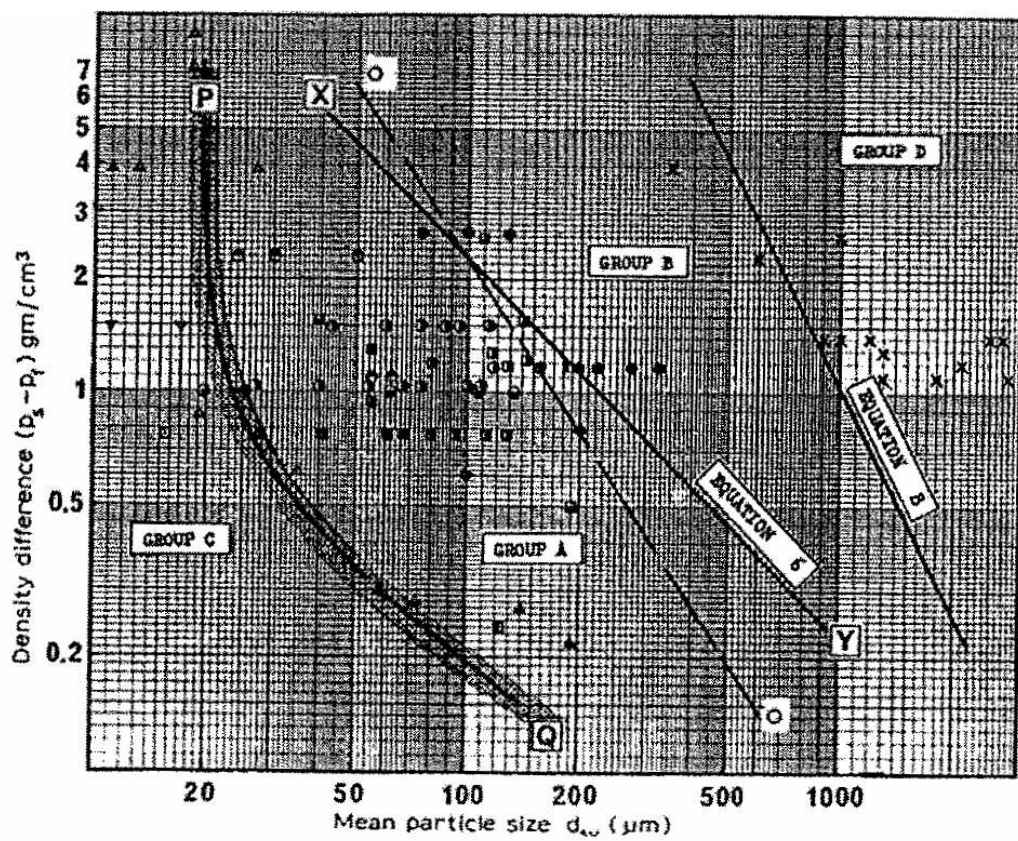


Figure I.1 : *Classification de Geldart (Geldart (1973))*

### État de fluidisation

La vitesse du fluide joue un rôle important dans le comportement du lit. Plusieurs états de fluidisation sont observables suivant la valeur de sa norme. La vitesse minimale de fluidisation,  $U_{mf}$ , est une grandeur du fluide qui permet de caractériser l'état de fluidisation. Elle est par exemple donnée par la corrélation expérimentale d'Ergun (1952) obtenue à partir de la chute de pression au seuil de fluidisation :

$$\frac{\Delta P}{L} = 150 \frac{\alpha_{sm}^2}{(1 - \alpha_{sm})^3} \frac{\mu_f U_{mf}}{d^2} + 1.75 \frac{\alpha_{sm}}{(1 - \alpha_{sm})^3} \frac{\rho_f U_{mf}^2}{d} \quad (\text{I.4})$$

Ici  $\alpha_{sm}$  représente la fraction volumique solide maximale que l'on obtient au seuil de fluidisation. Au minimum de fluidisation, la perte de charge due aux effets visqueux et inertiels est égale au poids apparent du lit soit :

$$\frac{\Delta P}{L} = \alpha_s (\rho_s - \rho_f) g \quad (\text{I.5})$$

$U_{mf}$  est alors la solution de l'équation :

$$\alpha_s (\rho_s - \rho_f) g = 150 \frac{\alpha_{sm}^2}{(1 - \alpha_{sm})^3} \frac{\mu_f U_{mf}}{d^2} + 1.75 \frac{\alpha_{sm}}{(1 - \alpha_{sm})^3} \frac{\rho_f U_{mf}^2}{d} \quad (\text{I.6})$$

Cette vitesse minimale de fluidisation peut être également donnée par la corrélation expérimentale de Wen and Yu (1966) selon la formule :

$$U_{mf} = \frac{\nu_f}{d} \left( \sqrt{1135.7 + 0.0408 Ga} - 33.7 \right) \quad (\text{I.7})$$

$$\frac{1}{(1 - \alpha_s)^{4.7}} = \frac{Ga}{18 Re_p + 2.7 Re_p^{1.687}} \quad (\text{I.8})$$

où  $Ga = \frac{d^3 \mu_f (\rho_s - \rho_f) g}{\mu_f^2}$  représente le nombre de Galilée, aussi appelé nombre d'Archimède. Pour une fluidisation liquide/solide, on définit une vitesse critique supplémentaire, la vitesse minimale d'apparition des bulles, notée  $U_{mb}$ . Les bulles sont des zones du lit fluidisé pauvres, voire dépourvues de particules.  $U_{mb}$  correspond à la vitesse minimale de fluidisation pour les particules des groupes B et D. Dans la plupart des cas de fluidisation gaz/solide,  $U_{mb}$  est aussi la vitesse minimale de fluidisation. Pour les particules appartenant au groupe A, on a  $U_{mb} > U_{mf}$ . La corrélation d'Abrahamsen and Geldart (1980) donne une évaluation du rapport  $U_{mb}/U_{mf}$  :

$$\frac{U_{mb}}{U_{mf}} = 2.07 e^{0.716F} \frac{d \rho_f^{0.66}}{\mu_f^{0.347}} \quad (\text{I.9})$$

dans lequel  $F$  représente la fraction massique de poudre dont le diamètre est inférieur à  $45 \mu m$ . Les différents états de fluidisation susceptibles d'être rencontrés sont résumés ci-dessous.

- Lit fixe : Lorsque la vitesse du fluide est trop faible, les forces d'interaction fluide/particule ne sont pas suffisantes pour équilibrer le poids des particules, la suspension reste tassée au fond du réacteur : on parle alors de *lit fixe*. Cet état est bien entendu indépendant de la nature gazeuse ou liquide du fluide employé.
- Régime particulaire : En augmentant progressivement le débit, le gradient de pression en résultant tend à compenser exactement le poids de la suspension. La vitesse minimum de fluidisation,  $U_{mf}$ , est atteinte à cet instant. La suspension quitte son état compact et on observe ensuite l'expansion du lit fluidisé. Au delà de ce seuil, l'état de fluidisation diffère selon le type de fluide utilisé et des caractéristiques des particules.
- Régime à bulles : Ce régime est atteint pour des vitesses de fluide supérieures ou égales à la vitesse minimale d'apparition des bulles  $U_{mb}$ . Il se caractérise par la formation de bulles près de la grille de fluidisation qui coalescent, grossissent puis atteignent la surface et éclatent. Le phénomène s'apparente à l'ébullition d'un liquide. On parle alors de lits *hétérogènes* (ou *particulaires*) en opposition aux lits *homogènes* (ou encore *aggrégatifs*) dans lesquels il n'y a pas de zones pauvres ou dépourvues de particules.
- Régime à piston (ou à bouchon) : Lorsque la taille des bulles approche le diamètre de la colonne de fluidisation, le régime est dit à piston. La surface du lit monte et descend régulièrement en fonction du passage des bulles.
- Régime turbulent : avant d'atteindre le régime turbulent, le lit passe par un régime de transition pratiquement similaire au régime pleinement turbulent. Il se caractérise par une coalescence permanente des bulles conduisant à des passages préférentiels du fluide par des canaux à travers le lit. La surface du lit se distingue difficilement.
- Régime de fluidisation rapide : la surface du lit est indiscernable, les particules sont transportées hors du lit et elles y retombent finalement.
- Régime pneumatique : il n'y a plus de lit fluidisé. Les particules sont transportées

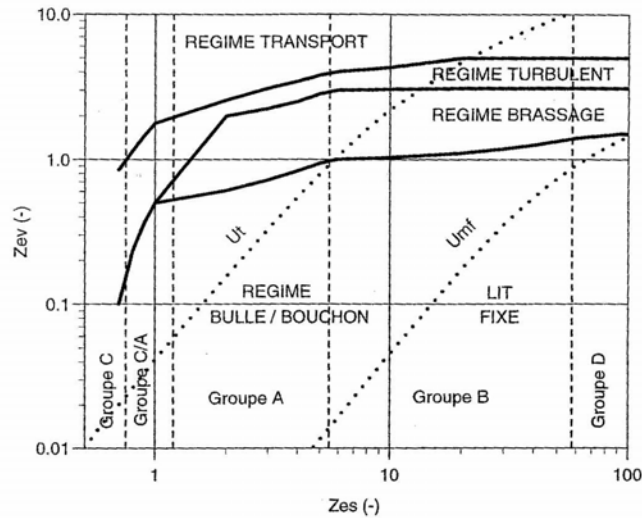


Figure I.2 : *Diagramme de fluidisation Reddy Karri (1993)*

à une vitesse proche de celle du fluide jusqu'au sommet du réacteur. L'écoulement est dilué.

Il est à noter que l'apparition du régime à bulles dépend de la nature de la fluidisation. En fluidisation liquide/solide, ce régime apparaît après le régime turbulent alors qu'il intervient avant pour la fluidisation gaz/solide. Le régime particulaire dans ce dernier cas est très restreint; le régime à bulles apparaît dès que la vitesse minimale de fluidisation est atteinte car elle est identique à la vitesse d'apparition des bulles. La transition vers le régime turbulent est également différente suivant le type de fluide mis en jeu. Pour une fluidisation liquide/solide, le passage vers le régime turbulent est progressif car il peut apparaître un régime oscillatoire caractérisé par une alternance sous forme d'ondes planes de zones vides en particules et de zones denses. Une étude plus poussée a été menée par Nicolas (1997) pour comprendre les mécanismes engendrant cette instabilité. Le diagramme de la figure (I.2) reprend ces différents régimes de fluidisation et la classification par granulométrie proposée par Geldart (1973).

## I.2 Modélisation d'un écoulement de lits fluidisés

Avant de nous intéresser à quelques exemples de modélisation de lits fluidisés, il est utile de comprendre les phénomènes qui gèrent la trajectoire d'une particule. En effet,

le mouvement d'ensemble du lit fluidisé résulte d'une adaptation de la trajectoire de chaque particule à la présence de toutes les autres. Ainsi, grâce à la connaissance du mouvement d'une particule isolée, nous pouvons ensuite mieux appréhender le mouvement de l'ensemble des particules. En outre, certaines équations utilisées dans la modélisation du lit fluidisé font intervenir des termes directement issus de l'étude du mouvement d'une particule isolée.

### I.2.1 Force appliquée à une particule

La trajectoire d'une particule est définie par l'utilisation du principe fondamental de la dynamique appliquée au centre d'inertie de la particule. La trajectoire est alors obtenue par :

$$m_p \frac{d\vec{U}_p}{dt} = m_p \vec{g} + \vec{F}_{ext} \quad (\text{I.10})$$

Ici,  $m_p = \rho_s \mathcal{V}_p$  est la masse de la particule sphérique de volume  $\mathcal{V}_p$  et de surface  $\mathcal{S}_p$ .  $\vec{U}_p$  est la vitesse de son centre d'inertie. Les forces extérieures agissant sur la particule proviennent de l'action du fluide et s'expriment par la formule :

$$\vec{F}_{ext} = \int_{\mathcal{S}_p} (-p\vec{n} + \bar{\sigma}_f \cdot \vec{n}) ds \quad (\text{I.11})$$

dans laquelle  $\vec{n}$  est la normale extérieure à  $\mathcal{S}_p$ .  $\bar{\sigma}_f$  et  $p$  sont respectivement le tenseur des taux de déformations (ou encore tenseur des contraintes visqueuses) et la pression du fluide. Les différentes études ont montré que l'action du fluide pouvait être définie comme une somme de forces :

$$\vec{F}_{ext} = \vec{F}_A + \vec{T} + \vec{F}_H + \vec{F}_{MA} \quad (\text{I.12})$$

#### Force d'Archimède $\vec{F}_A$

Cette force résulte de l'action du fluide sur la particule lorsqu'elle est immergée dans ce fluide. Elle est proportionnelle au volume du corps immergé et s'oppose à la gravité. Son expression est :

$$\vec{F}_A = -\rho_f \mathcal{V}_p \vec{g}$$

où  $\mathcal{V}_p$  représente le volume de la particule. La résultante des forces d'Archimède et de la gravité est la flottabilité :

$$\vec{F}_{Flottabilite} = \vec{F}_g + \vec{F}_A = (\rho_s - \rho_f) \mathcal{V}_p \vec{g} \quad (\text{I.13})$$



La force  $\vec{F}_A$  est importante dans le cas où les masses volumiques du fluide et des particules sont assez proches. Ainsi pour des écoulements gaz/solide, cette contribution  $\vec{F}_A$  est souvent négligée car  $\rho_s \gg \rho_f$ .

### Force de traînée $\vec{T}$

Cette force représente les frottements entre la phase fluide et le solide et se manifeste sous forme d'une dissipation d'énergie au cours du mouvement. Par analogie, il s'agirait de l'équivalent de la perte d'énergie sous forme de chaleur par effet Joule en électricité. Ce terme est prépondérant dans l'établissement de la trajectoire des particules. Son expression est donnée par la relation :

$$\vec{T} = \frac{1}{2} C_d \mathcal{S}_f \|\vec{U}_{Relatif}\| \vec{U}_{Relatif}$$

Ici,  $\vec{U}_{Relatif}$  est la vitesse relative entre la particule et le fluide,  $\mathcal{S}_f$  la surface apparente de la particule et  $C_d$  le coefficient de traînée. La valeur de  $C_d$  dépend du régime de l'écoulement. Le régime d'écoulement est déterminé par la valeur du nombre de Reynolds défini par :

$$Re_t = \frac{\rho_f d_p U_p}{\mu_f} \quad (I.14)$$

De nombreuses études ont été menées sur le cas d'une particule isolée afin de préciser l'expression du coefficient de traînée en fonction du régime d'écoulement. Une expression couramment employée est celle de Schiller et Nauman (Clift et al. (1978)) qui propose la corrélation suivante pour une particule sphérique :

$$C_d = \begin{cases} \frac{24}{Re} (1 + 0.15 Re^{0.687}) & \text{pour } Re < 800 \\ 0.45 & \text{pour } Re > 800 \end{cases}$$

### Force d'histoire ou de Basset $\vec{F}_H$

Cette force résulte de l'effet de la viscosité du fluide. Lorsque la particule subit une accélération, le fluide réagit avec un certain retard à cause de la viscosité qui diffuse la quantité de mouvement. Ce déphasage crée donc une force qui agit tant que le fluide n'a pas atteint son état d'équilibre. La force de Basset est donc proportionnelle au temps écoulé depuis l'accélération de la particule. Les travaux dus à Basset (1888) ont montré que cette force s'exprime par la relation (I.15) dans le cas d'une sphère solide :

$$\vec{F}_H = 3\pi\mu_f d_p \int_0^t \mathcal{K}(t-s) \left( \frac{\partial \vec{U}_f}{\partial s} - \frac{d\vec{U}_p}{ds} \right) ds \quad (I.15)$$

avec  $\mathcal{K}(t-s) = \frac{d_s}{2\sqrt{\pi\mu_f/\rho_f(t-s)}}$ . Dans la plupart des cas, cette force est négligée à cause de la complexité de son expression. Il est en effet nécessaire de connaître l'accélération relative des deux phases pour obtenir une bonne estimation de cette force.

### Force de masse ajoutée $\vec{F}_{MA}$

La force de masse ajoutée est créée lorsque l'une des phases subit une accélération. Cette accélération engendre alors celle de l'autre phase. Si nous prenons l'exemple d'une particule qui se déplace, elle entraîne dans son mouvement le fluide qui l'entoure. L'inertie du fluide environnant s'ajoute alors à l'inertie de la particule elle-même. Dans le cas du déplacement d'une particule à la vitesse  $\vec{U}_p$  dans un écoulement uniforme d'un fluide visqueux  $\vec{U}_f$ , la force de masse ajoutée devient :

$$\vec{F}_{MA} = \rho_s \mathcal{V}_p C_{MA} \left( \frac{d\vec{U}_f}{dt} - \frac{d\vec{U}_p}{dt} \right) \quad (\text{I.16})$$

Cette force est négligeable lorsque la masse volumique de la particule est grande devant celle du fluide. Ainsi elle est souvent omise dans la configuration mettant en jeu un gaz avec des particules denses. La valeur du coefficient de masse ajoutée  $C_{MA}$  ne dépend que de la forme de la particule. Elle vaut pour une particule sphérique :

$$C_{MA} = \frac{1}{2} \quad (\text{I.17})$$

## I.2.2 Modélisation empirique

Comme nous venons de le constater, de nombreux paramètres entrent en jeu dans le processus complexe de fluidisation. Les premières études relatives aux lits fluidisés ont donc essentiellement porté sur la prévision du comportement de ce dernier en fonction des caractéristiques du fluide et des propriétés du solide. Cela a permis une première classification. L'enjeu fut ensuite de mieux comprendre les transitions entre chaque régime. Pour cela, il était nécessaire de prévoir la vitesse minimale de fluidisation et de connaître, ou du moins, d'estimer la hauteur sur laquelle l'expansion du lit allait se produire.

Les études analytiques furent difficiles à mener voire impossibles sauf dans des cas très favorables par exemple pour des systèmes très dilués avec un nombre de Reynolds très faible (Batchelor (1972)).

La voie expérimentale a, quant à elle, permis de dégager une quantité très importante de résultats auxquels nous pouvons nous référer. Cependant, ils ne sont pas d'une grande

aide pour la compréhension des mécanismes d'interaction hydrodynamiques fluide/solide car il est difficile de mesurer les quantités locales telles que les vitesses relatives, les transferts de chaleur ou encore les fluctuations de vitesses par exemple, car les systèmes sont souvent opaques (parois du réacteur) ou difficile à équiper de capteurs. Ils ont toutefois le mérite d'avoir contribué à une classification des régimes de fluidisation et à la constitution d'une base de données mettant en relation la vitesse superficielle du fluide et la hauteur d'expansion du lit. Néanmoins, seule l'empirisme permet de prévoir plus ou moins correctement l'expansion du lit. En effet, les hauteurs de lits prédites grâce aux diagrammes issus des résultats expérimentaux doivent être corrigés dans la plupart des cas. Malgré cela, les corrélations empiriques sont tout de même utilisées, à l'image de la corrélation de Richardson and Zaki (1954) qui donne des résultats assez fiables. La concentration en particules est reliée à la vitesse superficielle du fluide par une relation en loi de puissance du type :

$$U = U_t(1 - \alpha_s)^n \quad (\text{I.18})$$

où l'exposant  $n$  dépend du nombre de Reynolds calculé à partir de la vitesse terminale de chute,  $U_t$ , d'une particule isolée en milieu infini. Les valeurs de  $n$  sont les suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{ll} n = 4.65 + 20\frac{d_p}{D} & Re_t < 0.2 \\ n = (4.4 + 18\frac{d_p}{D})Re_t^{-0.03} & 0.2 < Re_t < 1 \\ n = (4.4 + 18\frac{d_p}{D})Re_t^{-0.1} & 1 < Re_t < 200 \\ n = 4.4Re_t^{-0.1} & 200 < Re_t < 500 \\ n = 2.4 & Re_t > 500 \end{array} \right. \quad (\text{I.19})$$

Nous avons fait apparaître le confinement du système, représenté par le rapport entre le diamètre  $d_p$  de la particule et celui de la colonne,  $D$ , dans l'expression de  $n$ , tel qu'il était présenté dans l'article original de Richardson and Zaki (1954). Toutefois, l'influence du confinement ne semble pas significatif compte tenu des travaux menés par Chong et al. (1979).

Les premiers travaux théoriques sur la fluidisation sont dus à Ergun (1952). Il s'agissait de prévoir la perte de charge de l'écoulement engendrée par la présence du lit de particules. Cette approche est relativement proche des méthodes employées pour caractériser un milieu poreux, d'où la forme que prend l'expression utilisée par Ergun (1952) et déjà présentée auparavant (Equation (I.4)). Au minimum de fluidisation, la perte de charge

due aux effets inertiels et visqueux est exactement compensée par le poids de l'ensemble liquide/solide. Ainsi, la vitesse de fluidisation minimale est obtenue en résolvant la relation (I.6). Il s'avère que les vitesses résultant de ce calcul ne sont pas valables pour des nombres de Reynolds dépassant 1000. Il en est de même pour le comportement asymptotique vers les faibles concentrations qui reproduit mal le comportement d'un système ne contenant qu'une particule. Pour décrire entièrement le spectre, il est nécessaire de mettre en place des corrélations plus appropriées. De plus, l'expression proposée par Ergun ne donne que le minimum de vitesse de fluidisation et n'est pas en mesure de prévoir la hauteur du lit lors de son expansion.

### I.2.3 Modèle diphasique

Compte tenu de ces limitations et de l'intérêt croissant porté à une meilleure compréhension des mécanismes mis en jeu, les premiers modèles d'écoulement utilisant les équations aux dérivées partielles sont apparus vers les années 60. Les premières modélisations, dues à Jackson (1963) et Anderson and Jackson (1967), sont des modèles semi-empiriques relevant des modèles dit à deux fluides. Le système étudié est considéré comme un mélange de deux phases continues. Chacune des phases obéit au système d'équations formé par l'équation de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Une loi de fermeture permet ensuite de tenir compte des interactions entre les phases. Les différents modèles existants dans la littérature se distinguent par la manière dont le couplage entre les phases est effectué mais également par la manière dont sont effectuées les moyennes. L'idée générale est la suivante : la phase continue, le fluide, est décrite par une formulation classique eulérienne à l'aide des équations de Navier-Stokes. Le mouvement de la phase dispersée peut être obtenu de différentes façons, soit en décrivant la trajectoire de chaque particule (approche lagrangienne), soit en considérant la phase dispersée comme un fluide particulier, dont les caractéristiques sont obtenues par application d'un opérateur de moyenne (approche eulérienne). A partir de cette formulation à deux fluides, aboutissant à des équations similaires quelle que soit l'approche eulérienne ou langrangienne choisie, les différents modèles se distinguent ensuite par la façon de traiter toutes ces nouvelles inconnues.

### I.2.4 Approche Euler/Euler

La formulation eulérienne repose sur l'hypothèse que le système est décrit comme un mélange de deux phases. Cependant, les grandeurs physiques telles que la fraction volumique de la phase solide,  $\alpha_s$ , les vitesses  $\vec{u}_f$  et  $\vec{u}_s$  du fluide et des particules ne sont pas strictement locales. On calcule alors la moyenne de ces quantités sur un domaine suffisamment grand pour pouvoir contenir plusieurs particules, mais toutefois petit devant la taille du système. La première étape de la modélisation est la construction de la fonction de distribution caractéristique  $\chi_k$  de la phase  $k$  qui vaut 1 lorsqu'on est dans la phase  $k$  et 0 ailleurs.  $\chi_k$  permet de connaître à chaque instant le fluide dans lequel on se trouve. Notons que l'indice  $f$  sera relatif au fluide et l'indice  $s$  au solide. L'interface entre les phases est définie par les points de discontinuités de  $\chi_k$  qui reste néanmoins dérivable au sens des distributions.  $\chi_k$  vérifie les équations suivantes :

$$\frac{\partial \chi_k}{\partial t} + \vec{w} \cdot \nabla \chi_k = 0 \quad \text{avec} \quad \nabla \chi_k = -\vec{n}_k \quad (\text{I.20})$$

Nous avons introduit la vitesse de l'interface  $\vec{w}$  et la normale à l'interface  $\vec{n}_k$ , dirigée vers l'extérieur du domaine occupé par la phase  $k$ . Les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement s'écrivent dans le cas général, avec le tenseur des contraintes de la phase  $k$ ,  $\bar{\sigma}_k$ , et les forces extérieures  $\vec{f}_k$  :

$$\frac{\partial(\rho_k \alpha_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{u}_k) = 0 \quad (\text{I.21})$$

$$\frac{\partial(\rho_k \vec{u}_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \vec{u}_k \otimes \vec{u}_k) = \nabla \cdot \bar{\sigma}_k + \vec{f}_k \quad (\text{I.22})$$

Ces équations sont "multipliées" par la distribution  $\chi_k$ . Cette opération permet ainsi de les appliquer non seulement sur le volume de la phase  $k$  mais également sur le volume total. On obtient alors :

$$\frac{\partial(\rho_k \chi_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \chi_k \vec{u}_k) = \rho_k (\vec{w} - \vec{u}_k) \vec{n}_k \quad (\text{I.23})$$

$$\frac{\partial(\rho_k \vec{u}_k \chi_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \chi_k \vec{u}_k \otimes \vec{u}_k) = \nabla \cdot (\chi_k \bar{\sigma}_k) + \vec{f}_k \chi_k + \rho_k \vec{u}_k (\vec{w} - \vec{u}_k) \vec{n}_k + \bar{\sigma}_k \vec{n}_k \quad (\text{I.24})$$

Les termes  $\rho_k (\vec{w} - \vec{u}_k) \vec{n}_k$  et  $(\rho_k \vec{u}_k (\vec{w} - \vec{u}_k) + \bar{\sigma}_k) \vec{n}_k$  correspondent respectivement à l'échange interfacial de masse et de quantité de mouvement entre les phases. Dans l'éventualité d'un système diphasique mettant en jeu des phases solides indéformables, les interfaces sont rigides, ce qui entraîne l'égalité de la vitesse de l'interface avec celle du fluide et du solide.

Nous avons alors  $\vec{w} = \vec{u}_s = \vec{u}_f$ . Nous avons également égalité des contraintes normales à l'interface qui se traduit par la relation :

$$\bar{\sigma}_s \vec{n}_s + \bar{\sigma}_f \vec{n}_f = \vec{0} \quad (\text{I.25})$$

Le point-clé de la modélisation eulérienne réside dans la manière de calculer les moyennes. En effet, le nombre de lois de fermeture nécessaires au modèle dépend du type de moyenne que l'on adopte. Une possibilité est de définir la moyenne par :

$$\langle f \rangle = \frac{1}{V} \int_V f dV \quad (\text{I.26})$$

où  $V$  est le volume de contrôle constitué par l'ensemble des volumes  $V_k$  occupés par les phases  $k$ . La fraction volumique de la phase  $k$  est donnée par :

$$\alpha_k = \langle \chi_k \rangle = \frac{1}{V} \int_V \chi_k dV = \frac{V_k}{V} \quad (\text{I.27})$$

La moyenne eulérienne phasique est définie dans ce cas par :

$$\alpha_k F_k = \langle f \chi_k \rangle = \alpha_k \langle f \rangle_k = \frac{1}{V} \int_V f \chi_k dV \quad (\text{I.28})$$

Dans cette expression,  $\langle f \rangle_k = \frac{1}{V_k} \int_{V_k} f dV$ . Les grandeurs moyennes sont notées en majuscules.

Ce choix présente l'avantage de limiter le nombre de termes à modéliser. Le système d'équations diphasiques final est obtenu en prenant la moyenne des équations (I.23) et (I.24), telle que nous venons de la définir. On obtient la conservation de la masse de chaque phase :

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k U_k) = \Gamma_k \quad (\text{I.29})$$

$\Gamma_k$  représente la densité volumique des échanges aux interfaces qui s'écrit :

$$\Gamma_k = \langle \rho_k (\vec{w} - \vec{u}_k) \vec{n}_k \rangle \quad (\text{I.30})$$

et vérifie l'équation bilan de conservation surfacique aux interfaces :

$$\sum_{k=1}^2 \Gamma_k = 0 \quad (\text{I.31})$$

Dans le cas où les inclusions sont indéformables, isothermes et sans changement de phase, nous avons simplement  $\Gamma_k = 0$ . En appliquant la même procédure, on obtient l'équation

de conservation de la quantité de mouvement en prenant la moyenne de l'équation (I.24). Nous avons donc :

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k \vec{U}_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{U}_k \otimes \vec{U}_k) = \nabla \cdot (\alpha_k \bar{\bar{\Sigma}}_k) + \alpha_k \vec{F}_k + \vec{I}_k + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \langle \vec{u}_k' \otimes \vec{u}_k' \rangle_k) \quad (\text{I.32})$$

Dans cette équation,  $\alpha_k \bar{\bar{\Sigma}}_k = \langle \chi_k \bar{\bar{\sigma}}_k \rangle$  est la moyenne du tenseur des contraintes. Nous avons également la moyenne des termes d'échanges aux interfaces  $\vec{I}_k$  telle que

$$\vec{I}_k = \langle \rho_k \vec{u}_k (\vec{w} - \vec{u}_k) \vec{n}_k + \bar{\bar{\sigma}}_k \vec{n}_k \rangle \quad (\text{I.33})$$

Lorsque les interfaces sont indéformables et imperméables, le terme d'échange  $\vec{I}_k$  est nul. L'opération de prise de moyenne a permis d'écrire les équations sur les grandeurs moyennes pour chacune des phases, mais elle a introduit dans le même temps de nouvelles inconnues qui sont les corrélations  $\langle \vec{u}_k' \otimes \vec{u}_k' \rangle_k$ . Ces corrélations peuvent être modélisées si nous considérons certaines hypothèses simplificatrices. Elles peuvent être également modélisées en appliquant un modèle de turbulence. Il en est de même pour les termes d'échanges interfaciaux  $\Gamma_k$  et  $\vec{I}_k$ . Le tenseur des contraintes  $\bar{\bar{\sigma}}_k$  apparaissant dans les équations (I.22) est souvent écrit sous la forme :

$$\bar{\bar{\sigma}}_k = (-p_k + \lambda Tr \bar{\bar{\varepsilon}}_k) \bar{\bar{I}}_d + 2\mu \bar{\bar{\varepsilon}}_k \quad (\text{I.34})$$

Il s'agit de la modélisation d'un fluide newtonien dans lequel  $\bar{\bar{\varepsilon}}_k = \frac{1}{2}(\nabla \vec{u}_k + \nabla^T \vec{u}_k)$  est le tenseur des taux de déformation. Lorsque nous utilisons cette formulation pour la phase continue, la modélisation ne nécessite pas de traitement particulier puisque nous sommes en présence d'un fluide réel. La pression et la viscosité sont des grandeurs quantifiables. Cela n'est plus vrai pour la phase dispersée dans la mesure où il faut définir la pression et la viscosité du pseudo-fluide. Généralement, ces deux inconnues sont exprimées en fonction de la fraction volumique de solide.

**Exemples de modélisation** Gevrin (2002) a effectué une revue bibliographique sur les modélisations existantes. Les premières modélisations de lit fluidisé appartenant au groupe des modèles à deux fluides font appel à des modèles de fermeture assez simplistes dans la mesure où certains termes sont omis. La voie expérimentale a tout d'abord été explorée (Jackson (1963), Anderson and Jackson (1967)). Présentons par exemple le modèle de Anderson and Jackson (1967).

Les équations de conservation de la masse s'écrivent

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k U_k) = 0 \quad (\text{I.35})$$

avec  $k = s$  pour le solide et  $k = f$  pour le fluide. Les équations de conservation de la quantité de mouvement sont respectivement :

$$\alpha_f \rho_f \left( \frac{\partial \vec{U}_f}{\partial t} + \vec{U}_f \cdot \nabla \vec{U}_f \right) = \alpha_f \rho_f \vec{g} + \alpha_f \nabla \cdot \bar{\bar{\Sigma}}_f - \vec{I} \quad (\text{I.36})$$

$$\alpha_s \rho_s \left( \frac{\partial \vec{U}_s}{\partial t} + \vec{U}_s \cdot \nabla \vec{U}_s \right) = \alpha_s \rho_s \vec{g} + \nabla \cdot \bar{\bar{\Sigma}}_s + \vec{I} \quad (\text{I.37})$$

La modélisation adoptée par Anderson and Jackson (1967) pour les tenseurs de contraintes  $\bar{\bar{\Sigma}}_s$  et  $\bar{\bar{\Sigma}}_f$  des phases solide et fluide est celle d'un fluide newtonien. La justification physique d'un tel choix n'est pas précisée, cependant elle permet de rendre compte des effets dissipatifs qui ne furent pas pris en compte dans le modèle initial de Jackson (1963). Les tenseurs sont donc écrits sous la formulation classique :

$$\bar{\bar{\Sigma}}_k = \left( -P_k + \lambda_k(\alpha_k) \nabla \cdot \vec{U}_k \right) \bar{\bar{I}}_d + \mu_k(\alpha_k) \left( \nabla \vec{U}_k + \nabla^T \vec{U}_k - \frac{2}{3} \text{Tr}(\nabla \vec{U}_k) \bar{\bar{I}}_d \right) \quad (\text{I.38})$$

toujours avec les notations  $k = s$  pour le solide et  $k = f$  pour le fluide. Les valeurs des pression  $P_s$ , des viscosités de compression  $\lambda_s$  et dynamique  $\mu_s$  sont mal connues. Néanmoins, certaines hypothèses simples indiquent que leur expression doit être dépendante de la concentration solide. Nous pouvons nous attendre, par exemple, à ce que ces grandeurs tendent vers zéro lorsque la concentration  $\alpha_s$  en solide s'annule. Le terme d'interaction  $\vec{I}$  entre les phases est, quant à lui, modélisé par :

$$\vec{I} = \alpha_s \nabla \cdot \bar{\bar{\Sigma}}_f + \alpha_f \beta(\alpha_f) \left( \vec{U}_f - \vec{U}_s \right) + \alpha_s C(\alpha_f) \rho_f \frac{d}{dt} \left( \vec{U}_f - \vec{U}_s \right) \quad (\text{I.39})$$

où le premier terme est représentatif de l'action du fluide sur la surface des particules, le second terme est la force de traînée et enfin le dernier terme regroupe les effets de masse ajoutée. Les expressions des coefficients de traînée  $\beta$  et de masse ajoutée  $C$  ne sont pas précisées mis à part le fait qu'elles dépendent toutes de la concentration en particules. A partir de ces équations, plusieurs modèles de fermeture ont été proposés sur la base de résultats expérimentaux mais ils ne furent validés que pour des cas de fluidisation particuliers. Le tableau I.1 reprend sommairement les expressions proposées par les différents auteurs pour la pression  $P_s$  du solide, la viscosité  $\mu_s$  et la valeur du coefficient  $\beta$  intervenant dans le terme de traînée.  $\alpha_{s,m}$  représente fraction solide maximale,  $M$  ainsi que  $r$  sont des paramètres d'ajustement et  $P$  est la pression du fluide.  $Fr = \frac{U}{gd}$  est le nombre de Froude.



Auteurs	Pression $P_s$	Viscosité $\mu_s$	Coefficient de traînée $\beta$
Homsy et al. (1980)	non précisé mais fonction de $\alpha_s$	constant	$\frac{ReFr(\rho_s - \rho_f)\mu_f}{\rho_f d^2} \left(\frac{U_0}{U_t}\right) \frac{\alpha_s}{(1 - \alpha_s)^{n-2}}$
Needham and Merkin (1983)	$P\alpha_s$	non précisé	$\frac{\alpha_s}{(1 - \alpha_s)^n} \frac{CD_0}{V_p}$
Harris and Crighton (1994)	$P \frac{\alpha_s}{\alpha_{s,m} - \alpha_s}$	constante non précisé	$\frac{\alpha_s}{(1 - \alpha_s)^n} \frac{CD_0}{V_p}$
Anderson et al. (1995)	$P\alpha_s^3 \exp\left(\frac{r\alpha_s}{\alpha_{s,m} - \alpha_s}\right)$	$\frac{M\alpha_s}{1 - (\alpha_s/\alpha_{s,m})^{1/3}}$	$\frac{(\rho_s - \rho_f)g}{U_t} \frac{\alpha_s}{(1 - \alpha_s)^{n-1}}$

Tableau I.1 : Modèles de fermeture pour  $P_s$ ,  $\mu_s$  et  $\beta$ 

Auteurs	$C(\alpha_s)$
Anderson and Jackson (1968)	$\frac{1}{2}$
Homsy et al. (1980)	$\frac{1+2\alpha_s}{2(1-\alpha_s)}$
Anderson et al. (1995)	0

Tableau I.2 : Expression du coefficient de masse ajoutée  $C$  issue de la littérature

Le terme de masse ajoutée représente la force de réaction de la suspension à une accélération relative des deux phases. Une modélisation est également nécessaire pour ce terme, car bien qu'il soit relativement connu dans le cas d'une sphère isolée, sa dépendance à la concentration en particules est peu étudiée. Dans le cas d'une fluidisation gaz/liquide, ce terme est négligeable puisque le rapport de densité entre les deux phases est très grand. Nous avons  $\rho_s \gg \rho_f$ . Certains auteurs l'omettent même dans le cas d'une fluidisation liquide/solide. Le tableau I.2 reprend quelques valeurs affectées à  $C$ . Il est à noter qu'il existe aussi plusieurs écritures de la dérivée  $\frac{d}{dt}$ . Liu (1982) a recensé trois écritures pour l'expression de cette dérivée particulière :

$$\frac{d}{dt}(\vec{U}_f - \vec{U}_s) = \left( \frac{\partial \vec{U}_f}{\partial t} + \vec{U}_f \cdot \nabla \vec{U}_f \right) - \left( \frac{\partial \vec{U}_s}{\partial t} + \vec{U}_s \cdot \nabla \vec{U}_s \right) \quad (\text{I.40})$$

ou

$$\frac{d}{dt}(\vec{U}_f - \vec{U}_s) = \left( \frac{\partial \vec{U}_f}{\partial t} + (\vec{U}_f - \vec{U}_s) \cdot \nabla \vec{U}_f \right) - \left( \frac{\partial \vec{U}_s}{\partial t} + (\vec{U}_f - \vec{U}_s) \cdot \nabla \vec{U}_s \right) \quad (\text{I.41})$$

ou

$$\frac{d}{dt}(\vec{U}_f - \vec{U}_s) = \left( \frac{\partial \vec{U}_f}{\partial t} + (\vec{U}_f - \vec{U}_s) \cdot \nabla \vec{U}_f \right) - \left( \frac{\partial \vec{U}_s}{\partial t} - (\vec{U}_f - \vec{U}_s) \cdot \nabla \vec{U}_s \right) \quad (\text{I.42})$$

Foscolo and Gibilaro (1987) puis Batchelor (1988) ont proposé des modèles unidirectionnels afin d'introduire le moins de paramètres empiriques possibles. Ainsi, toutes les gran-

deurs inconnues sont exprimées en fonction de la concentration et de la vitesse moyenne du fluide.

### I.2.5 Approche Euler/Lagrange

Dans cette approche, le fluide est modélisé de la même manière que pour l'approche précédente. Ainsi, les équations de Navier-Stokes sont exprimées dans une formulation moyenne donnant une description moyenne des mouvements du fluide. Les équations de Navier-Stokes sont alors résolues soit par une méthode de discrétisation de l'espace ou des solutions, soit par une méthode statistique de Monte-Carlo. Pour la phase solide, la modélisation repose sur le suivi lagrangien des particules en prenant en compte les interactions hydrodynamiques particule-particule et fluide-particule. La simulation du mouvement des particules est obtenue par une intégration de la trajectoire de toutes les particules en considérant les effets physiques modélisés (force due à l'action de la traînée, chocs entre les particules, collisions avec les parois ...). L'approche que nous présentons ici est dérivée de la théorie cinétique des gaz. En effet, il existe une analogie forte entre le mouvement des particules dans un milieu diphasique et celui des molécules de gaz à l'échelle microscopique. Cette voie a été explorée par Grad (1949) pour les gaz raréfiés puis étendue aux milieux granulaires denses par Jenkins and Richman (1985). Dans ce cas, la modélisation repose sur une analyse statistique de l'état du système. Il s'agit de définir, à un instant  $t$ , le nombre probable de particules localisées par leur centre  $\vec{x}$  à  $d\vec{x}$  près et ayant une vitesse  $\vec{u}$  à  $d\vec{u}$  près. On considère alors la densité de probabilité (pdf)  $f_s$  telle que  $f_s(t, \vec{x}, \vec{u})d\vec{x}d\vec{u}$  soit la probabilité d'avoir des particules dans cet état. L'espace physique est remplacé par l'espace des phases  $d\vec{x}d\vec{u}$ . La densité volumique de particules est donnée par :

$$n_s(\vec{x}, t) = \langle n(\vec{x}, t) \rangle = \int f_s(\vec{x}, \vec{u}, t) d\vec{u} \quad (\text{I.43})$$

et plus généralement, la grandeur moyenne  $G$  d'une valeur  $g$  est obtenue par la relation suivante :

$$\langle g(\vec{x}, t) \rangle = G = \frac{1}{n_s} \int g(\vec{u}) f_s(\vec{x}, \vec{u}, t) d\vec{u} \quad (\text{I.44})$$

L'écart à la moyenne pour la vitesse est défini par :

$$c(\vec{x}, t) = \vec{u}(\vec{x}, t) - \langle \vec{u}(\vec{x}, t) \rangle = \vec{u}(\vec{x}, t) - \vec{U} \quad (\text{I.45})$$

Nous pouvons donc retrouver toutes les grandeurs moyennes définies pour l'approche eulérienne. Par exemple, en prenant  $g = \vec{u}_s$ , nous obtenons la vitesse moyenne  $\vec{U}_s$ . Il en

est de même pour les corrélations de vitesse  $\langle \vec{c} \otimes \vec{c} \rangle$  en prenant  $g = \vec{c} \otimes \vec{c}$ . Notons enfin que la fonction densité de probabilité  $f_s(\vec{x}, \vec{u}, t)$  vérifie l'équation de Boltzmann :

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{c} f_s) + \nabla_{\vec{c}} \cdot (\vec{F} f_s) = \mathcal{C}(f_s) \quad (\text{I.46})$$

où  $\vec{F}$  est la force extérieure instantanée massique qui agit sur les particules et  $\mathcal{C}(f_s)$  un opérateur de collisions qui traduit les interactions entre particules. L'équation de Boltzmann permet de suivre l'évolution temporelle de la grandeur moyenne  $\langle g \rangle$ . On note  $n_s m = \alpha_s \rho_s$ , avec  $m$  la masse d'une particule et  $\alpha_s$  la fraction volumique de particules. L'équation de transport de la grandeur moyenne  $\langle g \rangle$  est obtenue par multiplication de (I.46) par  $g$  puis par intégration de l'équation résultante dans l'espace des vitesses. Cette solution, proposée par Chapman and Cowling (1970), est finalement :

$$\frac{\partial(\alpha_s \rho_s \langle g \rangle)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \langle \vec{c} g \rangle) - \alpha_s \rho_s \left( \langle \frac{\partial g}{\partial t} \rangle + \langle \vec{c} \nabla_{\vec{c}} g \rangle + \langle \vec{F} \nabla_{\vec{c}} g \rangle \right) = \mathcal{C}(g) \quad (\text{I.47})$$

dans laquelle  $\mathcal{C}(g)$  est l'opérateur de collision pour la grandeur moyenne  $\langle g \rangle$ . Il est défini par  $\mathcal{C}(g) = \int g \mathcal{C}(f_s) dc$ . La variation de  $g$  due aux collisions s'obtient en intégrant la variation locale de  $g$  sur tous les chocs. Selon Jenkins and Richman (1985),  $\mathcal{C}(g)$  peut s'écrire :

$$\mathcal{C}(g) = \chi(g) - \nabla \vec{\Theta}(g) \quad (\text{I.48})$$

où  $\chi$  représente la perte de  $g$  due aux collisions inélastiques et le terme de flux  $\vec{\Theta}$  le transport de la quantité  $g$  durant la collision. Comme pour l'approche eulérienne, les différentes modélisations se distinguent par la manière de considérer les forces  $\vec{F}$  et l'opérateur de collision  $\mathcal{C}(g)$ . Le système d'équations final est obtenu en choisissant correctement la grandeur  $g$ . Pour  $g = 1$ , moment d'ordre 0, l'équation (I.47) donne l'équation de conservation de la masse :

$$\frac{\partial \alpha_s \rho_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s U_s) = 0 \quad (\text{I.49})$$

Une modélisation de  $\vec{F}$  est donnée par :

$$\vec{F} = \vec{g} - \frac{\vec{u} - \vec{u}_f}{\tau} - \frac{1}{\rho_s} \nabla P_f \quad (\text{I.50})$$

avec  $\vec{g}$  la gravité,  $\tau$  le temps caractéristiques associé à la traînée et  $\vec{u}_f$  la vitesse du fluide non perturbée par la présence des particules. Cette expression prend donc en compte l'action de la gravité, la traînée et la poussée d'Archimède. L'équation d'évolution du

moment d'ordre 1 est l'équation de conservation de la quantité de mouvement. Elle est obtenue en posant  $g = \vec{c}$ . Nous avons donc :

$$\alpha_s \rho_s \left( \frac{\partial \vec{U}_s}{\partial t} + \vec{U}_s \cdot \nabla \vec{U}_s \right) = -\nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \langle \vec{c} \otimes \vec{c} \rangle + \vec{\Theta}(\rho_s \vec{c})) - \alpha_s \nabla P_f + \frac{\alpha_s \rho_s}{\tau} (\vec{U}_f - \vec{U}_s) + \alpha_s \rho_s \vec{g} \quad (\text{I.51})$$

L'évolution du moment d'ordre 2, obtenu pour  $g = \langle \vec{c} \otimes \vec{c} \rangle$ , donne l'évolution des fluctuations de vitesses.

$$\begin{aligned} \alpha_s \rho_s \left( \frac{\partial \langle \vec{c} \otimes \vec{c} \rangle}{\partial t} + \vec{U}_s \cdot \nabla \langle \vec{c} \otimes \vec{c} \rangle \right) &= \nabla (\alpha_s \rho_s \langle \vec{c} \otimes \vec{c} \otimes \vec{c} \rangle) + \vec{\Theta}(\rho_s \vec{c} \otimes \vec{c}) \\ &\quad - \frac{\alpha_s \rho_s}{\tau} \left( \langle \vec{c} \otimes \vec{c} \rangle - \langle \vec{u}_f' \otimes \vec{c} \rangle \right) \\ &\quad - \left( \alpha_s \rho_s \langle \vec{c} \otimes \vec{c} \rangle + \vec{\Theta}(\rho_s \vec{c}) \right) \cdot (\nabla \vec{U}_s + \nabla^t \vec{U}_s) \\ &\quad + \chi(\rho_s \vec{c} \otimes \vec{c}) \end{aligned} \quad (\text{I.52})$$

En calculant la trace de cette équation, on obtient l'équation de conservation de l'énergie cinétique de la phase dispersée :

$$\begin{aligned} \alpha_s \rho_s \frac{Dq_s^2}{Dt} &= -\frac{1}{2} \nabla \cdot \left( \alpha_s \rho_s \langle \vec{c} \otimes \vec{c} \otimes \vec{c} \rangle + \vec{\Theta}(\rho_s \vec{c} \otimes \vec{c}) \right) \\ &\quad - \left( \alpha_s \rho_s \langle \vec{c} \otimes \vec{c} \rangle + \vec{\Theta}(\rho_s \vec{c}) \right) \nabla \vec{U}_s \\ &\quad + \frac{\alpha_s \rho_s}{\tau} (q_{fs} - 2q_s^2) + \frac{1}{2} \nabla \cdot \chi \end{aligned} \quad (\text{I.53})$$

Il est à noter qu'à l'image de la prise de moyenne dans le cas eulérien, nous faisons apparaître de nouvelles inconnues, ici, les corrélations triples de vitesses. En fait, le développement d'un moment ordre  $n$  fait toujours apparaître le moment d'ordre  $(n+1)$  dont l'évolution est inconnue. De la même manière, les termes  $\vec{\Theta}$  apparaissant dans l'opérateur de collision doivent être modélisés afin de fermer le modèle.

**Exemples de modélisation** Avec le développement des machines de calculs, les modèles Euler/Lagrange ont connu un certain succès. En effet ils permettent d'atteindre une précision importante dans la modélisation des interactions entre les particules grâce à la prise en compte des collisions entre elles et éventuellement avec les parois du système. Les travaux de Boëlle (1997) ont montré que ces effets étaient non négligeables, même en écoulement gaz/solide de faible concentration en solide. La variété des modèles Euler/Lagrange existants découle du nombre de manières de fermer les équations de transport des différents moments (type de collisions, prise en compte du fluide intersitial), mais aussi de son

domaine de validité (milieu dense ou dilué).

Nous présentons ici comme illustration de modèle issu de la théorie cinétique des gaz celui utilisé par Simonin and He (1992). Il a permis de souligner l'importance des couplages diphasiques. Initialement développé pour l'étude d'écoulements denses gaz-solide (Boëlle (1997)), ce modèle a été étendu au cas des écoulements liquide-solide dans le travail de Gevrin (2002). Nous présentons brièvement les équations à résoudre ainsi que les modèles de fermeture employés dans cette approche. Les équations de conservation de la masse et quantité de mouvement sont établies à partir de celles de la théorie cinétique des gaz. Elles s'écrivent ainsi :

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{U}_k) = 0 \quad (I.54)$$

$$\alpha_k \rho_k \frac{\partial \vec{U}_k}{\partial t} + \alpha_k \rho_k \vec{U}_k \cdot \nabla \vec{U}_k = -\alpha_k \nabla P_f + \alpha_k \rho_k \vec{g} - \nabla \cdot \bar{\bar{\Sigma}}_k + \vec{I}_k \quad (I.55)$$

Les notations restent inchangées,  $k = s$  pour le solide et  $k = f$  pour le fluide. Le terme  $\bar{\bar{\Sigma}}_f$  est égal au tenseur des contraintes de Reynolds  $\alpha_f \rho_f \langle \vec{u}_f \otimes \vec{u}_f \rangle$  alors que  $\bar{\bar{\Sigma}}_s$  est la somme du tenseur des contraintes de Reynolds  $\alpha_s \rho_s \langle \vec{u}_s \otimes \vec{u}_s \rangle$  et du tenseur des contraintes de collisions  $\Theta(\rho_s \vec{u}_s \otimes \vec{u}_s)$ . L'échange interfacial est tel que

$$\vec{I}_f = -\vec{I}_s = \alpha_s \rho_s \frac{\vec{U}_{Gli}}{\tau} \quad (I.56)$$

où  $\vec{U}_{Gli}$  représente la vitesse moyenne de glissement entre les phases.  $\tau$  désigne le temps de traînée moyen. Les corrélations doubles de la vitesse du fluide sont obtenues par un modèle de type  $k-\epsilon$ . Le tenseur de Reynolds est relié à l'énergie cinétique et la dissipation visqueuse par la viscosité turbulente. Pour la phase fluide, on a la relation

$$\langle \vec{u}_f \otimes \vec{u}_f \rangle = -\nu_f^t \left( \nabla \vec{U}_f + \nabla^t \vec{U}_f \right) + \frac{2}{3} \left( q_f^2 + \nu_f^t \nabla \cdot \vec{U}_f \right) \bar{\bar{I}}_d \quad (I.57)$$

où la viscosité turbulente vaut :

$$\nu_f^t = \frac{2}{3} q_f^2 \tau^t \quad \text{avec} \quad \tau^t = \frac{3}{2} C_\mu \frac{q_f^2}{\epsilon_f} \quad (I.58)$$

Le tenseur de Reynolds de la phase solide est modélisé à l'aide d'un modèle de type  $k-\epsilon$ . Il est alors donnée par :

$$\langle \vec{u}_s \otimes \vec{u}_s \rangle = -\nu_s^{cin} \left( \nabla \vec{U}_s + \nabla^t \vec{U}_s \right) + \frac{2}{3} \left( q_s^2 + \nu_s^{cin} \nabla \cdot \vec{U}_s \right) \bar{\bar{I}}_d \quad (I.59)$$

La viscosité cinétique, associée aux corrélations de vitesses, est notée  $\nu_s^{cin}$ . Nous avons :

$$\nu_s^{cin} = \frac{\frac{1}{3} \tau_{sf}^t q_{sf} + \frac{1}{2} \tau \frac{2}{3} q_s^2 (1 + \alpha_s g_0 \phi_c)}{1 + \frac{\sigma_c}{2} \frac{\tau}{\tau_s^c}} \quad (I.60)$$

avec

$$\tau_s^c = \sqrt{\frac{3\pi}{2}} \frac{d}{24\alpha_s g_0 \sqrt{q_s^2}} \quad (\text{I.61})$$

le temps caractéristique entre deux collisions.  $\sigma_c$  et  $\phi_c$  sont des constantes dépendantes du coefficient d'élasticité  $e_c$  de la particule.  $g_0$  est la fonction d'encombrement qui traduit le fait que les vitesses de deux particules qui entrent en collision ne sont pas statistiquement indépendantes. L'expression adoptée pour  $g_0$  dans ce modèle est celle de Lun and Savage (1986) dans le cadre d'un écoulement granulaire. Ils proposent :

$$g_0 = \left(1 - \frac{\alpha_s}{\alpha_{s,max}}\right)^{-2.5\alpha_{s,max}} \quad (\text{I.62})$$

où  $\alpha_{s,max}$  est la concentration maximale de la phase solide. Nous avons auparavant noté que le tenseur des contraintes du solide est la somme du tenseur des contraintes de Reynolds solide et du tenseur de collisions. Ce dernier sera également modélisé à l'aide d'un modèle de type  $k - \epsilon$  par souci de cohérence et fera donc apparaître une autre viscosité cinétique, notée  $\nu_s^{col}$ . Par analogie, le tenseur des corrélations fluide/solide est obtenu également à l'aide d'un modèle  $k - \epsilon$ . Les équations de fermeture sont :

$$\langle \vec{u}_f \otimes \vec{u}_s \rangle = -\nu_{fs}^t \left( \nabla \vec{U}_f + \nabla \vec{U}_s \right) + \frac{1}{3} \left( q_{fs}^2 + \nu_{fs}^t (\nabla \cdot \vec{U}_f + \nabla \cdot \vec{U}_s) \right) \bar{I} \bar{d} \quad (\text{I.63})$$

dans lesquelles la viscosité turbulente est modélisée par :

$$\nu_{fs}^t = \frac{1}{3} q_{fs} \tau_{sf}^t \quad \text{avec} \quad \tau_{sf}^t = \tau_f^t \sqrt{1 + C_\beta f(q_f^2)} \quad (\text{I.64})$$

Enfin, les termes de collisions  $\chi(\rho_s \vec{u}_s)$ ,  $\chi(\rho_s \vec{u}_s \vec{u}_f)$ ,  $\Theta(\rho_s \vec{u}_s)$  et  $\Theta(\rho_s \vec{u}_s \vec{u}_f)$  sont exprimés en fonction de  $g_0$ , de l'énergie cinétique  $q_s^2$  et du tenseur de Reynolds solide  $\langle \vec{u}_s \otimes \vec{u}_s \rangle$ . Le développement détaillé des termes collisionnels est précisé dans l'article de He and Simonin (1994). Cette formulation nous donne l'expression de la viscosité de collisions  $\nu_s^{col}$  qui est égale à :

$$\nu_s^{col} = \frac{4}{5} \alpha_s g_0 (1 + e_c) \left( \nu_s^{cin} + d \sqrt{\frac{2q_s^2}{3\pi}} \right) \quad (\text{I.65})$$

Finalement, le tenseur des contraintes solides  $\bar{\bar{\Sigma}}_s$  peut être décrit par la loi de comportement :

$$\bar{\bar{\Sigma}}_s = \left( P_s - \lambda_s \nabla \cdot \vec{U}_s \right) \bar{I} \bar{d} - \mu_s \left( \nabla \vec{U}_s + \nabla^t \vec{U}_s - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{U}_s \bar{I} \bar{d} \right) \quad (\text{I.66})$$

Dans ce cas, la pression est définie comme :

$$P_s = \frac{2}{3}\alpha_s\rho_s q_s^2 (1 + 2\alpha_s g_0(1 + e_c)) \quad (\text{I.67})$$

La viscosité de compression vaut :

$$\lambda_s = \frac{4}{3}\alpha_s^2\rho_s d g_0(1 + e_c)\sqrt{\frac{2q_s^2}{3\pi}} \quad (\text{I.68})$$

et la viscosité de cisaillement s'écrit :

$$\mu_s = \alpha_s\rho_s(\nu_s^{cin} + \nu_s^{col}) \quad (\text{I.69})$$

### I.3 Apport de la simulation numérique directe

Les modèles macroscopiques ont permis de mieux comprendre les phénomènes généraux intervenant dans les lits fluidisés. A partir d'une approche simplifiée où certains termes agissant dans le développement ne sont pas pris en compte, les premières modélisations ont permis, par exemple, d'étudier la stabilité linéaire du lit (Jackson (1963)). Grâce à l'apport de la modélisation par une approche cinétique, les effets dus aux contacts entre les particules ont été intégrés. Cependant, comme nous venons de le voir dans le paragraphe précédent, le traitement macroscopique a introduit des inconnues dont l'expression est modélisée, comme par exemple la traînée ou la turbulence. On peut apprécier l'intérêt de la simulation numérique directe qui permet de s'affranchir, dans une certaine mesure, des modèles empiriques ou mathématiques. La simulation numérique directe consiste à résoudre exactement (en un nombre suffisant de points qui représente le domaine d'étude) les équations de Navier-Stokes et la trajectoire des particules. Ainsi, on peut non seulement vérifier la validité des modèles mais aussi espérer les améliorer par le biais d'expérimentations numériques.

Nous avons vu, dans le paragraphe I.2.1, les différentes forces agissant sur une particule isolée. Même dans le cas, a priori simple, d'une particule, nous avons pu constater que la détermination exacte des forces agissant celle-ci nécessitait le calcul exact des efforts locaux présents à sa surface. Ainsi, la connaissance exacte de la répartition de pression et des contraintes exercées par le fluide permet de s'affranchir de la résolution des équations de trajectoires. Cela est d'autant plus vrai lorsque plusieurs particules sont en interaction dans un fluide. Dans ce cas, la présence des autres particules modifie considérablement les

forces mises en jeu. Nous allons montrer, à titre d'exemple, comment sont altérées les expressions des forces de traînée et de masse ajoutée dans le cas où il y a une concentration importante de particules.

### I.3.1 Traînee

La force de traînée est la force prépondérante dans les écoulements chargés en particules. La définition de la traînée engendrée par un ensemble de particules est donc primordiale. En s'appuyant sur l'expression de la traînée pour une particule isolée, plusieurs auteurs ont tenté de mesurer la traînée dans le cas d'un ensemble de particules. La plupart des corrélations se réfèrent à la traînée d'une particule isolée. Les différents travaux ont montré que la traînée augmentait avec la concentration en particules. Le tableau I.3 regroupe un certain nombre d'expressions du coefficient de traînée pour un ensemble de particules identiques. D'autres formulations ont déjà été présentées dans le tableau I.1 du paragraphe I.2.4.  $Re_{Surf}$  est le nombre de Reynolds défini à partir de la vitesse moyenne relative des deux phases  $U_s - U_f$  et  $d$  le rayon  $R_p$  des particules.

Auteurs	Système	Coefficient de traînée	Validité
Ergun (1952)	Écoulement gazeux à travers un milieu poreux	$C_d = \frac{4}{3} \left( 1.75 + 150 \frac{\alpha_s}{Re} \right)$	$0.7 \leq Re \leq 2500$
Richardson and Zaki (1954)	Sédimentation et fluidisation liquide/solide	$C_d = \alpha_s^{-n} \frac{24}{Re_{Surf}} \left( 1 + 0.15 Re_{Surf}^{0.687} \right)$ $n = 1.65$ $n = 1.78$	$Re < 0.2$ $Re \geq 500$
Wen and Yu (1966)	Lits fluidisés particulaires	$C_d = \alpha_s^{-1.7} \frac{24}{Re_{Surf}} \left( 1 + 0.15 Re_{Surf}^{0.687} \right)$	$0.001 \leq Re_{Surf} \leq 1000$ $\alpha_s \leq 0.59$

Tableau I.3 : Expressions du coefficient de traînée  $C_d$  pour un système de particules

### I.3.2 Force de masse ajoutée

Dans les hypothèses faisant intervenir des phases de masses volumiques proches, la force de masse ajoutée joue un rôle important. Le tableau I.2 de la section I.2.4 regroupe quelques corrélations possibles, cependant les études précises sur le sujet sont rares. A partir de ce constat, apparaît l'apport considérable de la simulation directe qui permet de tenir compte de la force de masse ajoutée même dans le cas d'un ensemble de particules.



### I.3.3 Fonction d'encombrement $g_0$

La fonction d'autocorrélation de paire  $g_0$  est un paramètre essentiel dans l'établissement des modèles issus de la théorie cinétique des gaz. Elle est utilisée, comme nous l'avons vu précédemment, pour écrire les relations de fermeture des modèles. Plus exactement,  $g_0$  permet de rendre compte de la pression collisionnelle dans l'écriture du tenseur des contraintes solide. En effet, elle exprime le fait que la probabilité de présence d'une particule à une position donnée est conditionnée par la présence des autres particules. Le tableau I.4 présente quelques expressions de la fonction d'autocorrélation de paire. L'effet de la fonction d'encombrement  $g_0$  devient important lorsque la concentration en

Chapman and Cowling (1970)	$g_0(\alpha_s) = 1 + 2.5\alpha_s + 4.5904\alpha_s^2 + 7.0592\alpha_s^3 + 9.8816\alpha_s^4$
Carnahan and Starling (1969)	$g_0(\alpha_s) = \frac{1}{1-\alpha_s} + \frac{3}{2} \frac{\alpha_s}{(1-\alpha_s)^2} + \frac{\alpha_s^2}{2(1-\alpha_s)^3}$
Lun and Savage (1986)	$g_0(\alpha_s) = \left(1 - \frac{\alpha_s}{\alpha_{s,m}}\right)^{-2.5\alpha_{s,m}}$

Tableau I.4 : *Fonction d'autocorrélation de paire  $g_0$*

particules est proche de la compacité maximale. La figure I.3 tiré des travaux de Boëlle (1997) montre l'incidence de  $g_0$  sur la pression collisionnelle. On constate que pour les faibles concentrations, chaque loi représente bien le même comportement cependant, pour les fortes concentrations, les divergences sont notables.

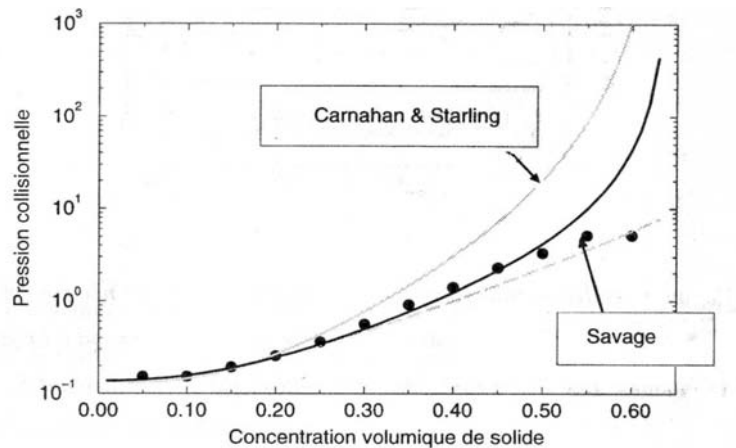


Figure I.3 : *Pression collisionnelle pour différentes expressions de  $g_0$  (Boëlle (1997)) (● : Données numériques de Boëlle (1997), Trait pointillé gris : Chapman and Cowling (1970) )*

## I.4 Conclusion

Nous avons exposé dans ce chapitre les mécanismes complexes mis en jeu dans les lits fluidisés. A partir des observations expérimentales, une première classification des différents types de lits fluidisés a pu être établie en fonction du comportement du lit (fixe, stable ou circulant). Cependant, ce comportement dépend très fortement du type de particules utilisées. Une autre classification a donc été déterminée par Geldart (1973). Elle a donc permis de prévoir le type de fluidisation en fonction des caractéristiques de la particule (masse volumique, taille).

Les travaux théoriques sur les lits fluidisés ont connu un essor important depuis les années 60 avec le développement de l'utilisation des lits fluidisés dans l'industrie de production d'énergie. La diversification des applications vers les industries pharmaceutiques et chimiques puis celles du traitement des déchets (déchets industriels et retraitement des eaux usées) a également contribué au développement des études sur le sujet. Jackson (1963) fut le premier à écrire un modèle à deux fluides pour décrire le comportement d'un lit fluidisé. En dépit de la simplicité des équations du modèle (seule la traînée est prise en compte pour l'interaction entre les phases) une étude de la stabilité du lit a pu être menée en laissant croître une perturbation. Le modèle proposé par Anderson and Jackson (1967), et plus généralement, les modèles obtenus à partir d'une prise de moyenne locale des équations de conservation, ont participé à une meilleure compréhension des phénomènes. Ainsi les modèles plus élaborés prenaient en compte plus précisément les termes d'interaction. Cependant, la prise de moyenne a également introduit de nouvelles inconnues (corrélations des fluctuations de vitesses) qu'il est nécessaire de modéliser. De plus, assimiler la phase solide à un fluide newtonien nécessite aussi de définir la pression dans la phase dispersée ainsi que sa viscosité. Cette étape a d'abord été effectuée de façon empirique. Puis, grâce aux modèles issus de la théorie cinétique des gaz, une définition plus rigoureuse fut proposée (Simonin and He (1992)). Néanmoins, les inconnues résultant de la prise de moyenne (que l'on soit dans le cas d'un modèle Euler/Euler ou Euler/Lagrange) doivent toujours être modélisées (tenseur de Reynolds de la phase fluide et de la phase dispersée). A ce stade, la simulation numérique directe peut apporter un soutien important car elle permet une résolution exacte des équations de Navier-Stokes pour la phase fluide et des équations de Newton/Euler pour les trajectoires de chaque particule. Ainsi, la simulation directe doit permettre, soit de vérifier la validité des modèles soit d'améliorer les modèles existants en précisant les termes issus d'une analyse empirique par une étude locale des

phénomènes.



## Chapitre II

# Modélisation de l'ensemble diphasique solide/fluide par une méthode de domaines fictifs

Bien que notre travail traite des interactions entre un solide et un fluide à l'échelle de la particule, nous assimilerons le solide à un fluide particulier. C'est la raison pour laquelle nous parlerons d'un écoulement à deux fluides. La justification de cette hypothèse sera présentée plus loin dans le document.

Compte tenu de la nécessité de prendre en considération tous les phénomènes évoqués précédemment à toutes les échelles de temps et d'espace, la simulation numérique directe (DNS) est un outil utile qui peut aider à la compréhension et à la modélisation des lits fluidisés. Par simulation numérique directe, on entend la résolution des équations de conservation à des échelles de temps et d'espace intégrant l'ensemble des interactions hydrodynamiques. Par analogie avec la turbulence (Sagaut (1998)), des expérimentations numériques d'écoulements particulières seront menées. L'exploitation des résultats nécessitera l'utilisation de traitements statistiques et de moyennes. Nous avons choisi d'étudier les interactions locales intervenant entre le fluide et les particules, mais aussi entre les particules elles-mêmes par une modélisation eulérienne, afin d'améliorer la connaissance des phénomènes locaux. Après avoir décrit brièvement les raisons du choix d'une modélisation eulérienne pour réaliser la simulation numérique directe, nous présenterons les modèles et leurs formulations mathématiques de la littérature. Enfin, nous proposerons une nouvelle modélisation mathématique de la DNS d'écoulement particulaire basée sur une écriture

originale du tenseur des contraintes visqueuses.

## II.1 Choix du maillage

La résolution numérique des équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement régissant celui de plusieurs phases peut être appréhendée de deux façons. Dans le cas qui nous concerne, les phases en présence sont la phase fluide dite phase continue et la phase dispersée constituée de l'ensemble des particules. Une première manière de traiter le problème est de résoudre précisément les équations de bilan dans une des phases, généralement la phase continue, en maillant uniquement celle-ci. Cette approche dite lagrangienne permet d'obtenir une résolution très précise des échanges ayant lieu à l'interface des milieux. La seconde approche, dite eulérienne, consiste à utiliser un maillage qui englobe toutes les phases du domaine. La difficulté porte alors sur la représentation et le suivi de l'interface entre les fluides présents. Notre choix s'est porté sur cette méthode dite eulérienne car elle présente l'avantage de pouvoir être mise en place en trois dimensions avec des coûts et une complexité numériques raisonnables.

### II.1.1 Maillage adapté à la géométrie

L'approche lagrangienne, utilisée par Hu (1996) pour l'étude par simulation numérique directe du mélange solide/liquide ou encore par Maury (1999), consiste à mailler uniquement une des phases mise en jeu. Généralement c'est la phase fluide qui est résolue en tenant compte de la présence des particules. Cependant cette approche nécessite une adaptation du maillage au cours de la simulation car les particules sont mobiles. Un exemple de maillage adaptatif est présenté sur la figure II.1. Le mouvement des particules est traité comme un problème à frontières mobiles dans lequel les interfaces sont les limites du domaine fluide. Le bilan des actions mécaniques du fluide sur la surface des particules permet de définir leurs nouvelles positions par la résolution de l'équation de mouvement de chaque particule. Une fois que toutes les particules ont été déplacées vers leur nouvelle position, le nouveau maillage est généré. Dans la plupart des cas, le maillage utilisé dans l'approche lagrangienne est un maillage non structuré car ce type de grilles est facilement créé et la densité de points du maillage aisément paramétrable. Les équations régissant le domaine fluide sont alors discrétisées à l'aide de méthodes de type éléments finis (Hu (1996), Maury (1999)) qui sont bien adaptées à ce modèle de grille. Cette ap-

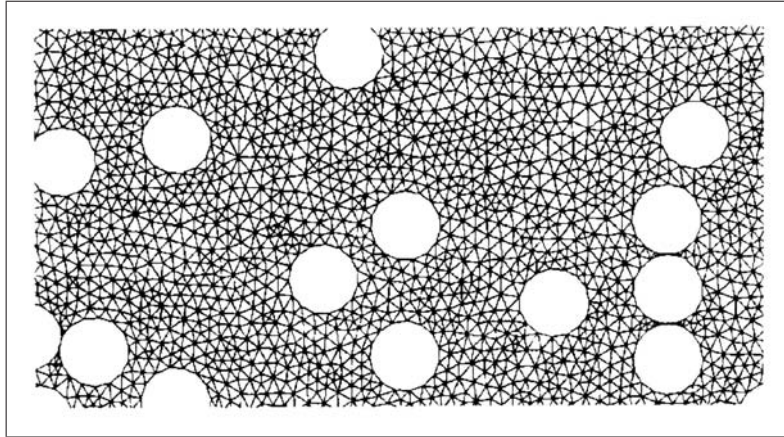


Figure II.1 : *Maillage adaptatif issu de Hu (1996)*

proche permet ainsi de traiter des problèmes aux géométries complexes compte tenu des configurations que peut adopter l'interface. Les interactions hydrodynamiques ainsi que tous les échanges aux interfaces sont très bien représentés car la position de l'interface est connue très précisément. Cependant, l'étape de reconstruction de maillage peut dans certains cas requérir des ressources et des temps de calculs très importants. Pour pallier ce problème, des algorithmes limitant la reconstruction systématique du maillage ont été développés, par exemple par Johnson and Tezduyar (1995) ou Hu et al. (2001). Le maillage se déforme pour suivre les particules sur une même grille le plus longtemps possible. Néanmoins, l'étape de reconstruction demeure inévitable lorsque les déformations deviennent trop importantes. Un autre inconvénient de cette approche est la mise en oeuvre tridimensionnelle de la méthode. En effet, dans ces configurations, il est nécessaire d'avoir un nombre conséquent de points de maillage pour conserver une précision suffisante. Il en résulte un coût en ressource mémoire et en temps de calcul qui devient rapidement excessif. Ainsi, l'utilisation de cette méthode est adaptée seulement à un nombre restreint de particules et à des configurations le plus souvent bidimensionnelles. Une solution alternative est alors le recours aux méthodes eulériennes.

### II.1.2 Maillage fixe indépendant de la géométrie

L'approche eulérienne est fondée sur une résolution des équations sur un maillage structuré, fixe et unique. Le domaine de calcul contenant les différentes phases est discrétisé sans connaître la nature de la phase présente (Figure II.2). Cette approche s'avère

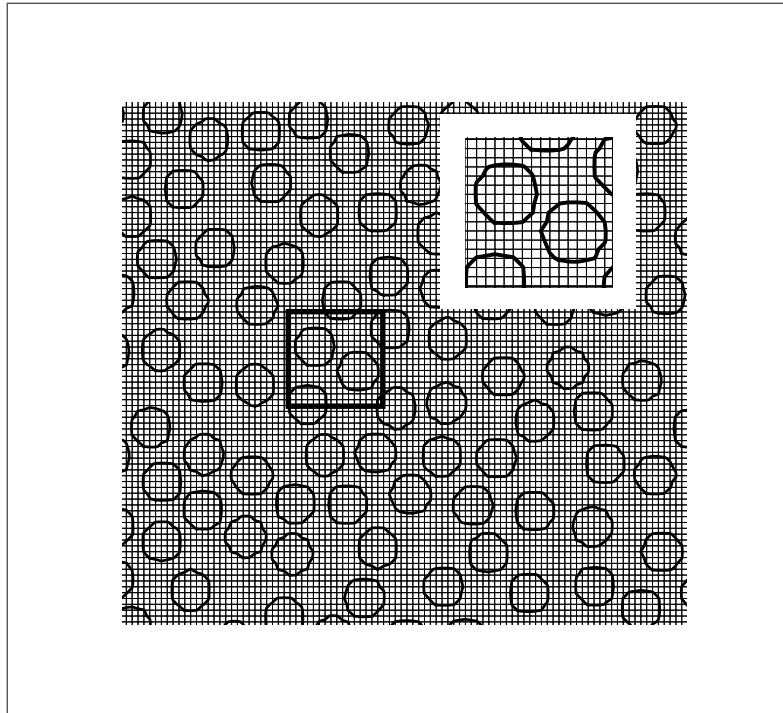


Figure II.2 : *Maillage fixe et agrandissement de la zone proche des particules*

alors très avantageuse par rapport aux méthodes lagrangiennes car elle ne requiert pas le remaillage au cours des simulations. Cette propriété permet un gain très important en temps de calcul et une flexibilité quant aux choix des situations à étudier car nous ne sommes plus limités par les soucis de gestion de maillages. De la même manière le traitement des cas en trois dimensions est géré intrinsèquement sans surcoût particulier. Cependant, de nouvelles variables dites fonctions de phase sont introduites dans les équations du mouvement et une nouvelle équation d'advection de ces fonctions est nécessaire. Ainsi, il apparaît de nouvelles difficultés qui sont, d'une part, le suivi de l'évolution de chaque phase et l'attribution des caractéristiques à chacune d'elles, et, d'autre part, la discontinuité des caractéristiques physiques du fluide et du solide qui engendre des contraintes numériques très importantes. Plus précisément, il est plus délicat de suivre et de traiter la discontinuité formée par l'interface entre les phases dispersée et continue. En effet, comme il n'existe plus de frontière physique réelle entre les phases, il est nécessaire d'introduire une fonction ou un indicateur qui nous permette de connaître à tout instant la position de chacune des phases. Cela est primordial afin de pouvoir appliquer les bonnes caractéristiques physiques à chaque milieu et de résoudre les équations adéquates.



Cette étape de localisation de l'interface est cruciale car elle conditionne la bonne résolution des équations dans chaque phase et donc, la représentation du phénomène physique. La définition d'une méthode efficace de suivi d'interface est donc indispensable. A cette fin, différentes méthodes de suivi d'interface ont été mises en place comme, par exemple, les méthodes de type volume de fluide que nous aborderons par la suite. Malgré cette contrainte, l'approche eulérienne demeure très avantageuse car elle est simple à mettre en oeuvre, quelle que soit la complexité de la géométrie. De plus, en association aux techniques dites de domaines fictifs, elle permet de traiter des problèmes mettant en jeu plusieurs phases grâce à une équation unique.

## II.2 Méthode des domaines fictifs

Nous présenterons dans cette section la méthode de domaines fictifs introduite il y a une vingtaine d'années par Peskin (1977). Cette méthode est une technique de résolution des équations particulièrement adaptée à l'approche eulérienne.

### II.2.1 Définition de la méthode

La méthode des domaines fictifs, connue aussi sous le nom d'*immersed boundary method*, consiste à traiter un ensemble de sous-domaines (pour nous il s'agit de la phase continue fluide et de la phase dispersée solide) comme un domaine unique qui englobe les deux sous-domaines. L'un des sous-domaines n'est pas modélisé par les équations de Navier-Stokes mais sa présence est simulée par des termes supplémentaires dans les équations gouvernant le problème. La difficulté réside dans le fait de simuler et/ou modéliser au mieux le comportement de chaque milieu afin de bien rendre compte des effets qu'ils induisent respectivement les uns sur les autres. Pour cela, nous avons recours à des techniques de pénalisation. Il s'agit d'une imposition de contraintes (vitesse imposée, action d'une force) sur une partie du domaine. Dans la plupart des cas, ces contraintes imposées se traduisent par un terme supplémentaire dans les équations du problème. Ainsi, nous nous affranchissons souvent de la résolution de plusieurs équations dans la mesure où une unique équation contient toutes les contributions de chaque sous-domaine. Par exemple un terme supplémentaire  $\mathbf{T}$  est ajouté dans l'équation classique de Navier-Stokes (II.1)

$$\rho \left( \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} \otimes \vec{u}) \right) = -\nabla p + \rho \vec{g} + \nabla \cdot \bar{\sigma} + \mathbf{T} \quad (\text{II.1})$$

pour représenter l'action de l'un des sous-domaines. Les différentes approches de la méthode des domaines fictifs se distinguent par l'expression que prend ce terme supplémentaire et par sa localisation spatiale (effet à l'interface fluide/solide, effet dans tout le solide).

## II.2.2 Techniques de pénalisation

### "Immersed Boundary method"

Peskin (1977) fut le premier à recourir à cette méthode originale pour la résolution de problèmes mettant en jeu plusieurs phases. Il s'agissait d'étudier la dynamique de l'écoulement sanguin dans les artères menant au coeur. L'action des membranes sur l'écoulement sanguin est modélisée par une force dans l'équation de Navier-Stokes. L'originalité de la méthode réside dans le couplage entre les équations de Navier-Stokes (II.2) et (II.3) et les équations de l'élasticité linéaire (II.7). Le système d'équation étudié est le suivant :

$$\rho \left( \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} \otimes \vec{u}) \right) = -\nabla p + \mu \Delta \vec{u} + \vec{f} \quad (\text{II.2})$$

$$\nabla \vec{u} = 0 \quad (\text{II.3})$$

$$\rho(x, t) = \int M(q, r, s) \delta(x - X(q, r, s)) dq.dr.ds \quad (\text{II.4})$$

$$\vec{f}(x, t) = \int \vec{F}(q, r, s) \delta(x - X(q, r, s)) dp.dr.ds \quad (\text{II.5})$$

$$\frac{\partial X(q, r, s)}{\partial t} = \vec{u}(X(q, r, s, t), t) = \int \vec{u}(x, t) \delta(x - X(q, r, s, t)) dx \quad (\text{II.6})$$

$$\vec{F} = -\frac{dE}{dX} \quad (\text{II.7})$$

Les équations du système sont résolues sur des maillages différents. Les équations de Navier-Stokes (II.2) et de conservation de la masse (II.3) le sont sur un maillage cartésien fixe dont la position d'un point est repérée par  $x$ . L'équation d'élasticité (II.7) est, quant à elle, solutionnée sur un maillage curviligne variable (dont la position est repérée par  $X$  avec les coordonnées curviligne  $(q, r, s)$ ). Le maillage curviligne est totalement libre *i.e.* il n'est pas contraint de s'adapter au maillage cartésien. Les équations (II.5),(II.6) sont les équations de couplage qui permettent de passer du maillage fixe au maillage mobile. La force  $\vec{f}$  qui apparaît dans l'équation (II.2) est directement déduite de l'énergie potentielle élastique de déformation de la membrane par le biais de l'équation (II.7). Elle est représentative de l'action de la membrane élastique sur l'écoulement.  $\delta$  est la fonction de Dirac qui permet d'imposer la contrainte souhaitée au point d'intersection des deux maillages. L'action de la membrane élastique est donc décrite par une force supplémentaire agissant en des points localisés du maillage cartésien. Dans ce cas, il n'y a pas de caractérisation de chaque phase car seule la donnée de la position de l'interface est utile afin de définir les positions des points forces représentant la membrane. Cette

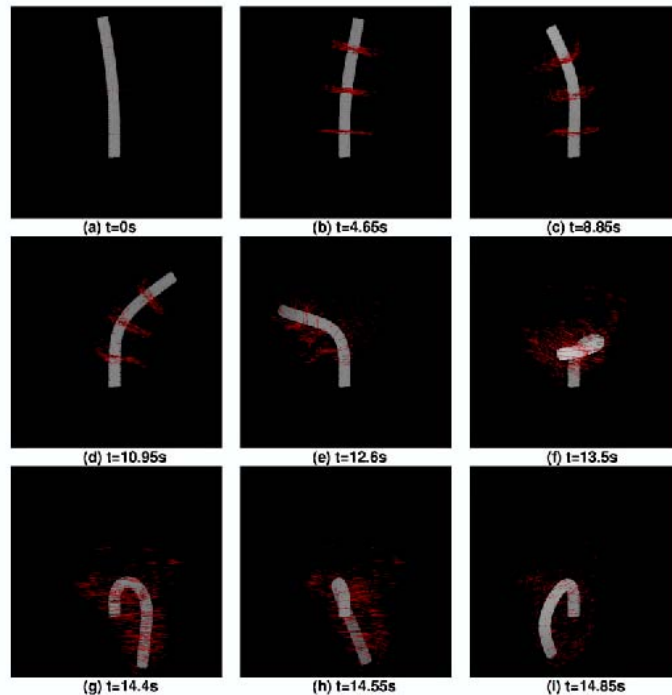


Figure II.3 : *Interaction entre une bactérie et un fluide visqueux (Lim and C.S. (2004))*

méthode est bien adaptée au traitement des interfaces déformables. Pour illustrer nos

propos, nous présentons les résultats obtenus à l'aide de "l'immersed boundary method" traitant de l'interaction entre une bactérie et un fluide visqueux sur la figure II.3. Ces images sont tirées des travaux de Lim and C.S. (2004). Dans cet exemple, la bactérie est un filament solide élastique. Uhlmann (2005) a recouru à cette méthode pour simuler des écoulements chargés en particules indéformables. Le champ instantané de la position des particules est représenté sur la figure II.4. On peut observer que la symétrie initiale de la position des particules a disparu au cours de la sédimentation.

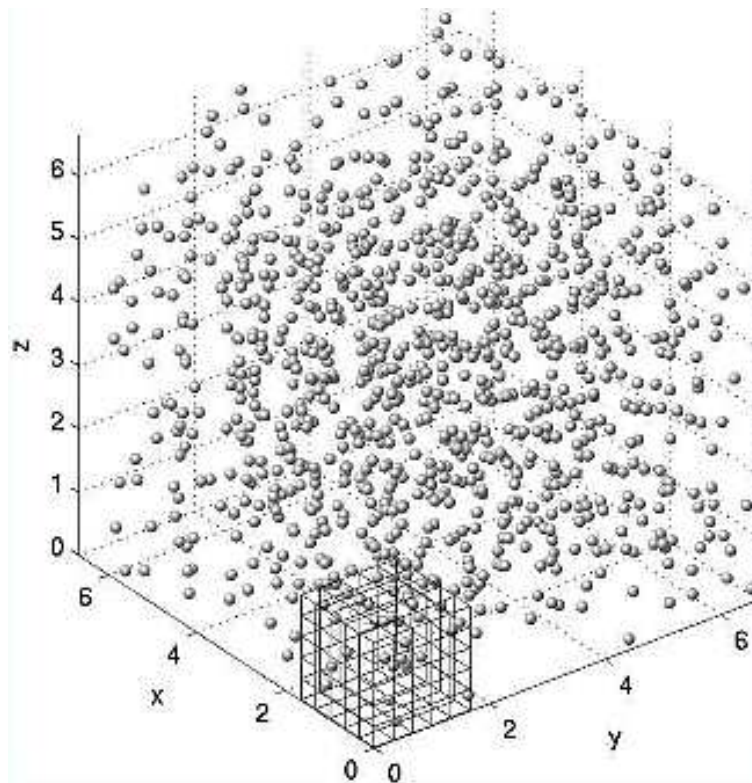


Figure II.4 : Positions instantannées des particules dans le cas de la sédimentation de 1000 particules (Uhlmann (2005))

### "Distributed Lagrange Multiplier" method

La solution proposée par Glowinski et al. (2001) est proche de celle de C.S. Peskin. En effet, ils présentent tous les deux la résolution couplée de deux équations : l'équation de Navier-Stokes (II.8) pour le fluide

$$\rho \left( \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} \otimes \vec{u}) \right) = -\nabla p + \rho \vec{g} + \nabla \cdot \bar{\bar{\sigma}} \quad (\text{II.8})$$

et les équations de Newton/Euler (II.9) pour le solide.

$$\begin{aligned} M \frac{d\vec{V}}{dt} &= M\vec{g} + \vec{F} \\ I \frac{d\vec{\omega}}{dt} + \vec{\omega} \times I\vec{\omega} &= \vec{\Gamma} \end{aligned} \quad (\text{II.9})$$

Ici  $M$  est la masse du solide,  $I$  son tenseur d'inertie,  $\vec{F} = - \int_S \bar{\sigma} \vec{n} dS$  les forces hydrodynamiques agissant sur le solide et  $\vec{\Gamma} = - \int_S \overline{GM} \times \bar{\sigma} \vec{n} dS$  le moment au centre d'inertie  $G$  des forces hydrodynamiques.  $\overline{GM}$  est le vecteur liant un point  $M$  du solide à son centre d'inertie  $G$ . Ces deux jeux d'équations sont résolus simultanément sur un maillage fixe. L'originalité de la méthode réside dans le fait que tout le domaine de calcul est considéré comme un fluide visqueux. La partie solide est obtenue en forçant le fluide à avoir un comportement solide dans le sens où le tenseur des taux de déformation est nul. Cette pénalisation du domaine solide est réalisée à l'aide de multiplicateurs de Lagrange qui forceront le domaine à résoudre les équations de Newton/Euler. Pour cela, les équations (II.8),(II.9) sont réécrites sous la formulation variationnelle, valable à la fois dans le fluide et le solide. On obtient alors le système :

$$\begin{aligned} & \rho \int_{\Omega} \left( \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} \right) \cdot \vec{v} d\Omega + 2\nu \int_{\Omega} \vec{D}(\vec{u}) : \vec{D}(\vec{v}) d\Omega \\ & - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \vec{v} d\Omega + M \frac{d\vec{V}}{dt} \cdot \vec{Y} + \left( I \frac{d\vec{\omega}}{dt} + \vec{\omega} \times I\vec{\omega} \right) \cdot \vec{\Theta} d\Omega \\ & = \rho \int_{\Omega} \vec{g} \cdot \vec{v} d\Omega + M\vec{g} \cdot \vec{Y} d\Omega \end{aligned} \quad (\text{II.10})$$

avec la vitesse  $\vec{u}$  vérifiant l'équation (II.11) dans le solide dans le but d'obtenir le champ de vecteur d'un solide indéformable.

$$\vec{u} = \vec{V} + \vec{\omega} \times \overline{OG} \quad \text{et} \quad \frac{d\overline{OG}}{dt} = \vec{V} \quad (\text{II.11})$$

Cette condition est aussi respectée à l'interface afin de conserver la condition d'adhérence du fluide à l'interface fluide/solide.  $\overline{OG}$  est le vecteur position du centre d'inertie du solide. Ici,  $\vec{D}(\vec{X}) = \nabla \vec{X} + \nabla^t \vec{X}$  est le tenseur des taux de déformation.  $\vec{v}$ ,  $\vec{Y}$  et  $\vec{\Theta}$  sont les fonctions tests nécessaires à l'établissement de la formulation variationnelle. Elles permettent d'assurer la résolution de la contrainte d'incompressibilité et les équations de Navier-Stokes dans le fluide et la résolution de l'équation d'Euler dans le solide. Patankar et al. (2000) ont travaillé directement sur la pénalisation de la contrainte  $\vec{D}(\vec{u})$  afin

de se libérer de la résolution des équations de Newton/Euler. Le phénomène, désormais bien connu de Drafting, Kissing, Tumbling (DKT), identifié par Fortes et al. (1987) a été reproduit numériquement par l'équipe de Glowinski. Le résultat des simulations est présenté sur les figures II.5 et II.6 qui sont issues des travaux Glowinski et al. (2001). On peut distinguer la phase de rapprochement  $t = 0.27075$  jusqu'au contact qui survient à  $t = 0.31425$ . Le doublet vertical se déstabilise à  $t = 0.45075$ . Le phénomène peut se reproduire de nouveau si les dimensions du domaine le permettent. Glowinski et ses collaborateurs ont aussi réalisé des simulations DNS de lits fluidisés et de sédimentation de particules.

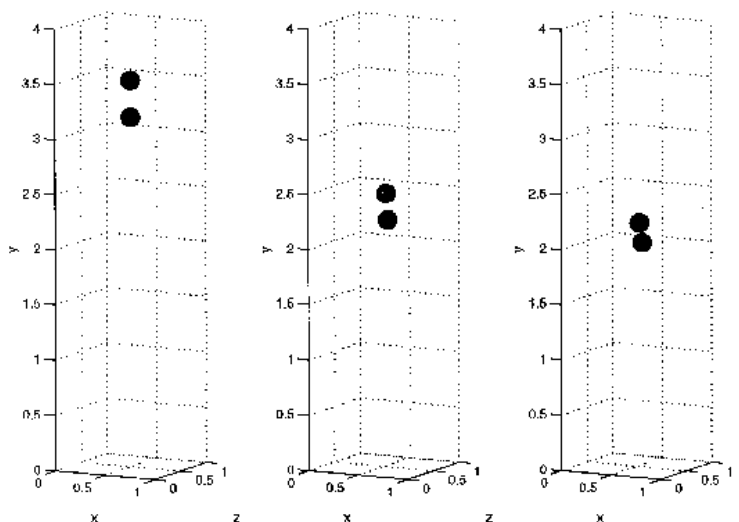


Figure II.5 : *DKT*: position à  $t = 0$ ,  $t = 0.27075$  et  $t = 0.31425$

### Approche de type milieu poreux

Dans le cadre du développement du code de calcul AQUILON du laboratoire, nous avons recours depuis plusieurs années aux techniques de pénalisation. Une approche de type milieu poreux fut tout d'abord utilisée par Arquís and Caltagirone (1984) pour traiter le problème de la convection naturelle dans un milieu poreux. Cette démarche fut ensuite étendue à l'étude d'un système plus complexe contenant à la fois un fluide, un solide et un milieu poreux (Khadra et al. (2000)). Le domaine d'étude est considéré comme un unique milieu poreux de perméabilité  $K$  variable. Le comportement de chaque phase est simulé en donnant des valeurs particulières à  $K$ . Grâce à ce traitement, seule l'équation

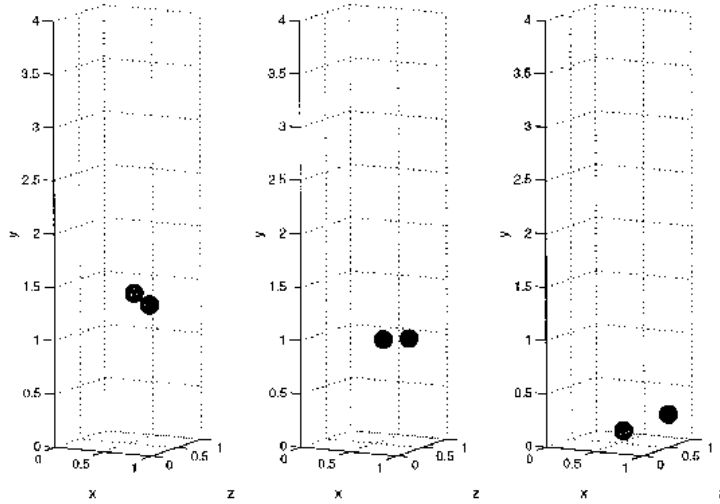


Figure II.6 : *DKT*: position à  $t = 0.45075$ ,  $t = 0.53475$  et  $t = 0.72925$

de Navier-Stokes/Brinkman (II.12) est résolue dans tout le domaine. La différenciation de chaque milieu est réalisée par la valeur de la perméabilité. On a :

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \tag{II.12}$$

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} - \frac{1}{Re} \Delta \vec{u} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} + \frac{\mu \vec{u}}{Re Da K} + \nabla p = \vec{f}$$

$Da$  est le nombre de Darcy. Le terme  $\frac{\mu \vec{u}}{Re Da K}$  est celui de Brinkman.

- Pour  $K = K_s \rightarrow 0$ , le milieu s'apparente à un solide car le terme de Brinkman devient prépondérant dans l'équation (II.12). Cela revient à imposer une vitesse nulle dans la zone considérée. Ainsi, on caractérise le solide comme un milieu imperméable dans lequel il n'y a aucun écoulement.
- Pour  $K = K_f \rightarrow +\infty$ , le milieu a un comportement fluide car le terme de Brinkman est cette fois négligeable par rapport aux autres termes de (II.12). Nous sommes donc ramenés à la résolution de l'équation de Navier-Stokes classique.
- Pour  $10^{-12} < K < 10^{-3}$ , le milieu est poreux.

D'autres méthodes sont disponibles pour simuler la présence d'un obstacle mobile ou fixe dans un écoulement fluide. Kim et al. (2001) proposent par exemple de modéliser la présence de l'objet solide en introduisant dans l'équation de Navier-Stokes une source de

quantité de mouvement ou un puits. A l'image de la méthode développée par Peskin, la source de quantité de mouvement simule la présence d'une interface à l'endroit où elle est imposée.

## II.3 Du "Navier-Stokes" partout

Depuis quelques années, le laboratoire développe une nouvelle approche de la pénalisation réalisée grâce à la viscosité. Ce modèle est assez proche du modèle poreux dans la mesure où nous jouons sur l'intensité de la viscosité pour caractériser le milieu. Cette méthode présente l'avantage de pouvoir traiter des solides mobiles. En effet, le gros défaut de la modélisation du solide par un milieu poreux est l'imposition trop forte du champ de vitesse à une vitesse de référence connue a priori. Lorsqu'on souhaite simuler un solide mobile en mouvement quelconque en faisant tendre la perméabilité  $K$  de la zone considérée vers  $+\infty$ , l'équation (II.12) dégénère alors vers  $\vec{u} = 0$ , ce qui traduit une zone sans vitesse et donc sans aucun déplacement. La pénalisation par la viscosité est plus souple car elle autorise le déplacement de la zone solide en agissant sur les contraintes et non plus sur la variable vitesse. Le modèle utilisé dans le cas de la pénalisation par la viscosité est régi par l'équation de Navier-Stokes présentée sous une forme particulière qui fait apparaître les différentes contributions du tenseur des taux de déformation.

### II.3.1 Modèle initial

Le modèle initial a été mis en place par J.B. Ritz (Ritz (1997)). Il repose sur un traitement particulier de la phase solide. En effet, l'idée est toujours d'utiliser une seule équation pour modéliser toutes les phases en présence. La viscosité a été choisie comme paramètre caractéristique permettant, comme pour la perméabilité, de simuler aussi bien un fluide qu'un solide en mouvement. Afin d'expliquer le principe de la modélisation, considérons un fluide non newtonien dont la loi de comportement est du type loi de puissance. Sa viscosité apparente est une fonction décroissante du taux du cisaillement soit :

$$\mu = K|\dot{\gamma}|^{m-1} \tag{II.13}$$

$K$  est la consistance du liquide,  $m$  l'indice de pseudo-plasticité (inférieur à 1 pour un fluide rhéofluidifiant) et  $\dot{\gamma}$  représente le taux de cisaillement. La viscosité du fluide tend vers l'infini lorsque le taux de cisaillement tend vers 0. Dans ce cas, le fluide devient très



rigide lorsque la sollicitation est faible. En prolongeant cette propriété, on définit un fluide de viscosité infinie de telle sorte que lorsque la viscosité augmente, le tenseur des taux de déformation  $\bar{\bar{D}}$  tend vers 0. Ainsi, on définit une loi de comportement pour chaque phase :

$$\begin{aligned} \text{pour la phase solide} \quad & \mu \rightarrow +\infty \quad \bar{\bar{D}} \rightarrow 0 \\ \text{pour la phase fluide} \quad & \mu = \mu_f \quad \bar{\bar{\tau}} = 2\mu_f \bar{\bar{D}} \end{aligned}$$

$\bar{\bar{\tau}}$  est le tenseur des contraintes visqueuses du fluide. A partir de ce modèle, une étude sur la sédimentation de particules à des nombres de Reynolds modérés a pu être menée. La figure II.7 montre par exemple la sédimentation en deux dimensions de 361 particules cylindriques entre deux plans parallèles (Ritz (1997)).

### II.3.2 Modèle physique

La nouvelle méthode de résolution des équations de Navier-Stokes proposée par Caltagirone and Vincent (2001) repose sur une formulation inédite des équations de la dynamique des fluides faisant apparaître quatre nouveaux tenseurs auxquels sont associés quatre viscosités.

Pour cela, nous considérons les équations du mouvement classiques d'un fluide visqueux newtonien.

$$\rho \left( \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} \otimes \vec{u}) \right) = \rho \vec{g} + \nabla \cdot \bar{\bar{\sigma}} \quad (\text{II.14})$$

où  $\rho$  est la masse volumique du fluide,  $\bar{\bar{\sigma}}$  représente le tenseur des contraintes appliquées au fluide. Nous avons :

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \lambda \nabla \cdot \mathbf{u} \delta_{ij} + 2\mu \tau_{ij} \quad (\text{II.15})$$

avec  $\lambda$  la viscosité de dilatation et  $\mu$  la viscosité de cisaillement.  $\tau_{ij} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)$  est le tenseur des taux de déformation pour un fluide newtonien. Pour établir l'équation modifiée, nous décomposons le tenseur gradient  $\nabla_{ij}$  en une partie symétrique  $\epsilon_{ij}$  et une anti-symétrique  $A_{ij}$  comme suit :

$$\nabla_{ij} = \frac{1}{2}(\nabla_{ij} + \nabla_{ji}) + \frac{1}{2}(\nabla_{ij} - \nabla_{ji}) = \epsilon_{ij} + A_{ij} \quad (\text{II.16})$$

Nous pouvons alors réécrire le tenseur des contraintes sous sa nouvelle forme :

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \lambda \nabla \cdot \mathbf{u} \delta_{ij} + 2\mu(\nabla_{ij} - A_{ij}) \quad (\text{II.17})$$

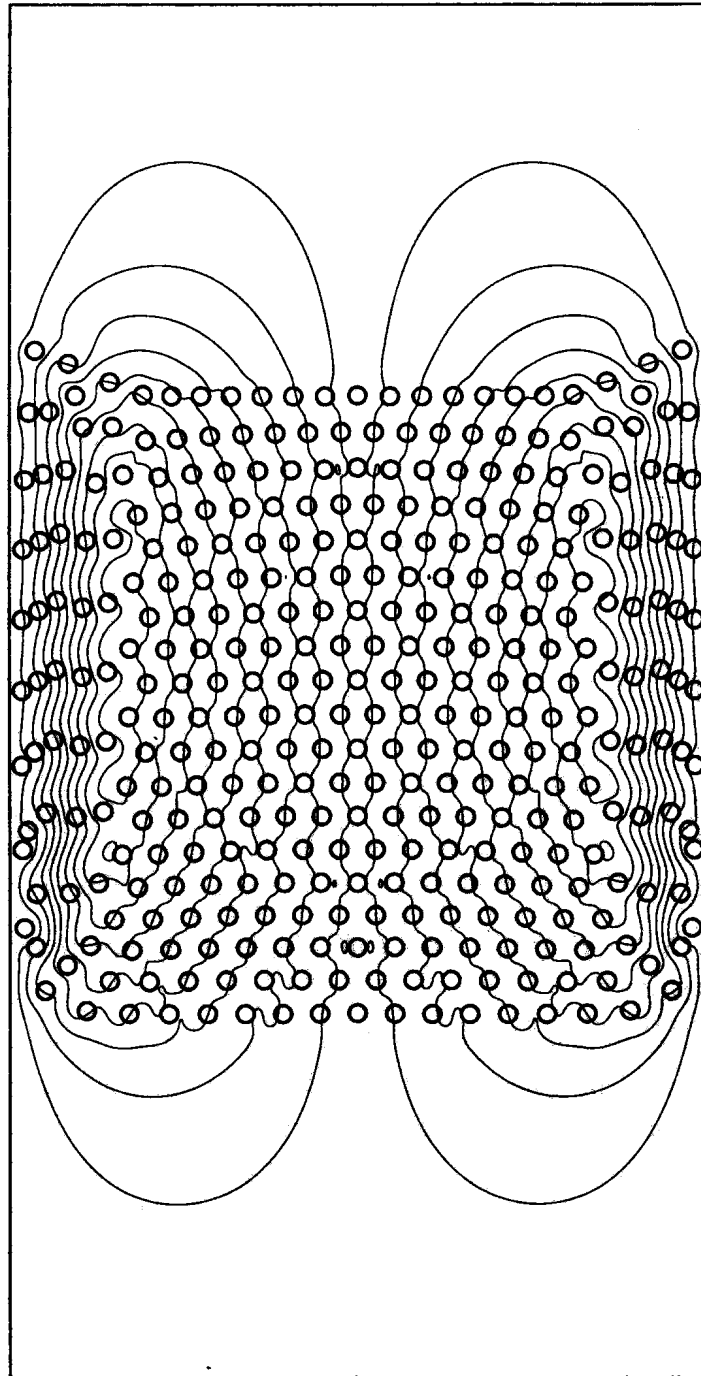


Figure II.7 : *Sédimentation de 361 particules cylindriques entre deux plans parallèles*  
(Ritz (1997))

Soit avec les nouveaux tenseurs définis ci-après :

$$\sigma_{ij} = (-p + \lambda \nabla \cdot \mathbf{u}) \delta_{ij} + \kappa \Lambda_{ij} + \zeta \Theta_{ij} - \eta \Gamma_{ij} \quad (\text{II.18})$$

avec

- $\lambda$  est la viscosité de dilatation
- $\kappa$  est la viscosité d'élongation
- $\zeta$  est la viscosité de cisaillement
- et  $\eta$  la viscosité de rotation.

Nous avons en coordonnées cartésiennes :

$$\Lambda_{ij} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial v}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix}, \Theta_{ij} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial u}{\partial z} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & 0 & \frac{\partial v}{\partial z} \\ \frac{\partial w}{\partial x} & \frac{\partial w}{\partial y} & 0 \end{bmatrix}, \Gamma_{ij} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial w}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} & 0 & \frac{\partial v}{\partial z} - \frac{\partial w}{\partial y} \\ \frac{\partial w}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial z} & \frac{\partial w}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial z} & 0 \end{bmatrix}$$

L'équation de Navier-Stokes se met donc sous la forme :

$$\rho \left( \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} \otimes \vec{u}) \right) = \rho \vec{g} - \nabla(-p + \lambda \nabla \cdot \vec{u}) + \nabla \cdot (\kappa \bar{\bar{\Lambda}}) + \nabla \cdot (\zeta \bar{\bar{\Theta}}) - \nabla \cdot (\eta \bar{\bar{\Gamma}}) \quad (\text{II.19})$$

Nous pouvons retrouver la formulation des équations de Navier-Stokes usuelles en affectant respectivement les valeurs  $-\frac{2}{3}\mu$ ,  $2\mu$ ,  $2\mu$ ,  $\mu$  à  $\lambda$ ,  $\kappa$ ,  $\zeta$  et  $\eta$ . Les valeurs de ces coefficients peuvent être obtenues expérimentalement ou théoriquement (cf Byron Bird et al. (1977) et Ryming (1985)).

Cette présentation originale du tenseur des contraintes nous permet de décomposer les contraintes agissant au sein du fluide en :

- contraintes d'élongation  $\nabla \cdot (\kappa \bar{\bar{\Lambda}})$ ,
- contraintes de cisaillement  $\nabla \cdot (\zeta \bar{\bar{\Theta}})$ ,
- et contraintes de rotation  $\nabla \cdot (\eta \bar{\bar{\Gamma}})$ .

Le principal avantage de cette nouvelle écriture est la facilité de mise en oeuvre d'une méthode de pénalisation. En effet, en ayant décomposé le tenseur des contraintes suivant ses différentes contributions, nous pouvons les imposer indépendamment les unes des

autres en agissant sur la viscosité correspondante. Par exemple, nous pouvons imposer uniquement la rotation ou uniquement l'incompressibilité. Par ailleurs, nous verrons plus loin que les différentes viscosités sont importantes pour la discrétisation des équations de Navier-Stokes.

### II.3.3 Pénalisation par la viscosité

La méthode des domaines fictifs que nous venons de présenter nécessite le recours à une technique de pénalisation pour imposer les contraintes qui distingueront les zones de comportement différent. Ainsi, nous avons utilisé la méthode du lagrangien augmenté décrite par Fortin and Glowinski (1982) pour imposer l'incompressibilité de l'écoulement. Nous avons ensuite introduit une méthode de lagrangien augmenté généralisé aux contraintes du solide. La contrainte d'incompressibilité apparaît alors comme un cas particulier de la méthode.

#### Méthode de Lagrangien augmenté généralisé

La pénalisation d'une contrainte consiste théoriquement dans notre cas à faire tendre la viscosité associée vers une valeur infiniment grande, de telle sorte que seule la contrainte considérée soit prépondérante par rapport aux autres contraintes. Pénalisons par exemple le tenseur de compression afin de simuler l'incompressibilité du milieu fluide. L'incompressibilité se traduit par  $\nabla \cdot \vec{u} = 0$ . Pour imposer cette condition, nous appliquons à  $\lambda$  une valeur d'ordre supérieur aux autres termes de Navier-Stokes (deux à trois ordres de grandeur suffisent). De cette manière, le terme  $\nabla \cdot \vec{u}$  devient prédominant dans l'équation (II.19), ce qui revient à imposer  $\nabla \cdot \vec{u} = 0$ . Il en est de même pour les autres contraintes que l'on souhaite prendre en compte.

**Problème d'optimisation** Mathématiquement, l'imposition d'une contrainte peut s'effectuer par la méthode du lagrangien augmenté. Il s'agit d'une technique d'optimisation sous contraintes. Considérons, par exemple, le problème écrit sous la forme matricielle :

$$A\vec{x} = \vec{b} \tag{II.20}$$

avec  $A$  une matrice symétrique carrée d'ordre  $n$  et  $\vec{b}$  un vecteur de dimension  $n$ . Soit également la condition  $D\vec{x} = 0$  où  $D$  est une matrice quelconque d'ordre inférieur à  $n$ . Le

problème peut être écrit sous la forme d'une fonctionnelle  $J(\vec{x})$  telle que :

$$J(\vec{x}) = \frac{1}{2} \vec{x}^t A \vec{x} - \vec{b}^t \vec{x} \quad (\text{II.21})$$

L'optimisation consiste à minimiser la fonctionnelle  $J(\vec{x})$  de la variable vectorielle  $\vec{x}$  sous la contrainte  $g(\vec{x}) = 0$ . On définit pour cela le lagrangien

$$L(\vec{x}, \lambda) = J(\vec{x}) + \lambda^t g(\vec{x}) \quad (\text{II.22})$$

où  $\lambda$  est le multiplicateur de Lagrange.

La recherche du minimum de  $J(\vec{x})$  soumis à  $g(\vec{x}) = 0$  se traduit par la recherche du point-selle de (II.22) i.e. le point  $(\vec{x}^*, \lambda^*)$  tel que

$$\min_{\vec{x}} \max_{\lambda} L(\vec{x}, \lambda) = \max_{\lambda} \min_{\vec{x}} L(\vec{x}, \lambda) = L(\vec{x}^*, \lambda^*) \quad (\text{II.23})$$

Afin de faciliter la détermination du point-selle, on définit le lagrangien augmenté

$$L_r(\vec{x}, \lambda) = J(\vec{x}) + \lambda^t g(\vec{x}) + \frac{r}{2} \|\lambda^t g(\vec{x})\|^2 \quad (\text{II.24})$$

$r$  est le paramètre de pénalisation et  $\|\cdot\|$  une norme. On montre mathématiquement que le point-selle de  $L_r$  est le même que celui de  $L$  (Fortin and Glowinski (1982)).

**Algorithme de minimisation : Uzawa** La recherche du point-selle est effectuée à l'aide d'un algorithme de type Uzawa (Fortin and Glowinski (1982)). La mise en oeuvre numérique de l'algorithme pour les équations de Navier-Stokes est présentée de manière plus détaillée dans le chapitre suivant. Nous exposons ici seulement la méthodologie générale de la méthode itérative de type Uzawa pour mettre en exergue l'intérêt et l'utilisation de la formulation (II.18) pour la DNS par la méthode des domaines fictifs. L'algorithme est construit autour de deux suites  $(\vec{x})^k$  et  $(\lambda)^k$  qui vont converger vers la solution souhaitée. Les deux suites sont définies par les relations :

$$\begin{cases} L_r(\vec{x}^k, \lambda^k) \leq L_r(\vec{x}, \lambda^k) \quad \forall \vec{x} \in R^n \\ \lambda^{k+1} = \lambda^k + dr D \vec{x}^k \end{cases} \quad (\text{II.25})$$

La première relation correspond à la recherche du minimum du lagrangien  $L_r(\vec{x}, \lambda^k)$  suivant la variable  $\vec{x}$ , la seconde à la mise à jour de la variable  $\lambda$ . Finalement, l'algorithme

se présente sous la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} \bullet (\lambda)^0 \text{ donné} \\ \bullet (A + rD^tD)\vec{x}^k + D^t\lambda^k = \vec{b} \\ \bullet \lambda^{k+1} = \lambda^k + drD\vec{x}^k \end{array} \right. \quad (\text{II.26})$$

$dr$  est un paramètre positif qui assure la convergence vers la solution. Le choix de la valeur de  $dr$  est délicat. D'après les travaux de Fortin and Glowinski (1982), la convergence est obtenue pour les valeurs de  $dr$  vérifiant les inégalités :

$$0 < dr < 2\left(r + \frac{1}{\beta^2}\right) \quad (\text{II.27})$$

avec

$$\beta^2 = \max_{\vec{x} \neq 0} \frac{|D\vec{x}|^2}{\vec{x}^t A \vec{x}} \quad (\text{II.28})$$

Une analyse approfondie sur le choix des paramètres  $r$  et  $dr$  est proposée dans Fortin and Glowinski (1982). Nous nous attacherons à réaliser des études paramétriques sur ce point dans la suite de la thèse.

**Application aux tenseurs des contraintes** Pour imposer chacune des différentes contraintes, nous allons appliquer la méthode du lagrangien augmenté. Nous considérons l'équation (II.19) et l'équation de continuité  $\nabla \cdot \vec{u} = 0$  que nous écrivons sous une formulation faible afin de faire apparaître les multiplicateurs de Lagrange. Nous définissons alors la fonctionnelle  $J(\vec{u})$  telle que

$$\begin{aligned} J(\vec{u}) = & \int_{\Omega} \rho \left( \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} \right) \vec{u} d\Omega + \int_{\Omega} (\vec{u} \cdot \nabla \vec{u}) \vec{u} d\Omega - \int_{\Omega} (\rho \vec{g}) \vec{u} d\Omega \\ & - \int_{\Omega} \nabla \cdot \left( \lambda \nabla \cdot \vec{u} \bar{I} \bar{d} + \kappa \bar{\Lambda} + \zeta \bar{\Theta} - \eta \bar{\Gamma} \right) \vec{u} d\Omega \end{aligned} \quad (\text{II.29})$$

avec  $\int_{\Omega} \vec{u} \vec{v} d\Omega$  le produit scalaire défini sur  $L^2(\Omega)$  pour tout  $\vec{u}$  et  $\vec{v}$  de  $[L^2(\Omega)]^3$ . Il s'agit de minimiser  $J(\vec{u})$  sous la contrainte  $\nabla \cdot \vec{u} = 0$  soit trouver le point-selle vérifiant

$$\min_{\vec{u} \in \{[H_0^1(\Omega)]^3\}} \max_{l_{g_1} \in \{L^2(\Omega)\}} L(\vec{u}, l_{g_1}) \quad (\text{II.30})$$

où

$$\begin{aligned} L(\vec{u}, l_{g_1}) = & \int_{\Omega} \rho \left( \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} \right) \vec{u} d\Omega + \int_{\Omega} (\vec{u} \cdot \nabla \vec{u}) \vec{u} d\Omega - \int_{\Omega} (\rho \vec{g}) \vec{u} d\Omega \\ & - \int_{\Omega} \nabla \cdot \left( (-l_{g_1} + \lambda \nabla \cdot \vec{u}) \bar{I} \bar{d} + \kappa \bar{\Lambda} + \zeta \bar{\Theta} - \eta \bar{\Gamma} \right) \vec{u} d\Omega \end{aligned}$$

$H_0^1(\Omega) = \{L^2(\Omega) / \nabla \cdot \vec{u} = 0\}$ .  $lg_1$  est le multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte d'incompressibilité. Il s'identifie à la pression. Nous généralisons cette approche aux tenseurs et nous définissons les multiplicateurs de Lagrange tensoriels  $\bar{\bar{lg}}_2, \bar{\bar{lg}}_3, \bar{\bar{lg}}_4$  que nous relierons à chaque tenseur des contraintes. Nous cherchons donc le point-selle de  $L(\vec{u}, lg_1, \bar{\bar{lg}}_2, \bar{\bar{lg}}_3, \bar{\bar{lg}}_4)$  tel que

$$\min_{\vec{u} \in \{[H_0^1(\Omega)]^3\}} \max_{lg_1 \in \{L^2(\Omega)\}} \max_{\bar{\bar{lg}}_2 \in \{L^2(\Omega)\}} \max_{\bar{\bar{lg}}_3 \in \{L^2(\Omega)\}} \max_{\bar{\bar{lg}}_4 \in \{L^2(\Omega)\}} L(\vec{u}, lg_1, \bar{\bar{lg}}_2, \bar{\bar{lg}}_3, \bar{\bar{lg}}_4) \quad (\text{II.31})$$

avec

$$\begin{aligned} L(\vec{u}, lg_1, \bar{\bar{lg}}_2, \bar{\bar{lg}}_3, \bar{\bar{lg}}_4) = & \int_{\Omega} \rho \left( \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} \right) \vec{u} d\Omega + \int_{\Omega} (\vec{u} \cdot \nabla \vec{u}) \vec{u} d\Omega - \int_{\Omega} (\rho \vec{g}) \vec{u} d\Omega \\ & - \int_{\Omega} \nabla \cdot \left( (-lg_1 + \lambda \nabla \cdot \vec{u}) \bar{\bar{I}}d - \bar{\bar{lg}}_2 + \kappa \bar{\bar{\Lambda}} - \bar{\bar{lg}}_3 + \zeta \bar{\bar{\Theta}} + \bar{\bar{lg}}_4 - \eta \bar{\bar{\Gamma}} \right) \vec{u} d\Omega \end{aligned}$$

La formulation (II.31) peut être mise sous la forme du Lagrangien augmenté en considérant les viscosités  $\lambda, \kappa, \zeta$  et  $\eta$  comme les paramètres de pénalisation. Dans la pratique, nous choisissons la viscosité de telle sorte que l'intensité des composantes du produit de la viscosité par son tenseur soit grande par rapport aux autres termes de l'équation.

## II.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté la méthode retenue pour l'étude des interactions entre les particules et le fluide. Le choix d'une telle méthode fut dicté par la volonté d'utiliser un maillage unique fixe et simple à générer. Il s'agit d'une méthode de simulation numérique directe dans laquelle nous avons eu recours à la technique de domaines fictifs. Elle fut introduite pour la première fois par Peskin (1977). Elle consiste à traiter un ensemble de domaines (des particules solides et du fluide) comme un domaine unique. Par ce biais, il est possible de traiter le problème à l'aide d'une seule équation, généralement celle relative au fluide. L'action des sous-domaines est prise en compte par l'intermédiaire d'un terme supplémentaire dans l'équation régissant le mouvement du fluide. Afin de mettre en oeuvre numériquement cette approche, la méthode des domaines fictifs doit être associée à des techniques de pénalisation qui permettent de réaliser la contrainte voulue (imposition d'une contrainte de non-déformation pour le solide ou d'une contrainte d'incompressibilité pour le fluide). Les nombreuses méthodes de domaines fictifs de la littérature se distinguent principalement par la manière de gérer la pénalisation. Peskin introduit, par

exemple, une force supplémentaire dans les équations de Navier-Stokes afin de modéliser l'action du solide sur le fluide. La méthode utilisée par l'équipe de Glowinski requiert la résolution de deux équations. Lorsque l'on se trouve dans la zone solide, les équations de Newton/Euler sont résolues, et dans la zone fluide, ce sont les équations de Navier-Stokes qui sont traitées. La technique que nous avons adoptée est le prolongement d'une part des travaux menés par Arquis and Caltagirone (1984), qui proposaient de traiter le domaine hétérogène (constitué d'un milieu poreux et d'un solide immergés dans un fluide) à l'aide de la seule équation de Navier-Stokes/Brinkman. Les trois milieux sont remplacés, dans ce cas, par un fluide unique dont la perméabilité est variable. Notre modélisation est d'autre part issue des recherches de Ritz et Caltagirone (Ritz and Caltagirone (1999)) sur la pénalisation par la viscosité. Nous avons considéré le milieu comme un fluide unique mais à viscosité variable. Pour cela, nous avons formulé le tenseur des contraintes de manière à faire apparaître différentes contributions : l'élongation, le cisaillement et la rotation. A chaque contrainte est associée une viscosité qui nous permet d'imposer la contribution qui nous intéresse. Afin de mettre en oeuvre cette méthode de pénalisation, nous avons opté pour un méthode de lagrangien augmenté que nous avons généralisée aux contraintes d'élongation, de cisaillement et de rotation.



# Chapitre III

## Méthodologie Numérique

Ce chapitre sera consacré à la présentation des outils numériques mis en place au laboratoire dans le cadre de la bibliothèque commune AQUILON pour réaliser des DNS d'écoulements particuliers. Nous présenterons dans un premier temps les contraintes liées à l'utilisation de la bibliothèque commune. En effet, les méthodes que nous allons développer devront s'intégrer harmonieusement dans l'environnement préexistant qui est bâti autour d'un maillage unique fixe. Les difficultés inhérentes à ce choix de grille sont alors le suivi des interfaces au cours du mouvement et la distinction des différents milieux mis en jeu. Ces points seront abordés en premier lieu du chapitre avec la présentation des stratégies possibles pour résoudre ces problèmes. Le chapitre présentera ensuite les méthodes utilisées pour discrétiser les équations employées dans notre travail. Nous illustrerons et validerons l'outil de simulation sur différents problèmes 2D et 3D d'écoulements particuliers.

### III.1 Suivi d'interface

L'approche de type domaines fictifs, et plus généralement, les méthodes de résolution eulériennes nécessitent un traitement particulier pour capturer l'interface entre le fluide et le solide. Hirt and Nichols (1981) furent les premiers à proposer l'approche de volume de fluide (VOF) que nous avons utilisée, dans une version modifiée, dans toutes nos simulations.

### III.1.1 Méthode de type suivi de Volume de Fluide (V.O.F.)

La méthode proposée par Hirt and Nichols (1981) repose sur la définition d'une fonction indicatrice de phase, que nous appellerons fonction couleur  $C$ , qui permet de connaître la nature de la phase dans laquelle on se situe. Dans notre cas,  $C$  vaut 1 lorsque l'on se trouve dans le solide et 0 ailleurs. La fonction couleur représente plus exactement la fraction volumique de la phase solide dans une maille de calcul. L'évolution de la fonction  $C$ , et donc de la position de l'interface, est obtenue par la résolution de l'équation d'advection (III.1) :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla C = 0 \quad (\text{III.1})$$

dans laquelle  $\vec{u}$  est la vitesse locale du fluide en absence de changement de phase. Connaissant la position de chacune des phases, nous affectons à chaque zone ses caractéristiques physiques telles que sa masse volumique et sa viscosité. La difficulté du problème consiste à transporter l'interface et à la représenter aussi précisément que possible. Plusieurs méthodes sont disponibles pour résoudre ce problème. D'une part, il existe les méthodes géométriques (VOF-SLIC, VOF-PLIC) et d'autre part, les méthodes mathématiques (VOF-TVD) que nous présentons dans la suite.

#### VOF-Simple Linear Interface Calculation (SLIC)

Il s'agit de la méthode originale présentée par Hirt and Nichols (1981). L'équation (III.1) est discrétisée à l'aide d'un schéma aux différences finies. La localisation de la fonction couleur  $C$  est obtenue en reconstruisant l'orientation de l'interface, qui peut être verticale ou horizontale suivant la valeur de  $C$  dans sa cellule et dans les cellules voisines. Cette méthode dite Simple Linear Interface Calculation (SLIC) est peu précise car le choix de l'orientation de la position de l'interface est trop restreint.

#### VOF-Piecewise Linear Interface Construction (PLIC)

Une amélioration fut proposée par Youngs (1982) afin de ne pas se limiter à la simple représentation de l'interface suivant deux directions. Cette fois, l'orientation de l'interface est donnée par la valeur de sa pente locale et des points d'intersection avec les faces de la maille de calcul. La pente est obtenue par le calcul du gradient de la fonction couleur  $C$ . Les points d'intersection avec la maille sont, quant à eux, calculés en imposant la conservation du volume de fluide dans chaque maille. Il s'agit donc de reconstruire par morceaux, à chaque itération, la position de l'interface. Cette méthode est très précise car

elle conserve bien le volume de fluide au cours du calcul. Cependant, elle est délicate à mettre en oeuvre en 3D. En effet, l'orientation de l'interface est plus difficile à obtenir car il ne s'agit plus de transporter des segments de droites mais des portions de plans.

### VOF-Total Variation Disminishing (TVD)

Cette méthode de résolution de l'équation d'advection repose sur une résolution mathématique. Il s'agit de résoudre directement l'équation (III.1) grâce des schémas numériques issus de l'approximation des équations hyperboliques (LeVeque (1990)). Le choix du schéma est dicté par sa précision qui doit limiter le plus possible les oscillations numériques. Par exemple, un schéma UPWIND diffusera trop l'interface jusqu'à la faire disparaître. Un schéma d'ordre plus élevé produira des oscillations dues à la forte discontinuité à l'interface. L'utilisation des schémas Total Variation Disminishing (TVD) permet de localiser précisément l'interface en éliminant les oscillations numériques et en limitant la diffusion de la discontinuité à quelques mailles autour de l'interface. De plus, le calcul explicite est simple, même en trois dimensions (Vincent and Caltagirone (2000), Vincent and Caltagirone (1999)).

### III.1.2 Méthodes de suivi de front

D'autres méthodes sont disponibles pour le suivi de l'interface. Parmi elles, les méthodes dites de suivi de front sont efficaces car elles sont fondées sur un suivi de l'interface à l'aide de marqueurs sans masse positionnés sur la surface de discontinuité. Elles sont donc associées à un suivi lagrangien de la position des marqueurs. Nous pouvons citer :

#### Les méthodes Marker And Cell (MAC)

Cette méthode de marqueurs de volume fut introduite pour la première fois par Harlow and Welsh (1965). Le domaine contenant le fluide est initialementensemencé de marqueurs sans masse. Ainsi, une cellule contenant au moins un marqueur sera considérée comme fluide et, a contrario, une cellule dépourvue de marqueur ne le sera pas (ou appartiendra à un autre fluide). La position de l'interface est alors définie par la position des cellules contenant au moins un marqueur et adjacente à une cellule sans marqueur. Au cours de la simulation, les particules sans masse sont transportées à leur nouvelle position  $\vec{X}(x_0, t + \Delta t) = \vec{X}(x_0, t) + \vec{u}\Delta t$  à partir de la vitesse  $\vec{u}$  locale du fluide.  $\vec{X}(x_0, t)$  est le vecteur position initial du marqueur situé en  $x_0$  à l'instant  $t$ .

### Les méthodes Front-Tracking (Unverdi and Tryggvason (1992))

Dans la suite de la méthode MAC, l'utilisation des marqueurs a été améliorée en les disposant directement sur l'interface. Celle-ci est donc repérée par la position des marqueurs en un certain nombre de points. Les particules sont également transportées de manière lagrangienne.

### Les méthodes Level Set

Il existe encore d'autres méthodes, comme la méthode de ligne de niveau (Level-Set) introduite par Osher and Sethian (1988) puis améliorée par Sussman and Smereka (1994). La formulation est basée sur la construction d'une fonction régulière, Level Set,  $\phi(x, t)$  définie dans tout le domaine, et correspondant à la plus courte distance à l'interface. Les valeurs négatives correspondant à l'un des fluides et les valeurs positives à l'autre. La position exacte de l'interface correspond au 0 de la fonction  $\phi(x, t)$ .  $\phi(x, t)$  est alors transportée à la place de la fonction couleur  $C$  par la même équation  $\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{U} \cdot \nabla \phi = 0$ . L'avantage de cette méthode de suivi d'interface est l'absence de reconstruction de celle-ci, comme c'est le cas pour les méthodes VOF. Cette opération de reconstruction s'avère coûteuse et difficile à implémenter pour des configurations autres que cartésiennes. Dans l'approche Level-Set, on utilise des algorithmes de redistanciation pour assurer la conservation de la masse et limiter la diffusion numérique. En outre, elle peut être facilement étendue à des maillages non structurés et des configurations en trois dimensions. Toutefois, l'inconvénient réside dans la non conservation de la masse et dans la nécessité d'effectuer plusieurs étapes de redistanciation sur  $\phi(x, t)$ .

### III.1.3 Méthode mixte : suivi eulérien-lagrangien

Nous venons de voir que chaque méthode évoquée présente des inconvénients. Afin de ne retenir que les aspects intéressants de chacune d'elles, nous avons adopté une approche mixte qui reprend la précision du suivi d'interface de type Front-Tracking et la souplesse d'utilisation de la fonction couleur  $C$  pour repérer les différents milieux du domaine. Ce choix a été dicté en partie par la nécessité de suivre exactement les trajectoires de chaque particule. En effet, lorsque nous sommes en présence de plusieurs particules, il est nécessaire de les distinguer. Une solution possible est de définir, pour chaque particule, une fonction couleur  $C$ . Cela aurait requis la résolution de l'équation d'advection autant de fois que le nombre de particules. Or, étant donné le nombre très important d'objets solides

à traiter, il semble plus judicieux d'exclure ce traitement car le temps de calcul qui en découlerait aurait été trop conséquent. Ainsi, une seule fonction couleur sera utilisée pour représenter toutes les particules d'une même phase solide. Afin de localiser et d'individualiser les solides, nous les repérons par les coordonnées de leur centre et leur rayon. Une opération de projection de la forme analytique des particules (cercles, sphères) sur le maillage eulérien est ensuite réalisée, comme dans une approche front-tracking pour définir la fonction  $C$ . Nous sommes ainsi capables de distinguer le fluide du solide par la fonction couleur, et les particules entre elles par la donnée de leur centre. En outre, les méthodes de type VOF (PLIC ou TVD) utilisées dans le code Aquilon engendrent toujours une certaine diffusion ou une distorsion de l'interface qui est d'autant plus importante que les gradients de vitesses sont grands. Cela peut, dans certains cas, altérer la forme de l'interface et donc modifier la forme de nos particules. Nous avons donc été amenés à changer la méthode de détermination du champ de la fonction couleur. Ainsi, le processus de projection de la fonction couleur sur le maillage eulérien et de transport des particules est défini par l'algorithme suivant :

1. Initialisation : On définit la position initiale des particules ainsi que leur rayon
2. Projection Lagrangien/Eulérien : Connaissant la position des particules, on projette sur le maillage eulérien la forme connue des particules à partir de leur position lagrangienne pour obtenir le champ de la fonction couleur. Les zones solides et les zones fluides sont ainsi fixées. Pour cela, on attribue directement (ie sans résolution de l'équation d'advection (III.1)) les valeurs de la fonction couleur à chaque point  $M$  du maillage dont les coordonnées sont  $(x_1, x_2)$  en 2D et  $(x_1, x_2, x_3)$  en 3D. Pour les points  $M$  vérifiant

$$\|\overrightarrow{C_i M}\| \leq R_i \quad \text{avec} \quad \|\overrightarrow{C_i M}\| = \sqrt{\sum_{j=1}^k (x_j - x_{C_{ij}})^2} \quad (\text{III.2})$$

on attribue la valeur 1 à la fonction couleur. Ce point appartient à la particule  $i$  et est solide. Ici  $C_i$  désigne le centre de coordonnées  $(x_{C_{i1}}, x_{C_{i2}})$  en 2D et  $(x_{C_{i1}}, x_{C_{i2}}, x_{C_{i3}})$  en 3D de la  $i$ -ième particule (voir figure III.1) et  $R_i$  son rayon. Les points qui sont à l'extérieur du rayon ( $\|\overrightarrow{C_i M}\| > R_i$ ) sont, quant eux, fluides, et nous affectons alors la valeur 0 à la couleur du point. Cette première étape permet de déterminer "grossièrement" les zones fluides et solides. Afin d'affiner la position de l'interface entre le fluide et le solide et de contrôler sa diffusion, nous introduisons des points

de contrôle supplémentaires dans les mailles intermédiaires où la couleur est telle que  $0 < C < 1$ . Plus exactement, le maillage est raffiné localement autour du noeud dont la valeur doit être affinée. La figure III.2 précise davantage le raffinement autour du noeud mixte. Concrètement, nous parcourons les volumes de contrôle mixtes  $V_j$  contenant l'interface par un maillage local dont le pas d'espace est plus fin que le maillage eulérien global. Pour chaque point  $M$ , nous vérifions si le point de raffinement est dans la particule ou à l'extérieur en utilisant la formule III.2. On somme le nombre de points internes et on multiplie le résultat par le volume d'une maille de raffinement. Nous obtenons ainsi une nouvelle approximation de la fraction volumique  $C(M)$  plus précise que celle issue du maillage eulérien grossier. Cette gestion de l'interface est efficace dans la mesure où même avec un maillage grossier (neuf points dans la particule), nous avons une bonne représentation, comme le montre la figure III.3. De plus, la conservation du volume est bien respectée d'après les résultats présentés dans le tableau III.1. A titre d'exemple, il est nécessaire d'avoir 30 points dans le diamètre de la particule pour obtenir une précision équivalente avec une méthode de type VOF.

3. Détermination du champ de vitesse lagrangien : Connaissant la position de la zone solide et de la zone fluide, nous pouvons résoudre l'équation de Navier-Stokes telle qu'elle a été présentée dans le chapitre II, afin de déterminer le champ de vitesse dans tout le domaine. La vitesse  $\vec{V}_i$  de la particule  $i$  est ensuite définie comme la moyenne des vitesses appartenant à celle-ci, soit

$$\vec{V}_i = \frac{1}{P} \sum_{k=1}^P \vec{u}_k(M)$$

où  $P$  est le nombre de points tel que  $C_i M \leq R_i$ .

4. Transport lagrangien : La nouvelle position de la particule est finalement obtenue à l'aide de la relation  $\vec{X}_i^{n+1} = \vec{X}_i^n + \vec{V}_i \Delta t$  où  $\vec{X}_i^n$  est le vecteur position à l'instant  $n$  et  $\vec{V}_i$  la vitesse de la particule  $i$ .

Ce traitement particulier nous offre l'avantage de cumuler la précision du suivi lagrangien et la facilité de mise en oeuvre des méthodes VOF. De plus, on peut noter l'absence d'accumulation de la diffusion de l'interface. En effet, elle est reconstruite à chaque itération à partir de la forme analytique si elle est connue. A chaque instant, nous

Méthode	Volume calculé ( $m^2$ )	Erreur (%)
Méthode VOF/Lagrangien (5 points de contrôle)	$0.7125 \cdot 10^{-3}$	0.81
Méthode VOF/Lagrangien (25 points de contrôle)	$0.7114 \cdot 10^{-3}$	0.65
Méthode VOF/Lagrangien (100 points de contrôle)	$0.7081 \cdot 10^{-3}$	0.18
Méthode VOF-CIAM	$0.9000 \cdot 10^{-3}$	27.33
Méthode VOF-TVD	$0.8999 \cdot 10^{-3}$	27.32

Tableau III.1 : Comparaison du volume numérique d'une particule en 2D avec un maillage eulérien induisant 9 points dans la particule (rayon  $R_i = 0.015$  m soit un volume théorique de  $0.707$   $mm^2$ )

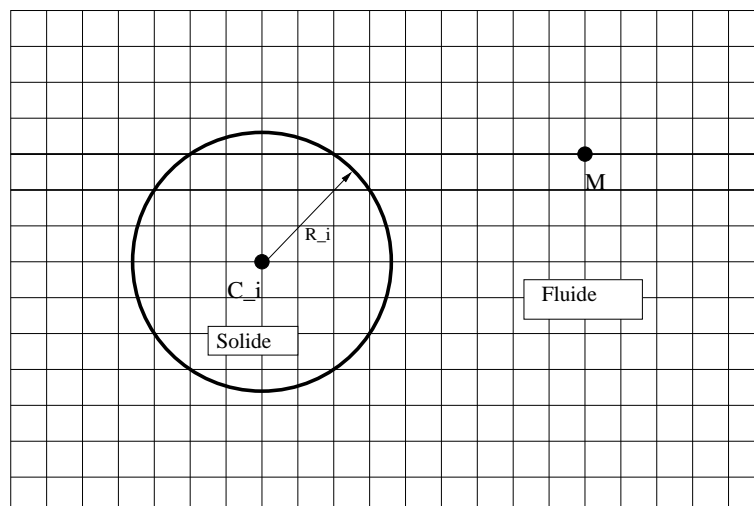


Figure III.1 : Description de la particule par une méthode mixte

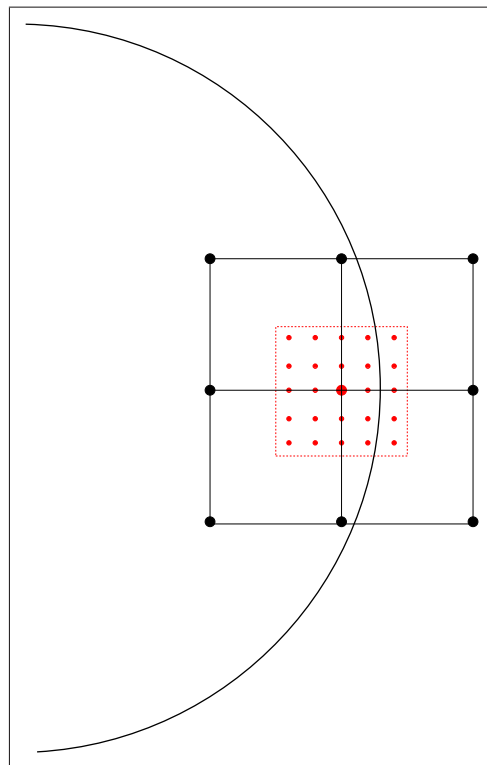


Figure III.2 : *Raffinement local au niveau du volume de contrôle coupé par l'interface. Le raffinement est de cinq points par direction d'espace*



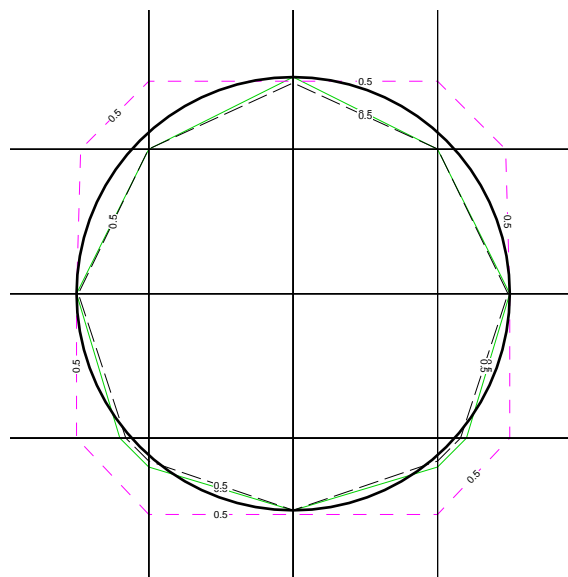


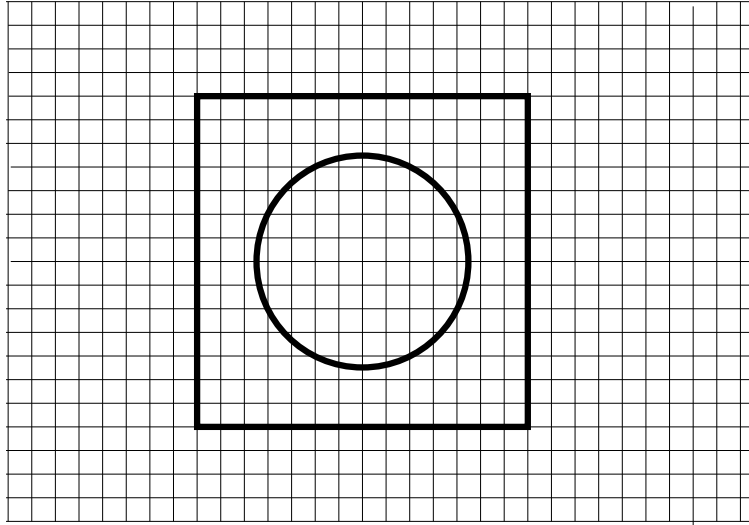
Figure III.3 : Visualisation de l'interface défini par  $C = 0.5$  (Trait pointillé rose : Méthode VOF, Trait plein vert : Méthode mixte avec 5 points de contrôle, Trait pointillés noir : Méthode mixte avec 100 points de contrôle, Trait plein noir : Position théorique)

conservons exactement le même volume de solide. Cette technique a été utilisée pour la première fois par J.B. Ritz avec des méthodes de pénalisation (Ritz (1997), Ritz and Caltagirone (1999)). Remarquons tout de même que cette méthode mixte ne peut être appliquée que pour des objets dont la géométrie est connue analytiquement. En effet, nous devons connaître l'équation de l'interface pour pouvoir projeter la fonction couleur sur le maillage. De la même manière, nous sommes limités à l'étude d'objets indéformables. La méthode peut être généralisée à une approche de type Front Tracking simplifiée. A partir de la connaissance de la géométrie, nous définissons les points de contrôle de l'interface qui serviront à la projection de la fonction couleur sur le maillage eulérien. Ce travail est en cours d'étude au laboratoire.

**Remarque :**

- **Repérage des points du maillage :** Un des points-clés de la méthode que nous avons mis en place est le repérage des points appartenant à une zone solide (la particule  $i$ ). Afin d'affecter la valeur 1 ou 0 à un point du maillage, nous sommes contraints de tester chaque noeud du maillage pour connaître sa position par rapport au centre d'une particule à chaque itération. Cette étape de localisation est la plus longue dans le processus de transport lagrangien. Afin de gagner en temps de calcul, nous avons donc mis en place une méthode de parcours des points du maillage dans une zone proche de la particule. Au lieu de parcourir toute la grille, nous repérons en premier lieu le centre de chaque particule. A partir de cette position, nous définissons une boîte carrée dont le centre est celui de la particule et dont la longueur du côté est légèrement plus grande que le diamètre de la particule. Un schéma de la configuration est proposé sur la figure III.4. Pour déterminer les points appartenant au solide, nous devons seulement parcourir les points de la boîte que nous venons de créer. Cette manipulation nous a permis d'économiser un temps considérable lors de la projection de la fonction couleur sur le maillage eulérien.
- **Calcul de la vitesse de rotation :** Comme nous avons à notre disposition le champ de vitesse à l'intérieur de la particule, il est facile de calculer les vitesses de rotation de la particule. Nous les définissons comme la moyenne des vitesses de rotations dans la particules soit :

$$\vec{\Omega}_i = \frac{1}{P} \sum_{k=1}^P \vec{\omega}_k(M)$$

Figure III.4 : *Repérage localisé autour de la particule*

où le vecteur rotation local  $\vec{\omega}_k$  est défini par

$$\vec{\omega}_k = \frac{1}{\|\vec{C}_i M\|^2} \vec{C}_i M \otimes (\vec{u}_k(M) - \vec{V}_i)$$

- **Forces de lubrification et/ou de répulsion :** Un des inconvénients de cette méthode VOF eulérien/lagrangien est le fait que la gestion de chaque particule est indépendante des autres. En effet, au moment du transport lagrangien il est possible que nous déplaçons une particule dans une zone où une autre particule est déjà présente. Cela conduit à une superposition de plusieurs particules qui n'est pas autorisée physiquement. Cette situation peut se présenter dans les cas où le pas de temps de la simulation n'est pas adapté ou lorsque la concentration en particules est proche de la compacité maximale. Comme nous le verrons un peu plus loin, cette situation est prise en compte naturellement à travers l'équation de Navier-Stokes. Si le pas de temps est bien choisi, les particules ne peuvent s'interpénétrer que très légèrement (de l'ordre d'une maille). Néanmoins, si l'on souhaite renforcer la répulsion des particules, pour modéliser des particules chargées par exemple ou encore pour empêcher tout contact, nous pouvons aisément introduire une force  $\vec{F}_{rep}$  qui modifiera la valeur de la vitesse de transport de la particule selon :

$$\vec{V}'_i = \vec{V}_i + \frac{\Delta t}{m_p} \vec{F}_{rep} \quad (\text{III.3})$$

où  $m_p$  représente la masse de la particule et  $\vec{V}'_i$  la nouvelle vitesse qui tient compte de la force supplémentaire. Nous avons implanté une force qui est issue des travaux de Singh et al. (2000) et qui se présente sous la forme :

$$\vec{F}_{rep}^P = \begin{cases} 0 & \text{pour } d_{ij} > R_i + R_j + d_{crit} \\ \frac{1}{\epsilon_P} (\vec{X}_i - \vec{X}_j) (R_i + R_j + d_{crit} - d_{ij})^2 & \text{pour } d_{ij} < R_i + R_j + d_{crit} \end{cases} \quad (\text{III.4})$$

pour le contact entre les particules et

$$\vec{F}_{rep}^P = \begin{cases} 0 & \text{pour } d_i > 2R_i + d_{crit} \\ \frac{1}{\epsilon_W} (\vec{X}_i - \vec{X}_j) (2R_i + d_{crit} - d_i)^2 & \text{pour } d_i < 2R_i + d_{crit} \end{cases} \quad (\text{III.5})$$

pour le contact entre la particules et les parois.  $\epsilon_P, \epsilon_W$  sont des paramètres qui permettent de contrôler l'intensité de la force de répulsion et  $d_{crit}$  la distance critique en dessous de laquelle nous appliquons la force. Dans la pratique,  $d_{crit}$  est imposé à une maille.

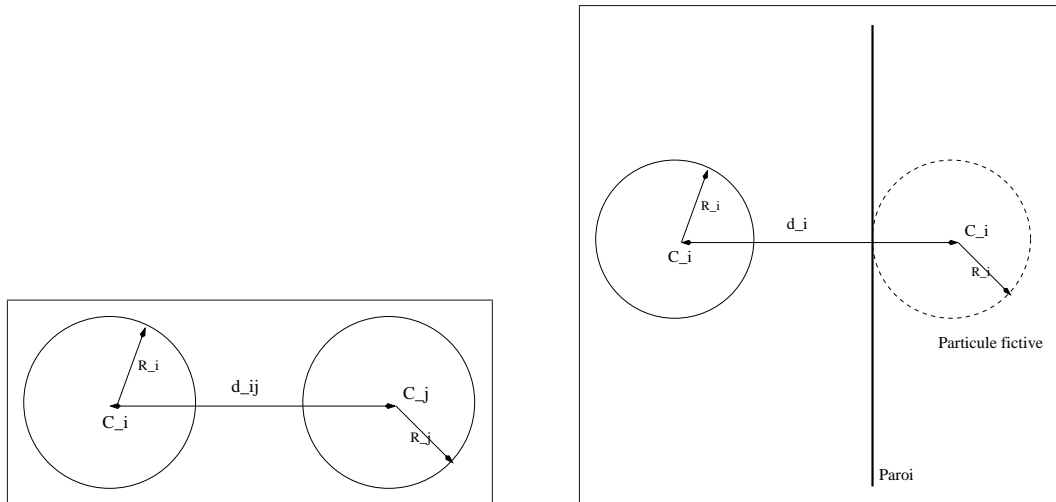


Figure III.5 : *Traitement du contact (à gauche : contact entre deux particules, à droite : contact avec la paroi)*

Des modèles de forces plus élaborés (Maury (1997)) peuvent être introduits très facilement dans le modèle, mais comme notre approche permet de prendre en compte implicitement les effets de lubrification (cf validations), nous rencontrons peu d'interpénétration de particules.

### III.1.4 Définition des caractéristiques du mélange diphasique

L'évolution des caractéristiques des fluides (viscosité et masse volumique) doit être évaluée à partir des valeurs  $\rho_s, \mu_s$  du solide et  $\rho_f, \mu_f$  du fluide, ainsi que de la fonction couleur  $C$ . Une fois la valeur de la fonction couleur connue dans tout le domaine de calcul grâce à la résolution de l'équation d'advection (III.1), nous sommes capables de repérer chaque milieu. Les propriétés physiques sont alors mises à jour.

L'affectation des caractéristiques physiques peut se faire de plusieurs façons, soit de façon discontinue, soit à partir d'une moyenne des propriétés de chaque milieu.

La masse volumique et la viscosité de l'interface peuvent tout d'abord être calculées à partir d'une moyenne continue linéaire (III.6) ou géométrique (III.7) :

$$\begin{cases} \rho = \rho_f + (\rho_s - \rho_f)C \\ \mu = \mu_f + (\mu_s - \mu_f)C \end{cases} \quad (\text{III.6})$$

$$\begin{cases} \rho = \frac{\rho_f \rho_s}{(1-C)\rho_f + \rho_s C} \\ \mu = \frac{\mu_f \mu_s}{(1-C)\mu_f + \mu_s C} \end{cases} \quad (\text{III.7})$$

L'inconvénient de la définition des propriétés de l'interface par cette méthode de moyenne réside dans l'introduction de valeurs intermédiaires pour la viscosité et la masse volumique du mélange. Si l'interface est trop diffuse, nous créons alors artificiellement un milieu supplémentaire sur plusieurs mailles. Cependant, cette diffusion dépend énormément de la résolution du maillage.

Afin de pallier ce désagrément, le calcul des caractéristiques de l'interface peut être effectué de façon discontinue (III.8). A cette fin, la valeur 0.5 de la fonction couleur est choisie arbitrairement pour définir la discontinuité des propriétés physiques. Nous avons alors

$$\begin{cases} \rho = \rho_s \quad \text{et} \quad \mu = \mu_s \quad \text{si} \quad C \geq 0.5 \\ \rho = \rho_f \quad \text{et} \quad \mu = \mu_f \quad \text{si} \quad C < 0.5 \end{cases} \quad (\text{III.8})$$

en tout point de l'espace de résolution.

**Remarque :** Nous pouvons constater que les caractéristiques physiques sont toutes déterminées à partir de la fonction couleur  $C$ . Pour obtenir la valeur de  $C$  sur les grilles de

viscosité ou de vitesse (comme indiqué sur les figures (III.6) et (III.7)), nous utilisons une interpolation de  $C$  à partir des valeurs de  $C$  de la grille de pression, grille sur laquelle est calculée la fonction couleur.

## III.2 Discrétisation des équations

La résolution des équations du problème est obtenue à l'aide d'une approche eulérienne. Les équations du problème sont donc discrétisées sur un maillage fixe cartésien qui ne tient pas compte de la géométrie du domaine ni de celle des fluides. Le modèle à un fluide a été utilisé en association avec une méthode de type VOF pour suivre l'évolution de l'interface et donc des différents fluides en présence. Nous rappelons le système d'équations de Navier-Stokes valable pour l'écoulement incompressible d'un fluide visqueux (III.9) :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{u} = 0 \\ \rho \left( \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} \right) = \rho \vec{g} - \nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla \vec{u} + \nabla^t \vec{u})] \end{cases} \quad (\text{III.9})$$

### III.2.1 Discrétisation spatiale

Les équations de Navier-Stokes sont résolues en un nombre fini de points qui forment le maillage. Nous employons la méthode des volumes finis pour discrétiser le système d'équations. Cette méthode est devenue une approche classique en mécanique des fluides car elle est basée sur la conservation de flux physiques aux interfaces des cellules du maillage. Afin d'optimiser la résolution des équations à l'aide de la méthode des volumes finis, le système (III.9), et plus généralement toutes les équations du problème, est exprimé sous sa forme conservative. Nous avons alors le système :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{u} = 0 \\ \rho \left( \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} \otimes \vec{u}) \right) = \rho \vec{g} - \nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla \vec{u} + \nabla^t \vec{u})] \end{cases} \quad (\text{III.10})$$

Le maillage forme également un ensemble de domaines ou volumes élémentaires sur lequel nous nous appuyerons pour mettre en place la méthode des volumes finis. L'approche de discrétisation spatiale de type volume fini consiste à appliquer les équations de conservation (III.9) aux volumes élémentaires (appelés volumes de contrôle) qui constituent le domaine de calcul (Patankar (1980)). Afin de faciliter le calcul des termes de divergence et de gradients, nous utilisons un maillage décalé en vitesse et en pression de type Marker

And Cell (MAC) (Harlow and Welsh (1965)). De plus, nous limitons les oscillations du calcul de la pression, observées pour les maillages collocatifs (sans décalage des inconnues). Un autre avantage que présente le maillage décalé est de restreindre le nombre d'interpolations des variables aux points où elles ne sont pas définies. Le maillage typique que nous employons est présenté sur la figure (III.6). La méthode des volumes finis consiste à effec-

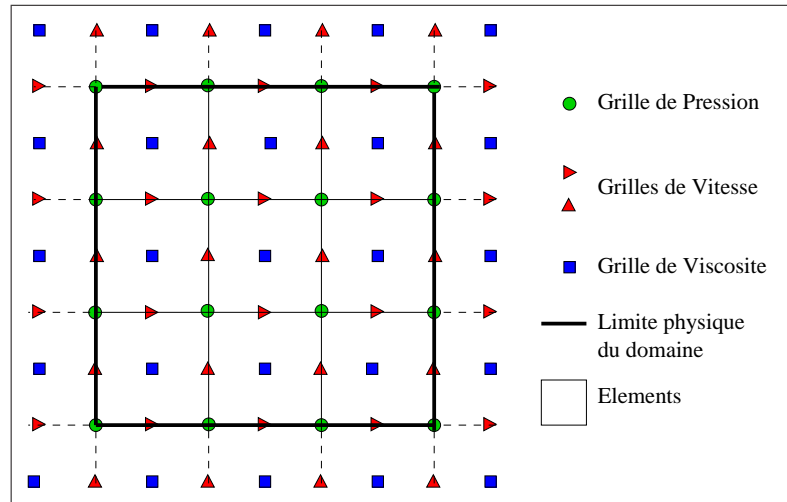


Figure III.6 : *Maillage décalé en vitesse et pression*

tuer un bilan de flux sur les faces du volume de contrôle. Ainsi, elle permet d'assurer la conservation des flux sur le volume de contrôle, et par extension, sur tout le domaine. Sur les figures (III.7) et (III.8), nous avons fait apparaître les points appartenant au volume de contrôle de chaque type de variables et les points intervenant dans la discrétisation spatiale. Afin de simplifier la représentation, nous donnons un exemple de maillage en deux dimensions. Le décalage demeure analogue en trois dimensions. L'équation-bilan modèle que nous utilisons pour décrire la méthode des volumes finis est la suivante :

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \phi) = \nabla \cdot (\gamma \nabla \phi) + S_\phi \quad (\text{III.11})$$

Dans ce paragraphe, nous ne traiterons pas du terme temporel car il sera présenté par la suite. L'équation à laquelle nous aboutissons est exprimée en coordonnées cartésiennes mais cette hypothèse n'est en aucun cas restrictive. La méthode peut s'exprimer aussi en coordonnées curvilignes. Nous avons la discrétisation suivante :

$$\frac{\partial}{\partial x} (\rho u_x \phi) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho u_y \phi) = \frac{\partial}{\partial x} (\gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (\gamma \frac{\partial \phi}{\partial y}) + S_\phi \quad (\text{III.12})$$

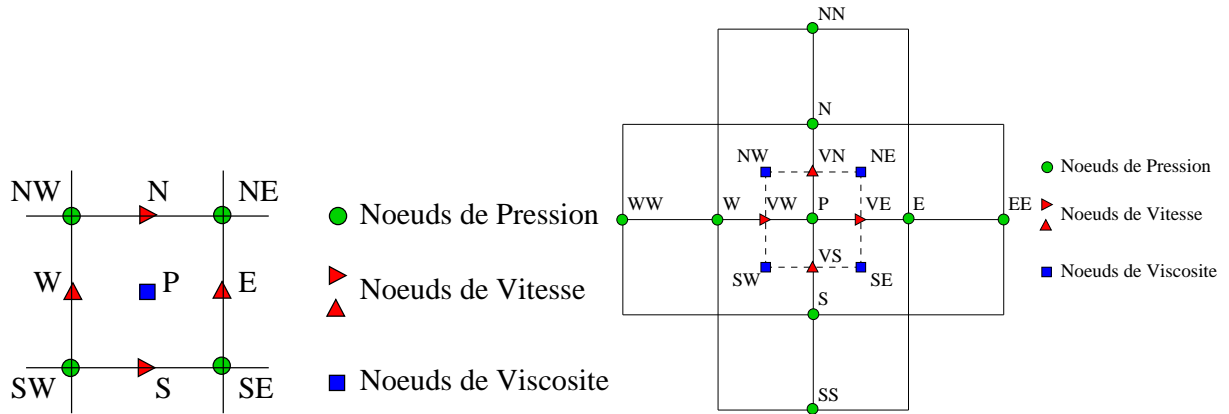


Figure III.7 : *Volume de contrôle pour chaque variable en 2D (gauche : noeud de viscosité, droite : noeud de pression et couleur)*

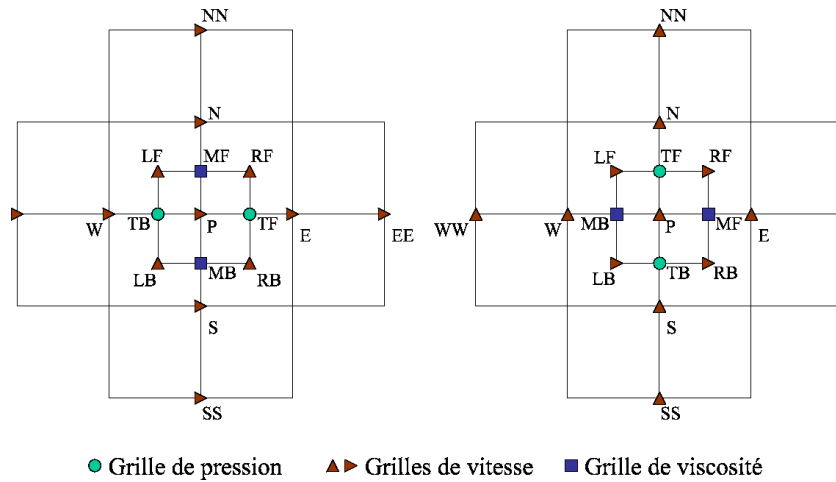


Figure III.8 : *Volume de contrôle pour les vitesses en 2D*



que nous intégrons sur le volume de contrôle  $\mathcal{V}_P$  :

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{V}_P} \left[ \frac{\partial}{\partial x} (\rho u_x \phi) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho u_y \phi) \right] d\mathcal{V} &= \int_{\mathcal{V}_P} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right] d\mathcal{V} + \int_{\mathcal{V}_P} S_\phi d\mathcal{V} \\ &\Leftrightarrow \\ \int_{\Delta_y} [\rho u_x \phi]_o^e dy + \int_{\Delta_x} [\rho u_y \phi]_s^n dx &= \int_{\Delta_y} \left[ \gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right]_o^e dy + \int_{\Delta_x} \left[ \gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right]_s^n dx + \bar{S} \Delta_x \Delta_y \end{aligned} \quad (\text{III.13})$$

Ici  $\bar{S}$  représente la valeur moyenne de  $S$  sur le volume  $\mathcal{V}_P$ . Ainsi, on peut considérer le volume de contrôle comme un filtre spatial des quantités calculées car toutes les expressions ne sont pas définies en-dessous de cette échelle. A ce stade, la valeur des termes situés sur les faces du volume de contrôle ( $[\psi]_o^e$  et  $[\psi]_s^n$ ) est inconnue. Nous supposons cependant que  $\psi$  est constant sur chaque face où il est exprimé. Nous avons alors (III.14) qui s'écrit :

$$\begin{aligned} \left( (\rho u_x \phi)|_e - (\rho u_x \phi)|_o \right) \Delta_y + \left( (\rho u_y \phi)|_n - (\rho u_y \phi)|_s \right) \Delta_x &= \\ \left( \left( \gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)|_e - \left( \gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)|_o \right) \Delta_y + \left( \left( \gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)|_n - \left( \gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)|_s \right) \Delta_x &+ \bar{S} \Delta_x \Delta_y \end{aligned} \quad (\text{III.14})$$

Pour évaluer  $\psi_n$ ,  $\psi_s$ ,  $\psi_e$  et  $\psi_o$ , nous utilisons différentes interpolations suivant le type de flux. Pour les termes visqueux et le terme de lagrangien augmenté (que nous expliciterons plus tard), un schéma centré du second ordre est employé. Le terme convectif peut, quant à lui, être interpolé par des schémas centré du second ordre, upwind ou encore hybride. Une description sommaire de chacun des schémas est présenté ci-après (Une vue plus détaillée est disponible dans Patankar (1980))

- Le schéma centré du second ordre évalue la valeur de la variable considérée, à l'aide d'un développement en série de Taylor tronqué à l'ordre 1. Cela revient à approximer le flux par une moyenne arithmétique à partir des points voisins. Par exemple, on a  $\psi_n = \frac{\psi_N + \psi_P}{2}$ . Ce schéma peut être instable.
- Le schéma upwind consiste à remplacer la variable inconnue située sur la face par la valeur du point placé en amont. Par exemple, si  $u_x > 0$  alors  $\psi_e = \psi_P$ . Ce schéma est intéressant pour les écoulements où le terme convectif est prépondérant mais il induit de la diffusion numérique.

- Le schéma hybride est composé de plusieurs schémas d'interpolation. Le principe repose sur un choix automatique du schéma en fonction des caractéristiques locales des flux. Pour cela, on utilise le nombre sans dimension de Peclet  $Pe$  qui compare localement les termes diffusifs et convectifs. Le nombre de Peclet est défini par  $Pe = \frac{\rho u \Delta}{\Gamma}$  avec  $u$  la vitesse locale,  $\Delta$  le pas d'espace et  $\Gamma$  une longueur caractéristique. Le schéma hybride est alors défini par :

$$\left\{ \begin{array}{l} -2 \leq Pe \leq 2 \quad \Rightarrow \quad \text{Schéma centré} \\ Pe > 2 \text{ ou } Pe < -2 \quad \Rightarrow \quad \text{Schéma upwind} \end{array} \right. \quad (\text{III.15})$$

### III.2.2 Discrétisation temporelle

Le terme instationnaire  $\frac{\partial \rho \phi}{\partial t}$  est présent dans toutes les équations, excepté dans l'équation qui traduit l'incompressibilité. L'application de la discrétisation en volumes finis nécessite l'intégration du terme instationnaire sur un intervalle de temps et sur le volume de contrôle  $\mathcal{V}_P$ . Nous avons :

$$\rho \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left( \int_{\mathcal{V}_P} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\mathcal{V} \right) dt = \rho \int_{\mathcal{V}_P} (\phi^{n+1} - \phi^n) d\mathcal{V} \quad (\text{III.16})$$

En supposant à présent que  $\phi_P$  est représentatif de  $\phi$  sur le volume de contrôle  $\mathcal{V}_P$ , nous obtenons :

$$\rho \int_{\mathcal{V}_P} (\phi^{n+1} - \phi^n) d\mathcal{V} = \rho \Delta_x \Delta_y (\phi_P^{n+1} - \phi_P^n) \quad (\text{III.17})$$

L'intégration temporelle doit être effectuée sur tous les termes de (III.11) sur un intervalle de temps  $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ , appelé pas de temps. Cette intégration temporelle conduit au calcul des quantités suivantes :

$$\int_{\Delta t} \phi_i dt \quad (\forall i = P, E, W, N, S) \quad (\text{III.18})$$

Plusieurs possibilités sont envisageables pour le calcul de ces quantités. Le schéma de discrétisation des dérivées temporelles adopté est un schéma implicite. Il présente l'avantage d'être inconditionnellement stable contrairement au schéma explicite qui requiert un critère de stabilité. Le calcul d'une dérivée  $\frac{\partial \phi}{\partial t}$  à l'instant  $(n+1)$  dépendra de la valeur de la fonction à l'instant  $(n+1)$  et des instants précédents. De façon générale, le calcul se présente de la façon suivante :

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^{n+1} = \frac{\alpha \phi^{n+1} + \beta \phi^n + \gamma \phi^{n-1}}{\Delta t} \quad (\text{III.19})$$

Suivant les valeurs des coefficients  $\alpha, \beta, \gamma$ , nous obtenons des schémas temporels précis au premier ou au second ordre.

Ordre	Nom	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$
1	Euler	1	-1	0
2	Gear	$\frac{3}{2}$	-2	$\frac{1}{2}$

L'utilisation d'un schéma d'ordre élevé permet d'accroître la précision de la solution mais elle peut engendrer des oscillations de celle-ci. Nous avons cependant utilisé le schéma de Gear dans toutes nos simulations. Notons qu'il ne peut pas être employé à la première itération car le terme  $\phi^{n-1}$  est encore inconnu à cette instant. On fait alors appel au schéma d'Euler dans cette étape initiale.

### III.2.3 Linéarisation et Découplage des équations

**Linéarisation des équations** Comme nous avons choisi un traitement implicite du système d'équations, tous les termes sont exprimés au temps  $(n+1)$  sauf pour les termes non linéaires. Les difficultés apparaissent pour le calcul du terme de convection  $(\vec{u}^{n+1} \cdot \nabla)\vec{u}^{n+1}$  ainsi que pour la masse volumique et la viscosité qui dépendent de la position de l'interface. Le terme de convection est linéarisé en l'écrivant sous la forme  $(\vec{u}^n \cdot \nabla)\vec{u}^{n+1}$ . Finalement le système d'équations initial (III.9) à résoudre est linéarisé et se présente sous la forme (III.20) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{D}(\vec{u}^{n+1}) = 0 \text{ dans le solide} \\ \nabla \cdot \vec{u}^{n+1} = 0 \text{ dans le fluide} \\ \rho^n \left( \frac{\alpha \vec{u}^{n+1} + \beta \vec{u}^n + \gamma \vec{u}^{n-1}}{\Delta t} + (\vec{u}^n \cdot \nabla)\vec{u}^{n+1} \right) = \rho^n \vec{g} - \nabla p^{n+1} + \nabla \cdot [\mu^n (\nabla \vec{u}^{n+1} + \nabla^t \vec{u}^{n+1})] \text{ partout} \end{array} \right. \quad (\text{III.20})$$

Les variables  $\vec{u}^n, \vec{u}^{n-1}$  et  $p^n$  sont supposées connues. La solution du système est obtenue lorsque les inconnues  $\vec{u}^{n+1}$  et  $p^{n+1}$  sont déterminées.

**Découplage des équations : Traitement des contraintes** Un des problèmes rencontré lors de la résolution des équations de Navier-Stokes exprimées en variables primitives vitesse-pression concerne le traitement du couplage entre ces deux quantités. En effet,

en observant les équations, il apparaît clairement qu'il n'existe aucune équation explicite permettant le calcul de la pression. La méthode du lagrangien augmenté déjà présentée au chapitre précédent est une méthode de minimisation sous la contrainte de l'équation de continuité, où la pression, qui est découplée par rapport à la vitesse, apparaît comme un multiplicateur de Lagrange. Notons que la contrainte est en fait directement introduite dans l'équation du mouvement sous la forme du terme de pénalisation  $-\nabla(\lambda \nabla \cdot \vec{u})$  qui couple les différentes composantes de la vitesse. Le calcul du couple vitesse-pression est effectué par l'algorithme itératif d'Uzawa. Les itérations de lagrangien augmenté (notées  $k$ ) sont répétées jusqu'à ce que la valeur moyenne de la divergence de la vitesse, dans l'ensemble du domaine, soit suffisamment petite (inférieure à un critère  $\epsilon$  que l'on se fixe). En notant  $\mathcal{K}$  le nombre maximal d'itérations nécessaires pour satisfaire le précédent critère, l'algorithme itératif du lagrangien augmenté est représenté par :

1. Initialisation :  $\vec{u}^{k=0} = \vec{u}^n$  et  $p^{k=0} = p^n$

2. Pour  $k = 0$  à  $k = \mathcal{K} - 1$  effectuer :

– Calcul de  $\vec{u}^{k+1}$  solution de l'équation

$$\rho^n \left( \frac{\alpha \vec{u}^{k+1} + \beta \vec{u}^k + \gamma \vec{u}^{k-1}}{\Delta t} + (\vec{u}^k \cdot \nabla) \vec{u}^{k+1} \right) - \nabla(\lambda \nabla \cdot \vec{u}^{k+1}) = \quad (\text{III.21})$$

$$\rho^n \vec{g} - \nabla p^k + \nabla \cdot [\mu^n (\nabla \vec{u}^{k+1} + \nabla^t \vec{u}^{k+1})]$$

– Calcul de  $p^{k+1}$  à partir de l'équation :

$$p^{k+1} = p^k - \lambda \nabla \cdot \vec{u}^{k+1}$$

3. Solutions :  $\vec{u}^{n+1} = \vec{u}^{k=\mathcal{K}}$  et  $p^{n+1} = p^{k=\mathcal{K}}$

Afin de gérer la contrainte de non déformation du solide, nous appliquons le même algorithme que nous avons adapté. Pour cela, nous utilisons la décomposition du tenseur des contraintes présentée dans le chapitre précédent. Nous avons :

1. Initialisation :  $\vec{u}^{k=0} = \vec{u}^n$ ,  $p^{k=0} = p^n$ ,  $\bar{l}g_2^{k=0} = \bar{l}g_2^n$ ,  $\bar{l}g_3^{k=0} = \bar{l}g_3^n$  et  $\bar{l}g_4^{k=0} = \bar{l}g_4^n$

2. Pour  $k = 0$  à  $k = \mathcal{K} - 1$  effectuer :

– Calcul de  $\vec{u}^{k+1}$  solution de l'équation

$$\rho^n \left( \frac{\alpha \vec{u}^{k+1} + \beta \vec{u}^k + \gamma \vec{u}^{k-1}}{\Delta t} + (\vec{u}^k \cdot \nabla) \vec{u}^{k+1} \right) - \nabla(\lambda \nabla \cdot \vec{u}^{k+1})$$

$$- \nabla \cdot [\kappa \bar{\Lambda}^{k+1} + \zeta \bar{\Theta}^{k+1} - \eta \bar{\Gamma}^{k+1}] = \quad (\text{III.22})$$

$$\rho^n \vec{g} - \nabla p^k - \nabla \cdot [\bar{l}g_2^k + \bar{l}g_3^k - \bar{l}g_4^k]$$

– Calcul de  $p^{k+1}$ ,  $l\bar{g}_2^{k+1}$ ,  $l\bar{g}_3^{k+1}$  et  $l\bar{g}_4^{k+1}$  à partir de l'équation :

$$\begin{aligned} p^{k+1} &= p^k - \lambda \nabla \cdot \vec{u}^{k+1} \\ l\bar{g}_2^{k+1} &= l\bar{g}_2^k - \kappa \bar{\Lambda}^{k+1} \\ l\bar{g}_3^{k+1} &= l\bar{g}_3^k - \zeta \bar{\Theta}^{k+1} \\ l\bar{g}_4^{k+1} &= l\bar{g}_4^k - \eta \bar{\Gamma}^{k+1} \end{aligned}$$

3. Solutions :

$$\vec{u}^{n+1} = \vec{u}^{k=\mathcal{K}} \text{ et } p^{n+1} = p^{k=\mathcal{K}}, l\bar{g}_2^{n+1} = l\bar{g}_2^{k=\mathcal{K}}, l\bar{g}_3^{n+1} = l\bar{g}_3^{k=\mathcal{K}}, l\bar{g}_4^{n+1} = l\bar{g}_4^{k=\mathcal{K}}$$

Pour résoudre des écoulements sans particule, nous nous ramenons à l'algorithme classique du lagrangien augmenté en choisissant les valeurs des viscosités,  $\kappa = 2\mu$ ,  $\zeta = 2\mu$  et  $\eta = \mu$ , de telle manière à ce que l'on retrouve le tenseur des taux de déformation usuel.

### Choix des viscosités

Nous avons à notre disposition trois types de méthodes pour choisir l'intensité des viscosités. Nous disposons tout d'abord de la méthode classique du lagrangien augmenté, dans laquelle nous fixons initialement la valeur de  $\lambda$  pour imposer l'incompressibilité et la non-déformation du solide est assurée en donnant une valeur importante à sa viscosité. Cette méthode est dite méthode du lagrangien fixe. La gestion de l'incompressibilité peut également se faire grâce à un choix automatique de la valeur de  $\lambda$ , mais la non-déformation du solide est toujours réalisée en fixant sa viscosité initialement. Nous qualifierons cette technique de lagrangien semi-variable. Enfin, la gestion de tous les paramètres de pénalisation peut être réalisée de façon entièrement automatique : il s'agit de la méthode de lagrangien variable.

**Lagrangien fixe** Comme nous l'avons déjà évoqué lors de la présentation de la méthode du lagrangien augmenté dans le chapitre précédent, le choix du paramètre de pénalisation est assez délicat. En reprenant les notations du chapitre II, les paramètres  $r$  et  $dr$  (qui correspondent à  $\lambda$  à présent) doivent être choisis les plus grands possibles tout en respectant l'inégalité (II.27) et (II.28) que nous rappelons ici :

$$0 < dr < 2\left(r + \frac{1}{\beta^2}\right)$$

avec

$$\beta^2 = \max_{\vec{x} \neq 0} \frac{|D\vec{x}|^2}{\vec{x}^t A \vec{x}}$$

Au cours des simulations, nous nous sommes aperçus qu'une pénalisation trop forte, qui se traduit pas une valeur trop importante des viscosités, conduisait à une mauvaise résolution du système. D'une part, la matrice du système linéaire était difficile à résoudre en raison de la présence de termes dont les valeurs avaient des ordres de grandeurs très différents. D'autre part, la solution numérique obtenue n'était pas acceptable physiquement. Dans la pratique,  $\lambda$  était fixée à une valeur comprise entre 1 et 1000 pour imposer l'incompressibilité de l'écoulement.

**Lagrangien variable** Afin de pallier ce problème, nous avons mis en place une méthode dite de lagrangien variable qui permet de définir "automatiquement" la valeur de la viscosité à imposer en fonction des caractéristiques de l'écoulement. Cette approche que nous présentons a fait l'objet d'une publication Vincent et al. (2004). L'idée est de choisir la viscosité  $\lambda$  de telle sorte qu'au cours du calcul, l'ordre de grandeur de l'expression  $\lambda \nabla \cdot \vec{u}$  soit plus grand (100 à 1000 fois) que tous les autres termes de l'équation. Pour cela, si nous considérons les grandeurs  $L_0$ ,  $t_0$ ,  $u_0$  et  $p_0$  comme les valeurs de référence de longueur, de temps, de vitesse et de pression, nous écrivons, lors d'une itération  $k$  de l'algorithme du lagrangien augmenté, l'équation de conservation du mouvement sous la forme sans dimension :

$$\begin{aligned} \rho(M, t) \frac{L_0^2}{t_0} \left( \frac{\vec{u}^{k+1} - \vec{u}^k}{\Delta t} \right) + \rho(M, t) u_0 L_0 (\vec{u}^k \cdot \nabla) \vec{u}^{k+1} - \nabla (\lambda \nabla \cdot \vec{u}^{k+1}) \\ = \rho(M, t) \frac{L_0^2}{u_0} \vec{g} - \frac{p_0 L_0}{u_0} \nabla p^k + \nabla \cdot [\mu (\nabla \vec{u}^{k+1} + \nabla^t \vec{u}^{k+1})] \end{aligned} \quad (\text{III.23})$$

La viscosité  $\lambda$  est alors définie dans le fluide par :

$$\begin{aligned} \lambda(M, t) = K \max \left( \rho(M, t) \frac{L_0^2}{t_0}, \rho(M, t) u_0 L_0, \rho(M, t) \frac{L_0^2}{u_0} g, \frac{p_0 L_0}{u_0}, \mu(M, t) \right) \\ 10 \leq K \leq 1000 \end{aligned} \quad (\text{III.24})$$

et les viscosités du fluide sont :  $\kappa = 2\eta = \zeta = 2\mu_f$ . Grâce à cette méthode, nous avons la certitude que le terme  $\lambda \nabla \cdot \vec{u}$  est constamment 10 à 1000 plus grand que les autres termes de l'équation. Ainsi, nous nous assurons que la contrainte d'incompressibilité est maintenue au cours de la simulation quelque soit l'intensité des vitesses qui apparaissent. La vitesse de référence  $u_0$  est prise comme étant égale à la plus grande valeur de vitesse dans le domaine fluide.

Pour satisfaire la contrainte de non déformation dans le solide, nous imposons les viscosités suivant une stratégie analogue. Nous prenons les valeurs de viscosité suivantes dans le solide :

$$\begin{aligned}
\lambda(M, t) &= -\frac{2}{3}\mu_f \\
\kappa(M, t) &= \frac{K}{2} \max \left( \rho(M, t) \frac{L_0^2 u_{in}}{t_0 u_{vis}}, \rho(M, t) \frac{u_{in}^2 L_0}{u_{vis}}, \rho(M, t) \frac{L_0^2}{u_{vis}} g, \frac{p_0 L_0}{u_{vis}}, \lambda(M, t) \right) \\
\eta(M, t) &= \frac{K}{2} \max \left( \rho(M, t) \frac{L_0^2 u_{in}}{t_0 u_{vis}}, \rho(M, t) \frac{u_{in}^2 L_0}{u_{vis}}, \rho(M, t) \frac{L_0^2}{u_{vis}} g, \frac{p_0 L_0}{u_{vis}}, \lambda(M, t) \right) \\
\zeta(M, t) &= K \max \left( \rho(M, t) \frac{L_0^2 u_{in}}{t_0 u_{vis}}, \rho(M, t) \frac{u_{in}^2 L_0}{u_{vis}}, \rho(M, t) \frac{L_0^2}{u_{vis}} g, \frac{p_0 L_0}{u_{vis}}, \lambda(M, t) \right) \\
10 &\leq K \leq 1000
\end{aligned} \tag{III.25}$$

Contrairement au cas de l'imposition de la contrainte d'incompressibilité, nous avons distingué la vitesse de référence  $u_0$  en deux vitesses. La vitesse  $u_{in}$  sert de référence au terme d'inertie et  $u_{vis}$  au terme visqueux. Cette distinction s'est avérée nécessaire surtout lors de la phase de mise en vitesse de la particule. Nous avons, comme pour  $\lambda$  (formule III.24), estimé  $u_{in}$  par le maximum de la vitesse dans le domaine de calcul. Par contre, nous avons choisi  $u_{vis}$  constant et différent de zéro pour éviter que  $\kappa$ ,  $\eta$ , et  $\zeta$  ne tendent vers l'infini. En effet, le solide étant encore fixe dans cette phase, toutes les vitesses sont quasiment nulles. Les viscosités tendent alors vers des valeurs très grandes.

L'ordre de grandeur des viscosités est un point capital car il conditionne la bonne résolution du système matriciel et donc la qualité de la solution. Nous venons de voir que la pénalisation avec une valeur constante des viscosités engendrait une mauvaise qualité de la solution. Ceci résulte du fait que nous accordons trop d'importance à la résolution des contraintes d'incompressibilité et de non-déformation. Nous dégradons ainsi la solution de l'équation de conservation du mouvement. En choisissant automatiquement les viscosités par le lagrangien variable, nous établissons un compromis entre la réalisation des contraintes et la résolution des équations physiques. Une solution est le recours à la résolution par des équations par les méthodes directes car nous aurions alors à la fois une bonne résolution des contraintes et des équations de conservation du mouvement. Nous verrons par la suite une étude comparative de ces trois types de pénalisation.

### III.2.4 Conditions aux limites

Les choix (système d'équations unique pour le fluide et le solide, maillage fixe) que nous avons adoptés ont nécessité un traitement particulier des conditions aux limites.

Afin de pouvoir utiliser un seul jeu d'équations pour résoudre l'écoulement dans tout le domaine, nous avons introduit les conditions aux limites directement dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement, sous la forme de termes de pénalisation. La technique, développée initialement par Angot (1989) et Khadra (1994), consiste à exprimer une condition limite généralisée sous la forme d'un flux volumique :

$$-\nabla \vec{u} \cdot \vec{n} = \mathbf{B}_u(\vec{u} - \vec{u}_\infty) \quad (\text{III.26})$$

où  $B_u$  est un coefficient numérique. En fait, il s'agit de l'extension de la loi de Newton (III.27) qui caractérise le flux de chaleur conducto-convectif entre un solide et un fluide :

$$\frac{\partial T}{\partial \vec{n}} = h(T - T_\infty) \quad (\text{III.27})$$

où  $T$  est la température,  $T_\infty$  la température du fluide à l'infini et  $h$  le coefficient d'échange caractéristique entre les deux milieux. La condition à la limite (III.26) est directement intégrée au système (III.9). Suivant la valeur de  $\mathbf{B}_u$  il est possible d'imposer la vitesse dans le domaine de calcul ou sur les parois. Pour  $\mathbf{B}_u = 0$ , nous modélisons une condition limite de type Neumann ( $\frac{\partial \vec{u}}{\partial \vec{n}} = 0$ ) alors qu'en fixant  $\mathbf{B}_u \rightarrow +\infty$ , nous imposons une condition limite de type Dirichlet. Le système d'équation à résoudre devient alors :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{u} = 0 \\ \rho \left( \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} \right) + \mathbf{B}_u(\vec{u} - \vec{u}_\infty) = \rho \vec{g} - \nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla \vec{u} + \nabla^t \vec{u})] \end{cases} \quad (\text{III.28})$$

avec (III.26) sur les limites du domaine. Ce traitement particulier de la condition à la limite s'adapte également parfaitement à la discrétisation par la méthode des volumes finis et au choix de maillage décalé. Le système linéarisé final est le suivant :

$$\begin{cases} \bar{D}(\vec{u}^{n+1}) = 0 \text{ dans le solide} \\ \nabla \cdot \vec{u}^{n+1} = 0 \text{ dans le fluide} \\ \rho^n \left( \frac{\alpha \vec{u}^{n+1} + \beta \vec{u}^n + \gamma \vec{u}^{n-1}}{\Delta t} + (\vec{u}^n \cdot \nabla) \vec{u}^{n+1} \right) + \mathbf{B}_u(\vec{u}^{n+1} - \vec{u}_\infty) = \\ \rho^n \vec{g} - \nabla p^{n+1} + \nabla(\lambda^n \nabla \cdot \vec{u}^{n+1}) + \nabla \cdot [\kappa^n \bar{\Lambda}^{n+1} + \zeta^n \bar{\Theta}^{n+1} - \eta^n \bar{\Gamma}^{n+1}] \text{ partout} \end{cases} \quad (\text{III.29})$$

### III.2.5 Résolution du système matriciel

Le système matriciel linéaire résultant de la discrétisation (III.29) est résolu à l'aide d'un algorithme itératif. Les méthodes itératives sont les plus utilisées pour résoudre les



systèmes de très grande taille. L'algorithme implémenté dans le code Aquilon est de type gradient conjugué Bi-Conjugate Gradient Stabilized II (BiCGSTAB II) développé par Van Der Vorst (1992). Afin d'améliorer la convergence du calcul un pré-conditionnement de la matrice est effectué par une méthode Modified and Incomplete LU (MILU) (Gustafsson (1978)).

## III.3 Validations

Notre objectif dans cette section est de valider la méthode de suivi eulérien/lagrangien que nous avons mis en place. De plus, nous devons nous assurer que la solution obtenue grâce à la technique de pénalisation est correcte. Nous avons choisi plusieurs cas-tests représentatifs des effets qui ont lieu dans un système chargé en particules. Tout d'abord, nous allons tester les divers paramètres du lagrangien augmenté et comparer les différentes méthodes de pénalisation sur un cas simple de sédimentation d'une particule en deux dimensions. La configuration du test correspond à celle de Glowinski et al. (2001). Dans un deuxième temps, nous aborderons le problème de la sédimentation d'une particule dans un cuve cylindrique contenant un fluide visqueux. Le but est de montrer que nous prenons bien en compte les effets dus au confinement de la particule. Ceci est important compte tenu des conditions de fort encombrement que l'on rencontre dans les lits fluidisés. Les nombres de Reynolds de ces deux cas d'études étant faibles, nous avons ensuite simulé la sédimentation d'un disque à des régimes d'écoulements où le sillage devient instationnaire. Enfin, l'analyse des forces de lubrification apparaissant lorsqu'une particule approche une paroi sera étudiée. Nous allons montrer que notre modèle de suivi de particule associé à une technique originale de pénalisation est à même de prendre en compte ces forces sans aucune modélisation explicite.

### III.3.1 Sédimentation d'une particule cylindrique

Afin de tester les différents paramètres du calculs, nous nous sommes intéressés à la sédimentation d'un disque dans une cuve remplie de fluide visqueux. L'objectif de cette partie est :

- d'examiner l'influence de la méthode d'advection de la particule : méthode eulérienne et méthode mixte;

- d'étudier les trois types de pénalisation, à savoir la pénalisation par la méthode du lagrangien variable, celle du lagrangien fixe et la pénalisation totale. Le but est de mieux comprendre l'effet des paramètres de pénalisation.

Le cas-test est présenté sur la figure III.9. Nous avons représenté les lignes de courant autour de la particule à trois instants ( $t = 0.35s$ ,  $t = 0.65s$  et  $t = 0.8s$ ). Le domaine est une cuve de  $6 m$  de hauteur et de  $2 m$  de largeur. Le rayon et la masse volumique de

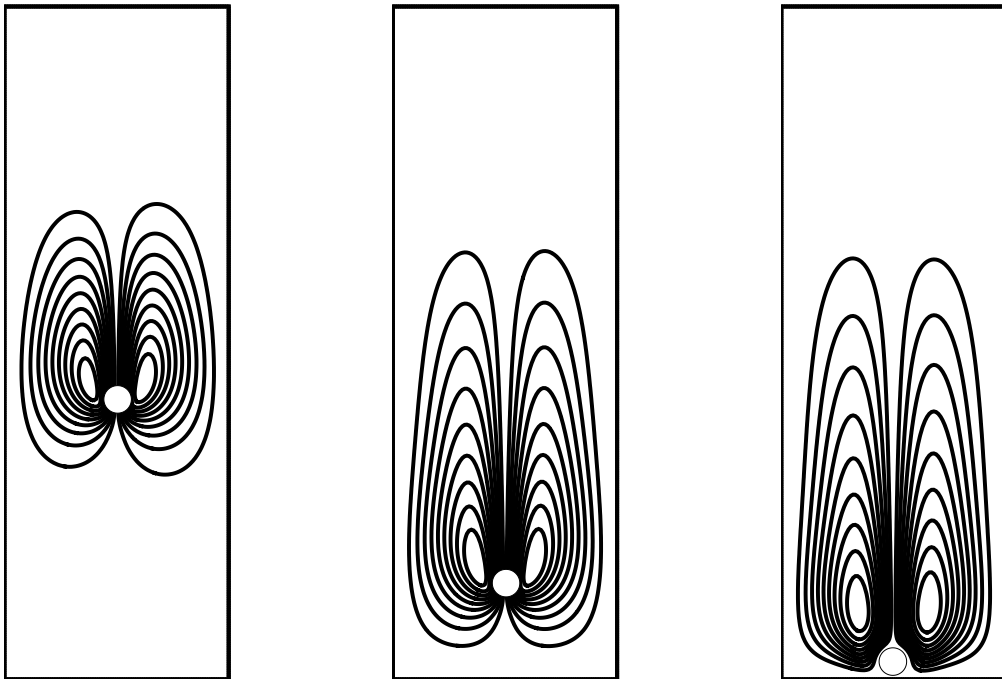


Figure III.9 : *Visualisation de la particule et des lignes de courant d'un disque en sédimentation à  $Re = 13.5$  (Maillage  $200 \times 600$ , Pas de temps :  $10^{-3}s$ , Méthode lagrangien variable avec  $K = 100$ ) (de gauche à droite) :  $t = 0.35s$ ,  $t = 0.65s$ ,  $t = 0.8s$*

la particule sont respectivement  $R_p = 0.125 m$  et  $\rho_s = 1.25 kg/m^3$ . A l'instant initial, elle est lâchée sans vitesse de la position  $x = 1$ ,  $z = 4$ . La particule sédimente alors sous

l'action de la gravité dans un fluide de masse volumique  $\rho_f = 1 \text{ kg/m}^3$  et de viscosité dynamique  $\mu_f = 0.1 \text{ Pa.s}$ . Ce cas-test correspond à l'étude menée par R. Glowinski et son équipe (Glowinski et al. (2001)) à l'aide de la méthode "Distributed Lagrange Multiplier". Il a été repris par la suite par Wan and Turek (2005) pour valider leur modèle basée sur l'utilisation d'une résolution multigrille associée à une méthode de domaines fictifs similaire à celle de Glowinski. L'évolution de la particule et des lignes de courant sont données sur la figure III.9. Nous pouvons constater sur la figure III.10 que la particule est très légèrement déviée de l'axe de la cuve (de l'ordre de 0.8% sur la figure III.10i). Cette déviation est due à l'existence d'une vitesse transversale dont l'intensité reste faible par rapport à celle de la vitesse verticale (cf figure III.11). La particule atteint une vitesse maximale de  $5.4 \text{ m/s}$  après une accélération initiale qui disparaît au bout de  $0.2 \text{ s}$  lorsque les forces de frottement et de gravité s'équilibrent.

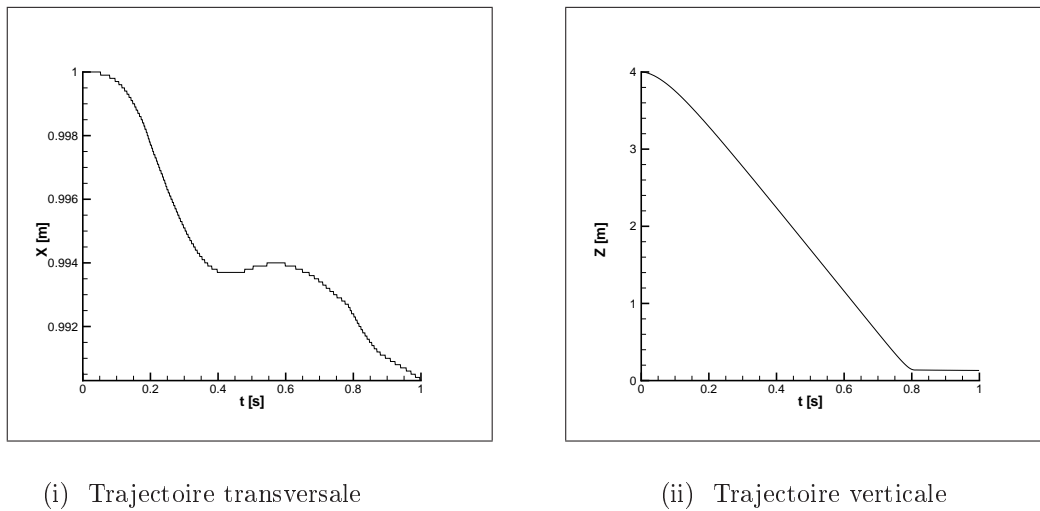
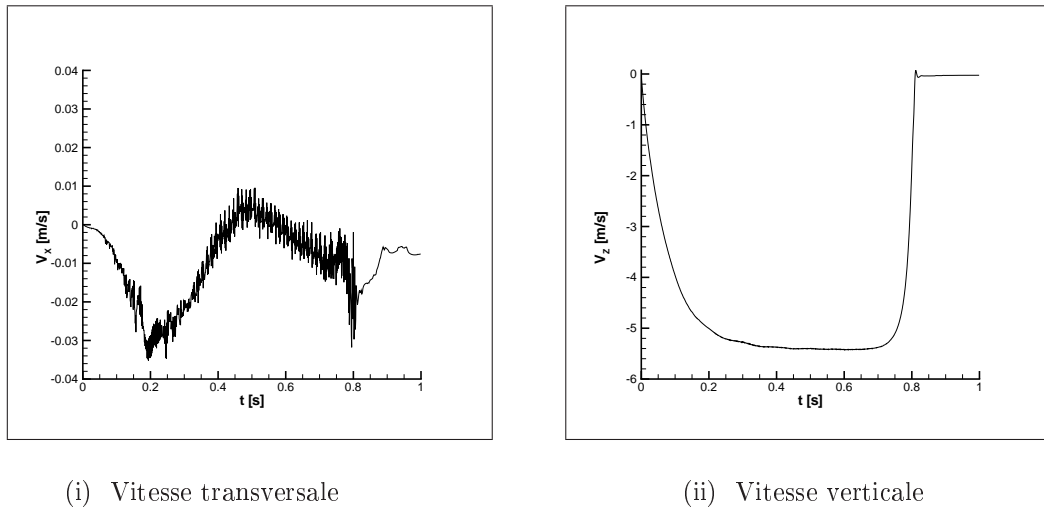


Figure III.10 : *Evolution de la position de la particule (Maillage  $200 \times 600$ , Pas de temps :  $10^{-3} \text{ s}$ , Méthode lagrangien variable avec  $K = 100$ )*

### Choix de la méthode d'advection

Afin de tester le transport lagrangien des particules, nous avons comparé les résultats obtenus avec la méthode d'advection eulérienne de type VOF et l'advection VOF avec suivi lagrangien. La figure III.12i représente les lignes de courant à l'instant  $t = 0.7 \text{ s}$  obtenues avec les deux types de transport. Nous pouvons constater que nous retrouvons le même champ avec de très légères différences. Dans cette étude, nous avons utilisé les



(i) Vitesse transversale

(ii) Vitesse verticale

Figure III.11 : *Evolution de la vitesse de la particule (Maillage  $200 \times 600$ , Pas de temps :  $10^{-3}$ s, Méthode lagrangien variable avec  $K = 100$ )*

mêmes paramètres de pénalisation, à savoir la pénalisation par le lagrangien variable en choisissant  $K = 100$  dans le but de sélectionner automatiquement les valeurs des paramètres de pénalisation. En examinant attentivement la représentation de l'interface (figure III.12ii), nous voyons que les différences sur la position de la particule sont de l'ordre de la maille. De plus, on observe une faible déformation dissymétrique amont/aval de la particule lorsque l'advection est effectuée par la méthode VOF. Cette modification de la position de l'interface entraîne une modification de la vitesse de chute de la particule comme l'illustre la figure III.13. Néanmoins, les deux méthodes aboutissent à des résultats en très bon accord avec les résultats de Wan and Turek (2005). Nous avons utilisé un maillage de  $100 \times 300$  (ce qui représente 12 mailles dans le diamètre de la particule). Pour ce type de résolution, les deux méthodes sont équivalentes et donnent des résultats similaires. Nous allons voir ultérieurement que pour des résolutions inférieures, le choix de la méthode VOF affecte grandement les résultats. Ceci est dû à l'insuffisance du nombre de points pour représenter correctement la forme de la particule.

### Imposition du caractère solide de la particule et de l'incompressibilité du fluide

Comme nous l'avons remarqué précédemment, le transport de la particule effectué avec une méthode de type VOF ou par une approche lagrangienne n'affecte que très peu les résultats si la résolution du maillage est suffisante. Quel que soit le type de méthode d'ad-

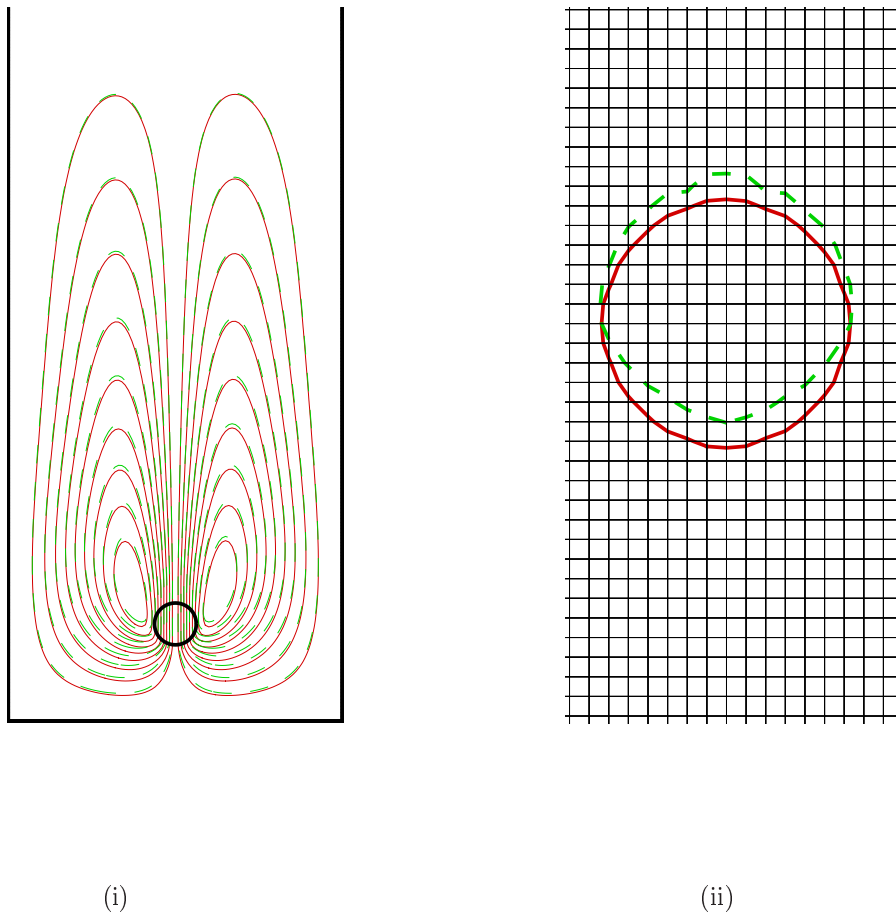


Figure III.12 : *Comparaison entre la méthode VOF (Trait pointillé vert) et la méthode lagrangienne (Trait plein rouge) pour  $t = 0.7s$  : (i) Lignes de courant, (ii) Interface fluide/solide représentée par  $C = 0.5$*

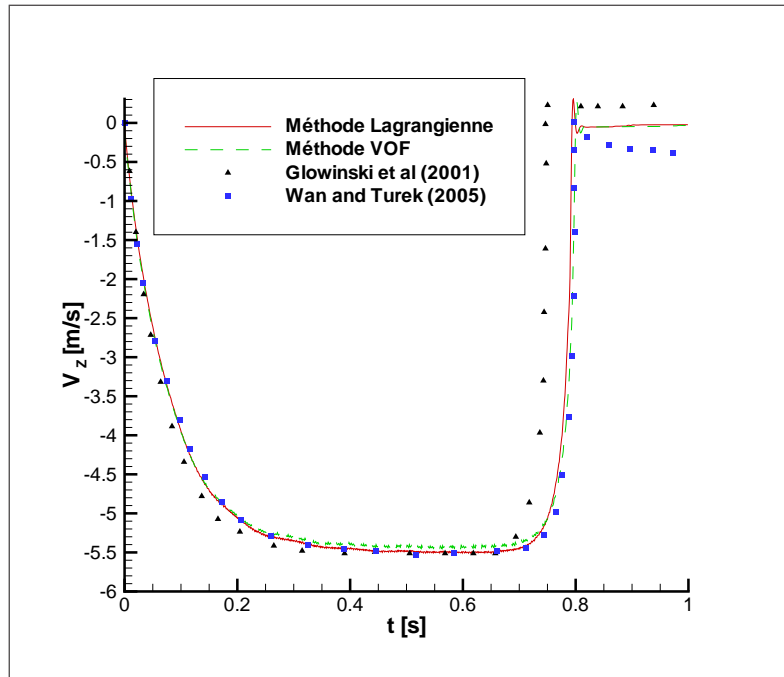


Figure III.13 : *Vitesse verticale pour 2 types de méthodes de transport*

vection employé, la difficulté réside dans l'imposition des contraintes : l'incompressibilité pour l'écoulement du fluide et la non déformation pour le solide. Pour réaliser cette pénalisation, nous utilisons la méthode du lagrangien augmenté (généralisée à la contrainte de non déformation) associée à un algorithme itératif de type Uzawa (cf III.2.3). Le choix des paramètres de pénalisation (valeur des viscosités associées à chaque contrainte) est crucial car il conditionne la bonne représentation du phénomène physique. Dans cette section, nous allons nous attacher à déterminer les valeurs des paramètres à appliquer pour réaliser la pénalisation.

**Lagrangien Fixe** Nous allons tout d'abord nous intéresser à la pénalisation de la contrainte d'incompressibilité par l'intermédiaire du paramètre de pénalisation  $\lambda$ . Afin de tester son influence sur la pénalisation de l'incompressibilité, nous avons fait varier sa valeur sur une plage allant de 1 à  $10^6 Pa.s$ . La viscosité  $\mu_s$  du solide est fixée à  $10^3 Pa.s$ . Cette valeur est suffisamment importante pour conserver la non déformation de la particule. En outre, elle ne bloque pas le mouvement de la particule. Les résultats sont présentés sur les figures III.14 et III.15. On constate que nous retrouvons l'allure générale des courbes de mise en vitesse obtenues par les autres équipes de recherche. Cependant,

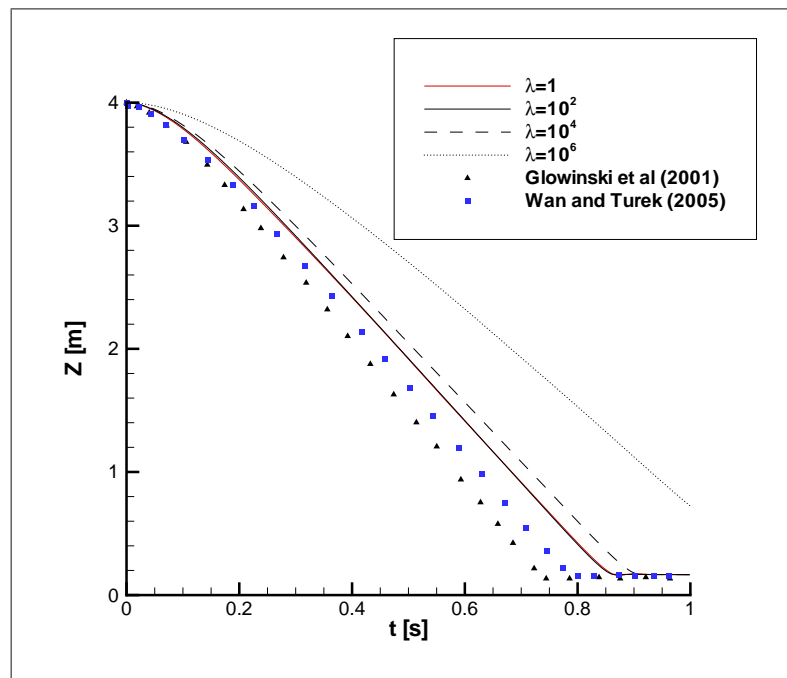


Figure III.14 : *Trajectoire verticale; Lagrangien fixe avec  $\mu_s = 10^3$  Pa.s*

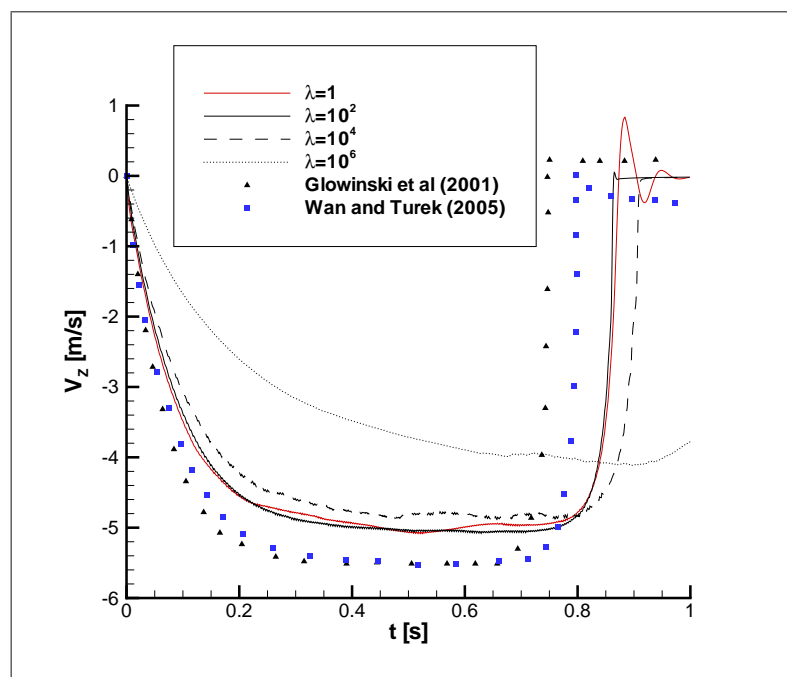


Figure III.15 : *Vitesse verticale; Lagrangien fixe avec  $\mu_s = 10^3$  Pa.s*

nous n'obtenons pas la vitesse de sédimentation correcte qu'elle que soit la configuration. Fixer la valeur de la viscosité de compression  $\lambda$  (le paramètre de pénalisation pour l'incompressibilité) tend à ralentir la particule. En fait, plus on augmente la valeur de  $\lambda$ , plus on favorise la résolution de l'équation de continuité  $\nabla \cdot \vec{u} = 0$ , au détriment de la résolution de l'équation de conservation de la quantité de mouvement. Cela se traduit par un mauvais champ de vitesses dans le sens où son intensité est sous-estimée. Pour obtenir une solution convenable, il faut maintenir le terme  $\lambda \nabla \cdot \vec{u}$  de l'équation (III.23) à une valeur 10 à 1000 fois plus grande que les autres termes de (III.23). Dans le cas présent, le meilleur compromis est donc de choisir  $\lambda = 10^2$  même si la solution numérique est éloignée de celle de référence. En effet, au-delà, la conservation de la quantité de mouvement n'est pas assurée alors que, a contrario, une valeur inférieure conduit à une mauvaise résolution de la divergence. Nous utiliserons donc cette valeur dans la suite pour tester les autres paramètres de pénalisation. En second lieu, nous devons assurer la non-déformation de la particule. A cette fin, nous devons adapter la valeur de la viscosité du solide. Pour déterminer la valeur adéquate, nous avons effectué une étude paramétrique sur la viscosité  $\mu_s$  du solide. La plage d'étude s'étend de  $10^{-1}$  à  $10^6 Pa.s$ . Les divers résultats sont présentés sur les figure III.16 et III.17. Pour les plus fortes valeurs de viscosité, la particule est quasiment immobile alors qu'au contraire, pour des valeurs de viscosité proches de celle du fluide, la particule se déforme. Cette aberration n'est cependant pas visible lorsque nous utilisons le transport lagrangien. En effet, nous reconstruisons la fonction couleur à partir de la position du centre du solide de telle sorte que l'on obtienne un disque. Ainsi, à chaque itération on bâtit une nouvelle particule. Dans le but de visualiser le changement de forme de la particule, nous avons effectué une simulation identique en utilisant le transport de la sphère par la méthode VOF. Après  $0.1s$ , on observe clairement la déformation du solide bien que le champ de vitesse soit proche de celui obtenu par l'approche lagrangienne (voir figure III.18). La déformation est également visible à travers la courbe de position de la particule. En effet, sur la figure III.16 représentant la trajectoire verticale, on constate que la position devient négative. Cette situation incohérente s'explique par le fait que nous résolvons l'équation de Navier-Stokes classique dans la particule. Comme la valeur de la viscosité est faible, tout se passe comme si nous transportions une goutte de fluide très visqueux. Le champ de vitesse que nous considérons pour définir la vitesse de la particule est alors celui d'un fluide. Nous redéfinissons ensuite arbitrairement la fonction couleur à partir de la nouvelle position du centre de la particule qui peut, à ce moment là, être partiellement en dehors du domaine. De la même manière, la vitesse de la particule que



nous calculons est erronée comme l'indique la figure III.17 (courbe pour  $\mu_s = 10^{-1} Pa.s$ ). Il ne devrait pas se produire de ralentissement de la particule à l'approche de la paroi.

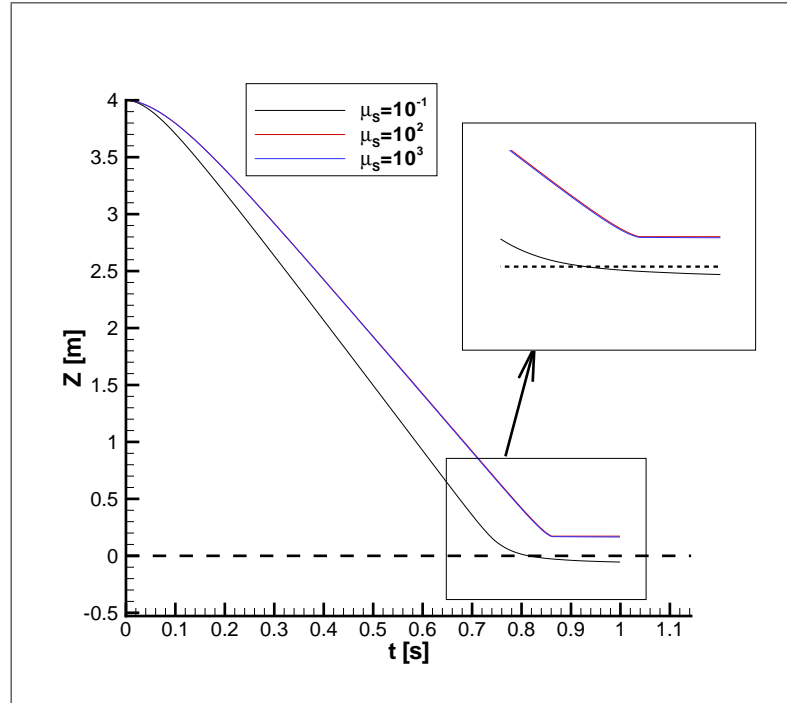


Figure III.16 : *Trajectoire verticale; Lagrangien fixe avec  $\lambda_f = 10^2 Pa.s$ : Visualisation des trajectoires de la particule pour différents  $\mu_s$*

**Lagrangien variable** Ainsi que nous venons de le voir, la caractérisation des viscosités,  $\lambda$  et  $\mu_s$ , relève plutôt de l'empirisme. Leur détermination est d'autant plus complexe que l'est le phénomène à étudier. Aussi, une manière de remédier à ce problème est de les fixer automatiquement en fonction des paramètres physiques et de calcul. La procédure de calcul des viscosités a été décrite précédemment : les viscosités sont obtenues par la résolution de l'équation (III.25) pour le solide et de l'équation (III.24) pour le fluide. Cependant, nous sommes tout de même tenus de définir la valeur du coefficient multiplicatif  $K$  dans les deux cas. Nous avons reporté sur la figure III.19 l'étude paramétrique correspondante. Nous notons qu'en dépit du calcul automatique des viscosités, il est toujours nécessaire de fixer judicieusement le coefficient  $K$ . En effet, ce paramètre permet d'imposer l'ordre de grandeur des viscosités  $\lambda$  dans le fluide et  $\kappa, \eta, \zeta$  pour le solide. Nous aboutissons aux mêmes observations déjà évoquées lors de l'étude menée avec le lagrangien fixe. En effet, pour de faibles valeurs de  $K$  (inférieure à 10), la pénalisation est insuffisante. Nous

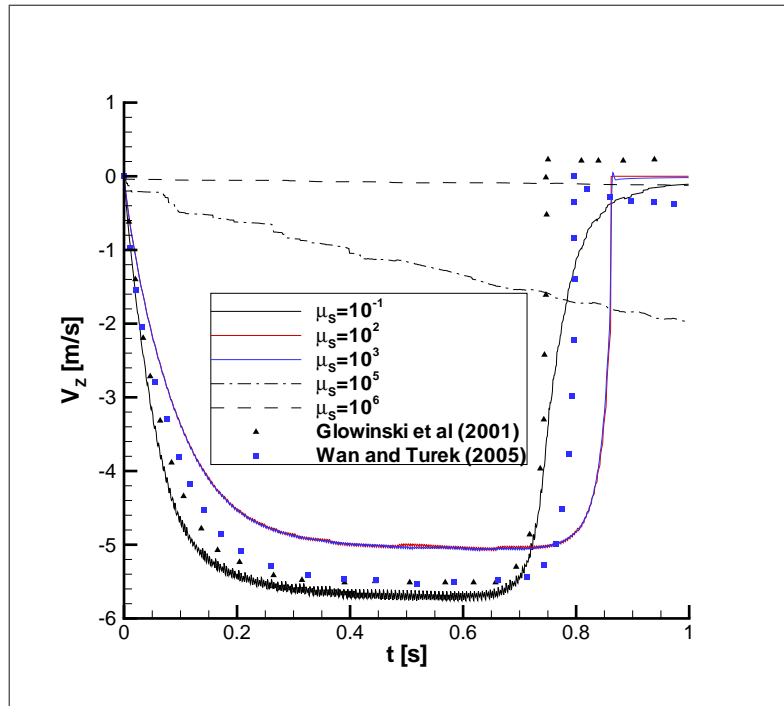


Figure III.17 : *Vitesse verticale; Lagrangien fixe avec  $\lambda_f = 10^2 Pa.s$ : Visualisation de la vitesse de sédimentation de la particule pour différents  $\mu_s$*

constatons, par exemple, que pour  $K = 1$  la particule "voit" très tôt la paroi inférieure. La vitesse de la particule correspondant à ce cas présente un ralentissement très progressif à l'approche de la paroi, alors que cette diminution de vitesse doit être plus brutale. Nous nous retrouvons alors dans la situation déjà évoquée pour le lagrangien fixe. Les mêmes observations sont valables lorsque le facteur  $K$  est trop élevé ( $K \geq 10^3$ ): la particule est bloquée dans son mouvement ce qui bride sa vitesse. Toutefois, les résultats que nous obtenons grâce à la méthode du lagrangien variable, avec  $10 \leq K \leq 1000$ , sont nettement plus cohérents avec les résultats présentées par Wan et Turek.

**Pénalisation totale** Grâce à l'automatisation du calcul des viscosités, nous sommes parvenus à équilibrer correctement la résolution des équations de Navier-Stokes et la réalisation des contraintes d'incompressibilité et de non déformation. Cependant, la solution qui en résulte ne vérifie pas  $\nabla \cdot \vec{u} = 0$  dans le fluide et  $\bar{\bar{D}} = 0$  dans le solide. Le résidu que nous calculons en utilisant le solveur itératif est de l'ordre de  $10^{-6}$ . Cette valeur est définie comme l'écart entre les solutions obtenues après deux itérations consécutives. Cette grandeur est représentative de la qualité de la solution de l'équation de Navier-Stokes.

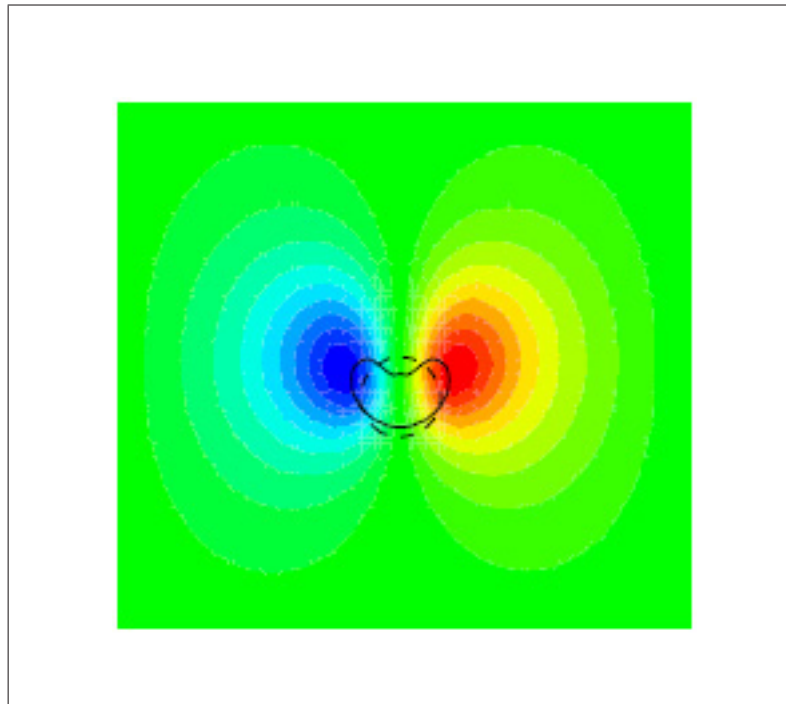


Figure III.18 : *Visualisation de la particule et des lignes de courant à  $t = 0.1s$  pour  $\mu_s = 10^{-1} Pa.s$  et  $\lambda_f = 10^2 Pa.s$  : méthode VOF (Trait plein), méthode lagrangienne (Trait pointillé)*

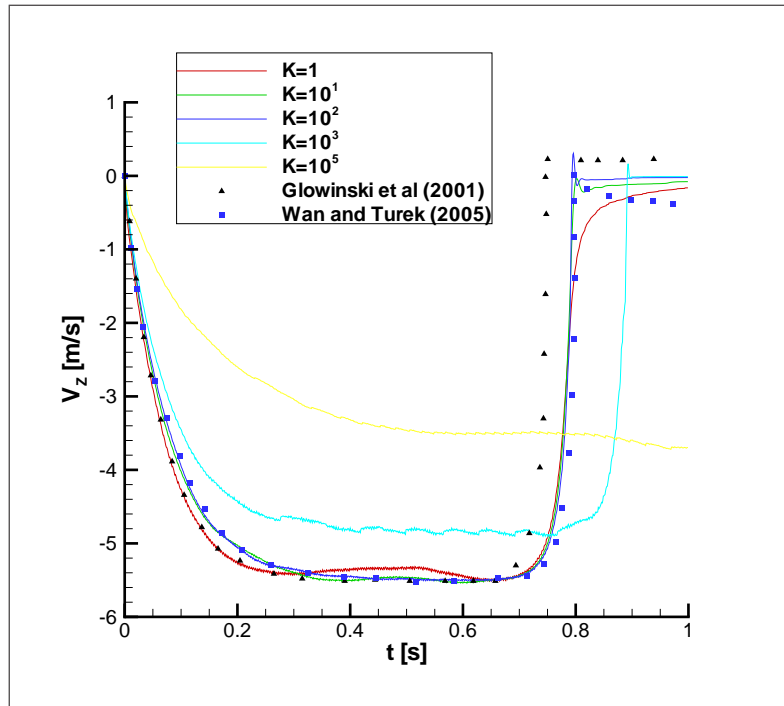


Figure III.19 : Lagrangien variable: vitesse verticale pour différentes valeurs de  $K$

Pour estimer la réalisation de l'incompressibilité du fluide, nous avons à notre disposition la norme de la divergence de la vitesse. Dans le cas du traitement de la pénalisation par la méthode du lagrangien variable, le niveau de divergence est proche de  $1.10^{-4}$ . Un moyen d'assurer, dans tous les cas, la mise en oeuvre de la pénalisation est le recours à une résolution directe du système d'équations.

Cette méthode consiste à résoudre la matrice du système linéaire résultant de la discrétisation des équations du problème, du type  $\bar{A}\vec{x} = \vec{b}$ , en inversant directement la matrice  $\bar{A}$ . L'avantage principal est qu'il n'y a aucune approximation lors de l'inversion de la matrice. En effet, lors de la résolution par les méthodes itératives, l'équation initiale est transformée en une série d'équations équivalentes théoriquement, mais qui accumulent les approximations au cours de chaque itération. Ainsi, on peut considérer la solution obtenue par la méthode directe comme la solution exacte à notre problème puisqu'elle prend en compte tous les termes de la matrice. Nous avons utilisé le solveur direct fourni par Demmel et al. (1999). Les résultats des calculs acquis à l'aide de la méthode directe sont présentés sur les figures III.20, III.21, III.22 et III.23 pour diverses valeurs de  $\lambda$  et  $\mu_s$ . Nous retrouvons les effets évoqués précédemment. Cependant, le choix des paramètres est plus aisé. En effet, le recours à la méthode directe permet d'imposer très fortement

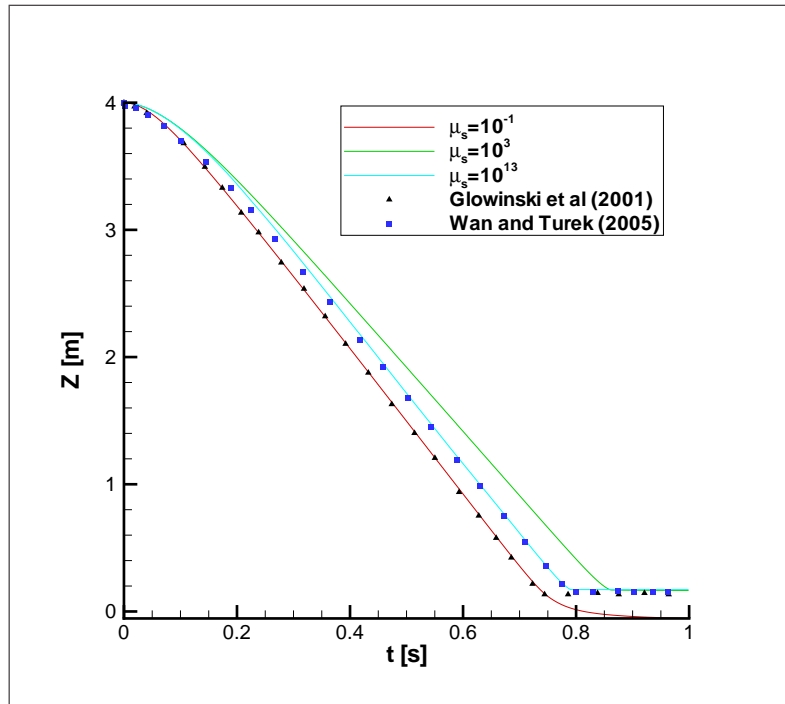


Figure III.20 : Trajectoire verticale; Pénalisation totale : visualisation de la vitesse de la particule pour différents  $\mu_s$  avec  $\lambda = 10^{10}$

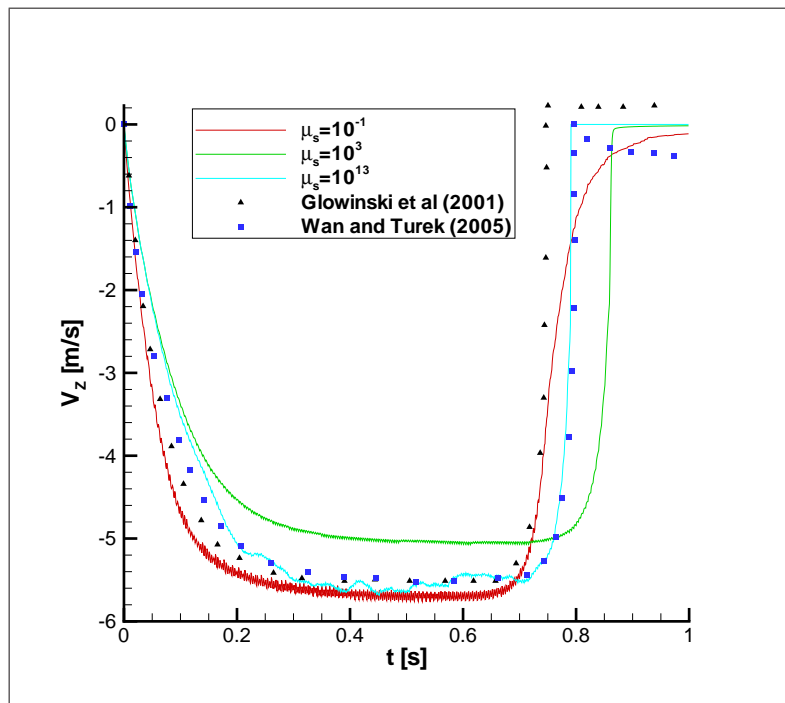


Figure III.21 : Vitesse verticale; Pénalisation totale : visualisation de la vitesse de la particule pour différents  $\mu_s$  avec  $\lambda = 10^{10}$

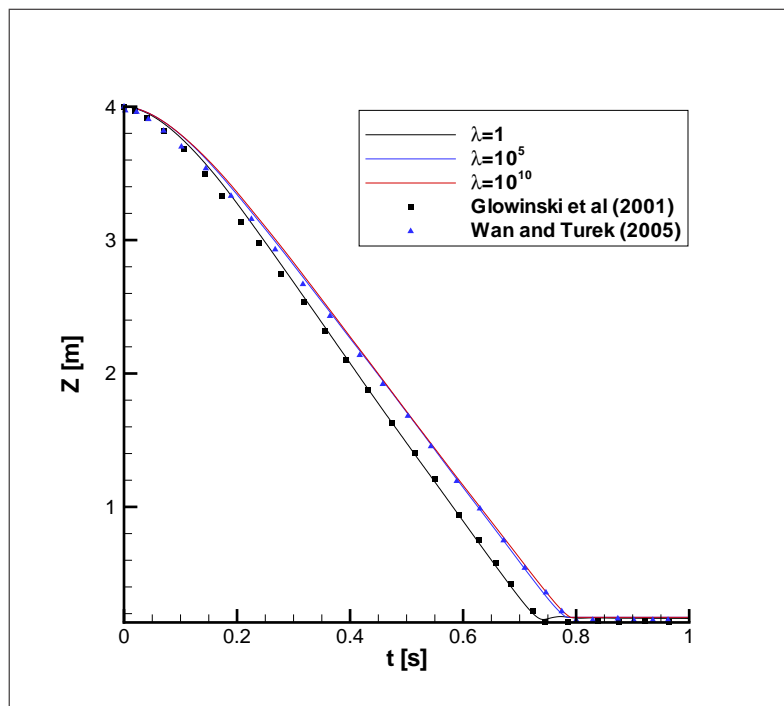


Figure III.22 : Trajectoire verticale; Pénalisation totale : visualisation de la vitesse de la particule pour différents  $\lambda$  avec  $\mu_s = 10^{13} \text{ Pa.s}$

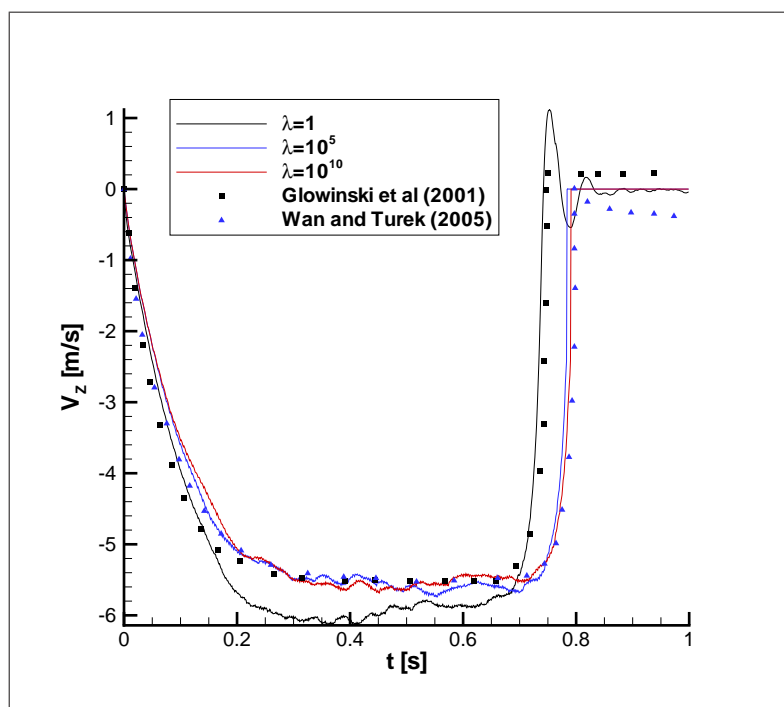


Figure III.23 : Vitesse verticale; Pénalisation totale : visualisation de la vitesse de la particule pour différents  $\lambda$  avec  $\mu_s = 10^{13} \text{ Pa.s}$

la contrainte sans dégrader la solution que l'on obtient. Pour obtenir la non-déformation, nous avons donc fixé la viscosité  $\mu_s$  à  $10^{13}$  *Pa.s* ce qui nous permet de conserver un niveau de non déformation de l'ordre de  $10^{-13}$  tout au long du calcul. De même, les niveaux de divergence et du résidu sont très faibles. Ils valent respectivement  $10^{-11}$  et  $10^{-13}$ . Dans ce cas, on appelle résidu la norme de  $\bar{A}\bar{x}^* - \bar{b}$  où  $\bar{x}^*$  est la solution fournie par la méthode directe. Cela traduit à la fois une bonne résolution de la contrainte de divergence nulle et des équations de Navier-Stokes. Néanmoins, nous devons prendre quelques précautions dans le choix de  $\lambda$  et  $\mu_s$  lors de l'utilisation de la méthode directe. Afin d'étudier la sensibilité des paramètres  $\lambda$  et  $\mu_s$ , nous les avons fait varier dans des gammes importantes. Sur les figures III.20 et III.21, nous avons représenté l'allure des trajectoires et des vitesses verticales pour plusieurs valeurs de viscosités  $\mu_s$ . Lorsque la viscosité est faible ( $10^{-1}$  *Pa.s*), la déformation est prononcée, ce qui fausse la résolution. En revanche, pour une plage de valeurs de  $\mu_s$  allant de  $10^3$  à  $10^{12}$  *Pa.s*, le comportement de la solution est correct mais nous ne retrouvons pas la vitesse de sédimentation attendue. Pour obtenir une vitesse juste, nous devons imposer la viscosité à  $10^{13}$  *Pa.s*. Au delà de cette intensité, nous atteignons les limites du solveur direct. Le calcul ne converge pas. Une étude similaire a été menée sur la détermination de la viscosité  $\lambda$  afin de réaliser l'incompressibilité de l'écoulement. Nous avons balayé un intervalle commençant à 1 et se terminant à  $10^{15}$  (voir figure III.23). Hormis pour  $\lambda = 1$ , nous constatons que dès  $\lambda = 10^3$ , nous avons une bonne représentation de la vitesse de sédimentation. Toutefois, nous parvenons également aux limites du solveur si nous maintenons la viscosité de compression à une valeur trop forte. Pour  $\lambda > 10^{13}$  le calcul diverge.

**Conclusion** Cette étude a mis en exergue l'importance du choix des paramètres de pénalisation. En effet, quelle que soit la méthode de pénalisation adoptée, un mauvais choix des viscosités fausse totalement la simulation. La méthode du lagrangien telle qu'elle fut utilisée par Fortin et Glowinski, avec des paramètres fixes au cours du temps et en chaque point du maillage, nécessite une bonne connaissance du calcul pour imposer judicieusement les valeurs. De plus, elle est mal appropriée aux écoulements polyphasiques. Nous avons amélioré la gestion des viscosités en faisant varier leurs valeurs au cours de la simulation. De cette façon, nous conservons en permanence un bon compromis entre la réalisation de la contrainte et la résolution des équations du mouvement. L'utilisation d'une méthode de résolution directe s'avère efficace pour résoudre correctement les équations de Navier-Stokes et pour imposer les conditions d'incompressibilité de l'écoulement et de

non-déformation de la particule. Néanmoins, l'inconvénient est que cette méthode requiert des ressources en mémoire très importantes même pour des maillages bi-dimensionnels. Il est donc exclu de l'utiliser sur des cas en trois dimensions pour le moment. L'utilisation de solveurs parallèles directs permettra dans l'avenir de surmonter cette difficulté.

### III.3.2 Sédimentation d'une particule entre deux parois parallèles dans le régime de Stokes : effet du confinement

Considérons à présent une particule solide lâchée sans vitesse initiale dans un cylindre rempli d'un liquide visqueux. Les rayons de la particule et du cylindre sont respectivement  $R_p$  et  $R_c$ . Sous l'action de la gravité, la particule est instantanément mise en mouvement et tombe dans le fluide visqueux. Elle atteint, après un certain temps, une vitesse permanente dite vitesse de chute ou de sédimentation. Cette vitesse  $\vec{u}_{ts}$  est obtenue lorsque les forces de gravité  $\vec{F}_g$  sont compensées par la force de traînée  $\vec{F}_r$ .  $\vec{F}_g$  s'exprime selon :

$$\vec{F}_g = (\rho_p - \rho_f)\mathcal{V}\vec{g} \quad (\text{III.30})$$

avec

- $\rho_f$  la masse volumique du fluide et  $\rho_p$  la masse volumique de la particule
- $\mathcal{V} = \frac{4}{3}\pi R_p^3$  est le volume de la particule
- $\vec{g}$  est l'accélération de la pesanteur

Cette formule tient compte de la poussée d'Archimède. L'expression de la force de traînée d'une sphère dans un écoulement visqueux est donnée par la loi de Stokes en milieu infini.

$$\vec{F}_r = 6\pi\mu R_p\vec{u}_{ts} \quad (\text{III.31})$$

où  $\mu$  est la viscosité du fluide.

A l'équilibre, l'égalité  $\vec{F}_g = \vec{F}_r$  permet de déduire l'expression théorique de la vitesse de sédimentation qui est :

$$\vec{u}_{ts} = \frac{2}{9} \frac{(\rho_p - \rho_f)}{\mu} R_p^2 \vec{g} \quad (\text{III.32})$$

Cette vitesse, dont la formule est attribuée à Stokes, n'est cependant valable qu'en milieu infini i.e. pour des valeurs grandes de  $R_c$  ( $R_c \rightarrow +\infty$ ). Pour tenir compte du confinement, que nous mesurons grâce au coefficient de confinement  $C_p = \frac{R_p}{R_c}$ , nous devons



introduire un coefficient de correction  $C_w$  dans l'expression de  $\vec{u}_{ts}$  donnée par (III.32). Nous avons donc :

$$\vec{u}_{ts} = \frac{2(\rho_p - \rho_f)}{9\mu C_w} R_p^2 \vec{g} \quad (\text{III.33})$$

Pour des valeurs de  $C_p$  proche de 1, le coefficient  $C_w$  tend vers  $+\infty$ . La vitesse de la particule est alors nulle. Cela signifie que les effets de paroi, qui se traduisent par une augmentation du frottement, sont si importants qu'ils empêchent le mouvement de la sphère (Guyon et al. (1991)). Au contraire, pour  $C_p \rightarrow +\infty$ , on tend vers le milieu infini puisque le rayon de la particule devient très petit devant celui du cylindre. Dans ce cas,  $C_w$  tend vers 1 car la particule n'est plus perturbée, ou très peu, par la présence des parois. Plusieurs études furent menées pour déterminer la valeur du coefficient de paroi. Haberman et Sayre proposèrent une solution approchée (Happel and Brenner (1983)) :

$$C_w = \frac{1 - 0.75857C_p^5}{1 - 2.1050C_p + 2.0865C_p^3 + 0.72603C_p^6} \quad (\text{III.34})$$

### Méthodologie numérique

L'étude a été menée en utilisant la méthode de pénalisation tensorielle décrite précédemment. Pour cela, nous avons simulé le comportement de la particule solide en affectant une valeur importante aux viscosités de compression, de cisaillement et de rotation. La gestion de l'intensité des viscosités est assurée par la méthode dite de lagrangien variable. Le domaine de calcul est présenté sur la figure III.24. Il s'agit d'un pavé de 2.5 m de hauteur et sa base carré mesure 1 m de côté. La particule sédimente dans un cylindre de rayon 50 cm et de hauteur 2.5 m inscrit dans le pavé. La zone située entre le cylindre et les parois du pavé est modélisée par un milieu poreux imperméable (cf figure III.24). Nous avons vu dans le chapitre précédent qu'en faisant tendre la perméabilité  $K$  vers l'infini, nous étions capable d'imposer une zone imperméable dans laquelle les vitesses sont nulles. Nous nous sommes servis de cette propriété dans cette zone solide afin d'obtenir une condition de type paroi (vitesse nulle) sur la surface du cylindre. Le cylindre est rempli d'un fluide visqueux dont les caractéristiques physiques sont :  $\mu_f = 0.2 \text{ Pa.s}$  pour la viscosité dynamique et  $\rho_f = 1 \text{ kg/m}^3$  pour la masse volumique. La particule a, quant à elle, une masse volumique  $\mu_s$  de  $1.02 \text{ kg/m}^3$ .

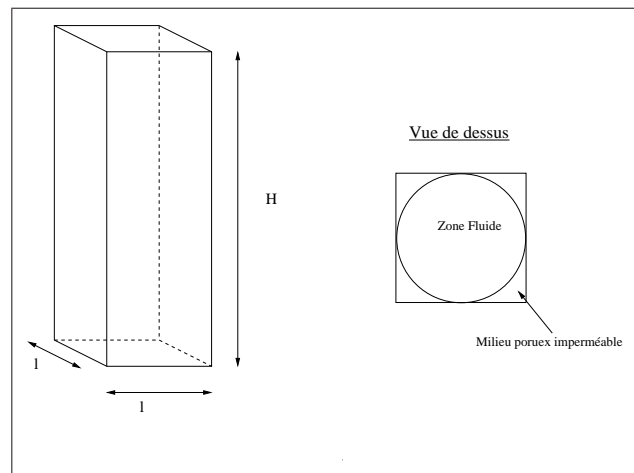


Figure III.24 : *Domaine de calcul*:  $H = 2.5m$ ,  $l = 1m$

## Résultats

Afin d'étudier le comportement de notre modèle vis-à-vis des effets de confinement, nous avons mesuré la vitesse terminale de chute d'une particule isolée dans le cylindre rempli d'un fluide visqueux. En comparant cette vitesse avec celle que la particule devrait atteindre théoriquement dans un milieu infini (obtenu à l'aide de la formule de Stokes III.32), nous déterminons le coefficient de confinement  $C_w$ . Les résultats que nous avons obtenus sont consignés dans le tableau III.2.

Nous avons travaillé avec un diamètre constant du cylindre. Pour faire varier le confinement  $C_p$ , nous avons donc modifié le rayon de la particule. Une grille fixe de  $40 \times 100 \times 40$  a été utilisée et le pas de temps est fixé à  $10^{-3}s$ . Le nombre de Reynolds  $Re$  a été calculé à partir de la vitesse de chute  $\vec{u}_{ts}$  de la particule. Nous sommes bien dans les hypothèses de Stokes puisque dans tous les cas de figure,  $Re$  est inférieur à  $6 \cdot 10^{-3}$ . L'évolution de la vitesse en fonction du confinement a été représentée sur la figure III.25. Nous pouvons distinguer deux zones où les forces de viscosité et les forces de gravité agissent à tour de rôle. L'effet des parois devient prépondérant au delà du confinement 0.4. Pour  $C_p < 0.4$  la vitesse de chute augmente quand le rayon de la sphère augmente. Cela signifie que les forces liées à la gravité pilotent la sédimentation. Puis, lorsque  $C_p > 0.4$ , les forces visqueuses dues à la proximité des parois prennent le dessus et tendent à ralentir le mouvement de la particule.

Nous avons reporté sur la figure III.26 l'évolution de l'erreur par rapport à la solution théorique proposée par Happel et Brenner en fonction du confinement. Nous constatons

Confinement $C_p$	Coefficient de correction numérique	Coefficient de correction théorique	$Re = \frac{\rho_f 2R_p u_{ts}}{\mu_f}$ $\times 10^{-3}$
0.1	1.390	1.263	0.196
0.2	1.708	1.68	1.28
0.3	2.403	2.371	3.06
0.4	3.678	3.596	4.74
0.5	6.085	5.97	5.60
0.6	11.269	11.135	5.22
0.7	24.590	24.955	3.80
0.8	70.223	73.555	1.99
0.9	404.258	-	0.491

Tableau III.2 : Comparaison du coefficient de correction

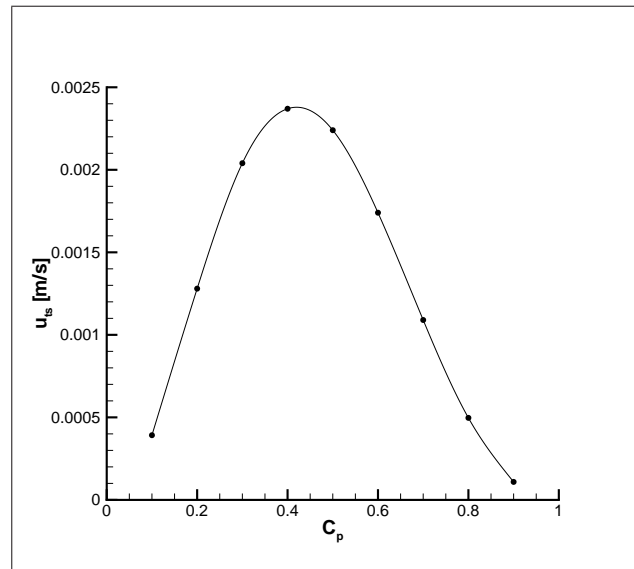


Figure III.25 : Evolution de la vitesse de sédimentation en fonction du confinement

que notre modèle décrit convenablement les effets de parois en dehors des confinements extrêmes. Ces erreurs sont principalement dues à une mauvaise résolution du maillage. Pour les faibles confinements, nous disposons de peu de mailles pour représenter la particule. De plus, nous nous situons dans la zone où les effets de gravité imposent la dynamique à la particule. Ainsi, nous ne retrouvons pas la vitesse de chute théorique avec assez de précision. Dans le cas des forts confinements, nous avons cette fois suffisamment de mailles pour représenter la particule, mais l'interstice entre la paroi et la particule est mal pris en compte. Les forces de frottement visqueux à la paroi sont reproduites approximativement.

**Etude en maillage** Nous nous intéressons maintenant à l'effet de la méthode de transport de particule sur les solutions en fonction de la résolution du maillage. Le tableau III.3 expose l'erreur relative sur le coefficient de correction  $C_w$  par rapport à la solution théorique pour un faible confinement ( $C_p = 0.1$ ). Pour le maillage le plus grossier, nous n'avons pas de résultat car la particule ne contient pas assez de points pour être représentée. L'erreur diminue notablement lorsque la résolution est suffisante. Nous avons également calculé l'erreur que nous commettons sur  $C_w$  dans le cas d'un fort confinement. Les résultats sont proposés dans le tableau III.4 pour un confinement de 0.8. Nous n'avons pas de résultat pour le maillage le plus grossier car le nombre de mailles dans la zone fluide comprise entre la paroi et la particule est trop faible. Tout se passe comme si la particule était collée à la paroi. L'apport de la méthode lagrangienne apparaît clairement quant à la représentation des phénomènes physiques. Notons toutefois que pour des configurations où le nombre de mailles est suffisant, les deux méthodes offrent des résultats comparables. Nous avons, par exemple, tracé l'évolution de l'erreur sur  $C_w$  pour un confinement intermédiaire égal à 0.6 (cf figure III.27). L'étude en maillage montre que l'ordre de convergence des deux méthodes d'advection est similaire (proche de l'ordre 1). Néanmoins, les niveaux d'erreur sont tout de même inférieurs avec la méthode de transport lagrangienne. Ce résultat concorde avec les observations du chapitre II. La particule est toujours mieux décrite dès lors que nous reconstruisons la fonction couleur à partir de la surface analytique.

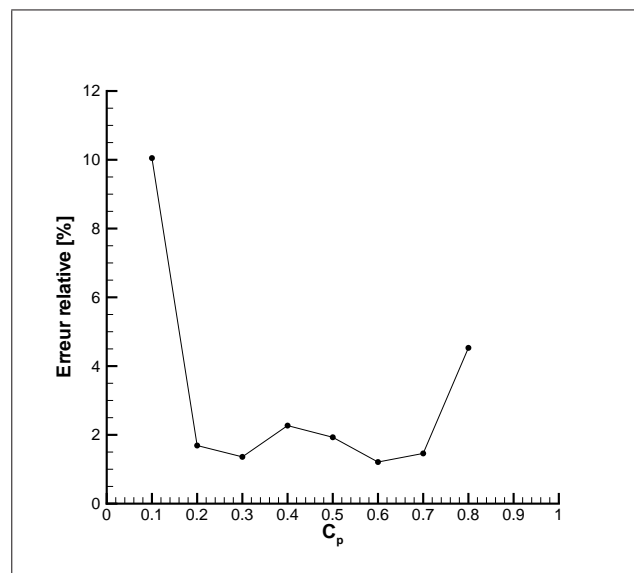
## Conclusion

Nous avons vu dans ce paragraphe que les forces de lubrification étaient pleinement prises en compte par notre modèle de suivi eulérien/lagrangien des particules. Si le

Maillage	Méthode VOF	Méthode Lagrangienne
10x25x10	-	-
20x50x20	41.69	25
40x100x40	10.05	6.15

Tableau III.3 : *Erreur relative sur  $C_w$  en pourcentage pour trois maillages pour  $C_p = 0.1$* 

Maillage	Méthode VOF	Méthode Lagrangienne
10x25x10	-	-
20x50x20	651	13
40x100x40	12	4

Tableau III.4 : *Erreur relative sur  $C_w$  en pourcentage pour deux maillages pour  $C_p = 0.8$* Figure III.26 : *Evolution de l'erreur en fonction du confinement pour un maillage  $40 \times 100 \times 40$*

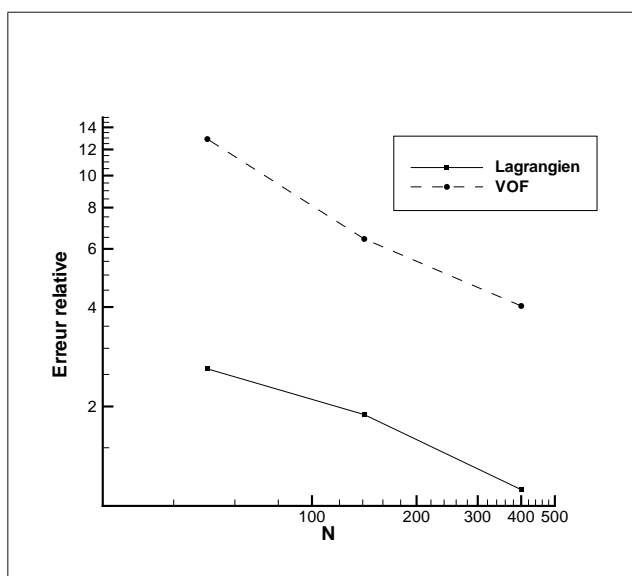


Figure III.27 : *Etude de la convergence en maillage pour  $C_p = 0.6$ :  $10 \times 25 \times 10$ ,  $20 \times 50 \times 20$  et  $40 \times 100 \times 40$  ( $N$  est le nombre de points)*

maillage est suffisamment fin, il n'est pas nécessaire d'introduire de modèle physique pour empêcher le contact des particules avec les parois ou entre-elles. Cependant, comme toute simulation numérique, la solution que nous proposons n'est en mesure de représenter que les phénomènes dont la taille caractéristique est supérieure au pas de la grille. En ce qui concerne la lubrification, même en utilisant un maillage grossier, l'allure générale de la force de lubrification est reproduite.

### III.3.3 Sédimentation d'un disque à un nombre de Reynolds élevé entre deux parois parallèles

L'étude de la sédimentation d'un disque à un nombre de Reynolds de 110 entre deux plans parallèles a été entreprise. Cette configuration a été tirée des travaux de Ritz and Caltagirone (1999). L'objectif est de mettre en avant l'apport important de la méthode du lagrangien augmenté variable pour traiter un écoulement piloté par les aspects instationnaires.

### Conditions numériques

La configuration de la simulation est très proche de celle mise en place pour l'étude du confinement. La simulation est menée en deux dimensions. Le domaine de calcul est constitué d'une cuve rectangulaire dont les dimensions sont : la hauteur  $H$  est de 10 *cm* et sa largeur  $l$  mesure 1 *cm*. Elle est remplie d'un fluide visqueux dont les caractéristiques sont celles de l'eau. Sa viscosité  $\mu_f$  est égale à  $10^{-3}$  *Pa.s* et sa masse volumique  $\rho_f$  est prise égale à 1000 *kg/m<sup>3</sup>*. La particule de rayon 1.25 *mm* est lâchée sans vitesse initiale depuis la position  $x = 8$  *mm* et  $z = 9.5$  *cm*. Sa masse volumique  $\rho_s$  est de 1110 *kg/m<sup>3</sup>*.

### Résultats numériques

Afin d'étudier l'apport de la méthode du lagrangien augmentée dans des simulations à forts nombres de Reynolds, nous avons effectué une comparaison des résultats que nous obtenions avec les trois techniques dont nous disposons : le lagrangien augmenté classique pour résoudre la contrainte d'incompressibilité (la non-déformation du solide étant assurée en fixant sa viscosité à une valeur importante,  $\mu_s = 10^6$  *Pa.s*), le lagrangien augmenté variable à la fois pour réaliser l'incompressibilité de l'écoulement et l'indéformabilité du solide. Enfin la méthode de résolution directe qui assure à l'erreur machine près la réalisation des contraintes sans approximation.

Pour des nombres de Reynolds compris entre 1 et 40, une zone de recirculation se forme derrière le cylindre. La longueur du sillage croît à mesure que le nombre de Reynolds s'agrandit. Au delà d'une valeur voisine de 40, le régime d'écoulement change. La recirculation se détache de la particule. On assiste alors à la création et à la croissance d'un nouveau tourbillon derrière la particule puis à son détachement. Ce phénomène se reproduit périodiquement (cf figure III.28). Dans notre cas, la taille des tourbillons est conditionnée par la largeur de la cuve. Ce lâcher périodique de tourbillons affecte la trajectoire de la particule puisque celle-ci se met à osciller autour de son axe de sédimentation. La figure III.29 donne les trajectoires et les vitesses de la particule au cours du temps.

Ce lâcher périodique de tourbillons est connu sous le nom d'allées de Von Karman. La fréquence  $f$  de ces oscillations est une caractéristique de l'écoulement. Elle peut être définie par le nombre de Strouhal  $St$  dont l'expression est donnée par la formule III.35.

$$St = \frac{fD}{U} \quad (\text{III.35})$$

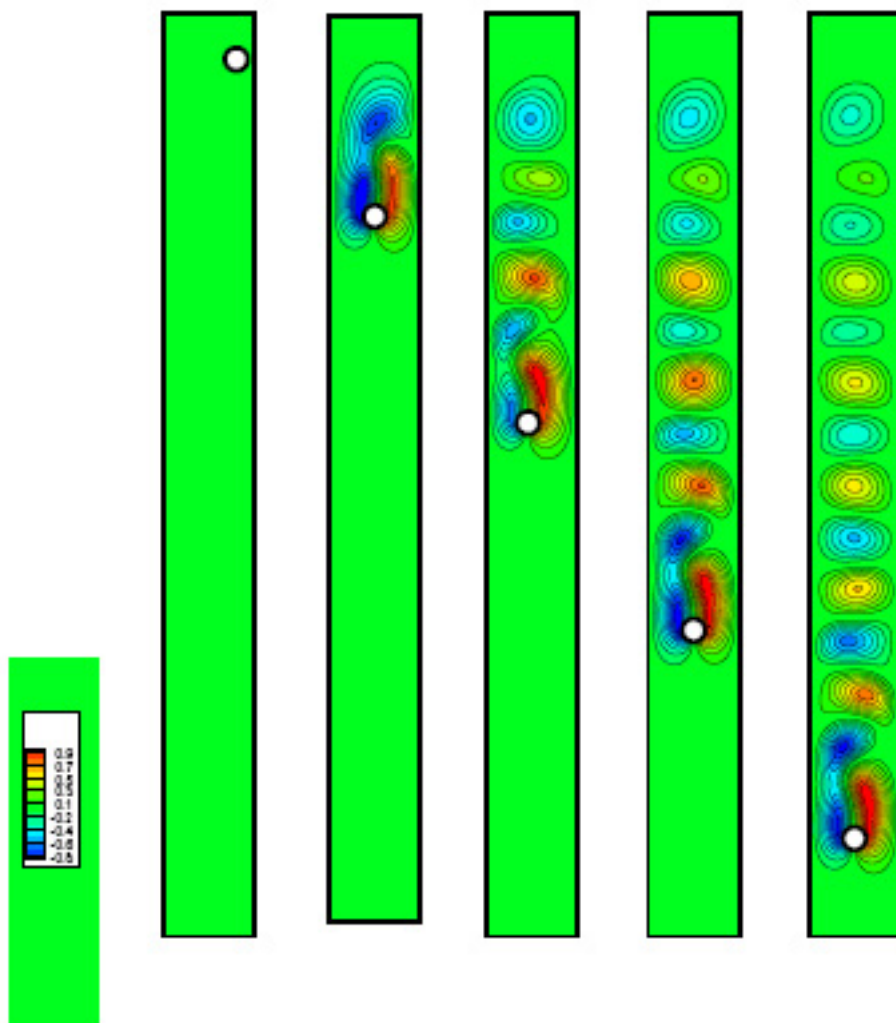
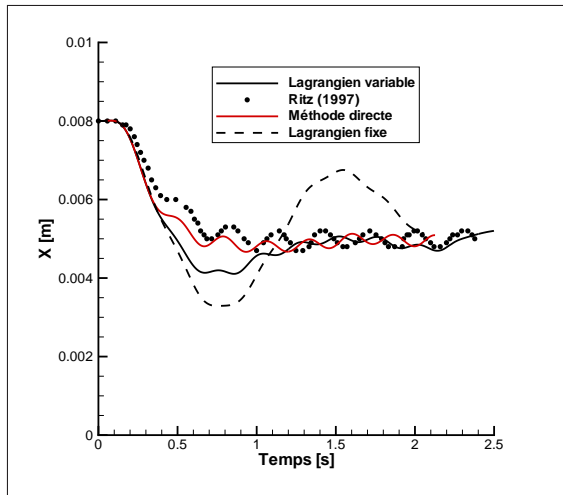
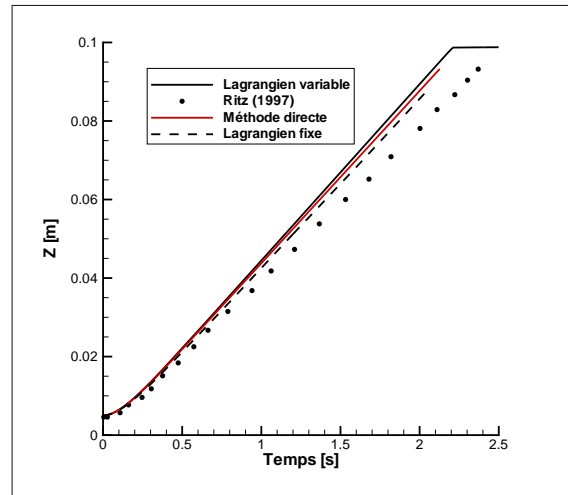


Figure III.28 : *Sédimentation d'un cylindre à  $Re = 110$  (Maillage  $100 \times 1000$ ) :  
Visualisation des lignes de courant pour  $t = 0s$ ,  $t = 0.5s$ ,  $t = 1.5s$  et  $t = 2s$*

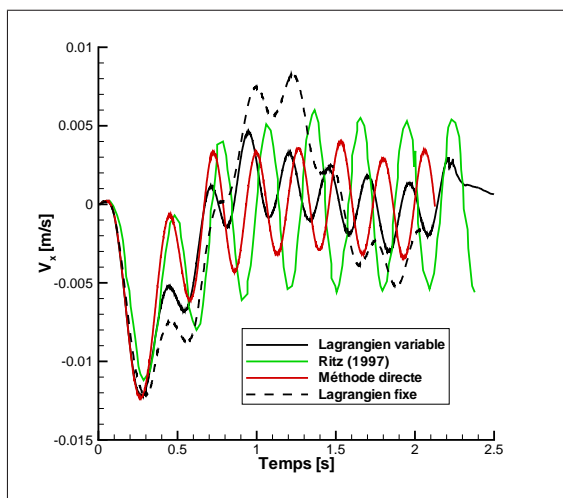




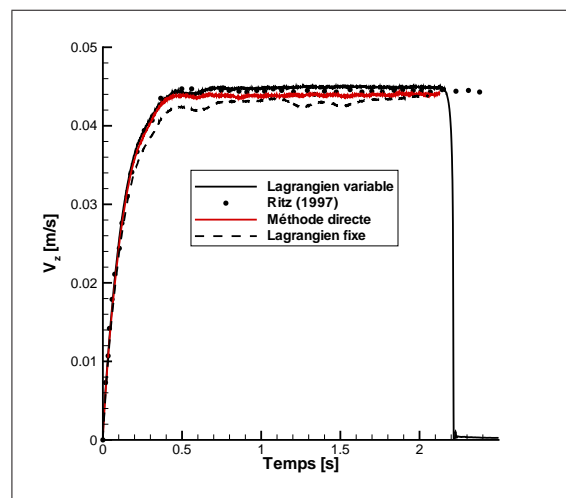
(i)



(ii)



(iii)



(iv)

Figure III.29 : Comparaisons des trajectoires et vitesses de la particule pour  $Re = 110$  (maillage  $100 \times 1000$ )

Méthode	Vitesse	Fréquence	Nombre de Strouhal
Ritz (1997)	0.04405	3.57	0.20
Lagrangien variable	0.04479	3.33	0.186
Directe	0.04384	3.73	0.213
Lagrangien fixe	0.04287	4.00	0.234

Tableau III.5 : *Comparaison des nombres de Strouhal pour un cylindre en sédimentation à  $Re = 110$*

D'après les travaux de Swanson (1970), Ritz (1997) propose une corrélation pour l'évolution du nombre de Strouhal en fonction du nombre de Reynolds. Il est donné par :

$$St = 0.212 \left( 1 - \frac{21.2}{Re} \right) \quad (\text{III.36})$$

Le tableau III.5 regroupe les valeurs du nombre Strouhal que nous obtenons dans les trois configurations de calcul.

La vitesse de sédimentation (composante verticale de la vitesse (cf figure III.29iv)) est très proche dans les trois cas. Par contre on observe une disparité des résultats sur la fréquence des lâchers tourbillonnaires. La formule III.36, théoriquement valable pour un cylindre infini, donne une valeur du nombre de Strouhal égale à 0.17. Nos résultats sont très proches de cette valeur ce qui confirme la bonne tenue de la méthode du lagrangien variable. La méthode du lagrangien fixe donne les résultats les plus éloignés, notamment sur la vitesse de chute. Cette différence dans l'intensité de la vitesse de chute provient de la trajectoire de la particule. Contrairement aux autres simulations, l'amplitude du déplacement horizontal est très importante. Elle est alors ralentie par les parois. Cet effet des parois modifie également la fréquence des lâchers de tourbillons. La méthode directe offre les résultats les plus proches de ceux de Ritz.

## Conclusion

La méthode du lagrangien variable est à même de résoudre correctement les écoulements instationnaires obtenus pour des nombres de Reynolds importants. En effet, les résultats que nous obtenons sont très voisins de la méthode directe que l'on considère comme celle qui offre les résultats exacts dans le sens où elle engendre peu d'approximations.

mations de résolution. Au contraire, la méthode classique du lagrangien fixe, bien que proposant une solution acceptable en terme de vitesse de sédimentation (état stationnaire), ne permet pas d'obtenir le bon comportement en terme de lâcher tourbillonnaire.

### III.3.4 Sédimentation d'une particule vers une paroi : force de lubrification

Dans cette partie, nous nous fixons comme objectif d'étudier la sédimentation d'une particule vers une paroi fixe en complément des résultats obtenus dans le paragraphe III.3.2. Le but est de déterminer les forces de lubrification et de montrer qu'elles sont prises en compte naturellement par ma modélisation numérique choisie. La théorie de la lubrification est généralement appliquée aux écoulements dans les films minces. Par exemple, l'étude de l'étalement d'un film liquide ou celui de deux solides séparés par une fine couche de liquide et en mouvement relatif peuvent être décrit à l'aide de cette théorie. La théorie de la lubrification n'est valable que sous les hypothèses de Stokes i.e lorsque le terme d'inertie est nul ou négligeable. En ce qui nous concerne, l'interaction entre deux particules ou entre la particule et la paroi peut être traité dans le cadre de cette hypothèse seulement durant la phase proche du contact. En dehors de cette plage, la distance entre les surfaces en vis-à-vis (le "gap" dans la terminologie anglo-saxonne) est trop importante. On n'est pas en mesure de considérer que l'écoulement entre la paroi et la particule subit un cisaillement suffisamment important. Lorsque que les conditions physiques sont réunies, le champ de vitesse à l'intérieur du film vérifie les conditions de Stokes car la vitesse du fluide est orthogonale à son gradient. Le terme d'inertie est alors nul et nous sommes amenés à résoudre l'équation de Stokes. Grâce à cette particularité de l'écoulement, la force de lubrification peut se manifester même pour des nombres de Reynolds très supérieurs à l'unité.

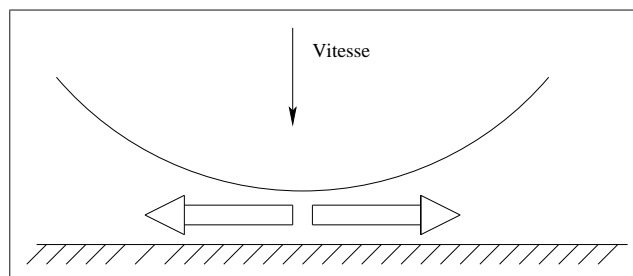


Figure III.30 : *Schéma de la zone de lubrification*

Une vue schématique de la situation avant le contact est donnée sur la figure III.30. A l'approche de la paroi, le fluide interstitiel est éjecté par les côtés sous l'action de la particule. Cette expulsion du fluide résulte plus précisément d'un gradient de pression dans la zone interstitielle. Au centre de cet intervalle entre la paroi et la particule, la pression est plus élevée que sur les bords. La force engendrée par ce gradient de pression peut alors être très importante. De nombreux travaux (Happel and Brenner (1983), Lecoq et al. (1993), Zhang et al. (2005)) furent menés pour quantifier la force de lubrification. Elle se manifeste par une diminution de la vitesse de Stokes  $\vec{u}_{ts}$  (formule (III.32)). Le calcul analytique de la solution des équations de Stokes mené par Brenner (Happel and Brenner (1983)) a permis d'obtenir la formule suivante :

$$\vec{F}_{lub} = C_{lub} 6\pi\mu_f R_p \vec{u}_{ts} \quad (\text{III.37})$$

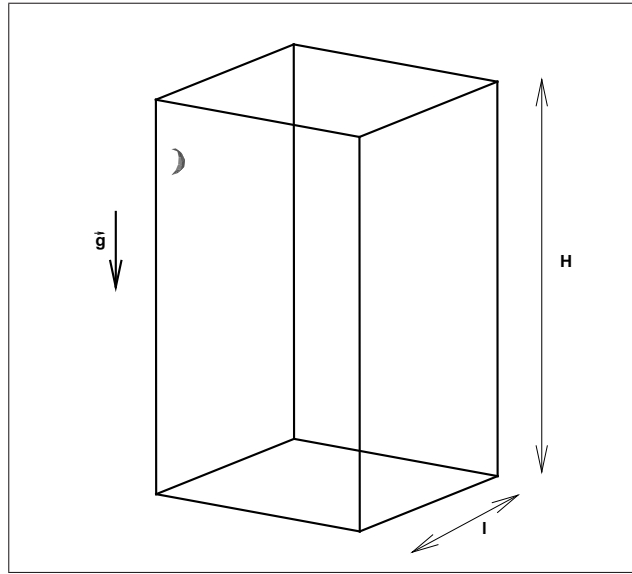
avec

$$C_{lub} = \frac{4}{3} \sinh\alpha \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n(n+1)}{(2n-1)(2n+3)} \times \left( \frac{2\sinh(2n+1)\alpha + (2n+1)\sinh 2\alpha}{4\sinh^2(n+1/2)\alpha - (2n+1)^2\sinh^2\alpha} - 1 \right) \quad (\text{III.38})$$

Ici,  $\alpha = \text{arccosh}(z/R_p)$  et  $z$  représente la coordonnée verticale de la particule. Dans le cas des particules, il faut tout de même noter que la lubrification est concurrencée par les effets dus à la rugosité lorsque le contact est vraiment proche. A ce moment, les forces liées à l'imperfection de la surface des inclusions prennent le dessus et permettent le contact.

### Présentation du cas d'étude

Afin d'étudier les forces de lubrification, nous considérons la chute d'une particule dans une cuve parallélépipédique rempli d'un fluide visqueux. La hauteur  $H$  de la cuve mesure  $2\text{ m}$  et sa largeur  $l$  est de  $2.4\text{ m}$  (cf figure III.31). La particule de rayon  $R_p = 75\text{ mm}$  a une masse volumique de  $1\text{ kg/m}^3$ . La densité du fluide est de  $2\text{ kg/m}^3$  et sa viscosité de  $0.4285\text{ Pa.s}$ . Pour réaliser la simulation numérique, nous avons considéré un domaine axisymétrique. Ce choix est autorisé dans la mesure où le nombre de Reynolds de la particule, formé à partir de son diamètre et de sa vitesse terminale de chute, est faible et donc que l'écoulement sera symétrique par rapport à l'axe de chute de la particule. Nous vérifierons a posteriori que sa valeur est bien inférieure à 1. Dans cette gamme de nombre de Reynolds, la trajectoire de la particule reste rectiligne car l'écoulement autour de la particule est symétrique. Notons que la particule est légèrement confinée. Le confinement est ici de 0.0625. A partir de la relation III.34, nous pouvons déterminer la valeur du

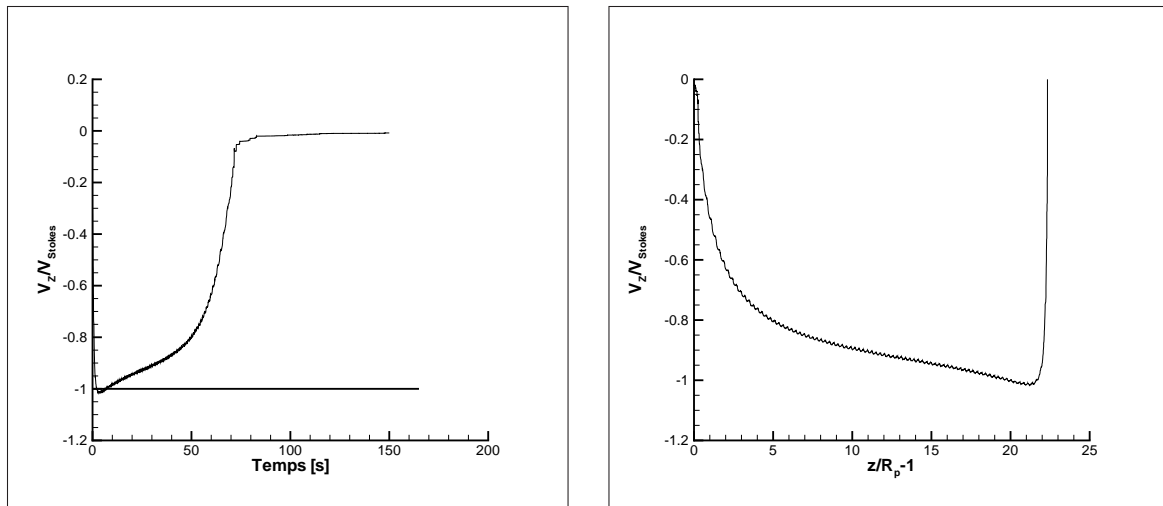
Figure III.31 : *Domaine d'étude axisymétrique de la lubrification*

Maillage	Nombre de points dans le diamètre
15×25×15	2
30×50×30	4
60×100×60	8

Tableau III.6 : *Caractéristiques des maillages pour l'étude de la lubrification*

coefficient  $C_w$  et déduire la vitesse de la sphère dans ces conditions. Elle est égale à  $0.0262 \text{ m/s}$ . Le nombre de Reynolds correspondant est alors de  $10^{-2}$ . Il vérifie bien les conditions souhaitées à savoir  $Re \ll 1$ . Les conditions aux limites sont les suivantes : nous imposons des conditions de symétrie sur les faces latérales du domaine de calcul. La paroi du fond admet une condition limite de vitesse nulle. Enfin, la face supérieure du domaine admet une condition de type sortie, c'est à dire que les vitesses sont normales à la face. La particule est repérée et représentée à l'aide de la méthode de suivi eulérien/lagrangien. Comme nous l'avons signalé auparavant, elle permet limiter les approximations sur la construction de l'interface. Le caractère solide de la particule ainsi que l'incompressibilité de l'écoulement sont gérés par l'intermédiaire de la méthode du lagrangien variable. Afin de vérifier la sensibilité au maillage, nous avons calculé la solution sur trois grilles. Nous avons reporté les caractéristiques de chaque grille dans le tableau III.6.

Nous avons représenté sur la figure III.32, l'évolution de la vitesse de sédimentation au cours du temps. Il s'agit plus exactement de l'évolution temporelle du rapport  $V_z/V_{Stokes}$  dans laquelle  $V_z$  est la vitesse verticale de la particule et  $V_{Stokes}$ , la vitesse de Stokes. Nous pouvons constater que sa vitesse limite de chute est atteinte au bout d'un diamètre seulement. De plus, l'intensité de la celle-ci est en très bon accord avec la vitesse théorique calculée à partir de la formule de Stokes. Dès l'instant où la particule est à son maximum de vitesse, elle est aussitôt ralentie (cf figure III.32i) car les effets de la paroi inférieure se font sentir. Cette observation s'explique par le fait qu'à des régimes d'écoulement faibles, le champ perturbé se propage très loin. En traçant la courbe d'équation (III.38) représentative du coefficient de correction  $C_{lub}$ , on s'aperçoit qu'il y a une influence de la paroi lorsque la particule se trouve à plusieurs dizaines de diamètres de la paroi. Néanmoins cette modification de la vitesse de chute reste infime.



(i) Evolution en fonction du temps

(ii) Evolution en fonction de la distance à la paroi

Figure III.32 : *Evolution de la vitesse verticale normalisée*

Une vue du champ de vitesse est proposée sur la figure III.33. Nous observons distinctement l'expulsion du fluide situé entre la particule et la paroi du fond. Nous avons tracé sur la figure III.34 l'évolution du coefficient de correction  $C_{lub}$  déterminé numériquement à l'aide des trois maillages. Compte tenu de la bonne adéquation entre nos résultats et ceux issus du calcul analytique, nous pouvons affirmer que le modèle de suivi de particules par la méthode hybride eulérien/lagrangien reproduit correctement les effets de lubrification.

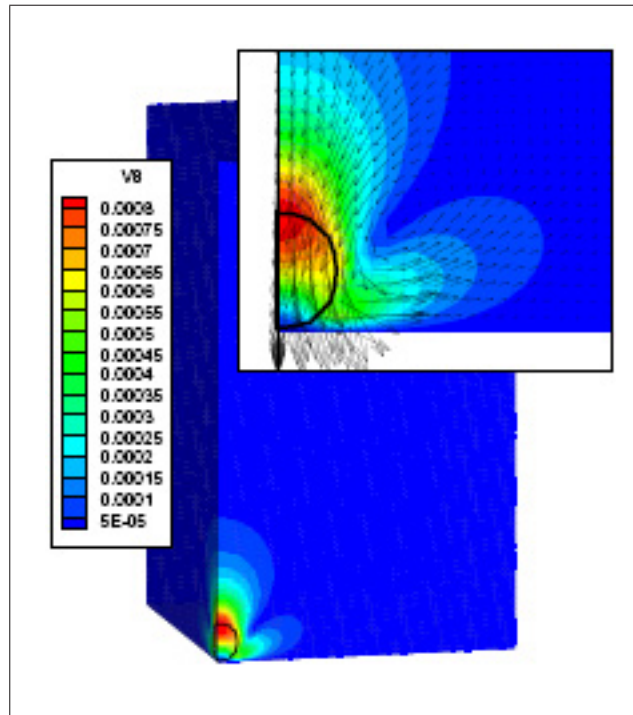


Figure III.33 : *Champ de vitesse à l'approche de la paroi*

Ceux-ci sont pris en compte parfaitement même lorsque le maillage est grossier. Comme nous pouvons le constater sur la figure III.34, nous captions très précisément les effets de lubrification à l'approche de la paroi et cela sans aucun modèle de force. Néanmoins, nous sommes toujours limités par le maillage qui ne peut pas reproduire les phénomènes dont la taille est inférieure à son pas. En effet, les forces de lubrification sont mal distinguées dans la couche de fluide située tout près de la paroi. En raffinant le maillage dans la zone considérée, nous sommes capable de réduire l'erreur par rapport à la solution théorique.

## III.4 Conclusions

Dans ce chapitre, la mise en oeuvre numérique de notre modèle a été présentée. Afin de réduire les coûts en temps de calcul et en gestion de maillage, nous avons opté pour une grille fixe cartésienne pour discrétiser notre domaine de calcul. Ce choix, bien qu'intéressant du point de vue de la simplicité d'utilisation, nécessite un traitement particulier pour distinguer toutes les phases en présence. En ce qui nous concerne, nous nous intéressons au suivi de particules. Nous avons donc construit un outil de suivi de particules original

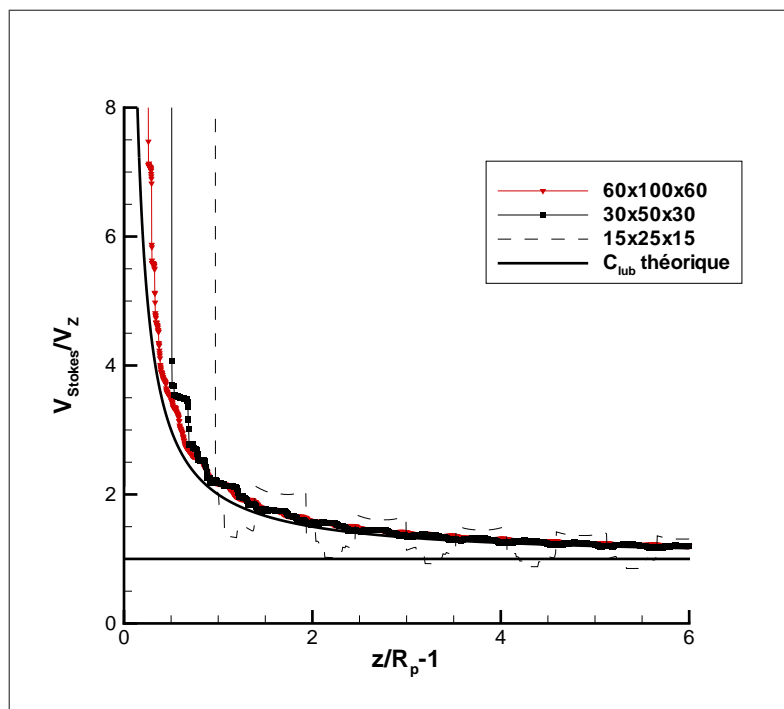


Figure III.34 : *Comparaison du coefficient de correction pour la lubrification*

dans la mesure où il combine les techniques classiques de suivi de front par la fraction volumique (méthode eulérienne) et les techniques de suivi lagrangien. Par ailleurs, afin d'imposer les contraintes d'incompressibilité du fluide et de non déformation du solide, nous avons implanté une technique de pénalisation dérivée de la méthode classique du lagrangien augmenté. Le paramètre  $\lambda$ , dont la valeur est constante dans l'approche traditionnelle de Fortin and Glowinski (1982), est modifié à chaque instant et en chaque point du maillage afin d'optimiser la résolution des équations de Navier-Stokes en tenant compte de la contrainte d'incompressibilité. Une méthode analogue a été également introduite pour gérer la contrainte de non déformation du solide. Ces nouvelles techniques ont été validées sur des cas de sédimentation de particules entre des parois parallèles, vers une paroi fixe à des régimes d'écoulement faibles et pour des régimes plus élevés.



# Chapitre IV

## Applications aux lits fluidisés

Ce chapitre sera consacré principalement aux applications de notre modèle de transport de particules. Plus précisément, nous allons étudier deux cas d'écoulement particulière. La première application est l'étude de l'écoulement à travers un réseau de particules fixes régulièrement réparties. La seconde application concerne l'étude d'un réseau de particules mobiles réparties aléatoirement.

### IV.1 Réseau de particules fixes alignées

Nous avons vu dans les chapitres précédents que la concentration en particules était un paramètre essentiel dans le comportement d'un lit fluidisé. En fonction de la fraction volumique de solide, l'intensité de la force de traînée est sensiblement modifiée. Ce changement d'intensité se manifeste à travers une modification du coefficient de traînée  $C_d$  des sphères du réseau. Ce changement dépend de l'arrangement et du nombre de particules présentes. Afin d'avoir une meilleure compréhension de l'évolution de  $C_d$ , il est important de comprendre les différents types d'interactions particulières. Nous allons donc présenter les lois de la littérature mettant en jeu des arrangements particuliers de particules. Nous examinerons également les changements engendrés sur le coefficient de traînée. Massol (2004) a établi une synthèse de résultats se rapportant à ces configurations.

Les travaux relatifs au coefficient de traînée d'une sphère isolée sont très nombreux et ont abouti à des expressions empiriques. L'une des plus employées est celle de Schiller et

Nauman (Clift et al. (1978)) déjà évoquée antérieurement, et que nous rappelons ici :

$$C_d = \begin{cases} \frac{24}{Re}(1 + 0.15Re^{0.687}) & \text{pour } Re < 800 \\ 0.45 & \text{pour } Re > 800 \end{cases}$$

Cette formule du  $C_d$  est une correction de l'expression établie par Stokes. Il a montré que pour des régimes où le nombre de Reynolds  $Re$  était petit devant 1, le coefficient de traînée vérifiait la loi :

$$C_d = \frac{24}{Re} \quad (\text{IV.1})$$

Ces expressions ne prennent pas en compte la présence éventuelle d'autres particules. Or, dès que nous nous retrouvons dans une configuration où deux sphères sont situées dans un même voisinage, la valeur du coefficient de traînée de l'ensemble est modifiée. La topologie des écoulements est, elle-aussi, perturbée.

### IV.1.1 Dans le sens de l'écoulement

Rowe and Henwood (1961) puis Tal et al. (1984) ont étudié la traînée de deux sphères placées l'une derrière l'autre. La configuration est présentée sur la figure IV.1. Ils ont observé une diminution de la traînée par rapport à la traînée d'une particule seule. Ils ont par ailleurs montré que la traînée de la sphère A était plus grande que celle de la sphère B. La distance  $l$  les séparant joue par ailleurs un rôle important. En effet, l'espacement entre les particules doit être de l'ordre de 30 diamètres pour que la traînée de la sphère située en amont soit celle d'une particule seule. En revanche, les interactions sur la sphère B perdurent plus longtemps. Il faut en effet disposer les deux particules à plus de 100 diamètres l'une de l'autre pour que la sphère B retrouve les caractéristiques d'une particule isolée. Cet écart dans la valeur de  $C_d$  résulte de la nature de l'écoulement que voit chacune des sphères. La sphère A rencontre un écoulement non perturbé. A contrario, la sphère située à l'arrière subit le sillage de la première sphère. Tal et al. (1984) ont démontré que la traînée des deux particules était plus faible que celle d'une particule seule car la taille de la recirculation derrière la sphère avalée était plus petite. Les travaux de Zhu et al. (1994) ont de plus fait apparaître que la traînée de l'ensemble vérifiait la relation :

$$\frac{C_d}{C_{Schiller}} = 1 - e^{a+b(C-1)} \quad (\text{IV.2})$$

avec

$$\begin{cases} a = -0.483 + 3.45 \times 10^{-3} Re - 1.07 \times 10^{-7} Re^2 \\ b = -0.115 + 8.75 \times 10^{-4} Re + 5.61 \times 10^{-7} Re^2 \end{cases}$$

$C_{Schiller}$  est la traînée d'une particule isolée donnée par l'expression IV.1. Le paramètre  $C$  rend compte de la distance entre les particules. Il est défini par  $C = \frac{l}{R_p}$ . Cette expression n'est toutefois valable que dans le domaine :

$$\begin{cases} 20 \leq Re \leq 150 \\ 1 \leq C \leq 8 \end{cases}$$

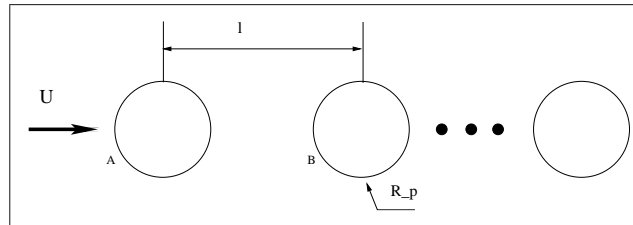


Figure IV.1 : Représentation d'un ensemble de sphères alignées dans le sens de l'écoulement

Plus généralement, la traînée d'un ensemble de particules alignées dans le sens de l'écoulement tend à être inférieure à celle d'une particule seule. Chaque particule située en aval subit une action moindre du fluide car elle se trouve dans le sillage de la particule placée en amont. Ceci a été vérifié, pour le cas de gouttes alignées, par Mulholland et al. (1988), puis par Virepinte (1999). L'évolution du coefficient de traînée en fonction du nombre de Reynolds et du paramètre de distance a été reportée sur la figure IV.2.

### IV.1.2 Perpendiculairement à l'écoulement

Cette configuration d'écoulement (cf figure IV.3) a été étudiée en détail par Kim et al. (1993) par une analyse numérique pour des particules solides et liquides. Ils ont démontré que l'on pouvait retrouver le coefficient de traînée d'une sphère isolée si on plaçait les particules à une distance  $l$  telle que le paramètre  $C$  soit égal à 21. En rapprochant les particules, la traînée diminue doucement tant que le paramètre  $C$  est inférieur à 4. A

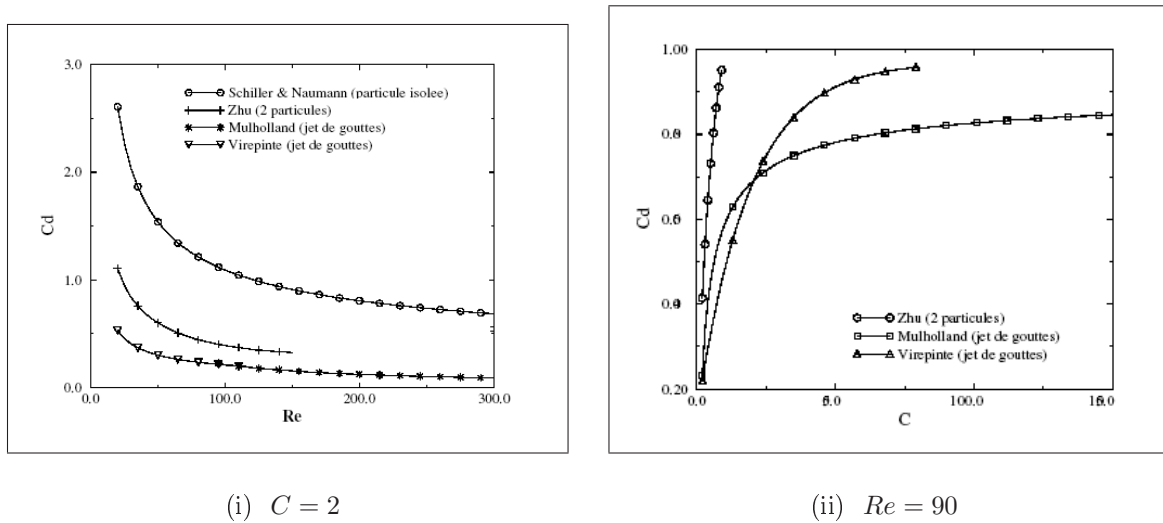


Figure IV.2 : Evolution du coefficient de traînée pour plusieurs particules alignées dans le sens de l'écoulement

partir de cette distance, le coefficient de traînée augmente brusquement. L'évolution de  $C_d$  en fonction du paramètre  $C$  est tracée sur la figure IV.4. Selon les auteurs, cette brusque augmentation résulte de l'accélération du fluide entre les deux particules et est due à la couche limite autour des particules. Le cisaillement et la pression sur les particules s'accroissent, ce qui provoque la hausse de la valeur de la traînée.

### IV.1.3 Suivant une direction oblique à l'écoulement

Dans la réalité, il est rare de rencontrer une organisation où les particules sont parfaitement alignées, soit dans le sens de l'écoulement, soit perpendiculairement à celui-ci. Rowe and Henwood (1961) ont entrepris des recherches sur l'évolution de la traînée de deux sphères en fonction de l'angle  $\theta$  formé par la direction de l'écoulement et le vecteur reliant les deux centres. La configuration de travail est présentée sur la figure IV.5. Ils constatent que pour une distance donnée, l'évolution de la traînée varie de façon sinusoïdale avec l'angle  $\theta$ . Les résultats de leurs travaux sont transcrits sur la figure IV.6. Pour une distance inter-particulaire donnée, par exemple pour  $C = 5$ , la traînée augmente lorsque l'on passe d'une configuration où les sphères sont alignées avec l'écoulement ( $\theta = 0^\circ$ ) vers la configuration transversale à l'écoulement ( $\theta = 90^\circ$ ). Le maximum de traînée correspond à la position  $\theta = 85^\circ$ . La modification du paramètre de distance  $C$  a pour conséquence de changer la position angulaire pour laquelle on obtient le maximum de traînée, et éga-

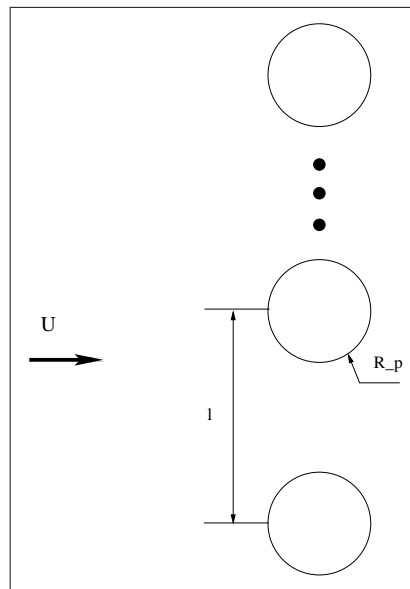


Figure IV.3 : Représentation d'un ensemble de sphères alignées perpendiculairement à l'écoulement

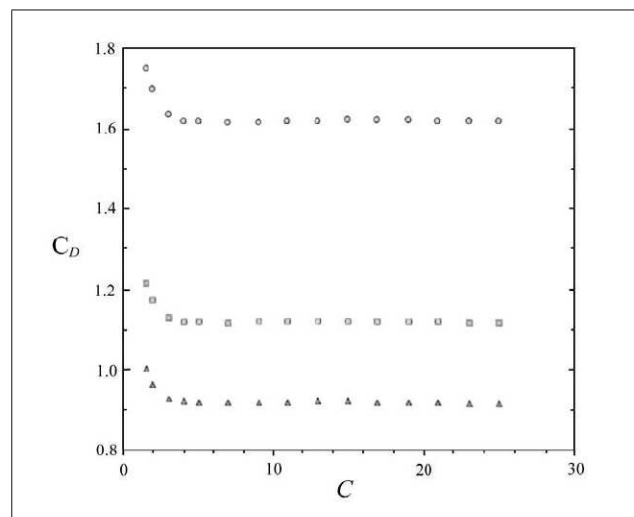


Figure IV.4 : Evolution de  $C_d$  pour deux particules alignées perpendiculairement à l'écoulement (Kim et al. (1993))

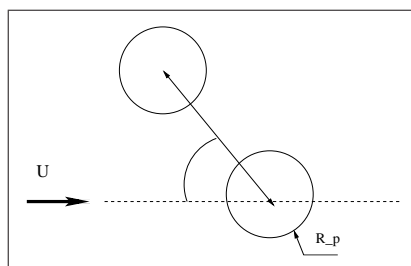


Figure IV.5 : Configuration d'étude pour deux particules suivant une direction oblique à l'écoulement

lement l'intensité maximale du coefficient  $C_d$ . En effet, pour  $C = 5$ , la traînée maximale est obtenue pour  $\theta$  voisin de  $85^\circ$  alors pour  $C = 1.08$ , elle correspond à un angle  $\theta$  proche de  $110^\circ$ .

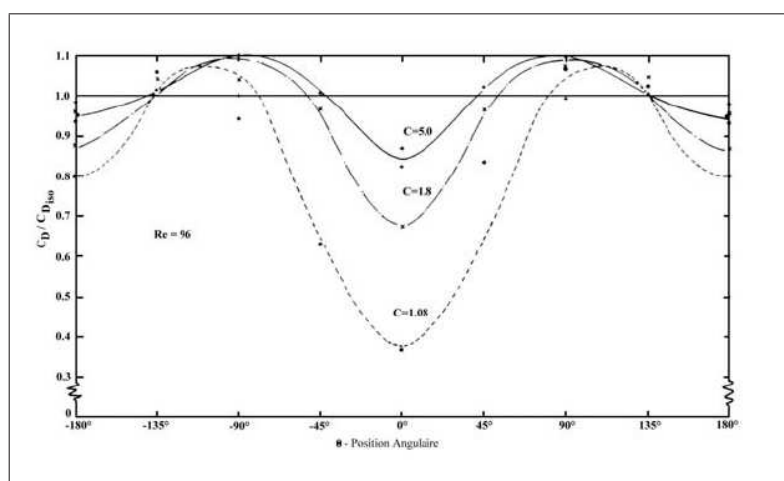


Figure IV.6 : Evolution du coefficient de traînée pour deux particules suivant une direction oblique à l'écoulement (Rowe and Henwood (1961))

#### IV.1.4 Conclusion

En résumé, il ressort de cette étude bibliographique que la disposition des sphères par rapport à l'écoulement a une influence certaine sur la valeur du coefficient de traînée : en effet, suivant l'alignement des sphères avec l'écoulement, la valeur du coefficient est énormément modifiée. Cette sensibilité est plus prononcée lorsque les particules sont alignées dans le sens de l'écoulement car le sillage à l'arrière de la particule se développe

sur une longueur importante. Si l'on compare cette distance à l'épaisseur de la couche limite autour de la sphère, on constate qu'elle est largement plus grande que la couche de frottement. Ainsi, la traînée d'une sphère dans un arrangement transversal sera moins perturbée que dans l'hypothèse d'un arrangement longitudinal. Si l'écoulement arrive de façon oblique, nous aurons une combinaison des deux interactions.

## IV.2 Réseau de particules fixes dans un arrangement Cubique Face Centrée (CFC)

Les différents types d'interaction que nous avons étudiés pour des arrangements "simples" de particules vont intervenir de manière plus complexe dans un nuage de particules. L'étude de l'écoulement à travers un réseau de particules fixes est la première étape vers la simulation d'un cas de lits fluidisés. L'intérêt de ce travail est de permettre d'apprécier l'effet de la présence de plusieurs particules sur le coefficient de traînée.

En préambule, nous rappelons brièvement les notations que nous allons adopter au cours de ce développement. Toutes les grandeurs relatives au solide seront repérées grâce à l'indice  $s$  tandis que celles du fluide seront notées avec l'indice  $f$ . Dans toute la suite du document, nous ne prenons pas en compte la gravité. Étant donné que notre étude porte sur un réseau de particules fixes, les termes de Basset et d'histoire seront nuls. L'action du fluide sur les particules se réduit donc à la force de traînée  $\vec{T}$ . Son expression peut se mettre sous la forme classique :

$$\vec{T} = \frac{1}{2} \rho_f \mathcal{S}_s C_d \|\vec{U}_{relatif}\| \vec{U}_{relatif} \quad (\text{IV.3})$$

$\mathcal{S}_s$  est la surface projetée orthogonale à la vitesse (encore appelée maître-couple).  $\mathcal{S}_s = \pi R_p^2$  pour une sphère de rayon  $R_p$ .  $\vec{U}_{relatif}$  est la vitesse relative entre la phase dispersée et la phase fluide vue par les particules. Cette grandeur est couramment utilisée dans les modèles à deux fluides, comme nous l'avons présenté dans le premier chapitre. Elle est définie comme :

$$\begin{aligned} \vec{U}_{relatif} &= \vec{U}_s - \vec{U}_f \\ &= \frac{1}{\mathcal{V}_s} \int_{\mathcal{V}_s} \vec{u}_s dV - \frac{1}{\mathcal{V}_f} \int_{\mathcal{V}_f} \vec{u}_f dV \\ &= \frac{1}{\alpha_s} \langle \vec{u}_s \chi_s \rangle - \frac{1}{\alpha_f} \langle \vec{u}_f \chi_f \rangle \end{aligned} \quad (\text{IV.4})$$

où  $\vec{U}_s = \langle \vec{u}_s \chi_s \rangle$  est la vitesse de la phase dispersée,  $\vec{U}_f = \langle \vec{u}_f \chi_f \rangle$ , celle de la phase continue.  $\alpha_f$  et  $\alpha_s$  sont respectivement les fractions volumiques de la phase fluide et de la phase solide avec la relation  $\alpha_f = 1 - \alpha_s$  qui unit les deux fractions volumiques.

Pour des écoulements dont la vitesse est faible, ou plus exactement tels que le nombre de Reynolds est faible ( $Re \ll 1$ ), la force de traînée  $\vec{T}_{Stokes}$ , exercée sur une inclusion, peut être déterminée analytiquement en résolvant les équations de Stokes. A l'aide d'une représentation des sphères par des points forces, Hasimoto (1959) a calculé la force de traînée pour des réseaux cubiques, cubiques centrés et cubiques faces centrées. Il en a déduit une expression de la force de traînée valable pour des faibles concentration. Sangani and Acrivos (1982) ont ensuite étendu le domaine de validité de la formule en proposant la formule (IV.5) pour l'expression de la force de traînée d'un réseau.

$$\frac{T}{T_{Stokes}} = \left( \sum_{i=0}^{30} a_i \left( \frac{\alpha_s}{\alpha_{s,max}} \right) \right)^{-1} \quad (IV.5)$$

Les valeurs des coefficients  $a_i$  pour les différents types d'arrangement sont reportées dans le tableau ??.

Pour les nombres de Reynolds plus élevés, il n'est plus possible de résoudre les équations de Navier-Stokes pour en extraire la valeur de la force de traînée, car il est impossible de linéariser les équations. Les solutions alternatives pour estimer la traînée sont alors l'étude par voie expérimentale ou par voie numérique. Nous allons donc estimer la traînée dans le cas d'un réseau de particules fixes pour un arrangement cubique à faces centrées. Cette organisation est celle qui offre la compacité la plus élevée et l'organisation la plus homogène. Elle est la plus représentative d'une situation de lit fluidisés où les particules admettent une distribution homogène. Le coefficient de traînée d'un réseau cubique face centrée a été étudié en détail via la simulation numérique par Massol (2004). Ses simulations ont été effectuées sur des maillages non structurés de type "body-fitted" qui s'adaptent à la géométrie des sphères. Nous nous servons donc de ses résultats comme référence car les calculs de traînée sont plus précis dans la mesure où grâce à ce type de maillage, les interactions aux interfaces fluide/solide ainsi que la forme du réseau sont beaucoup mieux décrits. Les maillages utilisés comportent de 300000 à 15000000 cellules suivant la fraction volumique en particules.



### IV.2.1 Présentation du cas

Tout au long de cette section, notre objet d'étude sera un cube dans lequel on a ajouté une sphère à chaque sommet et au centre de chaque face. Le motif minimal représentant le réseau est schématisé sur la figure IV.7. Il contient plus précisément un huitième de sphère sur chaque sommet et une demi sphère sur chaque face. Cela équivaut donc à quatre sphères dans une maille élémentaire du réseau. Pour de faibles concentrations, il est possible de toutes les introduire dans le cube (cf figure IV.7ii). Mais au delà d'une fraction solide de 0.2, les quatre particules ne peuvent plus y être contenues. Le passage d'une configuration à une autre se fait par une translation. Il est illustré sur la figure IV.8. Ces deux représentations sont équivalentes, mais pour faciliter la mise en oeuvre numérique, nous avons conservé la représentation de la figure IV.7i. Nous avons donc quatre particules, représentées partiellement, dans le domaine.

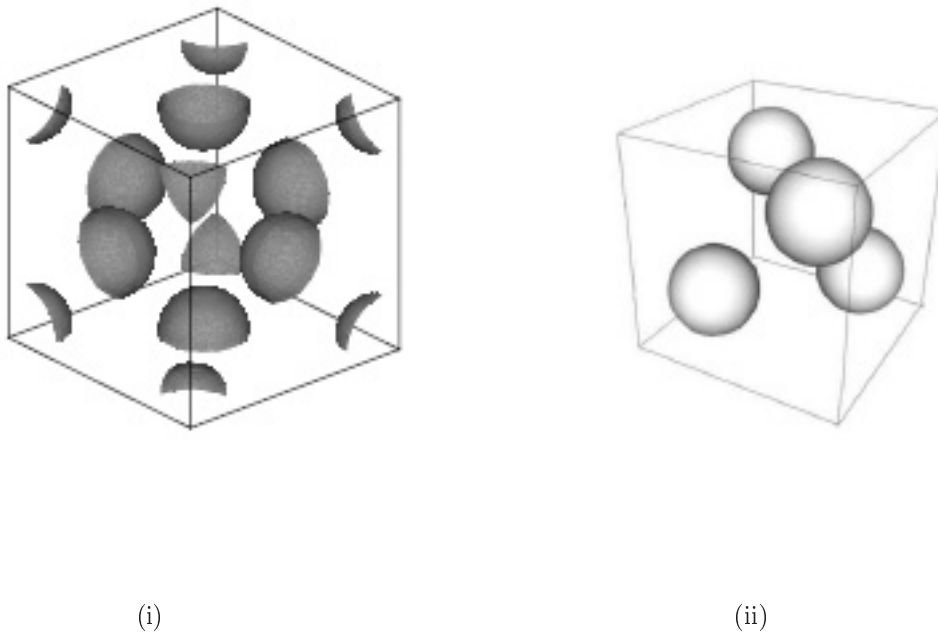


Figure IV.7 : *Organisation d'un réseau cubique face centrée*

Nous imposons des conditions périodiques sur chacune des faces du cube afin d'obtenir un réseau infini de sphères dans une configuration cubique à faces centrées. Les dimensions de notre domaine de calcul sont maintenues fixes au cours des simulations. Nous avons choisi un cube dont les côtés mesurent 38 mm. Pour modifier la concentration en particules solides, nous avons donc joué sur le rayon  $R_p$  des particules. Le maillage que nous avons utilisé pour mener cette étude est une grille cartésienne non adaptée à la géométrie des sphères. La grille comporte 70 mailles dans chaque direction. Les sphères

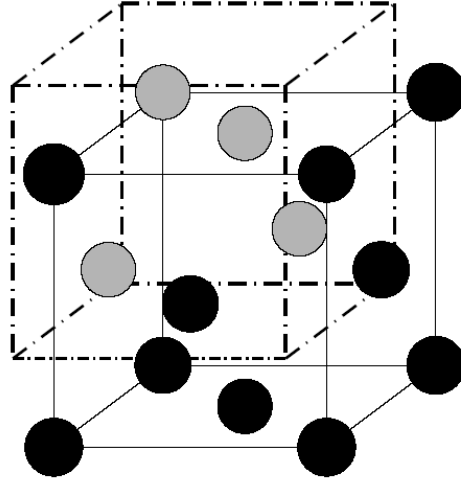


Figure IV.8 : *Passage de la configuration IV.7i à IV.7ii*

sont représentées par l'iso-surface  $C = 0.5$  en utilisant la technique de maillage des cellules mixtes fluide/solide que nous avons mise en place pour le suivi VOF/lagrangien des particules. Grâce à la projection de la couleur sur le maillage eulérien à partir de la donnée du centre et du rayon des sphères, nous limitons les erreurs de représentation de la particule. L'incidence du maillage sur les résultats a été étudiée sur trois grilles pour plusieurs concentrations en solide. Le tableau IV.1 indique les caractéristiques des maillages employés au cours des simulations, ainsi que les rayons des particules. Afin d'assurer l'immobilité des particules, nous avons fixé la viscosité du solide à  $10^{10} Pa.s$ . Par ailleurs, nous avons également imposé la zone occupée par les inclusions à une perméabilité nulle. Néanmoins, le rayon de ce secteur à perméabilité nulle est inférieur à celui de la particule. Comme nous l'avons vu dans le chapitre consacré aux méthodes de pénalisation, le fait d'imposer la perméabilité à une valeur nulle dans une région revient à imposer que la vitesse soit égale à zéro dans le lieu considérée. Cette manipulation nous assure donc de l'immobilité du centre des particules et de leur non déformation par effet de la viscosité. L'incompressibilité du fluide est obtenue en utilisant la méthode du lagrangien variable. Le paramètre  $K$  est fixée à  $10^2$ . Ainsi que nous l'avons montré dans le chapitre précédent, cette valeur permet d'obtenir un bon compromis entre la résolution des équations de Navier-Stokes et l'imposition de l'incompressibilité. Par ailleurs, une comparaison des méthodes de lagrangien variable et de lagrangien fixe a été menée. Le fluide dont nous nous servons pour les simulations est de l'eau avec des caractéristiques classiques. Sa masse

Concentration solide $\alpha_s$	Rayon $R_p$ [mm]	Nombre de points dans le diamètre		
		Maillage 15×15×15	Maillage 35×35×35	Maillage 70×70×70
0.05	5.471	4.32	10.08	20.16
0.1	6.893	5.44	12.70	25.39
0.15	7.890	6.23	14.53	29.07
0.2	8.684	6.86	16.00	32.00
0.3	9.941	7.85	18.31	36.63
0.4	10.94	8.64	20.16	40.31
0.5	11.79	9.31	21.71	43.42
0.6	12.53	9.89	23.07	46.15

Tableau IV.1 : *Caractéristiques des maillages du réseau cubique face centrée*

volumique est de  $1000 \text{ kg/m}^3$  et sa viscosité est de  $10^{-3} \text{ Pa.s}$ .

### IV.2.2 Imposition de l'écoulement et calcul de la traînée

**Génération de l'écoulement** La mise en place de l'écoulement à travers le réseau de sphères a nécessité un traitement particulier. En effet, comme nous imposons des conditions périodiques sur toutes les faces du domaine cubique, il nous était impossible d'y adjoindre une condition de vitesse imposée pour mettre le fluide en mouvement. L'option que nous avons retenue est d'introduire une force volumique dans le fluide qui va compenser la perte d'énergie due aux frottements du fluide sur les sphères. Nous souhaitons travailler à un nombre de Reynolds constant. Il faut donc ajuster le terme source volumique au cours de la simulation afin de garantir le maintien de notre consigne  $Re_{ref}$ . Nous avons donc installé un régulateur. Le terme source  $S$  est déterminé à chaque instant par le schéma itératif suivant :

$$Re^{n+1} = Re^n - \delta t S^n \quad (IV.6)$$

$$S^{n+1} = S^n - \tau_1(Re^{n+1} - Re_{ref}) + \tau_2(Re^n - Re_{ref}) \quad (IV.7)$$

Ce terme source est introduit dans l'équation de conservation du mouvement. Il permet d'obtenir l'écoulement du fluide avec une vitesse de celui-ci qui vérifie la consigne  $Re_{ref}$ . Notons que le nombre de Reynolds est défini à partir du diamètre d'une sphère et de la vitesse  $\vec{U}_S = \alpha_f < \vec{u}_f >_f$ .

**Calcul de la force de traînée** La valeur de la force de traînée est directement déduite de la force volumique que nous imposons. En effet, si on considère l'équation du mouvement comme un bilan de forces, nous avons :

$$\rho_f \frac{\partial \vec{U}_f}{\partial t} + \vec{U}_f \cdot \nabla \vec{U}_f = \vec{F}_{Part/Fluide} + \vec{S} \quad (\text{IV.8})$$

A l'équilibre, nous avons atteint le nombre de Reynolds choisi et l'équation IV.8 se réduit à :

$$0 = \vec{F}_{Part/Fluide} + \vec{S} \quad (\text{IV.9})$$

soit

$$\vec{F}_{Fluide/Part} = -\vec{F}_{Part/Fluide} = \vec{S} \quad (\text{IV.10})$$

La force volumique que nous avons introduite pour générer l'écoulement correspond directement à la force de traînée exercée par le fluide sur l'ensemble des particules.

### Validation sur l'écoulement autour d'un cylindre

Afin de vérifier la méthode d'imposition de l'écoulement et le calcul de la traînée, nous avons étudié le cas d'un écoulement autour d'un cylindre fixe. La configuration de l'étude est présentée sur la figure IV.9. Ce cas est largement documenté. Nous avons choisi de comparer nos résultats avec une étude expérimentale : Bouard (1983), et avec des études numériques : Kim et al. (1993) et Massol (2004). Le maillage est à pas variable avec un

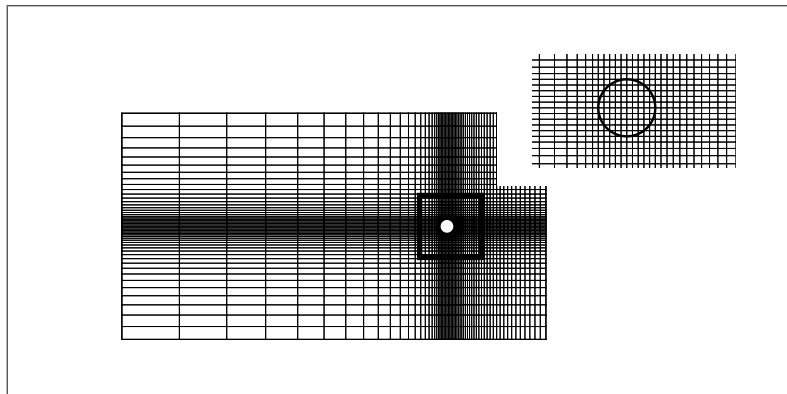


Figure IV.9 : *Maillage utilisé pour le cylindre fixe (exemple pour 60×50 mailles avec un pas de 0.1m dans la zone raffinée)*

raffinement prononcé dans la zone du cylindre. Dans cette zone, le pas est constant et égal  $10^{-1}m$ . Le domaine mesure 16 m de largeur. Sa longueur est fixée à 30 m ou 40 m

Re	10	20	40	80	100	120	160
Bouard (1983)	2.75	2	1.7	1.55	-	-	-
Kim et al. (1993)	2.72	1.97	-	-	-	-	-
Massol (2004)	-	-	1.56	1.4	-	1.36	-
$C_d$	3.52	2.40	1.79	1.25	1.26	1.11	0.9

Tableau IV.2 : Coefficients de traînée obtenus

suivant le nombre de Reynolds considéré. Il est défini par le diamètre de la particule et la vitesse moyenne du fluide dans la veine. Le rayon du cylindre est de  $0.5\text{ m}$ . L'écoulement est généré en imposant le terme source  $\vec{S}$  comme nous venons de le présenter. Nous avons simulé le cas pour plusieurs nombres de Reynolds : 10, 20, 40, 80, 100, 120 et 160. Les valeurs du coefficient de traînée du tableau IV.2 sont transcrites sur la figure IV.10.

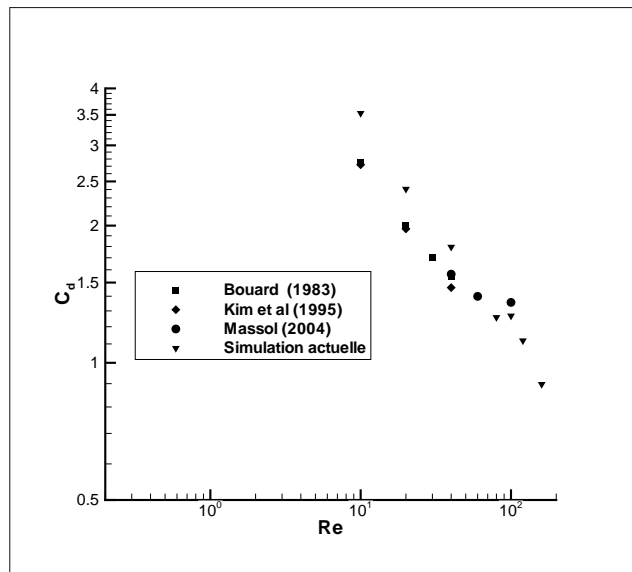


Figure IV.10 : Coefficient de traînée d'un cylindre fixe

On observe une bonne représentation du coefficient de traînée, même si nos résultats semblent donner des valeurs un peu supérieures pour les faibles nombres de Reynolds. A contrario, nous sous-évaluons le coefficient de traînée pour les nombres de Reynolds plus élevés. Ces variations sont dues à la mauvaise représentation de la particule puisque dans tous les cas, nous avons entre 5 et 10 points seulement dans le diamètre. Une étude

Pas du maillage	$C_d$	Erreur relative
0.1	3.529	0.297
0.05	3.330	0.224
0.03	2.978	0.095
0.025	2.638	0.030

Tableau IV.3 : *Etude en maillage du coefficient de traînée  $C_d$  pour  $Re = 10$ . Le  $C_d$  de référence égale à 2.72 est celui donné par Kim et al. (1993)*

de sensibilité au maillage a été effectuée pour  $Re = 10$ . Les résultats présentés dans le tableau IV.3 montre la convergence de la solution numérique lorsque le maillage est raffiné dans la zone du cylindre. Dans ce cas, le coefficient de traînée de référence tiré de Kim et al. (1993) est de 2.72.

### IV.2.3 Résultats des simulations

Le réseau cubique face centrée concentre les différents types d'interactions que nous avons évoqués en introduction. En effet, il regroupe à la fois un alignement de sphères dans le sens de l'écoulement, orthogonalement à l'écoulement et suivant une direction oblique. Cette conformation particulière modifie énormément l'évolution du coefficient de traînée de chaque sphère du réseau. De plus, elle entraîne une altération de la topologie de l'écoulement autour des sphères. Suivant les valeurs du nombre de Reynolds et de la concentration en particules, on distingue plusieurs topologies d'écoulement. Il est à noter toutefois que chaque sphère du réseau voit exactement le même écoulement. Massol (2004) a ainsi repéré plusieurs situations distinctes qui dépendent de la valeur du nombre de Reynolds mais aussi de la concentration en solide. Afin d'observer ces catégories, nous avons simulé plusieurs écoulements pour plusieurs valeurs de  $Re$ . Nous avons parcouru une gamme de concentrations allant de 0.05 à 0.6. Les nombres de Reynolds choisis sont  $Re=10, 50, 100$  et 300.

#### Topologies des écoulements

**Régime faible** Pour les faibles valeurs du nombre de Reynolds, l'écoulement suit la géométrie des inclusions. Contrairement au cas de la sphère isolée, le décollement a lieu

plus tard pour le réseau. Cette altération est due à l'encombrement des particules, qui bloquent le développement de la couche limite. A l'instar de ce qui se produit pour des sphères alignées dans une direction perpendiculaire à la vitesse, les particules latérales canalisent le fluide. De plus, on n'observe pas de recirculation à l'arrière des sphères. Nous avons représenté sur les figures IV.11 et IV.12 les champs de vitesse suivant la direction du gradient de pression ainsi que la pression pour  $Re = 10$  et une fraction solide de 0.4. Ce comportement se retrouve également pour des valeurs de  $Re$  supérieures. En effet, l'écoulement reste attaché pour  $Re = 10$  et  $\alpha_s \leq 0.4$ ,  $Re = 50$  et  $0.15 \leq \alpha_s \leq 0.6$ , et pour  $Re = 100$  et  $0.3 \leq \alpha_s \leq 0.6$ . Sur la figure IV.13, nous avons représenté le champ de vecteurs suivant une coupe dans ce réseau. On observe bien l'accélération du fluide entre les particules latérales. En outre, nous pouvons constater que les vitesses sont strictement nulles dans les particules.

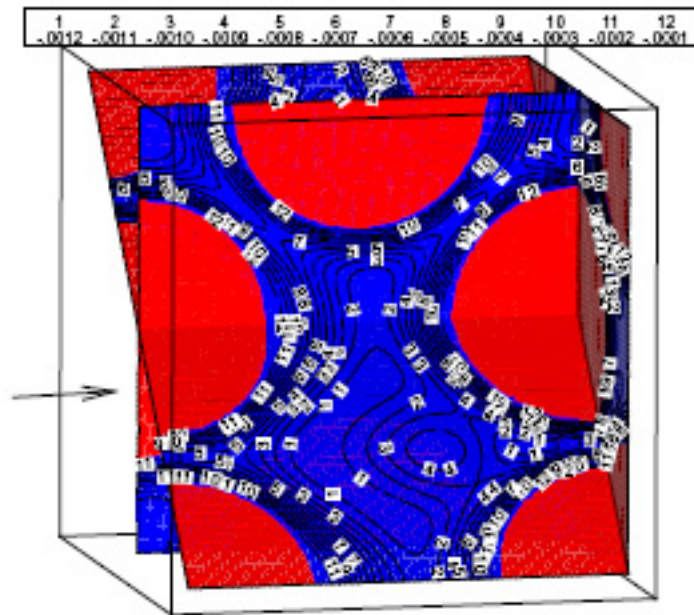


Figure IV.11 : *Isolignes de la vitesse suivant la direction du gradient de pression pour  $\alpha_s = 0.4$  et  $Re = 10$*

**Régime d'écoulement avec décollement** En augmentant la vitesse du fluide, l'écoulement parvient à se détacher des particules. Il se forme alors une zone de recirculation à l'arrière des particules. La figure IV.14, qui reproduit les lignes de courant sur une coupe,

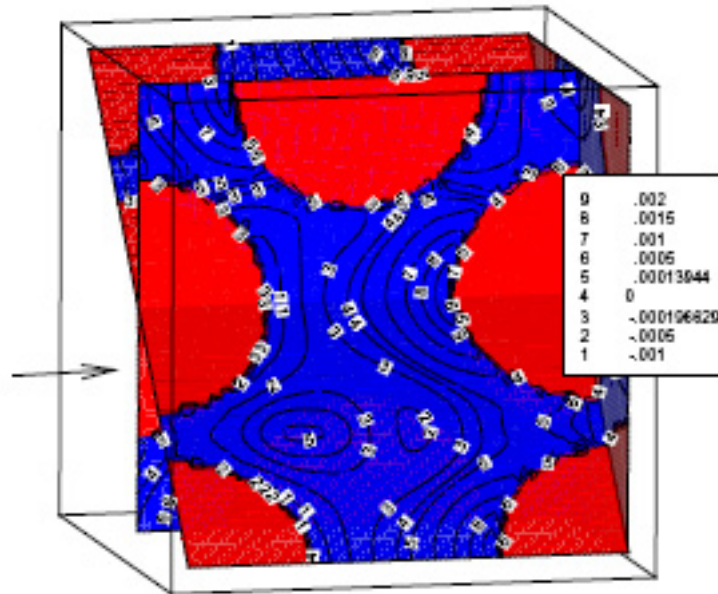


Figure IV.12 : Isovaleurs de la pression pour  $\alpha_s = 0.4$  et  $Re = 10$

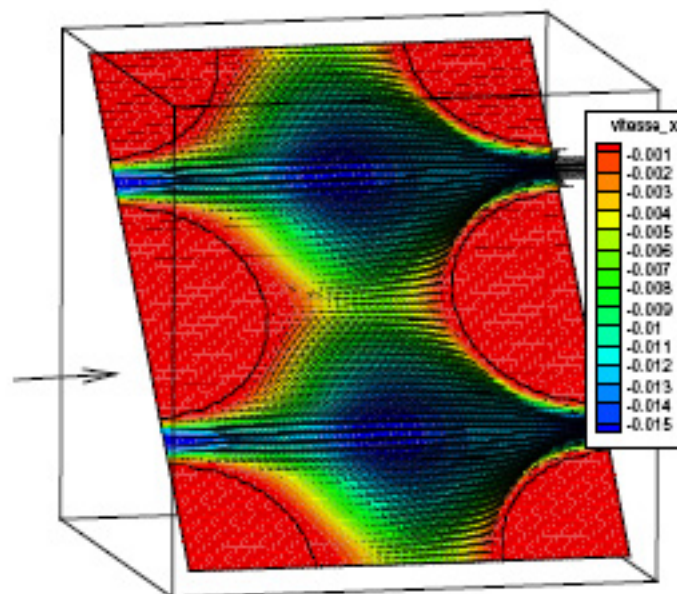


Figure IV.13 : Vecteur vitesse et champ de la vitesse suivant le gradient de pression pour  $\alpha_s = 0.4$  et  $Re = 100$



offre une bonne visualisation de la recirculation qui se forme derrière chaque sphère. Nous pouvons de plus constater que chaque sphère voit exactement le même écoulement. Cette similitude résulte de la symétrie du réseau et des conditions limites de périodicité.

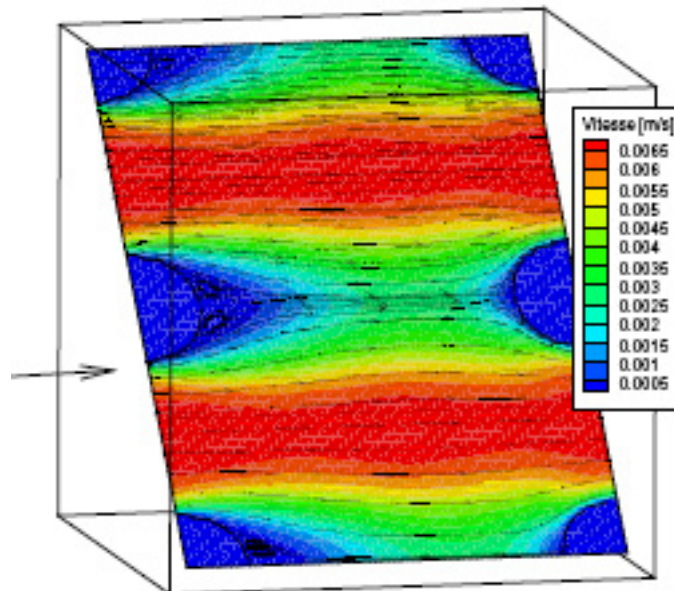


Figure IV.14 : *Ligne de courant et intensité de la vitesse pour  $\alpha_s = 0.05$  et  $Re = 50$*

Nous retrouvons cette topologie d'écoulement avec détachement pour d'autres couples de concentration et de nombre de Reynolds. La figure IV.15 donnant l'intensité de la vitesse dans la direction de l'écoulement pour  $\alpha_s = 0.15$  et  $Re = 100$ , indique que le décollement a lieu également. Le champ de pression pour la même configuration est fourni par sur la figure IV.16.

L'observation des points de départ de la recirculation suivant les deux coupes, définies sur les figures IV.17, permet de constater que la base de la recirculation n'est pas circulaire mais plutôt rectangulaire (cf figure IV.18). Cette différence vient du fait que dans le plan de coupe, tel que  $\gamma = 0^\circ$  (et également  $\gamma = 90^\circ$ ), les particules sont plus proches les unes des autres. Le fluide situé dans cette zone avance plus lentement. La recirculation se fera donc décalée vers l'arrière de la sphère. Au contraire, dans le plan de coupe  $\gamma = 45^\circ$ , les particules sont plus espacées. Le fluide atteint alors une vitesse plus grande ce qui a pour conséquence de faire avancer la position de la recirculation. On aboutit ainsi à une modification de la base du tourbillon. Les lignes de courant dans ces deux plans sont

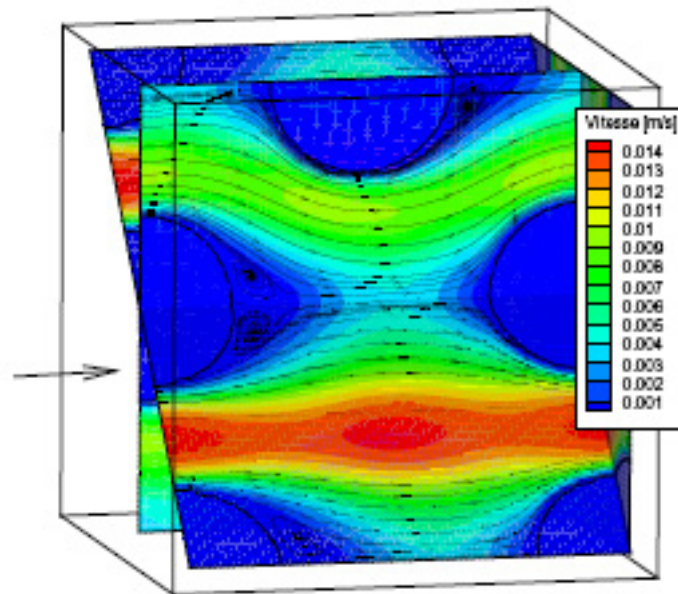


Figure IV.15 : *Ligne de courant et intensité de la vitesse pour  $\alpha_s = 0.15$  et  $Re = 100$*

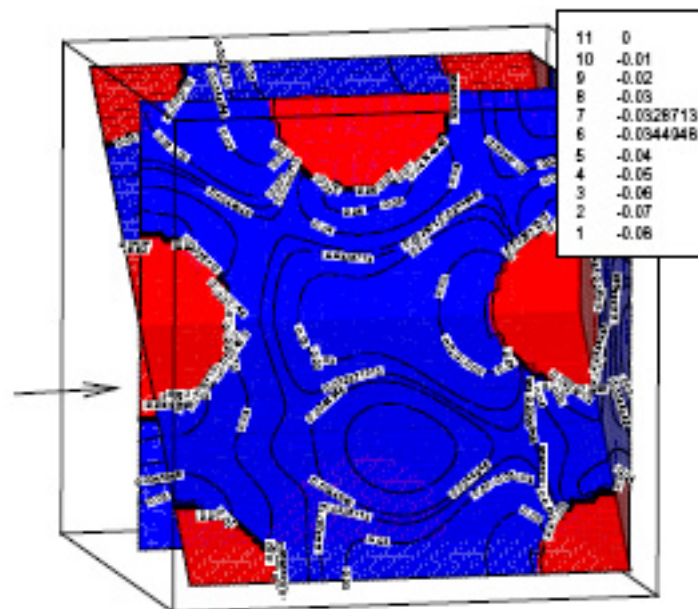


Figure IV.16 : *Champ de pression pour  $\alpha_s = 0.15$  et  $Re = 100$*

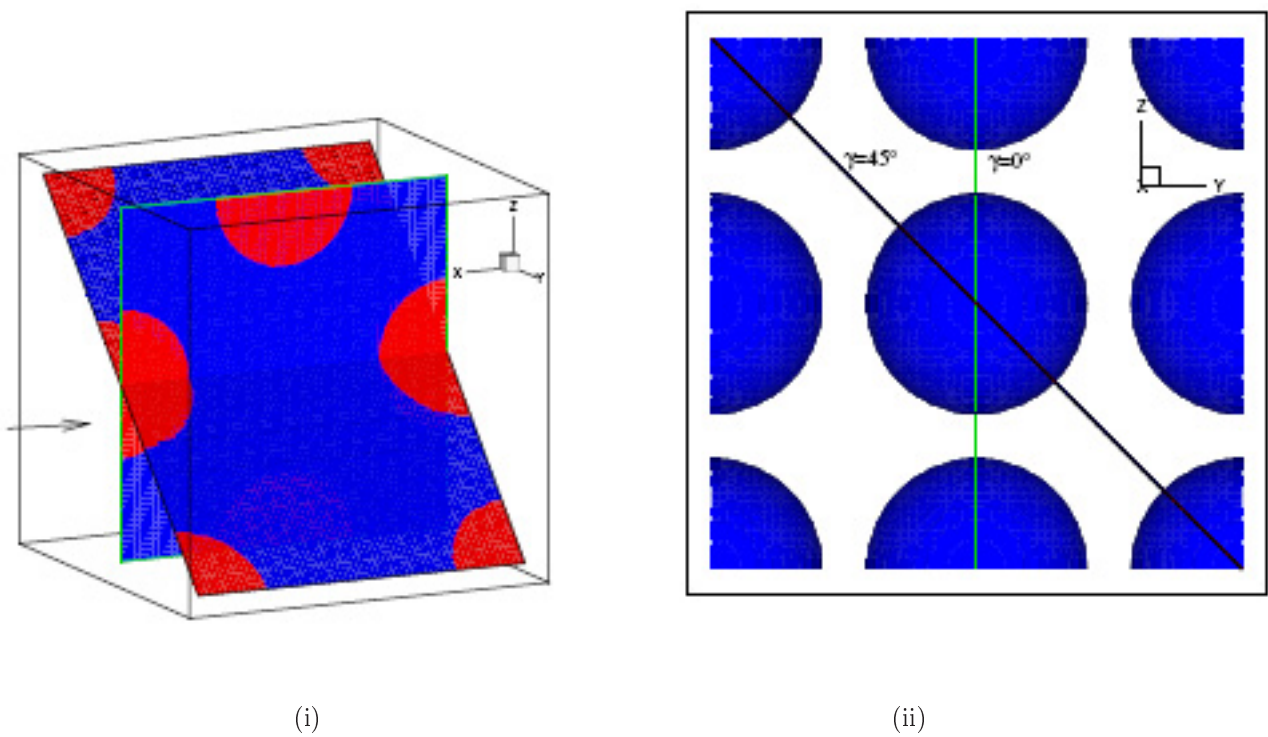


Figure IV.17 : Définition des plans de coupe : vert : coupe suivant  $\gamma = 0^\circ$ , noir : coupe suivant  $\gamma = 45^\circ$

représentées sur les figures IV.18 afin de mieux visualiser la taille des tourbillons.

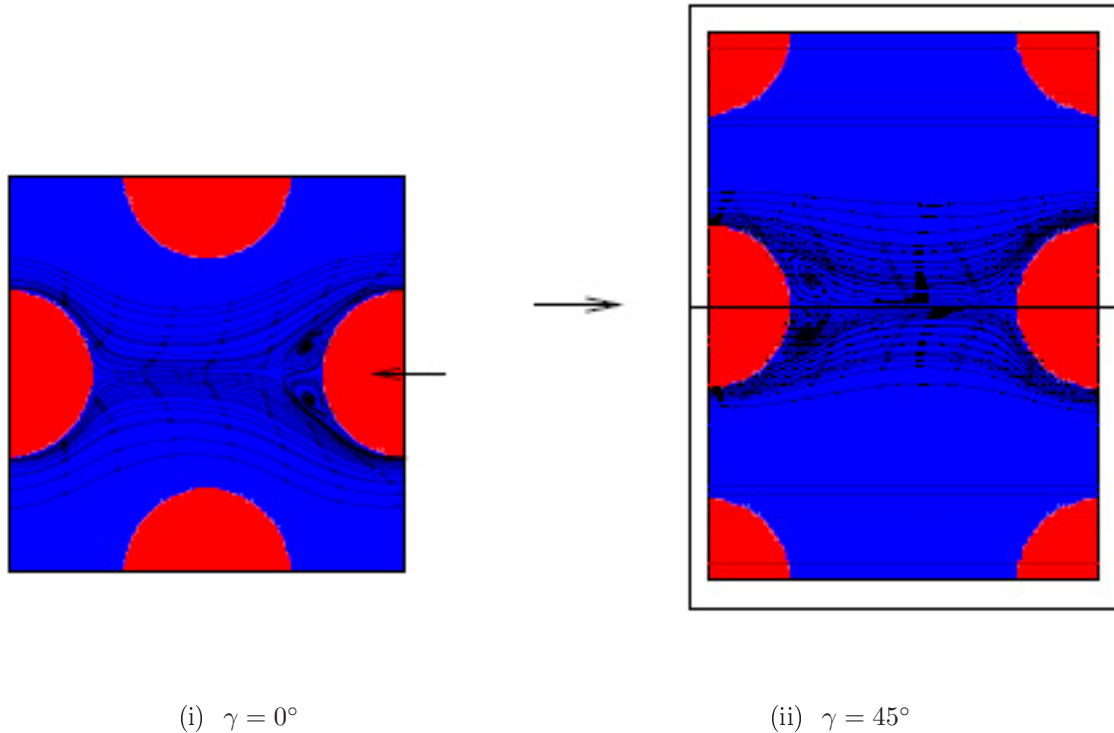


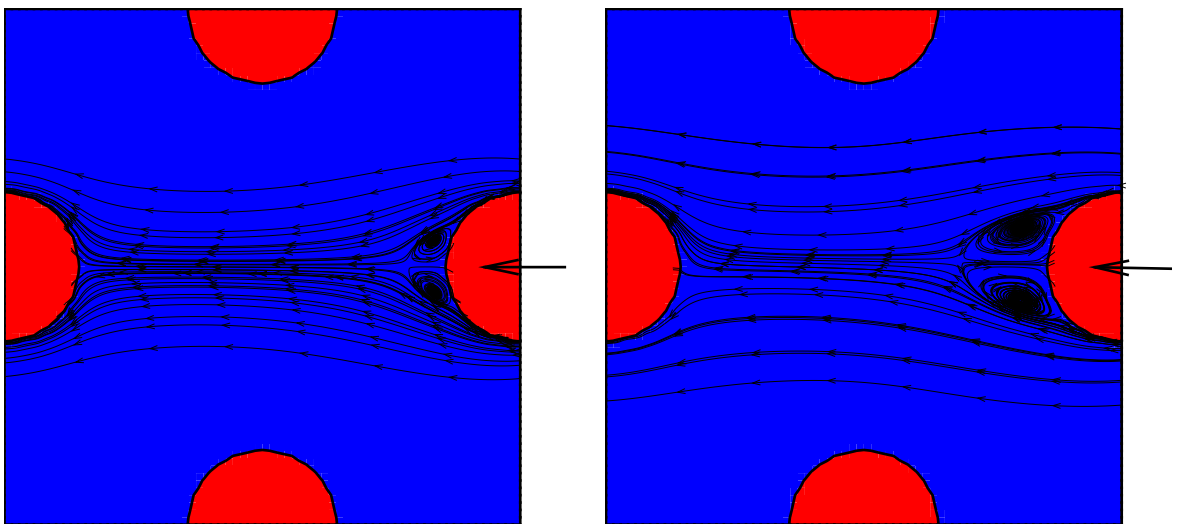
Figure IV.18 : *Vue en coupe des lignes de courant pour  $\alpha_s = 0.15$  et  $Re = 100$*

En augmentant la vitesse de l'écoulement, les recirculations s'allongent. Par exemple, nous avons tracé les lignes de courant pour  $\alpha_s = 0.05$  et  $Re = 100$  (figure IV.19ii) et  $Re = 50$  (figure IV.19i) dans le plan  $\gamma = 0^\circ$ . On distingue très nettement la différence de taille entre les deux recirculations : la recirculation derrière la sphère pour un nombre de Reynolds de 100 est deux fois plus grande que celle obtenue pour un nombre de Reynolds de 50.

### Coefficient de traînée

Nous avons par ailleurs déterminé le coefficient de traînée du réseau cubique face centrée. Afin de le comparer à celui d'une sphère isolée placée dans des conditions d'écoulement identiques, nous l'avons normalisé par le coefficient donné par Schiller et Nauman à savoir :

$$C_{Schiller} = \frac{24}{Re} (1 + 0.15Re^{0.687})$$



(i)  $Re=50$

(ii)  $Re=100$

Figure IV.19 : *Comparaison des lignes de courant pour  $\alpha_s=0.05$*

$\alpha_s$	Wen and Yu (1966)	Ergun (1952)	Massol (2004)	$C_d/C_{Schiller}$
0.05	1.09	0.80	-	1.49
0.1	1.20	1.04	-	1.85
0.15	1.32	1.28	2.14	1.79
0.2	1.46	1.53	-	2.34
0.3	1.83	2.01	3.00	2.39
0.4	2.38	2.49	3.67	3.91
0.5	3.25	2.97	-	4.99
0.6	4.75	3.45	-	6.11

Tableau IV.4 : Comparaison du coefficient de traînée adimensionné pour  $Re = 10$ 

Le nombre de Reynolds est alors défini de la même façon que pour le réseau. Les résultats que nous avons obtenus sont consignés dans les tableaux IV.4, IV.5, IV.6 et IV.7. Nous y avons inclus les valeurs des coefficients de traînée calculées à partir des corrélations données par Wen and Yu (1966), Ergun (1952) et les résultats numériques de Massol (2004). L'expression du coefficient de traînée proposée par Wen and Yu (1966) a été obtenue à partir de données expérimentales pour un lit fluidisé lorsque celui-ci a atteint son état stationnaire. Cette expression tient compte de la fraction volumique de fluide  $\alpha_f$  et se présente sous la forme :

$$\frac{C_d}{C_{Schiller}} = \left( \frac{1}{\alpha_f} \right)^{1.7} \quad (\text{IV.11})$$

Le domaine de validité est  $0.001 \leq Re \leq 1000$ . A partir d'expériences de lits fluidisés dans des configurations d'écoulements de type gaz/particule, Ergun (1952) a suggéré l'expression suivante pour le coefficient de traînée :

$$C_d = \frac{4}{3} \left( 1.75 + 150 \frac{\alpha_s}{Re} \right) \quad (\text{IV.12})$$

On remarque que cette expression ne permet pas de retrouver la traînée d'une sphère isolée si nous l'extrapolons vers  $\alpha_s = 0$ . Ainsi, son utilisation pour des fractions volumiques en solide trop faibles n'est pas recommandée.

L'évolution du coefficient de traînée en fonction de la concentration est tracée sur les figures IV.20 pour chaque nombre de Reynolds étudié.

$\alpha_s$	Wen and Yu (1966)	Ergun (1952)	Massol (2004)	$C_d/C_{Schiller}$
0.05	1.09	1.65	1.16	1.08
0.10	1.20	1.78	-	1.74
0.15	1.32	1.91	-	1.62
0.20	1.46	2.04	1.49	1.81
0.30	1.83	2.30	2.02	1.65
0.40	2.38	2.56	2.45	2.69
0.50	3.25	2.82	3.03	3.59
0.60	4.75	3.08	3.88	5.07

Tableau IV.5 : Comparaison du coefficient de traînée adimensionné pour  $Re = 50$

$\alpha_s$	Wen and Yu (1966)	Ergun (1952)	Massol (2004)	$C_d/C_{Schiller}$
0.05	1.09	2.23	-	0.89
0.10	1.20	2.32	-	1.28
0.15	1.32	2.41	-	1.47
0.20	1.46	2.50	1.29	1.58
0.30	1.83	2.69	1.69	1.40
0.40	2.38	2.87	2.01	2.28
0.50	3.25	3.05	2.50	3.27
0.60	4.75	3.24	3.45	5.01

Tableau IV.6 : Comparaison du coefficient de traînée adimensionné pour  $Re = 100$

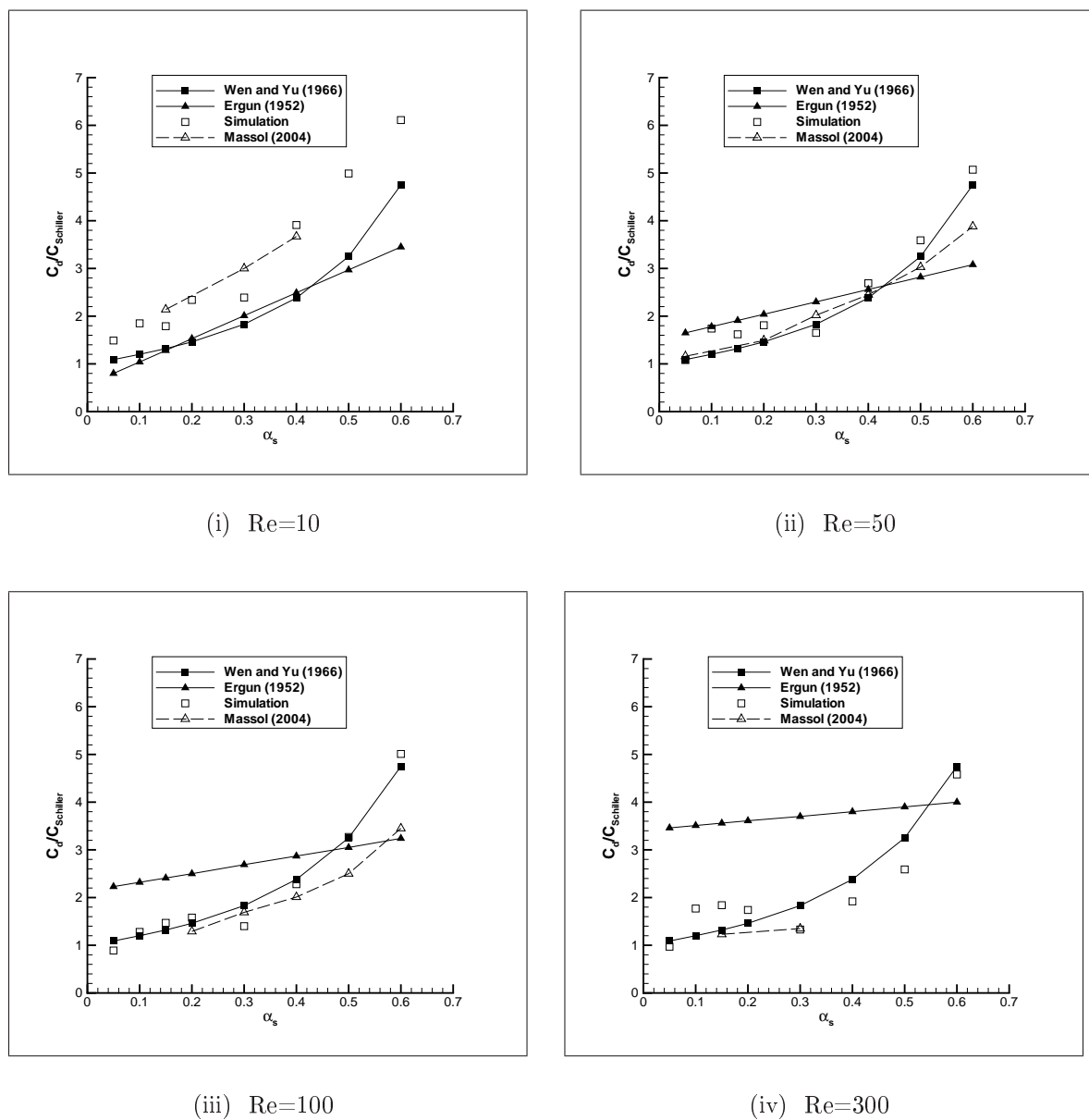


Figure IV.20 : Coefficient de traînée adimensionnée pour plusieurs  $Re$



$\alpha_s$	Wen and Yu (1966)	Ergun (1952)	Massol (2004)	$C_d/C_{Schiller}$
0.05	1.09	3.46	-	0.97
0.10	1.20	3.51	-	1.77
0.15	1.32	3.56	1.23	1.84
0.20	1.46	3.61	-	1.74
0.30	1.83	3.70	1.35	1.33
0.40	2.38	3.80	-	1.92
0.50	3.25	3.90	-	2.59
0.60	4.75	4.00	-	4.58

Tableau IV.7 : Comparaison du coefficient de traînée adimensionné pour  $Re = 300$

On constate que nos résultats concordent bien avec les données de la littérature. On note toutefois que pour les faibles valeurs de Reynolds, nous surestimons l'intensité de la traînée par rapport à ce qu'obtiennent Wen and Yu (1966) et Ergun (1952). Mais nos résultats se rapprochent de ceux de Massol (2004) qui trouve des valeurs plus importantes pour  $Re = 10$ .

En augmentant le nombre de Reynolds, nous parvenons à des résultats qui sont plus conformes. Plus précisément, nos valeurs de coefficient de traînée suivent la courbe d'évolution proposée par Wen and Yu (1966) et corroborent, dans tous les cas, les résultats acquis par Massol (2004) par simulation numérique. Toutefois, nous devons traiter ces résultats avec précaution car nous les comparons à des corrélations empiriques obtenues pour des réseaux de particules réparties aléatoirement. Nous n'avons pas présenté les autres corrélations existantes car chacune a un domaine de validité différent. Les corrélations de Wen and Yu (1966) et Ergun (1952) étant les plus employées, nous avons choisi de les conserver. Dans la pratique et compte tenu du nombre important des expressions de  $C_d$ , il est d'usage de considérer le coefficient de traînée proposée par Wen and Yu (1966) pour  $\alpha_s \leq 0.2$  et de retenir la valeur donnée par Ergun (1952) lorsque  $\alpha_s > 0.2$ . Gobin et al. (2001) proposent plutôt de choisir le coefficient donné par la relation de Wen and Yu (1966) lorsque  $\alpha_s \leq 0.3$  et pour les concentrations supérieures, de prendre la valeur minimale entre le coefficient de traînée obtenu par Wen and Yu (1966) et par Ergun

$\alpha_s$	Maillage		
	$15 \times 15 \times 15$	$35 \times 35 \times 35$	$70 \times 70 \times 70$
0.1	3.87	2.51	1.85
0.15	3.11	2.95	1.79
0.2	6.95	3.34	2.34
0.3	2.38	2.58	2.39
0.4	21.03	5.69	3.91
0.5	-	8.74	4.99

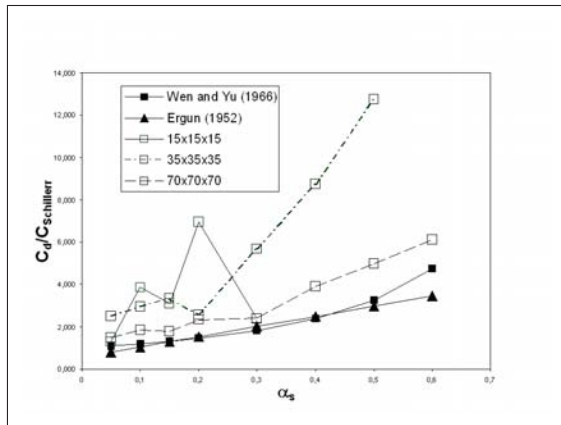
Tableau IV.8 : *Coefficient de traînée : étude en maillage pour  $Re = 10$* 

(1952).

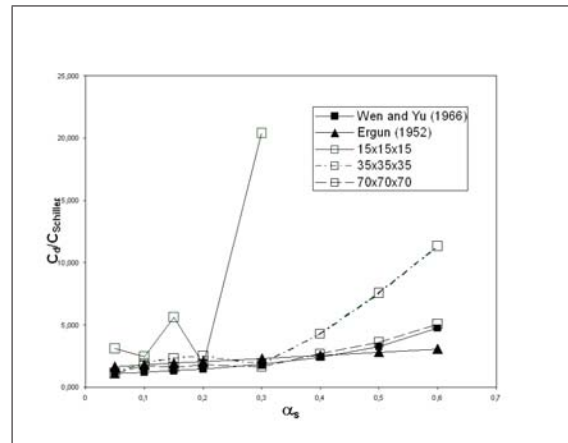
### Paramètres numériques

**Sensibilité au maillage** Nous avons tout d'abord testé l'influence des paramètres numériques sur les résultats. Le premier paramètre important est la résolution de la grille de calcul qui conditionne la précision des données extraites du calcul numérique. Par exemple, nous avons effectué le calcul du coefficient de traînée sur trois maillages ( $15 \times 15 \times 15$ ,  $35 \times 35 \times 35$ ,  $70 \times 70 \times 70$ ), afin d'étudier l'évolution des résultats en fonction du nombre de points dans le domaine de calcul. Les caractéristiques de ces maillages sont indiquées dans le tableau IV.1. Les figures IV.21 représentent l'évolution du coefficient de traînée pour les trois maillages précisés précédemment. Nous pouvons remarquer la nette amélioration des résultats en raffinant le maillage. Le raffinement est surtout important pour la détermination du coefficient de traînée pour les fortes concentrations. En effet, comme nous travaillons sur un domaine de taille constante, lorsque nous augmentons le rayon des particules pour augmenter la concentration, on réduit le nombre de mailles dans le domaine fluide. Ainsi, le fluide est moins bien résolu, ce qui conduit à une mauvaise prise en compte des effets de frottements sur la sphère. Les tableaux IV.8, IV.9 et IV.10 regroupent les valeurs du coefficient de traînée que nous avons reportées sur les graphiques.

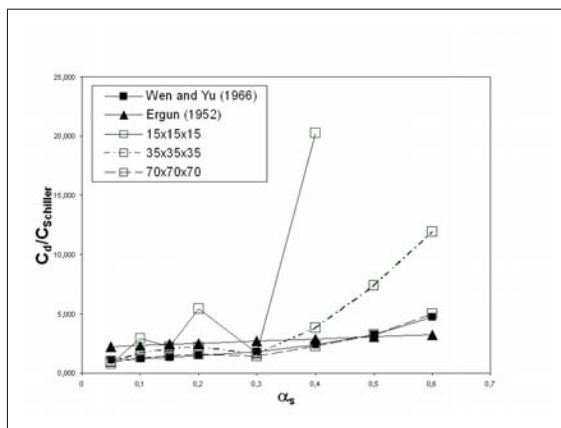
**Méthodes de pénalisation de l'incompressibilité** Nous avons également examiné l'incidence sur les résultats de la manière d'imposer la contrainte d'incompressibilité  $\nabla \cdot \vec{u} = 0$ . A cette fin, nous avons calculé le coefficient de traînée, pour un nombre de Reynolds de



(i)  $Re=10$



(ii)  $Re=50$



(iii)  $Re=100$

Figure IV.21 : Coefficient de traînée: étude en maillage

$\alpha_s$	Maillage		
	15×15×15	35×35×35	70×70×70
0.05	0.02	1.14	1.08
0.1	3.11	1.92	1.74
0.15	2.45	2.31	1.62
0.2	5.58	2.48	1.81
0.3	1.84	1.86	1.65
0.4	20.42	4.28	2.69
0.5	187.37	7.55	3.59
0.6	-	11.34	5.07

Tableau IV.9 : *Coefficient de traînée : étude en maillage pour  $Re = 50$* 

$\alpha_s$	Maillage		
	15×15×15	35×35×35	70×70×70
0.05	0.80	0.99	0.89
0.1	2.91	1.69	1.28
0.15	2.24	2.09	1.47
0.2	5.42	2.18	1.58
0.3	1.65	1.62	1.40
0.4	20.25	3.84	2.28
0.5	-	7.39	3.27
0.6	-	11.92	5.01

Tableau IV.10 : *Coefficient de traînée : étude en maillage pour  $Re = 100$*

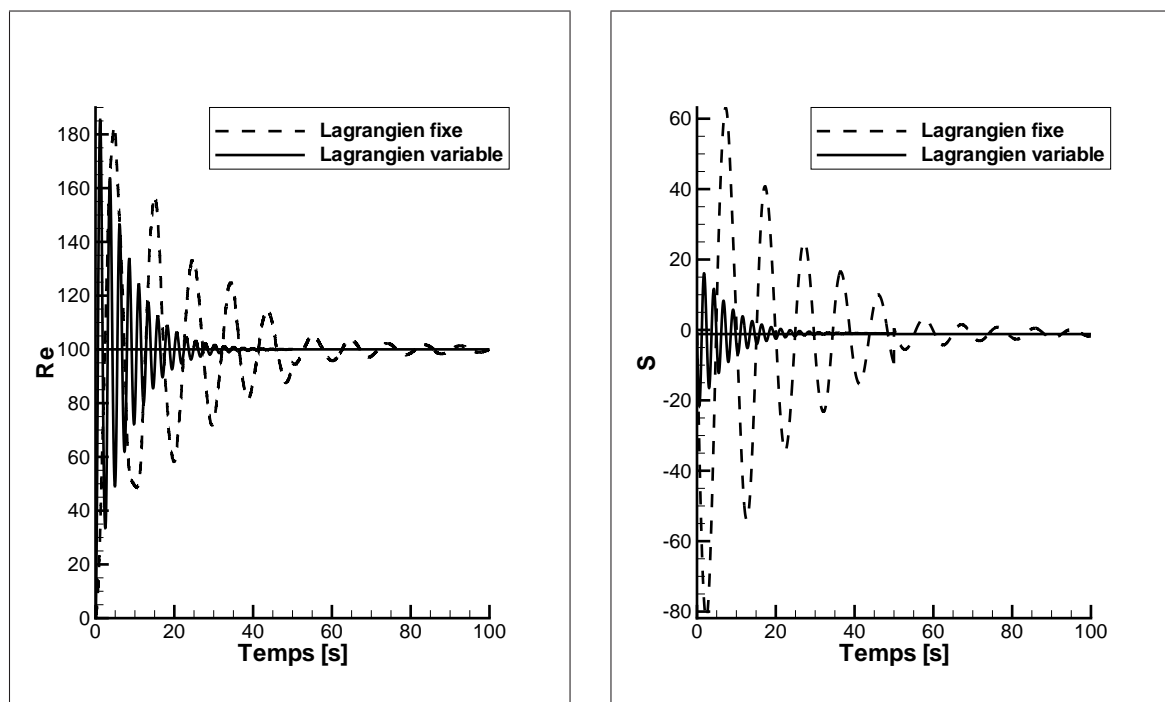
$\alpha_s$	Lagrangien variable	Lagrangien fixe
0.10	1.28	1.43
0.15	1.47	1.21
0.20	1.58	1.83
0.30	1.40	1.55
0.40	2.28	1.28
0.50	3.27	3.34
0.60	5.01	5.25

Tableau IV.11 : *Coefficient de traînée pour  $Re = 100$  : sensibilité à la méthode de pénalisation*

100, avec la méthode de pénalisation lagrangienne variable et avec la méthode classique du lagrangien augmenté, dans laquelle la valeur du paramètre  $\lambda$  est constante en tout point et au cours du temps. Les résultats que nous avons ainsi obtenus sont représentés dans le tableau IV.11. La méthode de pénalisation ne semble pas produire un effet prépondérant sur les résultats : les deux méthodes donnent des valeurs de  $C_d$  du même ordre de grandeur. Ce constat est plutôt logique dans la mesure où nous atteindrons le même état stationnaire de l'écoulement. En revanche, l'établissement de l'écoulement, au nombre de Reynolds fixé, survient beaucoup plus rapidement avec le lagrangien variable. Sur les figures IV.22i et IV.22ii, nous avons tracé respectivement l'évolution temporelle du nombre de Reynolds et de la valeur du terme source correspondant. Grâce à cette étude, nous mesurons bien l'apport conséquent de la technique de lagrangien variable lors de la phase instationnaire. En effet, le temps de réponse de notre système est plus court lorsque nous employons cette dernière méthode.

#### IV.2.4 Conclusion

A partir de l'étude d'un écoulement à travers un réseau ordonné de particules fixes, nous avons pu mettre en évidence et comprendre les mécanismes liés aux interactions particulaires. Le réseau cubique face centrée est une première approche du système complexe que constitue le lit fluidisé. Il regroupe tous les effets liés à l'encombrement des particules



(i) Nombre de Reynolds

(ii) Terme source

Figure IV.22 : Comparaison entre la méthode de lagrangien variable et de lagrangien fixe :

et permet de donner une estimation de la force de traînée pour un système chargé en particules. Par nos simulations numériques, nous sommes parvenus à retrouver les valeurs du coefficient de traînée de la littérature. Hormis pour des nombres de Reynolds faibles ( $Re = 10$ ), nos valeurs sont très proches de celles déterminées par Wen and Yu (1966).

## IV.3 Réseaux aléatoires

A présent, nous avons validé notre modèle dans des configurations mettant en oeuvre les interactions particulières et les interactions avec le fluide environnant de façon séparée. Nous allons donc utiliser notre modèle pour l'étude d'un réseau de particules mobiles réparties aléatoirement. Il s'agit en fait d'expérimenter un ensemble de particules représentatif de l'état local d'un lit fluidisé par simulation numérique directe. Cette partie de notre travail constitue une originalité importante car l'étude de configurations d'écoulements avec des particules mobiles par simulation numérique directe a été peu réalisée.

### IV.3.1 Présentation du cas

Notre objet d'étude est constitué d'un cube contenant plusieurs particules. La figure IV.23 montre un exemple de la configuration d'étude pour neuf particules. Nous avons choisi deux types de particules dont les caractéristiques sont précisées dans le tableau IV.12. Le choix de billes de Nylon a été essentiellement motivé par le fait que leur utilisation est courante dans de nombreuses expériences. Ainsi, leurs caractéristiques sont parfaitement connues. Nous disposons alors d'une base de données importante. Le fluide que nous employons dans nos simulations est de l'eau avec les propriétés physiques standards à 25°C : à cette température, sa masse volumique est de  $1000 \text{ kg/m}^3$  et sa viscosité est égale à  $1 \times 10^{-3} \text{ Pa.s}$ . Nous avons également effectué quelques simulations avec des billes de polyméthacrylate de méthyle (PMMA). Les caractéristiques sont très proches de celle du Nylon, notamment pour la masse volumique et le diamètre. Par contre, le fluide auquel nous associons ces particules est nettement plus visqueux que l'eau. De ce fait, le nombre de Reynolds basé sur la vitesse terminale de chute d'une particule de PMMA est nettement plus petit que celui de la bille de Nylon. Le fluide utilisé, dans ce cas, est du dibutylphthalate dont les propriétés à 26°C sont :

$$\begin{aligned} \text{masse volumique } \rho_f &: 1045.12 \text{ kg/m}^3 \\ \text{viscosité dynamique } \mu_f &: 17 \times 10^{-3} \text{ Pa.s} \end{aligned}$$

Particule	Diamètre [mm]	Masse volumique [ $\text{kg}/\text{m}^3$ ]	Vitesse de sédimentation [m/s]	$Re_t$	$St$	Exposant de Richardson $n$
Nylon	6.35	1140	0.136	785	6.9	2.4
PMMA	6.315	1202	0.075	29	1.5	-

Tableau IV.12 : *Caractéristiques des particules utilisés pour le réseau de sphères mobiles (Gevrin (2002))*

Ce couple de fluide/particule correspond à celui employé par Gevrin (2002) dans ses expériences de fluidisation. Le nombre de particules à l'intérieur de la boîte de simulation est compris entre 9 et 144. La largeur du domaine est variable. Pour modifier la concentration en particules dans le cube, nous avons fait varier la largeur de son côté afin de ne pas changer les caractéristiques des particules. Nous avons mentionné dans le tableau IV.13 les dimensions de la boîte d'étude en fonction de la concentration en particules. Nous imposons des conditions aux limites de type périodique sur chacune des faces du domaine de calcul. Dans toutes les simulations réalisées dans cette section, nous avons employé la méthode de suivi de particule eulérien/langrangien. Afin d'assurer la non déformation des sphères, nous avons appliqué la méthode de lagrangien variable. La réalisation de la contrainte d'incompressibilité du fluide est aussi obtenue par cette même méthode. Grâce à ces outils, nous sommes parvenus à un bon compromis entre la résolution des équations de Navier-Stokes et la mise en oeuvre des contraintes du solide et du fluide. Nous avons effectué nos calculs numériques sur un maillage cartésien fixe dont les dimensions sont  $70 \times 70 \times 70$ . Le fait de travailler avec un maillage fixe et des dimensions de domaines variables entraîne une réduction de la résolution du maillage dans la zone fluide lorsque nous augmentons la concentration en particules. De ce fait des imprécisions peuvent être notées quant à la résolution du champ de vitesse dans le fluide. La représentation des particules n'est pas trop affectée par cette diminution de pas d'espace car nous avons toujours un minimum de six points dans le diamètre de la sphère. Le pas de temps pour nos simulations est variable. Nous le modifions au cours du calcul, de sorte que la particule ne parcoure pas plus d'une maille en une itération de temps. Plus exactement, le critère de stabilité Courant-Friedrich-Levy (CFL) est fixé à 0.2. Le nombre de mailles dans chaque direction est maintenu constant à 70 pour toutes les configurations de calcul. Les particules sont initialisées de façon aléatoire.



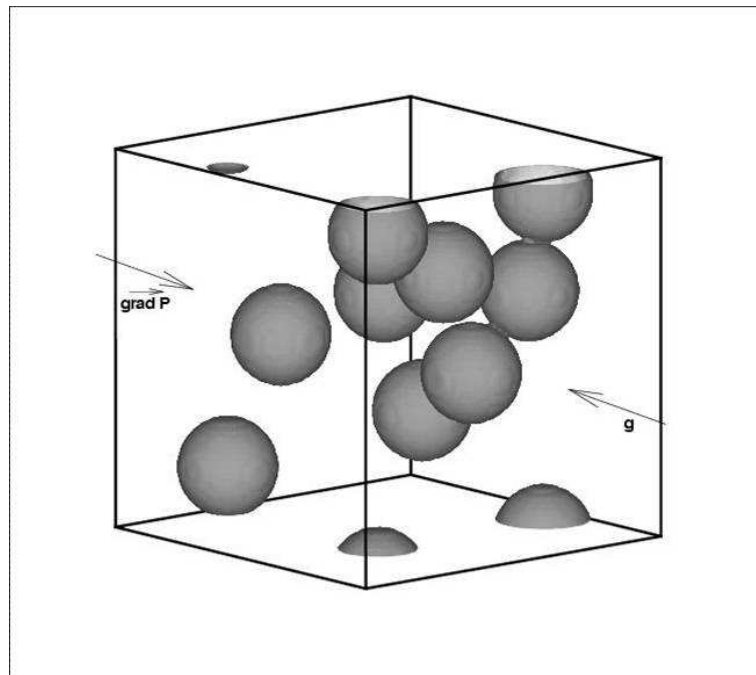


Figure IV.23 : Exemple de configuration pour le réseau de particules mobiles

Concentration		Nombre de particules			
$\alpha_s$	9	27	72	144	
0.05	2.890	4.168	5.780	7.282	
0.10	2.294	3.308	4.587	5.780	
0.15	2.004	2.890	4.007	5.049	
0.20	1.820	2.626	3.641	4.587	
0.30	1.590	2.294	3.181	4.007	
0.40	1.445	2.084	2.890	3.641	
0.50	1.341	1.935	2.683	3.380	
0.60	1.262	1.820	2.524	3.181	

Tableau IV.13 : Dimensions de la boîte d'étude en fonction de la concentration (Données exprimées en cm)

### IV.3.2 Imposition de l'écoulement

Afin de mettre en mouvement l'ensemble constitué par le fluide et les particules, nous devons soit imposer un gradient de pression dans une direction soit imposer la vitesse sur une des faces du domaine cubique. Le choix de la seconde solution n'est pas judicieux au vue des conditions aux limites que nous nous sommes fixées. En effet, nous avons des conditions de périodicité sur toutes les limites du domaine, ce qui empêche l'utilisation d'une vitesse imposée. Compte tenu de ces restrictions, nous avons opté pour l'imposition d'un gradient de pression. Comme pour le cas du réseau cubique face centrée, nous avons imposé le gradient de pression sous la forme d'un terme source volumique dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement. Afin de reproduire les conditions d'écoulement dans un lit fluidisé stable, nous devons équilibrer le poids de l'ensemble formé par le fluide et les particules par une force supplémentaire. En effet, si nous considérons le lit lorsqu'il est à l'équilibre, le bilan des forces s'appliquant au système s'écrit :

$$-\int_{\mathcal{V}_f} \nabla P + \rho_f \vec{g} \, dv - \int_{\mathcal{V}_s} \nabla P + \rho_s \vec{g} \, dv = 0 \quad (\text{IV.13})$$

soit

$$(\alpha_s \rho_s + \alpha_f \rho_f) \vec{g} + \nabla P = 0 \quad (\text{IV.14})$$

Il nous faut donc imposer un terme source tel que la valeur de son intégrale sur le volume total soit égale à  $(\alpha_s \rho_s + \alpha_f \rho_f) \vec{g}$ . Pour réaliser cette condition, nous fixons donc la valeur du terme source volumique  $S$  de la façon suivante :

$$\begin{aligned} S &= (\rho_f - \rho_{moy})g && \text{dans le fluide} \\ S &= (\rho_s - \rho_{moy})g && \text{dans le solide} \end{aligned}$$

$\rho_{moy} = \alpha_s \rho_s + \alpha_f \rho_f$  représente la masse volumique moyenne de la phase formée par le fluide et les inclusions. Nous assurons ainsi l'équilibre des forces agissant sur le lit fluidisé en permanence.

### IV.3.3 Résultats

Nous allons présenter dans ce paragraphe les résultats que nous avons obtenus lors de l'étude d'un réseau de particules mobiles.

**Vitesse de fluidisation** Une des principales difficultés dans l'étude des lits fluidisés est de prévoir la vitesse nécessaire pour fluidiser le système. Nous avons vu dans le premier chapitre que plusieurs paramètres entrent en ligne de compte dans l'établissement de l'état de fluidisation. Néanmoins, il existe quelques corrélations empiriques qui permettent de donner un ordre de grandeur, voire d'estimer assez justement la vitesse de fluidisation en fonction de la concentration en particules du lit fluidisé. La relation de Richardson and Zaki (1954), dont l'expression est rappelée par l'équation (IV.15), offre une bonne approximation de la vitesse de fluidisation dans de nombreuses configurations.

$$U_s = U_t(1 - \alpha_s)^n \quad (\text{IV.15})$$

où l'exposant  $n$  dépend du nombre de Reynolds calculé à partir de la vitesse terminale de chute d'une particule isolée en milieu infini. Les valeurs de  $n$  sont les suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{ll} n = 4.65 & Re_t < 0.2 \\ n = 4.4Re_t^{-0.03} & 0.2 < Re_t < 1 \\ n = 4.4Re_t^{-0.1} & 200 < Re_t < 500 \\ n = 2.4 & Re_t > 500 \end{array} \right.$$

La vitesse moyenne des particules  $\vec{U}_s$  est calculée suivant la relation IV.16 :

$$\vec{U}_s = \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} \vec{u}_i \quad (\text{IV.16})$$

$$\text{avec } \vec{u}_i = \frac{1}{\mathcal{V}_{p_i}} \int_{\mathcal{V}_{p_i}} \vec{u}_s \, dv \quad (\text{IV.17})$$

$N_p$  est le nombre total de particules,  $\vec{u}_i$  la vitesse de chaque particule  $i$  à l'instant  $t$  et  $\mathcal{V}_{p_i}$  le volume occupé par la particule  $i$ . La vitesse du fluide est obtenue en effectuant la moyenne phasique suivante :

$$\vec{U}_f = \frac{1}{\mathcal{V}_f} \int_{\mathcal{V}_f} \vec{u}_f \, dv \quad (\text{IV.18})$$

La vitesse relative est alors définie par :

$$\vec{U}_{relatif} = \vec{U}_s - \vec{U}_f \quad (\text{IV.19})$$

Sur la figure IV.24, nous avons tracé un exemple de l'évolution des vitesses moyennes du fluide et des particules au cours du temps pour une concentration de 0.1 obtenue avec 27

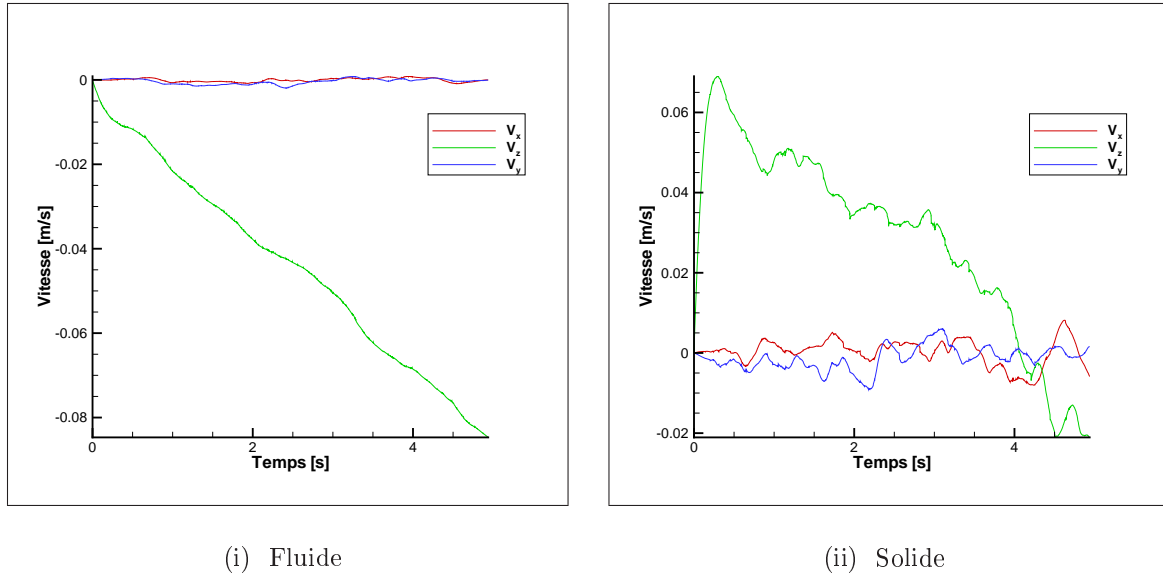


Figure IV.24 : *Vitesse moyenne des particules et du fluide pour  $\alpha_s = 0.1$  obtenue avec 27 particules*

particules. On remarque que le mouvement global de l'ensemble est bien dirigé suivant le gradient de pression que nous imposons. Les vitesses transversales oscillent dans les deux cas autour d'une valeur nulle, ce qui montre que le calcul numérique n'engendre pas de dérive suivant une direction transversale au gradient de pression. Bien que les vitesses des deux phases n'atteignent pas une valeur constante, nous pouvons voir sur la figure IV.25 que la vitesse relative, définie comme la différence des vitesses moyennes phasiques (voir Eq. IV.5 et IV.19), est stabilisée autour d'une valeur comprise entre 0.07 et 0.08  $m/s$ . Cette observation s'explique par le fait que la simulation est menée en respectant des conditions particulières de périodicité sur toutes les limites du domaine. Les particules et le fluide sont alors libres de se déplacer dans toutes les directions. Il n'y a aucune force de résistance, telle que la présence d'une paroi, pour s'opposer aux mouvements d'ensemble. On note seulement un équilibre entre le fluide et les particules qui résulte du frottement du fluide sur les sphères, du gradient de pression et de l'action de la gravité. L'établissement de cet équilibre ne se fait pas instantanément : la figure IV.24ii montre que la phase solide est tout d'abord entraînée avant de subir les effets de la gravité, ce qui explique la décroissance de la vitesse verticale. Le fluide "tombe", quant à lui, dès le début de la simulation. En fait, tout se passe comme si nous étions dans un cas de sédimentation. L'ensemble des deux phases chute avec une accélération constante puisqu'il n'y a pas de

force qui s'oppose à son mouvement.

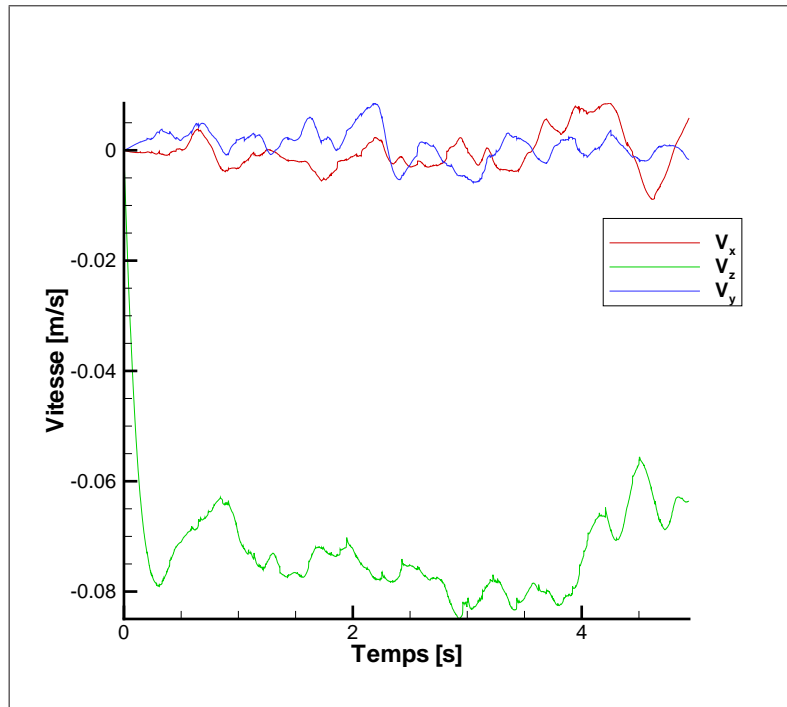


Figure IV.25 : *Vitesse relative*

Suite à cette observation et compte tenu de la variation de la vitesse relative autour d'une valeur moyenne au cours du temps, nous avons étudié l'influence de la concentration en particules sur la valeur de la vitesse relative moyenne. Étant donné la forte analogie avec le phénomène de sédimentation, nous pouvons nous attendre à une relation du type loi de puissance pour la dépendance de la vitesse relative à la concentration. Nous avons reporté sur la figure IV.26 nos données établies avec 9, 27 et 72 particules.

Comme nous l'avons prédit auparavant et comme le confirme la figure IV.26, l'évolution de la vitesse relative obéit bien à une loi de type puissance. La régression linéaire, tracée en coordonnées logarithmiques, nous donne l'expression suivante pour l'évolution de la vitesse de fluidisation :

$$U = U_t(1 - \alpha_s)^n \quad (\text{IV.20})$$

avec  $U_t \simeq 0.08 \text{ m/s}$  et le coefficient de Richardson  $n$  compris entre 2.7 et 4.2. Nous avons utilisé dans cette simulation des billes de Nylon. D'après le tableau IV.12 donnant les caractéristiques de cette particule, la vitesse de sédimentation de la bille est de  $0.136 \text{ m/s}$  et son exposant  $n$  est égal à 2.4. Nous obtenons des valeurs largement inférieures en ce qui

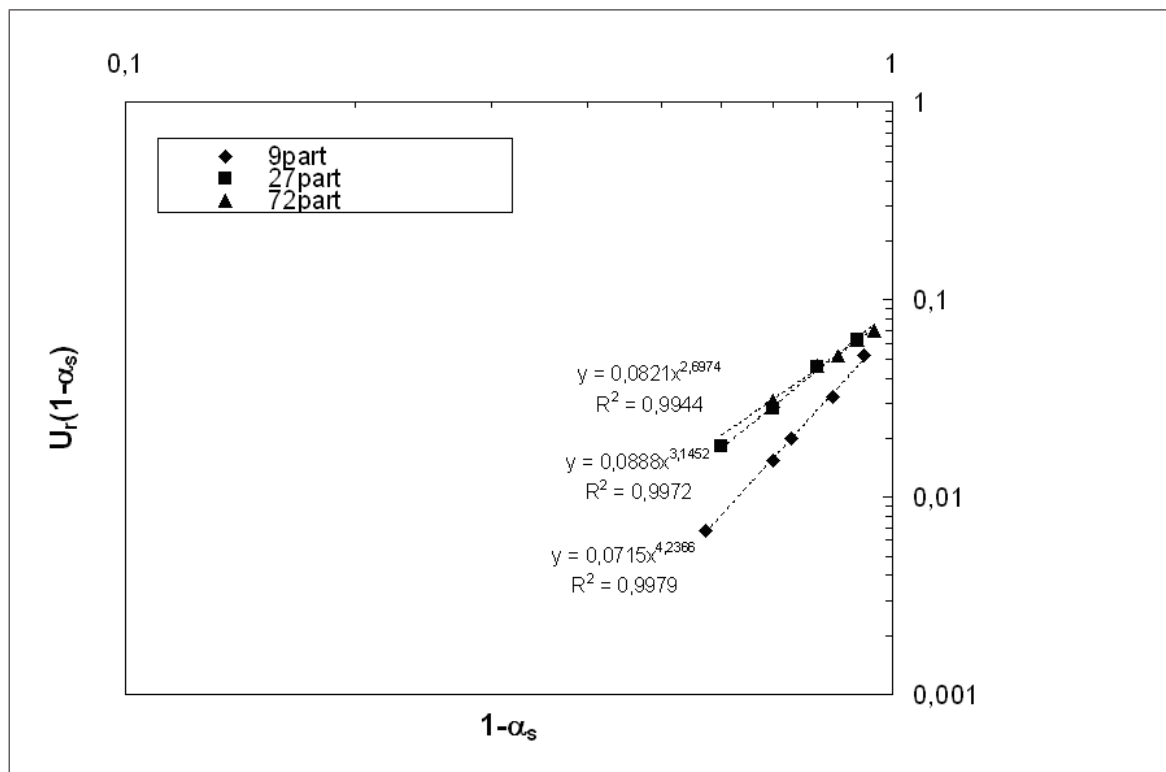


Figure IV.26 : Evolution de la vitesse relative en fonction de la concentration

concerne la vitesse de sédimentation. La vitesse que nous trouvons est plutôt du même ordre de grandeur que celle de la bille de PMMA. En augmentant le nombre de particules dans notre simulation, la valeur de l'exposant  $n$  tend vers 2.7. Cette valeur est proche de la valeur 2.4 prévue par la corrélation de Richardson et Zaki. Les simulations menées avec 144 particules n'ont pas encore permis de confirmer cette solution. Effet, ces calculs sont en cours mais nécessitent des maillages supérieurs à  $70^3$ , typiquement  $140^3$ , afin de conclure définitivement sur ce résultat.

**Fonction de répartition de paires  $g(r)$**  Un des paramètres importants utilisés dans les modèles de lits fluidisés est la fonction de répartition de paires  $g(r)$ . Elle donne une indication sur l'arrangement des particules dans le réseau. Cette fonction, encore désignée fonction d'encombrement ou fonction de distribution radiale, est couramment employée dans le domaine de la dynamique moléculaire. Elle permet en effet de caractériser l'état d'une phase en étudiant la répartition des molécules qui la constituent. Un exemple de la fonction de distribution de paires du méthane, tiré des travaux de Galliero (2003), est proposé sur la figure IV.28.  $g(r)$  traduit la probabilité de rencontrer une particule à une distance  $r$  donnée. Par exemple, nous avons tracé sur la figure IV.29 la fonction de répartition de paires pour le réseau cubique face centrée étudié dans le paragraphe précédent. Nous distinguons les pics de probabilités qui traduisent la présence de particules. En effet, nous retrouvons la distance  $L$  séparant les particules placées dans les coins du cube, ainsi que les particules situées sur les faces qui se trouvent à une distance  $L\sqrt{2}$ . Grâce à la fonction d'encombrement, nous pouvons connaître précisément la répartition d'un ensemble de particules. Dans le but de caractériser notre réseau de particules mobiles, nous avons déterminé la fonction de répartition de paires. L'objectif est d'identifier des arrangements particuliers qui peuvent éventuellement survenir au cours de l'écoulement. La fonction  $g(r)$  est définie comme suit :

$$g(r) = \frac{2\mathcal{V}}{N_p} \left\langle \sum_{i < j} \delta(r - r_{ij}) \right\rangle \quad (\text{IV.21})$$

où  $N_p$  est le nombre de particule total dans le volume  $\mathcal{V}$  considéré.  $\delta$  est la fonction de Dirac.  $g(r)$  est donc défini comme le nombre moyen de paires de particules  $i$  et  $j$  distantes de  $r$ . Numériquement, le calcul se fait en comptant, pour une particule  $i$  donnée, le nombre de particules voisines situées à une distance  $r + dr$ . Plus précisément, nous comptons le nombre de paires de particules contenues dans le volume  $\mathcal{V}(r + dr) - \mathcal{V}(r)$ , où  $\mathcal{V}(r + dr)$

et  $\mathcal{V}(r)$  désignent respectivement les volumes des sphères de rayon  $r$  et  $r + dr$ . Une vue bi-dimensionnelle de la configuration de calcul est dessinée sur la figure IV.27.

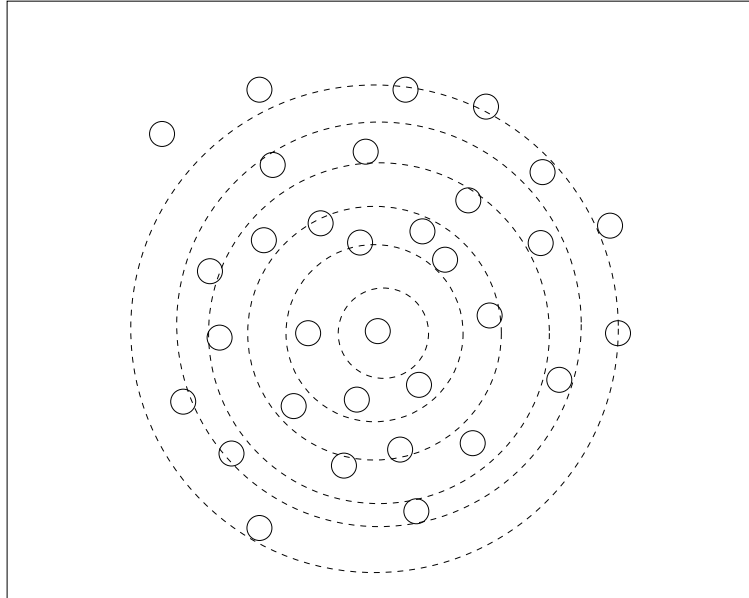


Figure IV.27 : Schéma du calcul numérique de  $g(r)$ . Les cercles concentriques définissent les volumes sphériques  $\mathcal{V}(r)$  de rayon  $r$

Afin d'identifier les arrangements éventuels qui peuvent se produire dans un réseau de particules mobiles, nous avons déterminé la fonction de distribution de paires pour plusieurs concentrations  $\alpha_s$ . Nous n'avons pas constaté de configuration remarquable des particules pour les gammes de concentrations étudiées. La figure IV.30 représente la fonction d'encombrement calculée pour une concentration  $\alpha_s = 0.3$  et 144 particules. Pour cette configuration, nous constatons que la valeur maximale de  $g(r)$  est obtenue pour  $r = 2.12R_p$ . Cela signifie que les particules se placent préférentiellement à une distance légèrement supérieure à un diamètre les unes des autres (la distance est calculée de centre à centre). Nous pouvons également noter que des particules sont présentes à une distance inférieure au rayon de la sphère. Ceci est dû à des particules qui s'interpénètrent au cours du mouvement. Comme nous l'avons évoqué dans le chapitre précédent, lorsque le maillage n'est pas suffisamment fin, il peut se produire des chevauchements de l'ordre de quelques mailles. Dans cette illustration, le chevauchement est de l'ordre de trois mailles. Néanmoins, les chevauchements sont ponctuels et les particules se séparent au bout de quelques itérations. Malgré tout, l'interpénétration des particules est un réel problème. En effet, les effets d'adhérence du fluide sur la particule sont mal pris en compte. Les



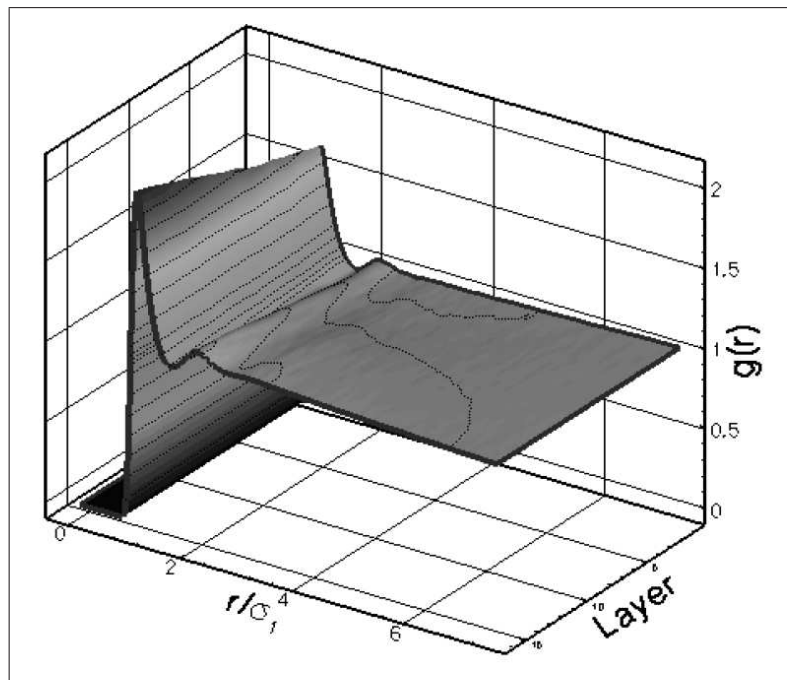


Figure IV.28 : *Fonction de distribution radiale du méthane en phase supercritique*  
(Galliero (2003))

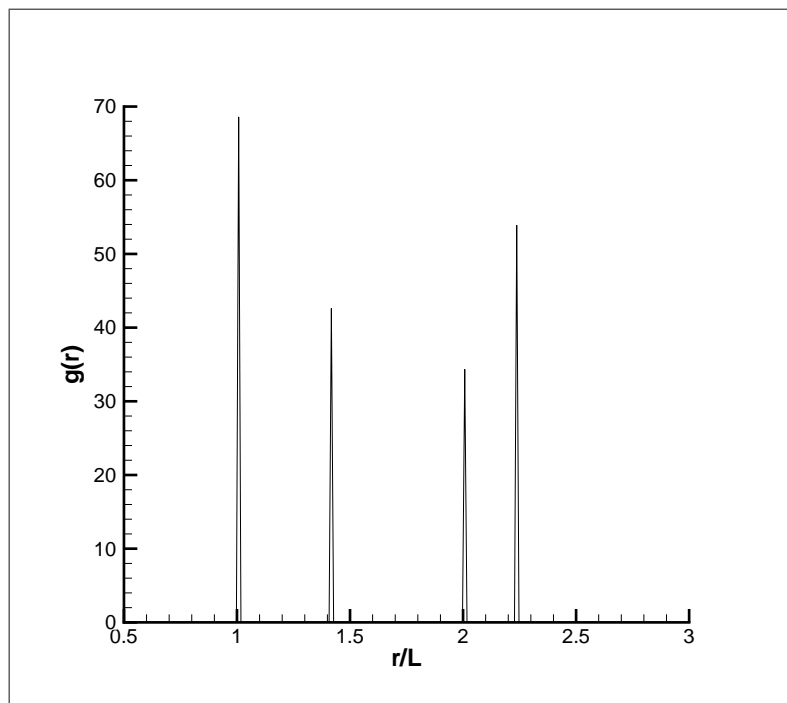


Figure IV.29 : *Fonction de distribution radiale du réseau CFC de pas  $L$*

forces de traînée sont mal évaluées et les statistiques d'encombrement polluées. Nous savons que l'interpénétration des particules résultent de la méthode de pénalisation par le lagrangien variable. En effet, celle-ci fournit le meilleur compromis entre la résolution des équations de conservation, l'imposition de  $\nabla \cdot \vec{u} = 0$  dans le fluide et l'indéformabilité dans le solide. Ce compromis induit que  $\nabla \cdot \vec{u} \neq 0$  (de l'ordre de  $10^{-3}$  à  $10^{-6}$ ) et  $\bar{\bar{D}}(\vec{u}) \neq 0$  (de l'ordre de  $10^{-2}$  à  $10^{-4}$  pour chaque composante). Nous avons montré au chapitre III que la bonne manière de réaliser l'imposition des contraintes est la pénalisation totale. Dans ce cas,  $\|\bar{\bar{D}}(\vec{u})\| = 10^{-13}$  et  $\|\nabla \cdot \vec{u} = 10^{-13}\|$ . Nous n'avons pas utilisé cette technique en 3D car elle nécessite des solveurs directs parallèles qui sont en cours d'implémentation dans Aquilon. Dans notre calcul de la fonction de répartition de paires, nous conservons en permanence cette information au cours du temps. Cela explique la probabilité non nulle de présence de particules dans la zone intérieure de la sphère. Toutefois, le nombre de paires de particules qui se chevauchent est faible devant le nombre total de combinaisons possibles (pour 144 particules, il y a  $A_{N_p}^2$  paires soit  $\frac{144!}{2!}$  paires). A partir de la fonction d'encombrement, nous pouvons déterminer la valeur de  $g(r)$  au contact entre les particules. Elle correspond dans notre cas à la valeur telle que  $r = 2R_p$ . Cette valeur est importante car elle permet de caractériser les forces de pression dues aux collisions entre les particules. Une corrélation couramment utilisée est celle de Lun and Savage (1986) (cf formule (I.62)) dont nous rappelons l'expression :

$$g_0 = \left(1 - \frac{\alpha_s}{\alpha_{s,max}}\right)^{-2.5\alpha_{s,max}} \quad (\text{IV.22})$$

$\alpha_{s,max}$  est la concentration en solide maximale. Elle est égale à 0.64 pour un réseau de particules réparties aléatoirement. Nous avons reporté les valeurs de  $g_0$  calculées numériquement dans le tableau IV.15. A une concentration donnée, nous retrouvons des valeurs similaires pour la valeur de  $g_0$  lorsque le réseau est constitué de 27, 72 ou 144 particules. De plus, nous observons une faible dépendance de l'intensité de  $g_0$  à la concentration en solide. Toutefois, pour les cas très dilués ( $\alpha_s \leq 0.15$ ), nous trouvons un accord correct avec les résultats de Lun and Savage (1986). Néanmoins, la définition que nous prenons pour déterminer la valeur de  $g(r)$  au contact n'est qu'une extrapolation de sa valeur pour  $r = 2R_p$ . Bien que nous trouvons des valeurs similaires, le calcul de  $g_0$  dépend de la longueur du pas de discrétisation,  $dr$ , établi pour compter le nombre de particules contenu dans la volume  $\mathcal{V}(r + dr) - \mathcal{V}(r)$ . Le tableau IV.14 référence les valeurs de  $g_0$  que l'on obtient en fonction de la longueur du pas  $dr$ . Les écarts peuvent atteindre dans certains

$\alpha_s$	Pas $dr$		
	$\frac{L}{35}$	$\frac{L}{70}$	$\frac{L}{140}$
0.1	1.05	0.94	0.92
0.2	1.203	1.202	1.23
0.3	1.126	1.068	1.023
0.4	1.096	1.067	1.071

Tableau IV.14 : *Comparaison de la valeur de  $g_0$  en fonction du pas de discrétisation  $dr$ . Résultats obtenus pour 144 particules ( $L$  est la longueur de la boîte)*

cas 10%. Un travail important reste encore à réaliser sur l'estimation de  $g(r)$  avec la méthode de pénalisation totale et sur la sensibilité du calcul de  $g(r)$  vis-à-vis du maillage et du nombre de particules explicitement résolues. Nous avons reporté dans le tableau IV.16 les valeurs maximales de  $g(r)$ , notées  $g_{max}$ , pour plusieurs concentrations et plusieurs nombres de particules. Les résultats sont très proches de  $g_0$ . De même, le rayon pour lequel nous les obtenons est très proche de  $r = 2R_p$ . On perçoit ici la difficulté de définir précisément  $g_0$ .

**Études des fluctuations de vitesses** Afin de caractériser plus précisément l'ensemble de particules, nous allons étudier le comportement moyen du réseau. Nous définissons les moyennes suivantes :

$$\bar{X}_i = \frac{1}{t} \int_0^t x_i(s) ds \quad (\text{IV.23})$$

$$\bar{V}_i = \frac{1}{t} \int_0^t v_i(s) ds \quad (\text{IV.24})$$

Ces deux moyennes décrivent respectivement la moyenne temporelle de la trajectoire et de la vitesse de la particule  $i$ . Les écarts aux valeurs moyennes sont alors donnés par :

$$x'_i = x_i - \bar{X}_i \quad (\text{IV.25})$$

$$v'_i = v_i - \bar{V}_i \quad (\text{IV.26})$$

Nous définissons également la moyenne sur l'ensemble des particules par :

$$\langle g_i \rangle_{N_p} = \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} g_i \quad (\text{IV.27})$$

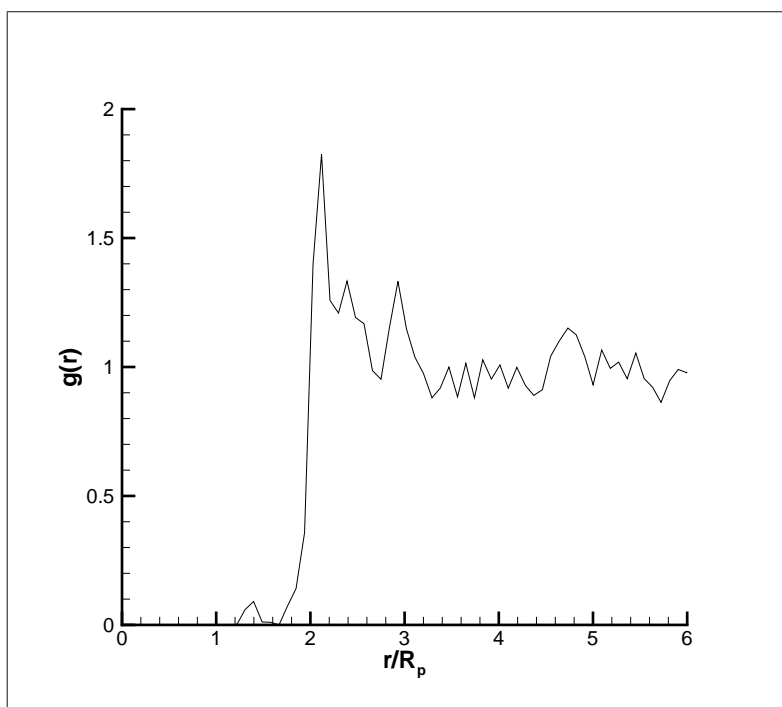


Figure IV.30 : *Fonction de distribution radiale du réseau de particules mobiles pour  $\alpha_s = 0.3$  avec 144 particules de nylon*

$\alpha_s$	Nombre de particules			Lun and Savage (1986)
	27	72	144	
0.05	-	-	1.130	1.139
0.1	0.940	1.106	1.334	1.312
0.15	-	-	1.197	1.533
0.2	1.202	0.780	0.780	1.821
0.3	1.068	0.900	1.080	2.751
0.4	1.067	1.050	-	4.803

Tableau IV.15 : *Comparaison de  $g_0$  pour plusieurs concentrations et pour différents nombres de particules*

$\alpha_s$	27 particules		72 particules		144 particules	
	$\frac{r}{R_P}$	$g_{max}$	$\frac{r}{R_P}$	$g_{max}$	$\frac{r}{R_P}$	$g_{max}$
0.05	-	-	-	-	2.13	1.197
0.1	2.158	1.106	3.218	1.344	2.210	1.405
0.15	-	-	-	-	2.167	1.263
0.2	2.066	1.221	2.552	1.481	2.357	1.183
0.3	2.116	1.264	2.519	1.461	2.073	1.704
0.4	2.109	1.191	2.238	1.419	-	-

Tableau IV.16 : Comparaison de  $g_{max}$  pour plusieurs concentrations et pour différents nombres de particules

L'écart-type moyen, défini par la formule IV.28, a été calculé pour plusieurs concentrations.

$$\langle \sigma_t(g') \rangle_{N_p} = \sqrt{\frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} (g')^2} \quad (\text{IV.28})$$

Une illustration de la moyenne temporelle des vitesses ( $\langle \bar{V}_{xi} \rangle_{N_p}$ ,  $\langle \bar{V}_{zi} \rangle_{N_p}$  et  $\langle \bar{V}_{yi} \rangle_{N_p}$ ) est donnée sur la figure IV.31. L'écart-type de chaque particule est également représenté sur la figure IV.32. Nous constatons que les particules semblent se déplacer en bloc. Nous avons reporté dans les tableaux IV.17 et IV.18, les valeurs des vitesses moyennes temporelles pour 72 et 144 particules. On constate que nous retrouvons le même comportement quel que soit le nombre de particules utilisé pour représenter le lit fluidisé. On observe une augmentation de la vitesse des particules avec la concentration jusqu'à  $\alpha_s = 0.2$ . Pour  $\alpha_s = 0.3$ , la vitesse des particules diminue légèrement. Pour les faibles concentrations, l'intensité des vitesses suivant les directions  $x$  et  $y$  est un ordre de grandeur plus faible que celui de la vitesse verticale alors que quatre ordres de grandeurs les séparent pour les plus fortes concentrations. Les tableaux IV.19 et IV.20 regroupent les moyennes des écart-types pour 72 et 144 particules en fonction de la concentration en solide. On note que pour les faibles concentrations ( $\alpha_s \leq 0.15$ ), les fluctuations de la position des particules sont du même ordre de grandeur dans toutes les directions. Les fluctuations de vitesses sont également comparables. Au contraire, lorsque la concentration

$\alpha_s$	$\langle \bar{V}_{xi} \rangle_{N_p}$	$\langle \bar{V}_{zi} \rangle_{N_p}$	$\langle \bar{V}_{yi} \rangle_{N_p}$
0.05	-1.47E-02	8.00E-02	-3.10E-03
0.1	-1.43E-02	8.00E-02	-1.00E-03
0.15	-1.10E-02	9.69E-02	-3.80E-03
0.2	-3.00E-04	1.25E+00	-4.00E-04
0.3	-5.00E-04	1.08E+00	8.00E-04

Tableau IV.17 : *Evolution en fonction de la concentration des vitesses moyennes temporelles des particules pour 144 billes*

$\alpha_s$	$\langle \bar{V}_{xi} \rangle_{N_p}$	$\langle \bar{V}_{zi} \rangle_{N_p}$	$\langle \bar{V}_{yi} \rangle_{N_p}$
0.2	-5.00E-04	9.90E-01	9.00E-04
0.3	1.00E-04	8.28E-01	3.00E-04

Tableau IV.18 : *Evolution en fonction de la concentration des vitesses moyennes temporelles des particules pour 72 billes*

augmente, les fluctuations se localisent dans la direction du gradient de pression pour les analyses des vitesses. Les figures IV.33 offrent une bonne visualisation de ces observations.

### IV.3.4 Conclusion

La méthode de suivi eulérien/lagrangien a été appliquée dans cette partie pour étudier le mouvement d'un ensemble de particules mobiles réparties aléatoirement. Ce premier dépouillement des résultats a permis de mettre en évidence la dépendance de la vitesse

$\alpha_s$	$\langle \sigma_t(x) \rangle_{N_p}$	$\langle \sigma_t(z) \rangle_{N_p}$	$\langle \sigma_t(y) \rangle_{N_p}$	$\langle \sigma_t(v_x) \rangle_{N_p}$	$\langle \sigma_t(v_z) \rangle_{N_p}$	$\langle \sigma_t(v_y) \rangle_{N_p}$
0.2	2.00E-04	1.05E-02	1.39E-02	2.50E-03	3.50E-01	2.80E-03
0.3	2.00E-04	9.20E-03	1.21E-02	2.90E-03	2.90E-01	3.20E-03

Tableau IV.19 : *Ecart-type des trajectoires et des vitesses pour 72 billes*

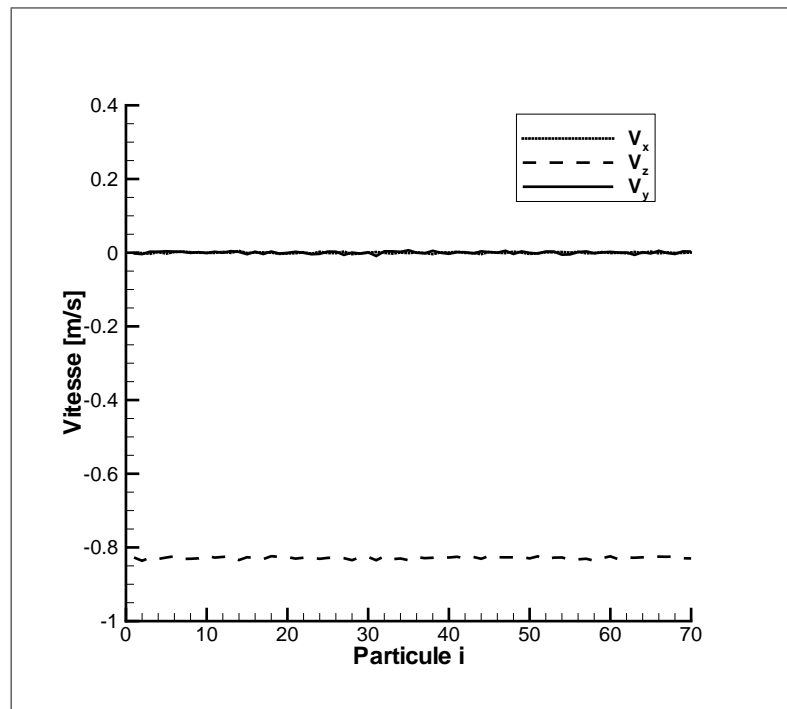
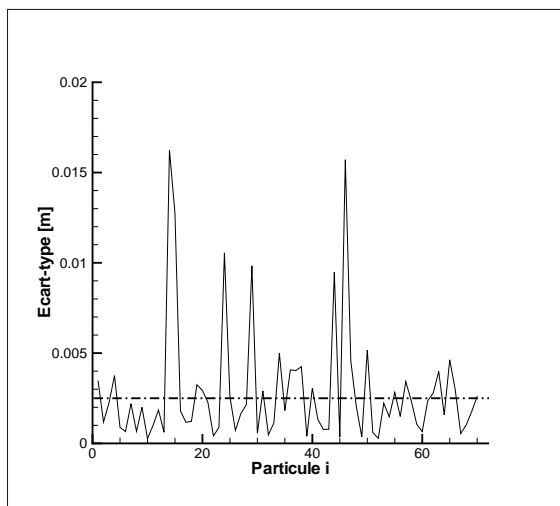


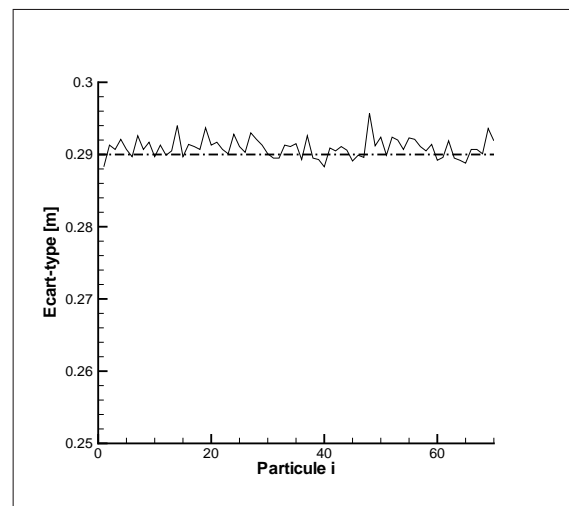
Figure IV.31 : Moyenne temporelle de la vitesse des particules pour  $\alpha_s = 0.3$  avec 72 particules

$\alpha_s$	$\langle \sigma_t(x) \rangle_{N_p}$	$\langle \sigma_t(z) \rangle_{N_p}$	$\langle \sigma_t(y) \rangle_{N_p}$	$\langle \sigma_t(v_x) \rangle_{N_p}$	$\langle \sigma_t(v_z) \rangle_{N_p}$	$\langle \sigma_t(v_y) \rangle_{N_p}$
0.05	1.70E-02	2.00E-02	2.50E-02	2.20E-02	3.11E-02	3.21E-02
0.1	1.30E-02	1.73E-02	2.00E-02	2.60E-02	5.90E-02	5.40E-02
0.15	1.01E-02	1.42E-02	1.77E-02	1.93E-02	3.97E-02	3.04E-02
0.2	2.00E-04	1.30E-02	1.80E-02	1.10E-03	4.40E-01	1.40E-03
0.3	4.19E-04	1.15E-02	1.56E-02	1.70E-03	3.81E-01	2.20E-03

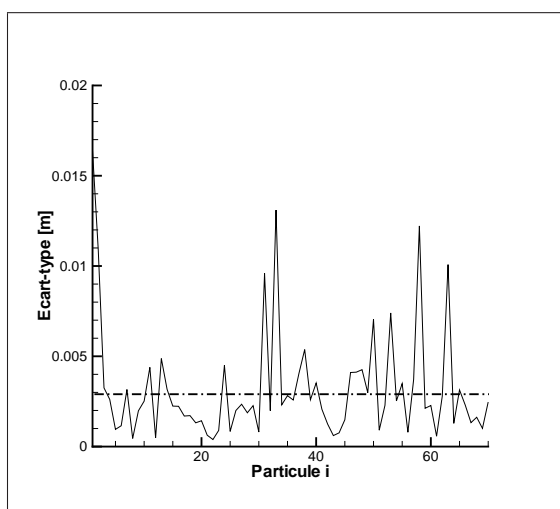
Tableau IV.20 : Ecart-type des trajectoires et des vitesses pour 144 billes



(i) Position en X (perpendiculaire au gradient de pression)



(ii) Position en Z (suivant le gradient de pression)



(iii) Position Y (perpendiculaire au gradient de pression)

Figure IV.32 : *Ecart-type de la vitesse des particules pour  $\alpha_s = 0.3$  avec 72 particules (Trait pointillé: valeur moyenne  $\langle \bar{g}_i \rangle_{N_p}$  de la grandeur  $g_i$ )*



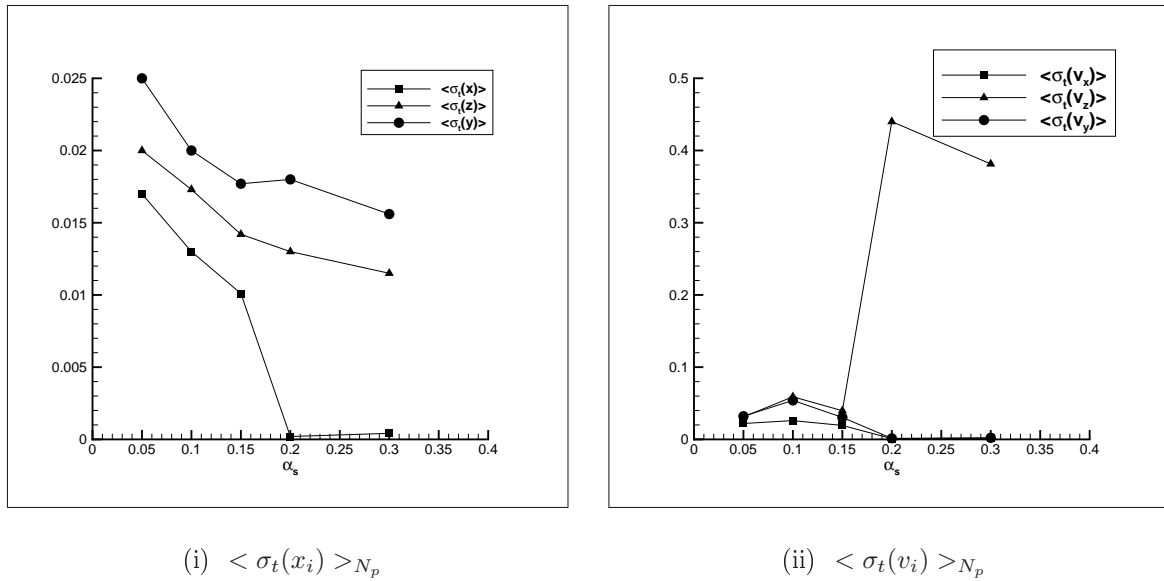


Figure IV.33 : Evolution des écart-types moyens en fonction de la concentration en solide pour 144 particules

relative des deux phases avec la concentration. La vitesse relative évolue selon une loi de type puissance avec la concentration en solide. Nous avons de plus déterminé la fonction de répartition de paires  $g(r)$  pour plusieurs concentrations afin de déduire sa valeur au contact. Contrairement aux lois expérimentales de Lun and Savage (1986), nous n'observons pas de dépendance vis à vis de la concentration  $\alpha_s$  en solide. Cette différence vient certainement du calcul de  $g_0$  qui doit être affiné. Ces investigations sont l'avenir de l'utilisation de l'outil de simulation numérique directe.

## IV.4 Conclusion

Ce chapitre a été consacré à l'application des modèles numériques que nous avons mis en place. Les études ont, dans un premier temps, porté sur les écoulements à travers un réseau cubique à faces centrées de particules fixes. Nous avons pu déterminer le coefficient de traînée  $C_d$  du réseau. Les valeurs que nous obtenons sont en bon accord avec les résultats issus de la relation empirique proposée par Wen and Yu (1966) et celles issues de la simulation numérique directe menée par Massol (2004). Nous avons par ailleurs identifié deux types de topologies d'écoulement correspondant. Pour les faibles valeurs de nombre de Reynolds, l'écoulement est attaché aux sphères. Lorsque le nombre de Rey-

nolds augmente, il se forme une zone de recirculation à l'arrière des inclusions dont la taille augmente avec le nombre Reynolds. Dans un second temps, nous avons porté notre attention sur l'étude d'un réseau de particules mobiles réparties aléatoirement. Nous avons retrouvé les lois de comportement de la vitesse relative en fonction de la concentration en particules. A partir de l'analyse de la répartition moyenne des particules selon la concentration  $\alpha_s$  de solide, nous avons pu déduire la valeur de  $g_0$ . Il s'agit de la valeur de la fonction de répartition  $g(r)$  au contact entre les particules. Cette fonction est utile dans les modèles macroscopiques de lits fluidisés car elle constitue un paramètre essentiel pour la modélisation de la pression dans la phase dispersée. Nos valeurs de  $g_0$ , bien que concordantes avec la loi de Lun and Savage (1986) pour les faibles concentrations, semblent être indépendantes de  $\alpha_s$  pour des concentrations plus fortes. Nous avons également constaté que les vitesses transversales à l'écoulement étaient du même ordre de grandeur que la vitesse verticale pour les faibles concentrations. A contrario, le contraste d'intensité est nettement plus marqué pour des concentrations plus grandes. Néanmoins, une étude plus poussée est à mener dans cette voie afin de tirer pleinement partie du modèle numérique de simulation numérique directe. Nous avons par ailleurs mené une étude thermique, à la fois sur le réseau cubique à faces centrées et sur le réseau de particules mobiles, afin de comprendre comment l'encombrement des particules affecté la diffusion de la chaleur au sein de l'ensemble fluide/particule. Cette partie est abordée dans l'annexe A de ce mémoire.

## Conclusion générale

L'objectif de ce travail de thèse de doctorat fut de développer un outil de simulation numérique directe capable de décrire les interactions hydrodynamiques entre le fluide et les particules solides. Ce modèle fut ensuite appliquée à des écoulements particuliers à travers des réseaux de sphères mobiles et fixes.

Le modèle numérique a été bâti sur la base des travaux de Ritz (1997). Les équations de Navier-Stokes sont résolues dans toutes les phases, solides et fluides, du domaine de calcul. En effet, notre objectif était de construire un outil simple, dans le sens où le nombre d'hypothèses de travail est très restreint, et qui ne nécessite pas un traitement lourd de remaillage. Nous avons donc "adapté" les équations de Navier-Stokes afin de les rendre compatibles pour la description du comportement d'un solide indéformable. Pour cela, nous avons reformulé le tenseur des contraintes afin de faire apparaître les contributions de compression, d'élongation, de cisaillement et de rotation. Nous associons ensuite à ces nouveaux pseudo-tenseurs une viscosité qui nous permet de contrôler l'intensité de chaque contribution. Afin d'obtenir le comportement d'un fluide dont l'écoulement est incompressible, nous pénalisons le terme de compression. Le comportement d'un solide indéformable est acquis en pénalisant les termes de cisaillement et de rotation. Parallèlement à cette description originale du domaine où toutes les phases sont des fluides, nous avons développé une méthode de pénalisation afin, justement, d'imposer la contrainte (incompressibilité ou non déformation) que l'on souhaite réaliser. Cette technique de pénalisation est fondée sur la méthode de lagrangien augmentée (Fortin and Glowinski (1982)), que nous avons généralisé à l'imposition de la contrainte de non déformation dans le solide. Contrairement à la méthode classique du lagrangien augmenté, la valeur du paramètre de pénalisation est ajustée automatiquement au cours du calcul. Le suivi des particules est géré de façon lagrangienne dans un contexte de volume de fluide VOF. Cependant, le transport des particules ne résulte pas du calcul exact de l'action du fluide sur la surface de celles-ci mais

il provient de la résolution des équations de Navier-Stokes, pénalisées, afin de résoudre le comportement d'un solide indéformable.

Le modèle numérique a été validé sur des cas de sédimentation de particules. La chute d'un disque à faibles puis à forts nombres de Reynolds a été abordée afin de déterminer les plages de validité des paramètres numériques du modèle de simulation numérique directe. Nous avons montré que les forces de lubrification ainsi que les effets de paroi sont correctement pris en compte par le modèle. Cette validation a été obtenue par l'examen de l'écoulement autour d'une sphère sédimentant entre deux parois parallèles et par le cas d'une inclusion approchant une paroi fixe.

Fort de ces résultats, nous avons utilisé notre modèle de simulation numérique directe pour considérer les écoulements particulaires.

La première application fut l'étude de l'écoulement à travers un ensemble de particules fixes dont l'arrangement formait un réseau cubique à faces centrées. Il s'agit d'une configuration idéale d'un lit fluidisé dans lequel les effets de groupe et d'encombrement sont tout de même présents. Nous avons ainsi pu identifier les modifications du coefficient de traînée  $C_d$  d'une sphère en présence d'autres particules dans son voisinage. Le coefficient  $C_d$  d'une particule appartenant au réseau est plus important que celui d'une particule isolée dans les mêmes conditions d'écoulement (même nombre de Reynolds). L'encombrement des particules tend à augmenter les frottements du fluide sur la surface des inclusions. De plus, elle empêche le développement des recirculations à l'arrière des sphères. Nos résultats sur la valeur du coefficient de traînée nous ont permis de montrer que, contrairement à ce qui est couramment fait dans la littérature, l'expression empirique proposée par Wen and Yu (1966) demeure toujours valable pour les grands nombres de Reynolds. Néanmoins, pour les faibles nombres de Reynolds, nous obtenons une valeur de coefficient de traînée plus importante que les corrélations classiques.

Le modèle fut ensuite appliqué à l'étude d'un réseau de particules mobiles réparties de façon quelconque. Nous avons retrouvé les comportements classiques de fluidisation (analogie à la sédimentation), à savoir, une dépendance suivant une loi de type puissance de la vitesse de fluidisation à la concentration en solide. L'analyse des vitesses a, par ailleurs, montré que pour les faibles concentrations, les vitesses transversales étaient du même ordre de grandeur que celles suivant la direction principale de l'écoulement. Les écarts sont nettement plus grands lorsque la concentration augmente. Nous n'avons pas

observé d'arrangement particulier des particules au cours des simulations. A partir de la fonction de répartition de paires  $g(r)$ , nous avons déterminé la fonction  $g_0$ . Nos simulations n'ont pas montré de corrélation claire entre  $g_0$  et la concentration en solide. Néanmoins, nous retrouvons, pour les concentrations inférieures à 0.2, les valeurs de  $g_0$  obtenues par Lun and Savage (1986).

L'outil de simulation numérique direct que nous avons développé a montré de réelles possibilités quant son utilisation pour l'étude des lits fluidisés. Ce travail de thèse peut être poursuivi dans les directions suivantes : l'analyse des quantités locales est à généraliser à des situations encore plus réalistes, dans lesquelles des particules de tailles variables sont considérées. Dans ce cas, il est nécessaire de traiter un nombre plus important d'inclusions afin d'être le plus proche possible de la réalité physique. L'augmentation du nombre de particules s'accompagne alors d'un aggrandissement de la taille des domaines. Une application intéressante à poursuivre est le couplage des effets hydrodynamiques présents dans un lit fluidisé et de la thermique. En effet, l'intérêt du lit fluidisé est qu'il constitue un support idéal de réactions chimiques et de mélanges. L'étude du transport de la chaleur au sein du lit à partir d'une simulation numérique directe serait un plus puisque l'on aurait accès à une multitude d'information sur les échanges thermiques. D'un point de vue numérique, l'augmentation du nombre de particules et de la taille des domaines nécessitera le recours à une parallélisation du modèle de transport de particules. De plus, le modèle de suivi eulérien/lagrangien doit être généralisé à tous les systèmes de coordonnées. Bien que notre modèle soit capable de transporter efficacement des particules sphériques, avec une précision importante dans la représentation de la sphère, il serait utile de coupler cette résolution à des méthodes de type raffinement local de maillage afin d'améliorer encore la précision de la résolution. De plus, l'emploi des méthodes "front tracking" serait un plus afin d'être capable de représenter fidèlement toute sorte d'objets mobiles de forme quelconque.



## Annexe A

# Étude thermique du réseau Cubique Face Centrée et du réseau aléatoire

Un des intérêts majeurs des lits fluidisés, dans les dispositifs industriels, est sa forte capacité à favoriser les transferts thermiques entre le fluide et les particules. Cette propriété résulte de l'importante surface de contact qui existe entre les deux milieux. Un moyen de quantifier les échanges thermiques est le calcul du nombre de Nusselt  $Nu$ . Ce nombre sans dimension compare le transfert d'énergie par convection et conduction au transfert purement conductif. Son expression est donnée par la relation A.1.

$$Nu = \frac{hL}{\lambda_f} \quad (\text{A.1})$$

où

- le coefficient de transfert thermique par convection/conduction,  $h$ , est défini par :

$$h\mathcal{S}(T_p - T_\infty) = \int_{\mathcal{S}} \lambda_c \nabla T \vec{n} dS \quad (\text{A.2})$$

$T_\infty$  est une température de référence et  $T_p$  la température de la paroi en contact avec le fluide convecté.  $\vec{n}$  est la normale à l'interface fluide/solide et  $\mathcal{S}$  l'aire de la paroi.

- $L$  est une longueur caractéristique, égale au diamètre des particules dans le cas des lits fluidisés
- $\lambda_f$  est la conductivité thermique du fluide

A l'image du coefficient de traînée  $C_d$ , de très nombreuses études relatives au le calcul du nombre de Nusselt autour d'une sphère isolée sont disponibles dans la littérature. Sa valeur dépend du nombre de Reynolds, défini à partir du diamètre de la particule et de sa vitesse de sédimentation, ainsi que du nombre de Prandlt  $Pr$ . L'expression du nombre de Prandlt est donnée par :

$$Pr = \frac{\mu_f c_p}{\lambda_f} \quad (\text{A.3})$$

dans laquelle  $c_p$  est la capacité calorifique du fluide. Le nombre de Prandtl compare la diffusion de la quantité de mouvement par viscosité et la diffusion par conduction thermique dans le fluide. En d'autres termes, il confronte le transfert de quantité de mouvement par viscosité et le transfert de chaleur par conduction. Ranz and Marshall (1952) ont établi une corrélation couramment utilisée qui permet de calculer le nombre de Nusselt d'une sphère isolée :

$$Nu_{Ranz} = 2 + 0.6Re^{\frac{1}{2}}Pr^{\frac{1}{3}} \quad (\text{A.4})$$

et son domaine de validité est :

$$\begin{cases} 1 \leq Re \leq 10^4 \\ 0.6 \leq Pr \leq 400 \end{cases}$$

Dans les configurations mettant en jeu plusieurs particules, les relations décrivant l'évolution du nombre de Nusselt avec la concentration sont rares. Massol (2004) a recensé plusieurs des corrélations donnant le nombre de Nusselt, disponibles pour un ensemble de particules. Nous les avons regroupées dans le tableau A.1 qui précise leur domaine de validité respectif.

## A.1 Equation de l'énergie

Les échanges d'énergie sont intimement liés au transport de matière. Les trois modes de transfert de l'énergie existants, à savoir la conduction (ou diffusion), la convection et le rayonnement (ce dernier mode de transport ne sera pas traité dans notre cas), sont fortement dépendants de la nature de l'écoulement. En effet, le mouvement de convection du fluide conduit à une répartition homogène de la chaleur en advectant les zones chaudes vers les plus froides. En fait, il ne participe pas à l'échange proprement dit de la température, mais le favorise en déplaçant plus rapidement les masses de fluide. Ainsi,



Auteurs	Nombre de Nusselt	Domaine de validité
Ranz and Marshall (1952)	$Nu = 2 + 1.8Re^{\frac{1}{2}}Pr^{\frac{1}{3}}$	$Re \geq 80$
Rowe and Claxton (1965)	$Nu = A + B + Re^n Pr^{\frac{1}{3}}$ avec $n = \frac{2+4.65Re^{-0.28}}{3(1+4.65Re^{-0.28})}$ $A = \frac{2}{1-\alpha_s^{\frac{1}{3}}}$ $B = \frac{0.61}{1-\alpha_s}$	$0.368 \leq \alpha_s \leq 0.74$ $200 \leq Re \leq 2000$
Gunn (1978)	$Nu = (7 + 10\alpha_s + 5\alpha_s^2) \left(1 + 0.7Re^{0.2}Pr^{\frac{1}{3}}\right)$ $+ (1.33 - 2.4\alpha_s + 1.2\alpha_s^2) Re^{0.7}Pr^{\frac{1}{3}}$	$0 \leq \alpha_s \leq 0.65$ $Re \leq 10^5$
Gnielinski (Riquarts (1980))	$Nu = (1 + 1.5\alpha_s) Nu_{Ranz}$ avec $Nu_{Ranz} = 2 + 0.6Re^{\frac{1}{2}}Pr^{\frac{1}{3}}$ (Eq. A.4)	
Wakao et al. (1979)	$Nu = 2 + 1.1Re^{0.6}Pr^{\frac{1}{3}}$	$15 \leq Re \leq 8500$ $Pr = 0.7$

Tableau A.1 : *Tableau des corrélations du nombre de Nusselt pour un système de particules*

plus l'écoulement sera rapide (i.e. la vitesse de convection est grande), plus l'homogénéisation de la température sera encouragée. L'équation de conservation de l'énergie, écrite en fonction de la température  $T$  (équation A.5), traduit ce couplage.

$$\rho c_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + \vec{u} \nabla T \right) = \nabla \cdot (\lambda_c \nabla T) + \beta T \frac{dp}{dt} + \Phi_\mu + S \quad (\text{A.5})$$

avec  $c_p$  et  $\lambda_c$  la capacité thermique et la conductivité du milieu considéré.  $S$  représente la source de chaleur éventuelle.  $\Phi_\mu = 2\mu \bar{\bar{D}} : \nabla \vec{u}$  est la dissipation visqueuse où  $\bar{\bar{D}}$  est le tenseur des contraintes visqueuses (ce terme n'intervient que dans le cas d'un fluide). Lorsque le fluide est incompressible, le terme  $\beta T \frac{dp}{dt}$  est négligeable et l'équation A.5 s'écrit simplement :

$$\rho c_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + \vec{u} \nabla T \right) = \nabla \cdot (\lambda_c \nabla T) + \Phi_\mu + S \quad (\text{A.6})$$

La discrétisation de l'équation A.5 est réalisée suivant la même procédure que pour les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement. Nous avons utilisé une méthode de type volume fini appliquée à une grille décalée. La grille de température correspond à celle de la pression ou de la fonction couleur. La discrétisation des termes de diffusion est obtenue à l'aide d'un schéma centré et d'un schéma de type TVD pour le terme de convection. La discrétisation temporelle est implicite. Un solveur itératif de type gradient conjugué préconditionné MILU est mis en oeuvre pour aboutir à la solution numérique.

## A.2 Imposition de la température et calcul du nombre de Nusselt

Afin de contribuer à l'étude de la thermique dans les milieux dispersés, nous avons effectué une analyse sur l'évolution du nombre de Nusselt en fonction de la vitesse de l'écoulement et de la concentration en particules dans des réseaux de particules fixes (CFC) et aléatoires. Le calcul du nombre de Nusselt a nécessité un traitement particulier que nous allons décrire ici. La valeur du nombre de Nusselt  $Nu$  dépend du coefficient de convection  $h$  dont l'expression est rappelée dans A.2. Il est indispensable de connaître le flux de chaleur  $\Phi$  échangé entre les deux milieux car

$$h = \frac{\Phi_i}{\mathcal{S}_s(T_p - t_\infty)} \quad (\text{A.7})$$

. Pour simplifier le calcul de  $h$ , nous avons imposé une source volumique de chaleur dans la zone solide. Ce flux de chaleur se retrouve alors dans le fluide et ainsi, nous connaissons, à tout instant, sa valeur. Sur la figure A.1, nous avons tracé la courbe d'évolution du terme source imposé théoriquement et celle du flux accumulé dans le fluide. La différence de flux de chaleur observée n'excède pas 3%. Les différences et les variations observées viennent de l'erreur introduite par le maillage eulérien sur la représentation du volume solide. La quantité de chaleur théorique que nous introduisons est donc assez bien transmise au fluide. De plus, en vue d'imposer une température uniforme dans tout le solide, nous avons artificiellement augmenté la conductivité thermique des particules. L'évolution de la température des deux phases au cours du temps est donnée sur la figure A.2i pour un réseau CFC de concentration  $\alpha_s = 0.5$  et pour un nombre de Reynolds de 10.

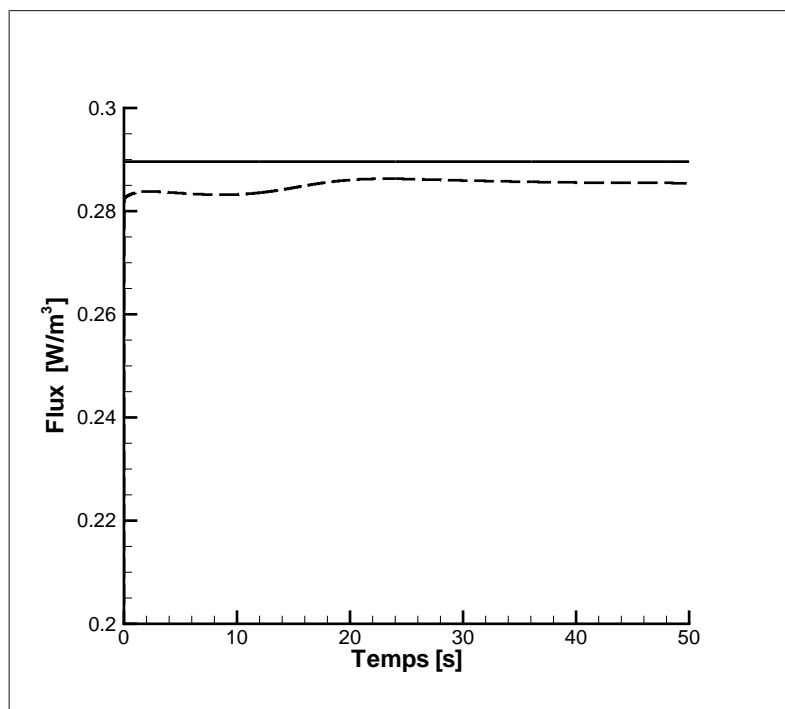
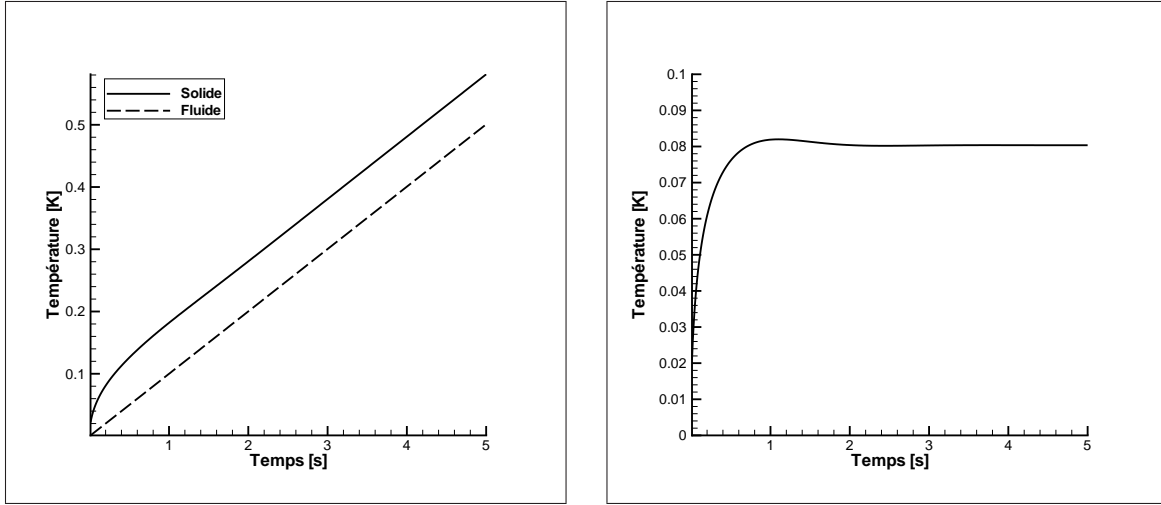


Figure A.1 : Comparaison de la valeur du terme source imposée  $S$  (trait plein) et du flux dans la phase fluide  $\rho_f c_p \frac{dT}{dt}$  (trait pointillé) pour  $\alpha_s = 0.5$  et  $Re = 100$

La température du solide croît linéairement car nous imposons une source constante de chaleur. Le fluide réagit à cette sollicitation de façon très rapide et l'écart entre les deux températures tend vite vers une constante. Le coefficient d'échange  $h$  est obtenu



(i) Température

(ii) Ecart de température

Figure A.2 : Evolution temporelle de la température pour  $\alpha_s = 0.5$  et  $Re = 10$ 

ainsi:

$$h = \frac{S}{\mathcal{S}_s(T_f - T_s)} \quad (\text{A.8})$$

L'évolution du nombre de Nusselt pour un réseau CFC de concentration  $\alpha_s = 0.5$  et pour un nombre de Reynolds  $Re = 10$  est décrite sur la figure A.3.

### A.3 Réseau Cubique Face Centrée

Une étude des échanges thermiques entre le fluide et les particules a été menée sur le réseau cubique face centrée pour deux valeurs du nombre de Reynolds. Les configurations examinées correspondent à celles du chapitre IV. Nous avons choisi un fluide dont les caractéristiques sont les suivantes : la masse volumique  $\rho_f$  est égale à  $1000 \text{ kg/m}^3$ , sa viscosité  $\mu_f$  de  $10^{-3} \text{ Pa.s}$ , la conductivité thermique  $\lambda_f$  de  $0.5 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$  et la capacité calorifique  $c_p$  est égale à  $1004 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ . Le nombre de Prandtl  $Pr$  vaut alors 2. Pour  $Pr > 1$ , la couche limite dynamique est plus développée que la couche limite thermique. Cette situation est plutôt défavorable au transfert thermique car la convection est ralentie. Les calculs ont été initialisés à partir de la solution convergée en vitesse que nous avons effectués pour la détermination du coefficient de traînée. Les résultats de l'analyse thermique du réseau CFC sont consignés dans le tableau A.3 pour un nombre de Reynolds de 10 et dans le tableau A.3 pour un nombre de Reynolds de 100.

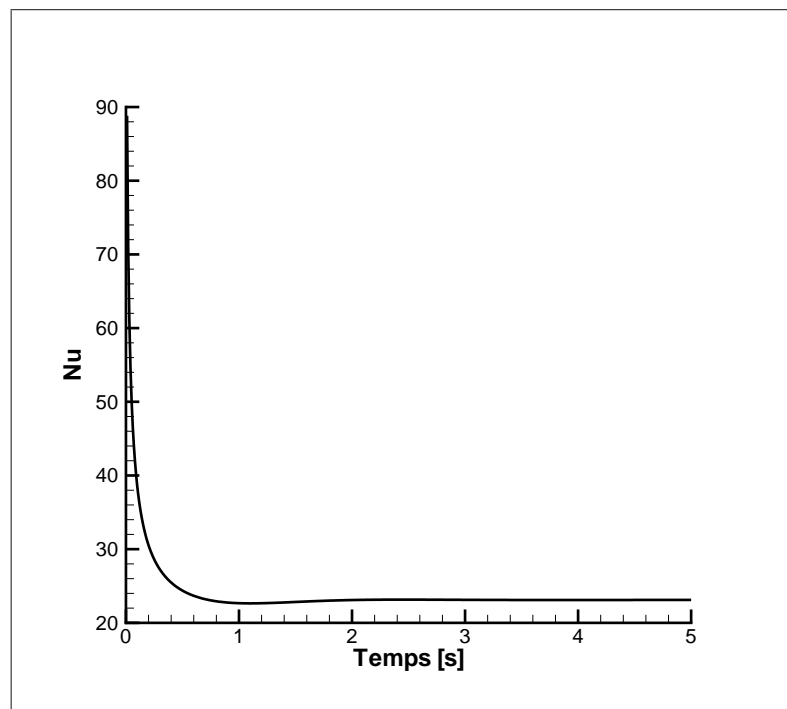


Figure A.3 : Evolution temporelle du nombre de Nusselt pour  $\alpha_s = 0.5$  et  $Re = 10$

Concentration	Nombre de Nusselt
0.05	3.79
0.1	-
0.15	9.78
0.2	12.08
0.3	13.64
0.4	22.65
0.5	31.02
0.6	38.15

Tableau A.2 : Nombre de Nusselt calculé d'une particule en interaction dans un réseau CFC pour  $Re = 10$

Concentration	Nombre de Nusselt
0.05	8.51
0.1	7.282
0.15	13.39
0.2	16.03
0.3	16.55
0.4	30.04
0.5	45.08
0.6	62.7

Tableau A.3 : *Nombre de Nusselt d'une particule en interaction dans un réseau CFC pour  $Re = 100$*

Sur la figure A.4, nous avons tracé le nombre de Nusselt normalisé par celui d'une sphère isolée placée dans les mêmes conditions. Comme pour le coefficient de traînée, le nombre de Nusselt d'une particule en interaction dans un réseau CFC est plus important que celui d'une particule seule. Ce phénomène est normal car la proximité des particules voisines bloque l'écoulement, ce qui favorise les frottements et donc augmente le transfert thermique par conduction. De plus, à un nombre de Reynolds donné, l'augmentation de la concentration entraîne aussi la hausse du nombre de Nusselt. Cela résulte toujours du blocage de l'écoulement qui est accentuée par la diminution de la fraction volumique du fluide.

Nous avons représenté sur la même figure A.5 les corrélations expérimentales de Gunn (1978), Rowe and Claxton (1965) et les résultats numériques de Massol (2004).

Pour les faibles nombres de Reynolds, nous surestimons les valeurs des corrélations. Cette tendance s'accroît lorsque la concentration augmente. A fort nombre de Reynolds, on peut constater un bon accord des résultats pour des concentrations inférieures à 0.3, alors que nous retrouvons une forte estimation du nombre de Nusselt pour des concentrations supérieures. La figure A.6 permet de visualiser le champ de température pour les écoulements attachés et décollés. On observe clairement la diffusion de la température dans la zone de recirculation lorsqu'elle est présente. Nous remarquons également que la

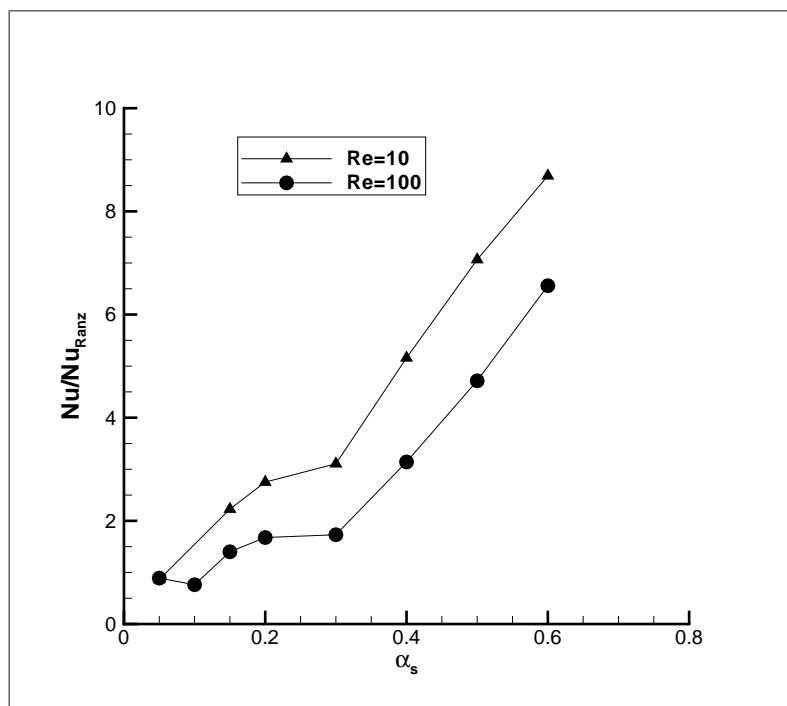
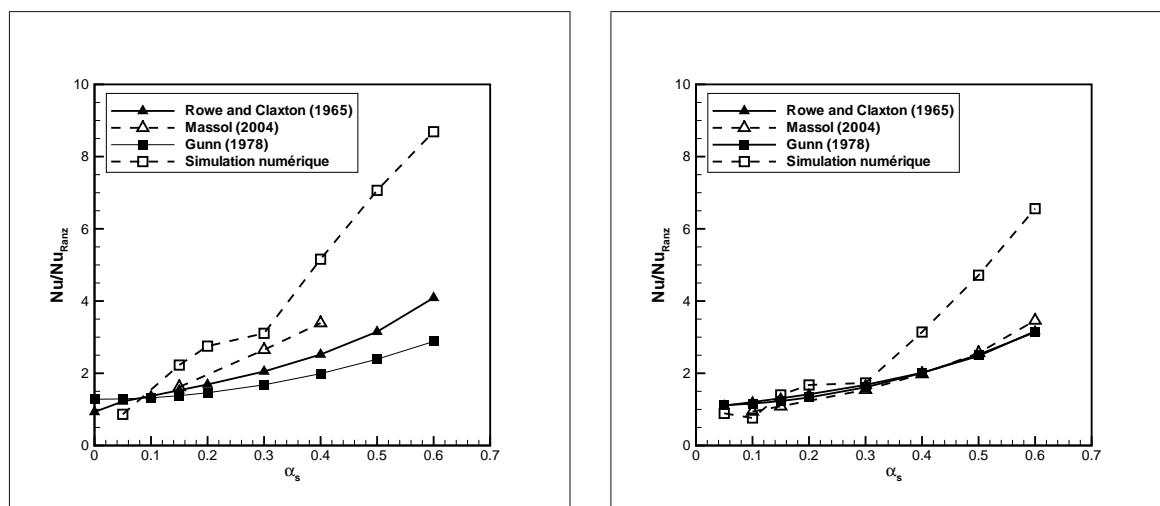


Figure A.4 : Evolution du nombre de Nusselt normalisé par celui d'une particule isolée ( $Nu_{Ranz}$  défini par (A.4)) pour  $Re = 10$  et  $Re = 100$  respectivement

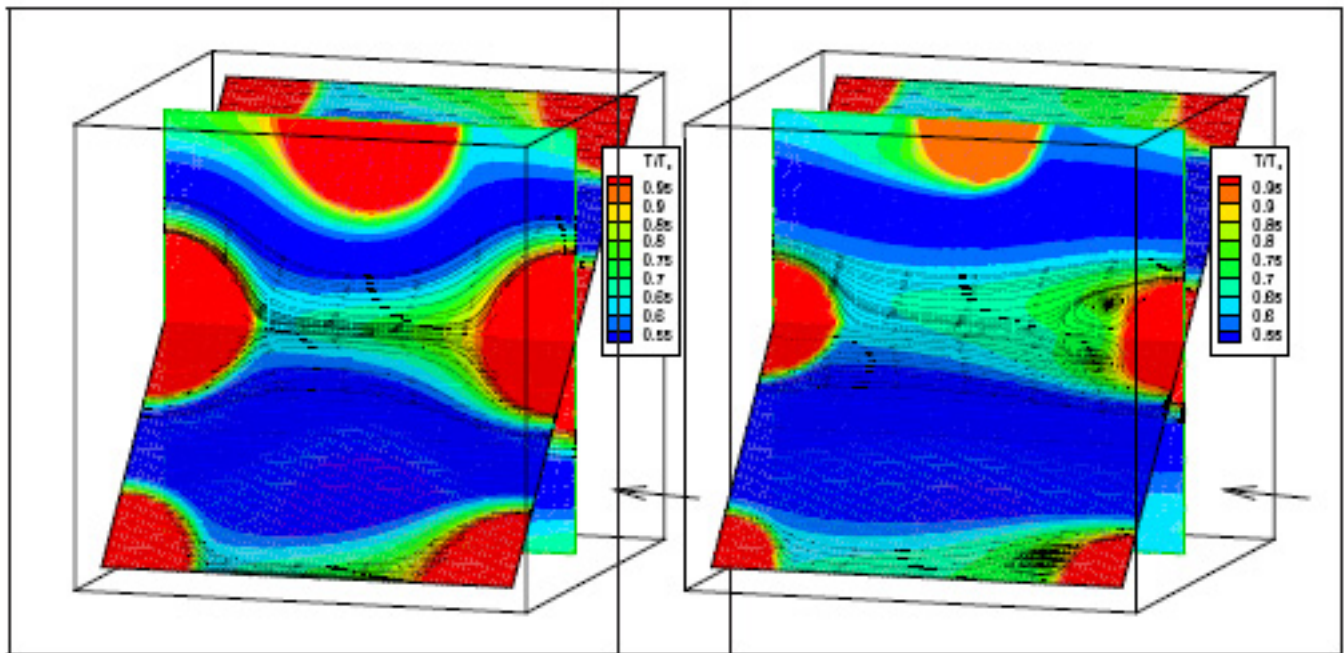


(i)  $Re=10$

(ii)  $Re=100$

Figure A.5 : Comparaison des corrélations du nombre Nusselt normalisé par  $Nu_{Ranz}$  pour  $Re = 10$  et  $Re = 100$

couche limite thermique est assez peu développée et qu'elle suit globalement l'allure des lignes de courant du fluide. Cela s'explique par le fait que nous travaillons avec un fluide dont le nombre de Prandtl est supérieur à 1. Dans ces conditions, la couche limite dynamique est plus épaisse que la couche limite thermique. La température se diffuse donc plus lentement.

(i)  $\alpha_s = 0.15$ ;  $Re=10$ (ii)  $\alpha_s = 0.05$ ;  $Re=100$ Figure A.6 : *Champ de température et lignes de courant pour le réseau CFC*

## A.4 Réseau aléatoire

Une analyse analogue sur l'évolution du nombre de Nusselt avec la concentration en particules a été menée sur le réseau de particules mobiles réparties aléatoirement. Cette fois, ni le champ de vitesse, ni le champ des particules n'ont été initialisés à partir de calculs convergés. Nous avons voulu étudier l'effet simultané du déplacement des inclusions sur la température du fluide. Le fluide que nous avons employé est identique à celui mis en jeu dans l'étude du réseau de particules ordonnées. Il correspond à un cas défavorable de la diffusion thermique car son nombre de Prandtl est plus grand que l'unité. Les résultats de nos travaux sont présentés dans le tableau A.4. Ils sont reportés sur la figure A.7 ainsi



que les corrélations de Gunn (1978) et Rowe and Claxton (1965).

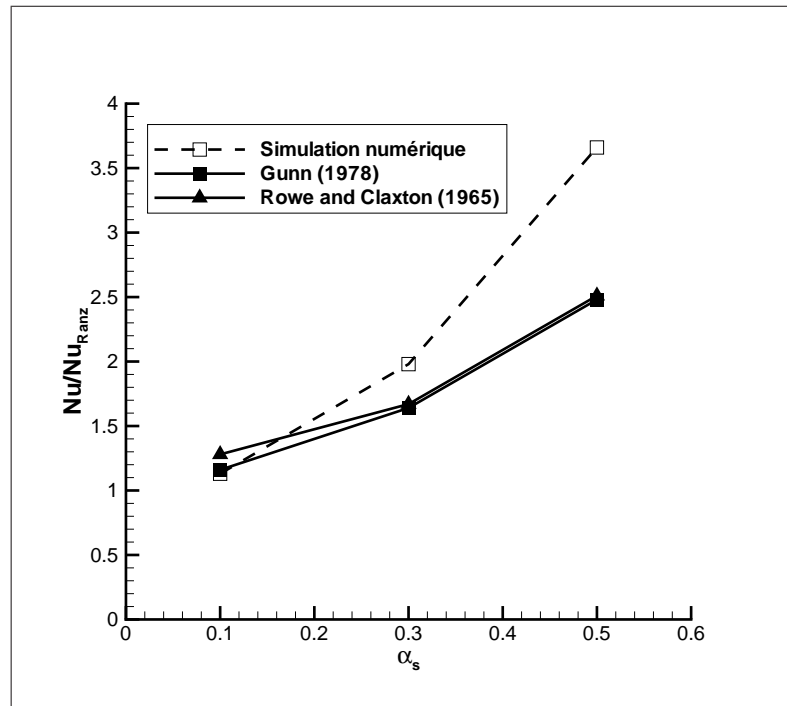


Figure A.7 : Evolution du nombre de Nusselt normalisé par celui d'une particule isolée ( $Nu_{Ranz}$  défini par (A.4)) pour 9 particules dans un réseau de sphères mobiles

Nous obtenons une bonne adéquation entre nos résultats et ceux de Rowe and Claxton (1965) et Gunn (1978) pour les faibles concentrations. En revanche, un écart assez important est observé pour  $\alpha_s = 0.5$ . Ces résultats sont tout de même à exploiter avec précautions. En effet, ils ont été acquis avec un nombre de particules limité à savoir neuf particules. Des travaux en cours sont consacrés à la prise en compte de 27 et 72 particules. Les nombres de Reynolds des écoulements correspondent respectivement à 360, 170 et 100 pour les concentrations 0.1, 0.3 et 0.5. Ces résultats ne sont pas directement comparables à ceux obtenus en réseaux fixes car les nombres de Reynolds ne correspondent pas. Cependant, nous observons que le nombre de Nusselt d'une particule en mouvement dans un réseau d'inclusions est plus élevé que celui d'une particule isolée. Ceci est dû au brassage plus important du fluide qui accélère la diffusion de la chaleur. On remarque que pour une même concentration la prise en compte du mouvement des particules est déterminant et permet de se rapprocher des résultats de Gunn et Rowe. Leurs corrélations ont été obtenues à partir d'expériences de lits fluidisés. Néanmoins, comme dans le cas du réseau CFC, la valeur du nombre de Nusselt que nous calculons est plus élevée que celle obtenue

## 178 Étude thermique du réseau Cubique Face Centrée et du réseau aléatoire

Concentration	NU numérique	Gunn (1978)	Rowe and Claxton (1965)
0.1	1.13	1.16	1.28
0.3	1.98	1.64	1.67
0.5	3.66	2.48	2.51

Tableau A.4 : *Nombre de Nusselt normalisé par  $Nu_{Ranz}$  dans un réseau de 9 particules mobiles*

à partir des corrélations.

## Annexe B

# Modélisation numérique du mouvement de particules solides par une nouvelle méthode de pénalisation

Nous présentons dans cette annexe un article publié dans International Journal for Numerical Methods in Fluid (Randrianarivelo et al. (2005))

## Numerical modelling of the solid particles motion using a new penalty method

T. N. Randrianarivelo, G. Pianet, S. Vincent and JP. Caltagirone

TRansferts Ecoulements FLuides Energetique (TREFLE), UMR CNRS 8508, Site ENSCPB 16 Avenue Pey Berland 33607  
PESSAC Cedex, France

### Résumé

The present article reports on an original tensorial penalty method (TPM) for modelling solid particle motion in an incompressible flow. The basic idea is to decompose the viscous stress tensor of Navier-Stokes equation into contributions representing elongation, pure shearing and rotation. An artificial viscosity is associated to each stress contribution. The penalty method is used to impose different stress components thanks to a generalized augmented Lagrangian method implemented by introducing four Lagrange multipliers. An iterative Uzawa algorithm is finally used to achieve the numerical solution. The classical problems of Couette's flow between two coaxial cylinders and the settling of a particle in a tank filled with a viscous fluid have been chosen to demonstrate the capability of the new method.

Keywords: Navier-Stokes; penalty method; stress tensor; direct numerical simulation; multiphase flows; liquid/particle interactions

## B.1 INTRODUCTION

Numerous problems motivated by applications from environment and engineering sciences involve multiphase flows with coupled stress interactions. In this regard, modeling of solid particles motion in a surrounding fluid has received a considerable research interests. The adoption of unstructured grid techniques for numerical modelling of such complex flow phenomena is known to be costly in terms of computational time. Numerical modelling using a fixed grid mesh is an interesting alternative. However, careful handling of different stress components should be employed for accurate distinction between the fluid and solid phases.

Several popular numerical modelling approaches permit to impose specific stresses in the motion equations, for example the Immersed Boundary (IB) method of Peskin [10], the Brinkman penalty technique of Arquis and Caltagirone [1] or the fictitious domain approach of Glowinski et al [5]. All the above mentioned methods are based on introducing extra terms in the Navier-Stokes equations in order to locally modify the motion equations according to the local characteristics of the media.

In the present work, a general formulation for solving incompressible multiphase flows involving gas, liquid and solid particles is proposed. The basic idea of our work is to consider all the media as fluid with specific rheological properties. In this way, a multiphase flow problem could be treated with a single set of equations.

The present article is organized as follows. The original decomposition of the stress tensor for Newtonian fluids and its numerical implementation is first presented. The application of Implicit Tensorial Penalty Method (ITPM) to treat incompressibility stress and solid behaviour is described in section 2. The problems of Couette's flow between two coaxial cylinders and the settling of a particle in a tank filled with a viscous fluid have been chosen to demonstrate the capability of the new method in the last section.

## B.2 NEW FORMULATION OF THE STRESS TENSOR AND TENSORIAL PENALTY METHOD

The classical governing equation of an incompressible flow can be written as:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{u} &= 0 \\ \rho \left( \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} \otimes \vec{u}) \right) &= -\nabla p + \rho \vec{g} + \nabla \cdot \bar{\bar{\sigma}} + \vec{S}_t \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

where  $\vec{u}$  is the velocity,  $\rho$  the density,  $t$  the time,  $p$  the pressure,  $\vec{g}$  the gravity vector,  $\bar{\bar{\sigma}}$  the stress tensor,  $\vec{S}_t$  an additional source term. The stress tensor  $\bar{\bar{\sigma}}$  for a viscous Newtonian fluid (see [11]) is written:

$$\bar{\bar{\sigma}} = -p \bar{\bar{I}}d + \lambda \nabla \cdot \vec{u} \bar{\bar{I}}d + 2\mu \bar{\bar{D}} \quad (\text{B.2})$$

where  $\lambda$  and  $\mu$  are respectively the compression and dynamic viscosities and  $\bar{\bar{D}} = \frac{1}{2}(\nabla \vec{u} + \nabla^t \vec{u})$  is the tensor of deforming rate and  $\bar{\bar{I}}d$  the identity matrix.

### B.2.1 An original formulation of stress tensor

The aim is to reformulate the problem so as to include terms representing different natural contributions of the stress tensor dealing with compression, tearing, shearing and rotation. This decomposition facilitates the distinct penalty of each term in order to strongly impose the associated stress (see Caltagirone and Vincent [2]). In fact, these terms originally exist in the classical formulation. However they are explicitly exhibited in the governing equations thanks to the new introduced formulation. The intermediate formulation of  $\bar{\bar{\sigma}}$  is

$$\bar{\bar{\sigma}} = -p \bar{\bar{I}}d + \lambda \nabla \cdot \vec{u} \bar{\bar{I}}d + 2\mu \left( \nabla \vec{u} - \bar{\bar{\Omega}} \right)$$

in which  $\bar{\bar{D}}$  is removed by a combination of the second order tensor  $\nabla \vec{u}$  and its asymmetrical part  $\bar{\bar{\Omega}}$  (Ryhming [11]). The final form is

$$\bar{\bar{\sigma}} = (-p + \lambda \nabla \cdot \vec{u}) \bar{\bar{I}}d + \kappa \bar{\bar{\Lambda}} + \zeta \bar{\bar{\Theta}} - \eta \bar{\bar{\Gamma}} \quad (\text{B.3})$$

where  $\nabla \cdot \vec{u}$  represents the compression term,  $\bar{\bar{\Lambda}}$ ,  $\bar{\bar{\Theta}}$  and  $\bar{\bar{\Gamma}}$  respectively represents the elongation tensor, pure shearing and the rotation tensor. Artificial viscosity coefficient  $(\kappa, \zeta, \eta)$  have been associated to each viscous stresses. It should be noted that the values

of  $\lambda$ ,  $\kappa$ ,  $\zeta$ ,  $\eta$  corresponds to  $-\frac{2}{3}\mu$ ,  $2\mu$ ,  $2\mu$ ,  $\mu$  in the classical formulation. The stress tensor formulation of (C.2) can be explicitly written in a tensorial form in Cartesian coordinates as:

$$\begin{aligned} \bar{\sigma} = & \begin{bmatrix} -p + \lambda \nabla \cdot \vec{u} & 0 & 0 \\ 0 & -p + \lambda \nabla \cdot \vec{u} & 0 \\ 0 & 0 & -p + \lambda \nabla \cdot \vec{u} \end{bmatrix} + \kappa \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial v}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix} \\ & + \zeta \begin{bmatrix} 0 & \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial u}{\partial z} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & 0 & \frac{\partial v}{\partial z} \\ \frac{\partial w}{\partial x} & \frac{\partial w}{\partial y} & 0 \end{bmatrix} - \eta \begin{bmatrix} 0 & \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial w}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} & 0 & \frac{\partial v}{\partial z} - \frac{\partial w}{\partial y} \\ \frac{\partial w}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial z} & \frac{\partial w}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial z} & 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

### B.2.2 Generalized UZAWA algorithm for ITPM

In the adoption of an eulerian-eulerian approach, it is necessary to distinguish between different media  $\Omega_i$  appearing in the domain. The ITPM can then be applied to penalize stress components in the domain, according to the media. A distribution function  $C_i(M, t)$ , also called volume fraction, has been associated to each phase. Values of the volume fraction in the domain are obtained solving an auxiliary advection equation,  $\frac{\partial C_i}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla C_i = 0$ , using a Volume Of Fluid (V.O.F.) method [14].  $C_i(M, t) = 1$  if M belongs to  $\Omega_i$  and  $C_i(M, t) = 0$  otherwise. The interface between different  $\Omega_i$  is then defined as  $C_i(M, t) = 0.5$ . Fluid properties (density, viscosity,...) have been evaluated as functions of the value of volume fraction. The penalty method adopted for solving motion equations (B.1) and (II.15) is described as follows.

We have implemented a generalized augmented Lagrangian approach first developed by Fortin [4] who considered the pressure  $p$  (referred as  $lg_1$  in the present study) as a Lagrange multiplier which accumulates the constraint of incompressibility. Following this work, tensorial Lagrange multipliers  $\bar{lg}_2, \bar{lg}_3, \bar{lg}_4$  have been introduced to accumulate the corresponding constraints on  $\Lambda, \Theta$  or  $\Gamma$ . The associated Lagrangian  $L(\mathbf{u}, lg_1, \bar{lg}_2, \bar{lg}_3, \bar{lg}_4)$

that should be minimized under several constraints is defined as:

$$\begin{aligned}
 L(\vec{u}, lg_1, \bar{lg}_2, \bar{lg}_3, \bar{lg}_4) = & \int_{\Omega} \left( \rho \left( \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} \right) - \rho \vec{g} \right) \vec{u} d\Omega \\
 + \int_{\Omega} \nabla \cdot \left( (lg_1 - \lambda(\nabla \cdot \vec{u} - (\nabla \cdot \vec{u})^\infty)) \bar{Id} \right) \vec{u} d\Omega & + \int_{\Omega} \nabla \cdot \left( \bar{lg}_2 - \kappa(\bar{\Lambda} - \bar{\Lambda}^\infty) \right) \vec{u} d\Omega \quad (\text{B.5}) \\
 + \int_{\Omega} \nabla \cdot \left( \bar{lg}_3 - \zeta(\bar{\Theta} - \bar{\Theta}^\infty) \right) \vec{u} d\Omega & - \int_{\Omega} \nabla \cdot \left( \bar{lg}_4 - \eta(\bar{\Gamma} - \bar{\Gamma}^\infty) \right) \vec{u} d\Omega
 \end{aligned}$$

where  $(\nabla \cdot \vec{u})^\infty, \bar{\Lambda}^\infty, \bar{\Theta}^\infty, \bar{\Gamma}^\infty$  are reference values to impose when  $\lambda, \kappa, \zeta$  and  $\eta$  admit significant orders of magnitude leading to penalty. Values of viscosities  $\lambda, \kappa, \zeta$  and  $\eta$  equal to  $10^2$  to  $10^3$  times the most important term (inertia, gravity, viscous force) in the Navier-Stokes equation for viscosity has been found to be sufficient to ensure a correct penalty. The minimisation of  $L(\vec{u}, lg_1, \bar{lg}_2, \bar{lg}_3, \bar{lg}_4)$  is realized using a generalized UZAWA algorithm. The solution procedures are described as follows:

- Source term in the Navier-Stokes equations (B.1) can now be written as:
 
$$\vec{S}_t = \nabla \cdot \left( (lg_1^n - \lambda \nabla \cdot \vec{u}) Id \right) + \nabla \cdot \left( \bar{lg}_2^n - \kappa \bar{\Lambda}^\infty \right) + \nabla \cdot \left( \bar{lg}_3^n - \zeta \bar{\Theta}^\infty \right) - \nabla \cdot \left( \bar{lg}_4^n - \eta \bar{\Gamma}^\infty \right)$$
- Knowing  $lg_1^0$  and  $\bar{lg}_i^0$  for  $i \in \{2, 3, 4\}$ , lagrange multipliers  $lg_i^{n+1}$  are computed as :

$$lg_1^{n+1} = lg_1^n - \lambda \nabla \cdot \vec{u}, \quad \bar{lg}_i^{n+1} = \bar{lg}_i^n - \alpha_i \bar{T}_i$$

with  $\alpha_2 = \kappa, \alpha_3 = \zeta, \alpha_4 = \eta$  and  $\bar{T}_2 = \bar{\Lambda}, \bar{T}_3 = \bar{\Theta}, \bar{T}_4 = \bar{\Gamma}$ .

### B.2.3 Numerical solution

Implicit finite volumes on a fixed Cartesian staggered grid are used to discretize the motion equations. The time derivatives are approximated by an Euler scheme of first order whereas the spatial fluxes are interpolated by centered schemes of second order. The resulting linear system is solved by an iterative procedure of conjugate gradient for non symmetric matrix BiCGSTAB II [12], preconditionned with an incomplete Gauss factorisation ILU [6].

The Piecewise Linear Interface Construction (PLIC [14]) method has been utilized to solve the advection equation of the volume fraction  $C_i(M, t)$ .

## B.3 VALIDATIONS AND APPLICATIONS

### B.3.1 Couette's flow

The simulation of the fundamental Couette's flow between two coaxial cylinders ( $R_i \leq R_e$ ) on Cartesian grid has been chosen to verify the accuracy of ITPM. The rotation of the inner completely solid cylinder of radius  $R_i$ , drives the viscous fluid contained in the annular zone of the two cylinders. Since the inner solid is moving with a constant angular velocity  $\Omega_0$ , this zone is characterized by a constant rotation tensor and a non-deformable property. This offers us the opportunity to impose the rotation tensor  $\Gamma$  using ITPM. This behaviour of solid motion have been modelled by assigning a value equal to  $10^9$  to the rotation viscosity  $\eta$ . Incompressibility of the flow has been achieved using a variable augmented Lagrangian technique developed in [13]. The flow field is characterized by

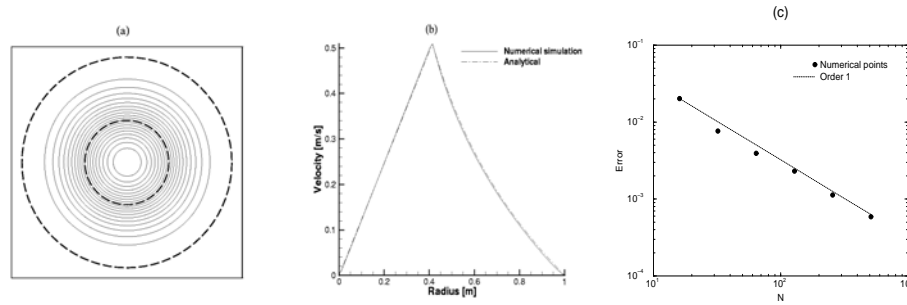


Figure B.1 : *Couette flow between two coaxial cylinders: (a)Streamlines(128x128 Cartesian grid)(b)Velocity profile (c)Space convergence study*

circular streamlines both in solid and fluid areas (figure (B.1a)). The comparison with the analytical velocity profile is depicted on figure (B.1b). A space convergence study has been carried out and demonstrates an order 1 (figure (B.1c)).

### B.3.2 Settling of solid particles in Stokes' regime

We have also considered a spherical solid particle initially dropped without initial velocity in a cylindrical tank filled with a viscous fluid. Under the influence of gravity, the particle is instantaneously accelerated and falls in the viscous fluid to reach its terminal settling velocity,  $u_{ts}$ , when gravity forces balance drag force. Analytical Stokes' solution, characterized by a Reynolds number  $Re_p = \frac{2\rho_f R_p u_{ts}}{\mu_f} \leq 1$ , is available for an infinite



medium. However, Stokes' velocity is modified as:

$$u_{ts} = \frac{2(\rho_p - \rho_f)}{9\mu C_w} g R_p^2 \quad (\text{B.6})$$

as soon as wall effects are not negligible.  $R_p$  is the particle radius,  $\mu$  the fluid viscosity and  $C_w$  a correction factor taking into account wall interactions.  $C_w$  depends on the ratio between particle radius  $R_p$  and tank radius. Several studies have been carried to determine  $C_w$ . Comparisons of our numerical values of  $C_w$  with literature data are presented on figure (B.2) showing the agreement between the present numerical computations and the exact theory of Haberman [7]. The order of space convergence is equal to 1.3.

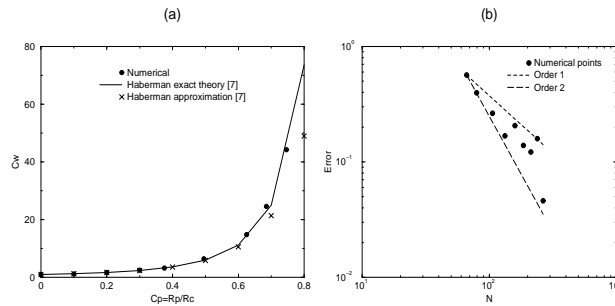


Figure B.2 : *Settling of solid particle ( $Re \ll 1$ ): (a) Comparison of present computed  $C_w$  with Haberman data, (b) Space convergence study*

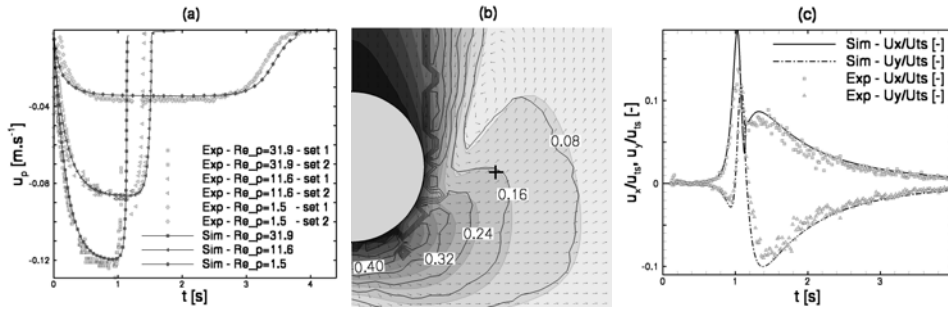


Figure B.3 : *Settling of solid particle ( $Re > 1$ ): (a) Particle velocity ( $E=experimental, S=simulation$ ), (b) Flow field  $|u|/u_{ts}$ ,  $Re_p = 31.9$ , Experimental (lines) & Numerical (gray levels), (c) Fluid timeseries on a monitoring point (Cf. black cross from Fig. 3(b) ),  $Re_p = 31.9$*

### B.3.3 Unsteady 3D simulations of a sphere settling in a tank.

Further simulations have been carried out for the unsteady behaviour of a sphere settling in a tank. Comparisons have been made with PIV measurements [3] of a settling

sphere with  $Re_p$  ranging from 1.5 to 31.9. Experimental and numerical particle velocities are compared on figure B.3(a). Concerning the  $Re_p = 31.9$  case, a slice of the flow field is extracted when the sphere's center is one diameter away from the tank's bottom, and a comparison of the velocity magnitude field  $|u|/u_{ts}$  is shown on figure B.3(b). Figure B.3(c) represents the velocity components  $u_x/u_{ts}$  and  $u_y/u_{ts}$  as functions of time on a monitor point. These results show that particle transient motion as well as fluid behaviour are well predicted by the ITPM method.

## B.4 CONCLUSION AND PROSPECTS

A new implicit tensorial penalty method (ITPM) has been presented for modelling solid particle motion in flows with a single set of equations. Stress tensor  $\bar{\sigma}$  has been first decomposed into compression, elongation, shearing and rotation contribution, respectively noted  $\nabla \cdot \bar{u}$ ,  $\bar{\Lambda}$ ,  $\bar{\Theta}$  and  $\bar{\Gamma}$ . Four viscosities  $\lambda, \kappa, \zeta, \eta$  has been associated to each contribution. The distinction between fluid and solid regions is then realized with a distribution function. A generalized augmented Lagrangian approach associated to an iterative Uzawa algorithm has been implemented to solve governing equations. The classical Couette flow between two coaxial cylinders problem has been chosen to test the imposition of a constant rotation of a solid. The settling of solid particle in confined configurations for a large range of Reynolds number has been studied.

## B.5 References

1. Arquis E, Caltagirone JP. *Sur les conditions hydrodynamiques au voisinage d'une interface milieu fluide - milieu poreux: application à la convection naturelle* C. R. Acad. Sci. Série II b, vol.299, 1984, 1-4.
2. Caltagirone JP, Vincent S. *Tensorial penalty method for solving Navier-Stokes equations* C. R. Acad. Sci. paris, Série IIb, vol.329, 2001, 607-613
3. ten Cate A, Nieuwstad, C.H., Derksen, J.J. and Van den Akker, H.E.A., *Particle imaging velocimetry experiments and lattice-Boltzmann simulations on a single sphere settling under gravity* Phys. Fluids, vol.14(11) , 2002, 4012-4025

4. Fortin M, Glowinski R. *Méthodes de lagrangien augmenté. Application à la résolution numérique de problèmes aux limites*, Dunod, 1982.
5. Glowinski R, Pan TW, Periaux J. *A fictitious domain method for external incompressible viscous flow modeled by Navier-Stokes equations*, Comput. Methods Appl. Mech. Eng., vol.112, 1994, 133–148.
6. Gustafsson I. *On first and second order symmetric factorization methods for the elliptic difference equation*, Chalmers University of Technology, 1978
7. Haberman, Sayre WL and RM, *David Taylor Model Basin Report No 1143* Washington, D.C., U.S. Navy Dept., 1958.
8. Happel J, Brenner H. *Low Reynolds Number Hydrodynamics* Kluwer Academic Publishers, 1963
9. Khadra K, Angot P, Parneix S, Caltagirone JP. *Fictitious domain approach for numerical modelling of Navier-Stokes equations* Int. J. Numer. Meth. Fluids, vol.34, 2000, 651–684.
10. Peskin CS. *Numerical analysis of blood flow in the heart* J. Comput. Phys., vol.25, 1977, 220–252.
11. Ryming I. *Dynamique des Fluides* Presses Polytechniques Romanes, 1985.
12. Vincent S, Caltagirone JP. *A One Cell Local Multigrid method for solving unsteady incompressible multi-phase flows* J. Comput. Phys., vol.163, 2000, 172–215.
13. Vincent, Caltagirone JP, Lubin P, Randrianarivelo N. *An adaptative augmented Lagrangian method for three-dimensional multi-material flows*, accepted for publication in Computers and Fluids, 2004
14. Youngs DL. *Time-dependent multimaterial flow with large fluid distortion*, K.W. Morton and M.J. Baines, Numerical Methods for Fluid Dynamics, Academic Press, New-York, 1982.



## Annexe C

# Méthode de lagrangien augmenté variable pour les écoulements 3D en présence de plusieurs phases

Nous présentons dans cette annexe un article commun publié dans *Computers And Fluids* (Vincent et al. (2004)).

*An adaptative augmented Lagrangian method for  
three-dimensional multi-material flows*

**Stéphane Vincent, Jean-Paul Caltagirone, Pierre Lubin, Tseho Nirina  
Randrianarivelo**

Modélisation Avancée des Systèmes Thermiques et Écoulements Réels (MASTER)

Ecole Nationale Supérieure de Chimie et de Physique de Bordeaux (ENSCPB)

Université Bordeaux 1

16 Avenue Pey-Berland, 33607 PESSAC Cedex, France

vincent@enscpb.fr

calta@enscpb.fr

lubin@enscpb.fr

randrian@enscpb.fr

Tel. 05 56 84 27 07

Fax 05 56 84 66 68

**Abstract**

The direct numerical simulation of incompressible multimaterial flows, based on predictor/corrector and Volume Of Fluid approaches is presented. An original adaptative augmented Lagrangian method is proposed to solve the predictor solution, satisfying at the same time the conservation equations as well as the incompressibility constraint. This algorithm is based on an Uzawa optimisation technique. The corrector solution is obtained with a projection method on a divergence free subspace. Several examples of two- and three-dimensional flows are proposed to illustrate the ability of the method to deal with unsteady, multimaterial problems.

**Key words**

numerical simulation, Navier-Stokes, augmented Lagrangian, VOF method, vectorial projection

## C.1 Introduction

The direct numerical simulation of incompressible multimaterial flows, in the sense of free surface or fluid/ particle motions, is subjected to two fundamental constraints: the incompressibility which must be verified to an almost computer error and, at the same time, the momentum conservation which is solved with discontinuous densities and viscosities, through the interface between the different media. Two approaches are currently found in literature to solve these problems. On the one hand, only one medium is discretized thanks to a curvilinear or an unstructured grid which is adapted in time and space to the Lagrangian evolutions of the interface (Magnaudet et al ?). The fluid dynamics are solved thanks to the Navier-Stokes equations in the considered fluid with standard projection methods (Goda ?). These methods are very accurate to take into account the forces acting on the interface. However, they become difficult to implement in three dimensions and are very time consuming. Moreover, they cannot handle merging or tearing of interfaces. On the other hand, the discontinuous multimaterial medium can be merged into a global structured grid (Eulerian approach). A Volume Of Fluid (VOF) function (Hirt and Nichols ?) allows to locate the materials and the evolutions of the physical characteristics are solved according to an advection equation on the VOF function. The challenge in this approach is to solve the Navier-Stokes equations in their multimaterial formulation (Scardovelli and Zaleski ?) in the presence of discontinuous densities and viscosities. The Eulerian approach has been widely used over the last 10 years for its easy programming in three dimensions and its potential application to interface distortion or rupture.

Our motivation is to study three dimensional, unsteady incompressible multimaterial flows such as the wave breaking on a beach, the flow induced by a solid particle falling into a cylindrical tube or the interaction between a liquid film and a turbulent gaseous jet. All these problems induce strong variations of the topology and position of the interface, and consequently of the physical characteristics of the flow. We have chosen to use an Eulerian approach for its wide adaptability to various geometries and interface conditions. The aim of this article is to present an original numerical solver dedicated to the Navier-Stokes equations in their single fluid formulation. Let  $\mathbf{u}$  be the velocity field,  $C$  the volume of fluid function,  $p$  the pressure,  $\mathbf{g}$  the gravity vector,  $t$  the time,  $\sigma$  the surface tension coefficient,  $k$  the average curvature of interface,  $\mathbf{n}_i$  its normal,  $\delta_i$  a Dirac function indicating interface  $\Sigma$ ,  $\rho$  the density and  $\mu$  the dynamic viscosity. If  $\Omega$  is the physical domain,  $\Omega_0$  and  $\Omega_1$  the subdomains corresponding to media 0 and 1 (see figure C.1),  $\Gamma$  the limit of  $\Omega$

and  $\mathbf{n}$  the unit normal to  $\Gamma$ , the conservation equation system reads

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \text{ in } \Omega \tag{C.1}$$

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = \rho \mathbf{g} - \nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u})] + \sigma k \mathbf{n}_i \delta_i \text{ in } \Omega \tag{C.2}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla C = 0 \text{ in } \Omega \tag{C.3}$$

$$\begin{cases} \rho = \rho_0 \text{ and } \mu = \mu_0 \text{ if } C \geq 0.5 \\ \rho = \rho_1 \text{ and } \mu = \mu_1 \text{ else} \end{cases} \tag{C.4}$$

$$\mathbf{u} = 0 \text{ or } \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{n}} = 0 \text{ on } \Gamma \tag{C.5}$$

where  $\rho_0, \rho_1, \mu_0$  and  $\mu_1$  are the densities and the viscosities in the media  $\Omega_0$  and  $\Omega_1$  respectively. The advection equation (??) on  $C$  can be discretised by classical VOF algorithms such as Piecewise Linear Interface Construction ? or Total Variation Diminishing TVD schemes ?.

The approximation of the Navier-Stokes equations (C.1-C.2) is difficult, due to the velocity-pressure coupling and the incompressibility constraint. Historically, a first idea has been proposed by Uzawa ? and applied, later on, for numerical computations based on spectral and finite element methods. Applied in 3D orthogonal geometries, such a method cannot be considered as optimal from the viewpoint of the computational complexity. With this difficulty, the time splitting strategy offers a convenient practical method for realistic modeling of fluid problems (complex geometries, direct numerical simulations of turbulence, ...etc). Here, the uncoupling between velocity and pressure is intrinsically related to the time scheme chosen for the Navier-Stokes problem. Nevertheless, this scheme suffers from some fundamental difficulties, namely consistency, global stability, easiness to the extension to high temporal orders and physically relevant determination of the pressure field. Since the introduction of the concept of projection methods by Chorin ? and Temam ? in the late 60's, there has been a lot of work devoted to the implementation of various versions of these techniques (see for example ?, ? or ?). The projection approach is based on a time-marching algorithm with two sub-steps which require to solve a predicted non-divergence free velocity field, thanks to an explicit pressure and to correct these unknown variables to ensure mass balance. Second order formulation of the projection method can be dealt with by leading, for example, an algebraic analysis of the projection step ?. Based



on the time splitting approach, an alternative fomulation has been proposed by Caltagirone and Breil ? to solve the Navier-Stokes equations. It consists in adding a vectorial projection step to an augmented Lagrangian method introduced by Fortin and Glowinski ?. The projection step suggests to estimate a velocity correction by solving a differential operator, coupling all the velocity components.

For the sake of simplicity, the present article is based on a standard time splitting method ? even if it can be generalized to all the previously cited works. The predictor/corrector steps involve the following splitting of unknown variables:

$$\begin{cases} \mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* + \mathbf{u}' \\ p^{n+1} = p^* + p' \end{cases} \quad (\text{C.6})$$

where  $\mathbf{u}^*$  and  $p^*$  are predictor solutions of velocity and pressure,  $\mathbf{u}'$  and  $p'$  the corrector solutions and  $n$  the time discretization subscripts related to time  $t = n\Delta t$ . Following the work of Scardovelli and Zaleski ? for example, the projection approaches are proofed to be restricted to moderate density gradient problems ( $\frac{\rho_1}{\rho_0}$  less than several hundreds) because they need a Poisson equation to be solved in the corrector step, whose conditioning depends on the inverse of the density. Moreover, scalar projection methods are restricted to Dirichlet boundary conditions leading to Neumann conditions on the pressure (Peyret and Taylor ?). The previous drawbacks can be avoided using a vectorial projection method ? which acts directly on the velocity field and does not depend on the physical characteristics of the problem nor on the boundary conditions. This approach has been implemented in this work to solve 2D and 3D multimaterial flows.

However, the key point is to approximate a prediction solution  $(\mathbf{u}^*, p^*)$  of the velocity verifying the boundary conditions, the inertial, viscous or gravity forces as well as the divergence free constraint with a low as possible residual. Indeed, the corrector step only ensures mass conservation, but it does not improve the other physical meanings of the numerical solution. For these reasons, this article is focused on the numerical solving of the prediction step  $(\mathbf{u}^*, p^*)$  by optimisation or augmented Lagrangian methods ?. We chose these approaches as they implicitly deal with both the conservation equations and the constraints at the same time. Referring to previous works concerning penalty methods ? and augmented Lagrangian ?, the penalty parameter is often difficult to estimate for constant density incompressible flows. Based on our numerical experiments, we have observed the need to have a variable penalty parameter in space and time to optimise the numerical solving and the physical meaning of the numerical solution  $(\mathbf{u}^*, p^*)$ . The pre-

vious remarks are emphasized by multiphase flow problems. Our main contribution is to formulate a dynamic a priori estimate of the penalisation parameter, adaptative in time and space, based on the physical characteristics of the studied flow. Several stiff numerical experiments are presented to demonstrate the efficiency and interest of the adaptative augmented Lagrangian.

Our article is structured in four parts. After the introduction, the second section is devoted to the presentation of an original method for the prediction step of the motion equations, based on optimisation techniques requiring the determination of a velocity-pressure saddle point. The third section illustrates the ability of the direct numerical simulation on several two and three-dimensional problems. Concluding remarks are given in the last section.

## C.2 Uzawa algorithms for predictor velocity fields

A Finite-Volume method on a staggered mesh (MAC, Harlow and Welsh ?) is implemented to discretise the Navier-Stokes equations through a second-order Euler scheme, or GEAR scheme, on the time derivatives, while a second order Hybrid Centered scheme (Pantankar ?) is devoted to the non-linear convective term and a second order centered scheme is chosen for the approximation of the viscous and the augmented Lagrangian terms. The boundary conditions (BC) are imposed thanks to implicit penalty terms added to the Navier-Stokes equations (Vincent and Caltagirone ?):

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = \rho \mathbf{g} - \nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u})] + \sigma k \mathbf{n}_i \delta_i \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{n}} = \mathbf{B}_u (\mathbf{u} - \mathbf{u}_\infty) \end{array} \right. \quad (\text{C.7})$$

where  $\mathbf{B}_u$  is a diagonal matrix. For  $B_{ii} = 0$ , Neuman BC are modelled while Dirichlet BC are obtained choosing  $B_{ii} = +\infty$ .

Following the work of Goda ? on time splitting schemes, the predictor velocity field is calculated by standard time discretisations :

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \left( \frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + (\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^n \right) = \rho \mathbf{g} - \nabla p^n + \nabla \cdot [\mu(\nabla \mathbf{u}^n + \nabla^T \mathbf{u}^n)] + \sigma k \mathbf{n}_i \delta_i \\ p^* = p^n \end{array} \right. \quad (\text{C.8})$$

for the explicit version and

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \left( \frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + (\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^* \right) = \rho \mathbf{g} - \nabla p^n + \nabla \cdot [\mu(\nabla \mathbf{u}^* + \nabla^T \mathbf{u}^*)] + \sigma k \mathbf{n}_i \delta_i \\ p^* = p^n \end{array} \right. \quad (\text{C.9})$$

for the implicit one, the linear system being solved for example by the iterative technique described in section (C.2.3).

The explicit discretisation is generally discarded, even for unsteady flows, because it is very restricting with respect to  $\Delta t$ . The implicit version is unconditionally stable but the higher the time step, the longer the convergence of the iterative solver is. Moreover, the incompressibility constraint is not solved in this predictor algorithm, which can lead to poor precision solutions in strong density or viscosity ratio problems. In this section, we present an implicit predictor step based on the optimisation augmented Lagrangian algorithm. The main originality consists in adding a control, or penalty, term in the Navier-Stokes equations, which uses an adaptative Lagrangian parameter in time and space. No stability criterion is needed and the predicted solution satisfies the Navier-Stokes equations, the boundary conditions, as well as the divergence free property, with a maximum error lower than the errors obtained with Goda's method (C.8-C.9). The behaviour of both Goda's and augmented Lagrangian methods for the calculation of  $\mathbf{u}^*$  are illustrated and commented in section (C.3).

### C.2.1 Standard augmented Lagrangian (SAL)

The standard augmented Lagrangian method was first introduced by Fortin and Glowinski ?. It consists in solving an optimisation problem by solving a velocity-pressure saddle point with an Uzawa algorithm ?. Starting with  $\mathbf{u}^{*,0} = \mathbf{u}^n$  and  $p^{*,0} = p^n$ , the predictor solution reads

$$\text{while } \|\nabla \cdot \mathbf{u}^{*,m}\| > \epsilon, \text{ solve } \left\{ \begin{array}{l} (\mathbf{u}^{*,0}, p^{*,0}) = (\mathbf{u}^n, p^n) \\ \rho \left( \frac{\mathbf{u}^{*,m} - \mathbf{u}^{*,0}}{\Delta t} + \mathbf{u}^{*,m-1} \cdot \nabla \mathbf{u}^{*,m} \right) - r \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}^{*,m}) \\ = -\nabla p^{*,0} + \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot [\mu(\nabla \mathbf{u}^{*,m} + \nabla^T \mathbf{u}^{*,m})] + \sigma k \mathbf{n}_i \delta_i \\ p^{*,m} = p^{*,0} - r \nabla \cdot \mathbf{u}^{*,m} \end{array} \right. \quad (\text{C.10})$$

where  $r$  is a numerical parameter used to impose the incompressibility constraint,  $m$  is an iterative convergence index and  $\epsilon$  a numerical threshold controlling the constraint. Usually, a constant value of  $r$  is used. From numerical experiments, optimal values are found to be of the order of  $\rho_i$  and  $\mu_i$  to accurately solve the motion equations in the related zone ?. The momentum, as well as the continuity equations are accurately described by the predictor solution  $(\mathbf{u}^*, p^*)$  coming from (C.10) in the medium, where the value of  $r$  is adapted. However, high values of  $r$  in the other zones act as penalty terms inducing the numerical solution to satisfy only the divergence free property. Indeed, if we consider for example  $\frac{\rho_1}{\rho_0} = 1000$  (characteristic of water and air problems) and a constant  $r = \rho_1$  to impose the divergence free property in the denser fluid, the asymptotic equation system solved in the the predictor step is:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \left( \frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + (\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^* \right) - r \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}^*) \\ = \rho \mathbf{g} - \nabla p^n + \nabla \cdot [\mu(\nabla \mathbf{u}^* + \nabla^T \mathbf{u}^*)] + \sigma k \mathbf{n}_i \delta_i \text{ in } \Omega_1 \\ \frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} - r \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}^*) = 0 \text{ in } \Omega_0 \end{array} \right. \quad (\text{C.11})$$

Our idea is to locally estimate the augmented Lagrangian parameter in order to obtain satisfactory equivalent models and solutions in all the media.

### C.2.2 Adaptative augmented Lagrangian (AAL)

Instead of choosing an empirical constant value of  $r$  fixed at the beginning of the simulations, we propose at each time step to locally estimate the augmented Lagrangian parameter  $r$ . Then,  $r(t, M)$  becomes a function of time  $t$  and space position  $M$ . It must be two to three orders of magnitude higher than the most important term in the conservation equations.

Let  $L_0$ ,  $t_0$ ,  $u_0$ ,  $C_0$  and  $p_0$  be reference space length, time, velocity, volume fraction and pressure respectively. If we consider one iterative step of the augmented Lagrangian procedure (II.22), the non-dimensional form of the momentum equations can be rewritten as

$$\begin{aligned} & \rho \frac{u_0}{t_0} \frac{\mathbf{u}^{*,m} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \rho \frac{u_0^2}{L_0} (\mathbf{u}^{*,m-1} \cdot \nabla) \mathbf{u}^{*,m} - r \frac{u_0}{L_0^2} \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}^{*,m}) \\ & = \rho \mathbf{g} - \frac{p_0}{L_0} \nabla p^n + \frac{u_0}{L_0^2} \nabla \cdot [\mu(\nabla \mathbf{u}^{*,m} + \nabla^T \mathbf{u}^{*,m})] + \frac{\sigma}{L_0^2} k \mathbf{n}_i \delta_i \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

Multiplying the right and left parts of equation (C.12) by  $\frac{L_0^2}{u_0}$ , we can compare the augmented Lagrangian parameter to all the contributions of the flow (inertia, gravity, pressure and viscosity). We obtain

$$\begin{aligned} & \rho \frac{L_0^2}{t_0} \frac{\mathbf{u}^{*,m} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \rho u_0 L_0 (\mathbf{u}^{*,m-1} \cdot \nabla) \mathbf{u}^{*,m} - r \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}^{*,m}) \\ & = \rho \frac{L_0^2}{u_0} \mathbf{g} - \frac{p_0 L_0}{u_0} \nabla p^n + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{u}^{*,m} + \nabla^T \mathbf{u}^{*,m})] + \frac{\sigma}{u_0} k \mathbf{n}_i \delta_i \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

It can be noticed that  $r$  is comparable to a viscosity coefficient. It is then defined as

$$r(t, M) = K \max \left( \rho(t, M) \frac{L_0^2}{t_0}, \rho(t, M) u_0 L_0, \rho(t, M) \frac{L_0^2}{u_0} g, \frac{p_0 L_0}{u_0}, \mu(t, M), \frac{\sigma}{u_0} \right) \quad (\text{C.14})$$

$$10 < K < 1000$$

If  $\frac{\rho_1}{\rho_0} = 1000$  and  $\mu_0 < \mu_1 \ll \rho_0 \ll \rho_1$  for example, the semi-discrete form of the momentum equations resulting from the new values of  $r(t, M)$  given by (C.14) then becomes

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 \left( \frac{\mathbf{u}^{*,m} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + (\mathbf{u}^{*,m-1} \cdot \nabla) \mathbf{u}^{*,m} \right) - r \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}^{*,m}) \\ = \rho_1 \mathbf{g} - \nabla p^n + \nabla \cdot [\mu_1 (\nabla \mathbf{u}^{*,m} + \nabla^T \mathbf{u}^{*,m})] + \sigma k \mathbf{n}_i \delta_i \text{ in } \Omega_1 \text{ with } r = K_1 \rho_1 L_0^2 u_0 \\ \rho_0 \left( \frac{\mathbf{u}^{*,m} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + (\mathbf{u}^{*,m-1} \cdot \nabla) \mathbf{u}^{*,m} \right) - r \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}^{*,m}) \\ = \rho_0 \mathbf{g} - \nabla p^n + \nabla \cdot [\mu_0 (\nabla \mathbf{u}^{*,m} + \nabla^T \mathbf{u}^{*,m})] + \sigma k \mathbf{n}_i \delta_i \text{ in } \Omega_0 \text{ with } r = K_0 \rho_0 L_0^2 u_0 \end{array} \right. \quad (\text{C.15})$$

where  $K_0$  and  $K_1$  are in between 10 and 1000. In this way, thanks to expression (C.13), the adaptative Lagrangian parameter is at least 10 to 1000 times the order of magnitude of the most important term between inertia, viscosity, pressure or gravity in both  $\Omega_1$  and  $\Omega_0$  domains. Compared to the SAL approach (C.11), the AAL is consistent with the expected conservation equation system (III.30-II.15). The new method (II.31) can be easily extended to other forces such as surface tension and Coriolis or specific source terms. Comparisons between standard and adaptative augmented Lagrangian (AAL) methods are presented in section (C.3). In particular, the influence of the penalty parameter on the convergence speed of the Bi-CGSTAB solver and time and space variations of  $r(M)$  are discussed.

As a summary, the complete time-marching procedure of the predictor-corrector algorithm including the AAL method is the following:

- ⊗ Step 1: defines initial values  $\mathbf{u}^0$  and  $p^0$  and boundary conditions on  $\Gamma$ ,
  
- ⊗ Step 2: knowing  $\mathbf{u}^n, p^n$  and a divergence threshold  $\epsilon$ , estimates the predictor values  $\mathbf{u}^*$  and  $p^*$  with the Uzawa algorithm (II.22) associated to the local estimate of  $r(t, M)$  defined in expression (II.31), so that  $\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{*,m}$  and  $p^* = p^{*,m}$  when  $m$  verifies  $\|\nabla \cdot \mathbf{u}^{*,m}\| < \epsilon$
  
- ⊗ Step 3: projects the solution  $(\mathbf{u}^*, p^*)$  on a divergence free subspace thanks, for example, to projection approaches ? or ? to get the correction solution  $(\mathbf{u}, p)$ . Then, the numerical solution at time  $(n + 1)\Delta t$  is  $(\mathbf{u}^{n+1}, p^{n+1}) = (\mathbf{u}^* + \mathbf{u}, p^* + p)$ ,
  
- ⊗ Step 4: iterates  $n$  in steps 3 and 4 until the physical time is reached.

### C.2.3 Numerical solver

The use of implicit discretisation for the approximation of the predictor and corrector steps in the time splitting approach, induces the determination of the inverse of a matrix. As the matrices resulting from the previous discretisations are nonsymmetrical, the linear algebra problem is solved numerically with an iterative Bi-CGSTAB (Bi-Conjugate Gradient Stabilised) algorithm (Van der Vorst ?), preconditioned under a Modified and Incomplete LU (MILU) algorithm of Gustafsson ?.

## C.3 Simulation of three-dimensional multimaterial flows

For the treatment of incompressibility, the main advantage of augmented Lagrangian-like methods is that they lead unconditionally to solutions satisfying the constraint. However, taking constant penalisation parameter  $r$  for flows with strongly varying characteristics ( $\frac{\rho_1}{\rho_0} = 1000$  for example) requires high values of  $r$  with respect to  $\rho_1$ , which leads to unsatisfactory simulations in  $\Omega_0$  (see equation (C.11)). In this section, we illustrate the improvements brought by the adaptative  $r$ , calculated thanks to expression (II.31), following the example of the Laplace law, the falling of a solid particle into a tube and the unsteady sinusoidal wave breaking over a flat bottom. In all applications, the mass conservation is verified to a  $10^{-3}$  error after the prediction step. It can be reduced to  $10^{-15}$  by using a scalar or a vectorial projection method in all cases. Comparisons to Goda's

algorithm are only performed for the Laplace law problems because the two other test cases involve high density ratios that cannot be managed by this method.

### C.3.1 The 2D Laplace law

Without gravity, an initial cylindrical drop of fluid 1, centered in a square domain full of fluid 0, represents a static fluid mechanics situation called the Laplace law. The drop radius  $R$  is the characteristic length of the problem. In this case, the stationary analytic solution is

$$\left. \begin{aligned} \Delta p &= \frac{\sigma}{R} \\ \mathbf{u} &= 0 \end{aligned} \right\} \text{in } \Omega \quad (\text{C.16})$$

In the momentum equations (II.15), the surface tension force can be approximated with the Continuum Surface Force (CSF) of Brackbill et al. ?. This method is well adapted for Volume Of Fluid formulation on Eulerian grids because it does not require the exact position of interfaces. However, as shown by Vincent and Caltagirone ?, the approximation of curvature in CSF is incomplete and it can lead to spurious parasitic currents which destroy interfaces for low Ohnesorge numbers  $\frac{\mu}{(\sigma\rho R)^{1/2}}$  ? ?. In this article, we use the Hessian Approximation of the surface tension Redistributed over an Extended Mesh (HAREM), based on the differential geometry of surfaces and on a discretisation on a dual grid, proposed by Vincent and Caltagirone ?. If  $f(x, y, z) = 0$  is the implicit parametrisation of interface, HAREM reads

$$\left\{ \begin{aligned} k &= \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \\ R_i &= \frac{\|\mathbf{n}_i\|}{Hes(\mathbf{t}_i, \mathbf{t}_i)} \\ Hes &= \mathbf{t}_i^T \mathbf{H} \mathbf{t}_i \\ \mathbf{H} &= \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} & \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial z} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} & \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial z} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial z \partial x} & \frac{\partial^2 f}{\partial z \partial y} & \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \end{bmatrix} \end{aligned} \right. \quad (\text{C.17})$$

where  $\mathbf{t}_1$  and  $\mathbf{t}_2$  are a basis of the local tangent plane to the interface. As a definition,  $\mathbf{t}_1 \cdot \mathbf{n}_i = 0$  and  $\mathbf{t}_2 \cdot \mathbf{n}_i = 0$ .

To understand the influence of the Lagrangian parameter on the numerical solution, we

compare simulations of the cylindrical drop equilibrium, achieved with three different time discretisations of the Navier-Stokes equations: an implicit Uzawa prediction ( $r = 0$ ) and a Goda projection on pressure and velocity ? called **Sim1**, a standard augmented Lagrangian prediction and a vectorial projection ? referenced as **Sim2** and the new adaptative augmented Lagrangian prediction (II.31) and a vectorial projection named **Sim3**. Choosing  $\Delta t = 10^{-3}s$  and a 128 x 128 Cartesian grid, figure C.2 presents the results obtained for a stabilized average pressure jump in **Sim1** and **Sim2** (about 200 time iterations) and a steady state flow in **Sim3** (10 iterations). We demonstrate the appearance of parasitic currents in **Sim1** and **Sim2** with velocities of the order  $10^{-6}m.s^{-1}$ , whereas **Sim3** maintains a stabilized pressure from the first iteration onward and velocities lower than  $10^{-15}m.s^{-1}$  for all the 10 time iterations. Comparing the numerical results to the theoretical solution (C.16) thanks to table 1, it is easily understood that solutions **Sim1** and **Sim2** are not analytical with respect to the velocity, and induce a strong error on the pressure jump (about 16%). The adaptative augmented Lagrangian solution is exact with respect to velocity, but a 4% error is observed on pressure. It is directly bound to the non-conformity of the cylindrical shape of the drop with the Cartesian mesh. However, we have demonstrated ? that the pressure converges to the Laplace solution with first order accuracy. The same behaviour is observed in three-dimensions.

### C.3.2 Flow induced by a spherical particle

The problem of a solid spherical particle falling into a cylindrical tube is characteristic of liquid-solid interactions. It has been widely studied over the last forty years ? for its many applications in fundamental fluid mechanic and industrial researches. We assume  $R_p$  and  $R_t$  as the radii of the particle and the tube respectively. The solid media is modelled according to a penalization technique (Ritz and Caltagirone ?, Vincent and Caltagirone ?) as a fluid with specific density and viscosity ( $\rho_1 = 5000kg.m^{-3}$  and  $\mu_1 = 10^3Pa.s$ ) while the cylinder is full of a "real" fluid whose characteristics are  $\rho_0 = 800kg.m^{-3}$  and  $\mu_0 = 1Pa.s$ . According to the Reynolds number  $Re = \frac{2\rho_1 R_p u_s}{\mu_0}$ , based on the particle parameters, which is equal to 0.73, the comparison to the Stokes theory is valid in our problem. In this configuration, we have the following theoretical results ? for the velocity :

$$u_s = \frac{2(\rho_1 - \rho_0)gR_p^2}{9\mu_0 C_w} \quad (C.18)$$

$$C_w = \frac{1}{1 - 2.105C_p + 2.0865C_p^3 + 0.72603C_p^6}$$



with  $C_p = \frac{R_p}{R_t}$  the characteristic aspect ratio and  $C_w = 1$  in an infinite medium.

Within the limit of the Stokes's theory  $Re \rightarrow 0$ , it can be demonstrated that the streamlines are symmetrical and centered at the particle center. If we examine the 3D axisymmetrical simulations on a 114 x 700 grid (figure C.3), we see that the solution arising from the standard augmented Lagrangian method is strongly disymmetrical with an artificial drag effect in the torque of the particle. On the contrary, the numerical simulation which uses the adaptative augmented Lagrangian approach is almost symmetrical according to the particle center. The weak disymmetry of this solution is due to the magnitude of the Reynolds number that reaches the limit of the Stokes theory. If we have a look at the comparison between the theoretical correction parameter  $C_w$  estimated from Happel and Brenner ? and the one calculated numerically (figure C.4), we see that for various aspect ratios, the numerical flow induced by the spherical particle is comparable to the analytical and experimental ones. In agreement with the analysis of the asymptotic approach in power law developed by Happel and Brenner ?, the numerical simulation diverges from the analytical solution for  $\frac{R_p}{R_t} \geq 0.7$ . Indeed, the terms discarded in the theoretical solution are not negligible in this case.

Even if the AAL parameter must be estimated locally at each calculation time, it induces a weak numerical overcost of about 5% in terms of computer storage and less than 1% with respect to calculation time (see table 2). Concerning the iterative Bi-CGSTAB solver presented on figure C.5, the behaviour is comparable with the SAL and the AAL methods, even if the decreasing of the residual is slightly slower with the last one. To finish with, it is observed that the space distribution of  $r(M)$  is directly linked to the order of magnitude of the viscosity, so that  $r(M, t) = K\mu_1$  in  $\Omega_1$  and  $r(M, t) = K\mu_0$  in  $\Omega_0$ . This observation is characteristic of low Reynolds numbers and Stokes flows.

### C.3.3 Wave breaking in shallow water

To demonstrate the interest of the AAL method to deal with free surface flows, we study the propagation of an unstable periodic sinusoidal water wave on a flat bottom in an air medium, as already shown in ?, ? and ?. All our calculations are made with the densities and the viscosities of air and water media ( $\rho_a = 1.1768 \text{ kg.m}^{-3}$  and  $\rho_w = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$ ,  $\mu_a = 1.85 \cdot 10^{-5} \text{ kg.m}^{-1}.s^{-1}$  and  $\mu_w = 1 \cdot 10^{-3} \text{ kg.m}^{-1}.s^{-1}$ ), and  $\sigma = 7.5 \cdot 10^{-2} \text{ N.m}^{-1}$ . The calculation domain is periodic in the flow direction (one wavelength long), with a symmetry boundary condition in the lower and lateral limits, and a free boundary condition in the

upper limit. Based on the linear theory, the reference variables of the initial incident wave are the celerity  $c$ , the period  $T$  and the wavelength  $L$ . The depth is defined by  $d$  and the waveheight is referred to as  $H$ . The flow motion is driven by the initial steepness,  $\frac{H}{L}$ , and the dispersion parameter,  $\frac{d}{L}$ , which are two dimensionless numbers respectively representative of the non linearity degree of the wave and the influence of the bottom on oscillatory movement. As already mentioned, the initial incident wave is not a steady travelling wave. The overturning motion is therefore controlled by the initial steepness and the dispersion parameter, which makes our approach interesting as we are then able to study any breaker type by only varying these two parameters. We can accurately study the breaking phenomenon in a smaller numerical domain, as it is periodical in the flow direction, compared to simulations involving a shoaling wave breaking over a sloping beach.

Three-dimensional simulations are carried out with the two-dimensional initial  $(x,z)$  solution spread in the  $y$ -direction. The  $x$ ,  $y$  and  $z$  axis are the streamwise, spanwise and vertical directions respectively. As a periodic condition is imposed in the  $x$  direction of wave propagation, the wave moves out of the domain on the right side to re-enter on the left side. We choose to simulate and present a plunging breaker with  $\frac{H}{L} = 0.13$  and  $\frac{d}{L} = 0.17$ , as shown hereafter (figures C.6 and C.7). The Reynolds number of the initial wave is  $Re = \frac{\rho_w L c}{\mu_w} = 35100$ , corresponding to  $T = 0.285s$ ,  $c = 0.351m.s^{-1}$  and  $L = 0.1m$ . We use a regular Cartesian grid of  $250 \times 100 \times 25$  points. The time step is approximately  $0.1ms$ . In figure C.6, we present a picture of the three-dimensional wave breaking at  $t = 0.13s$ . The interface being chosen to be at  $C = 0.5$ , we show the color function for the water medium.

Using the same non-dimensional parameters, we show in figure C.7, comparisons of the results obtained by doing the simulation with and without the AAL method. The velocity field and the free surface are presented in a  $(x, z)$  plane, parallel to the wave propagation axis. Differences can be very easily observed. The flow in the air medium is not well resolved without the AAL method. Indeed, as explained in section C.2.1, imposing the incompressibility through a constant Lagrangian parameter induces incorrect behaviour of the air medium which acts as a solid wall and resists against the plunging jet. Moreover, it creates flow instabilities near the interface that propagate in the gas. Local artificial accelerations can be observed in this medium and therefore, the whole simulation suffers

from these numerical drawbacks. On the contrary, using the AAL methods, the velocity field is well balanced in both phases and respects the descriptions of Peregrine ?. During the ejection and the impact of the jet, the shape of the free surface looks like a tongue of water as generally observed in ? or ?, whereas strong spurious interface deformations appear with a constant  $r$ . A comprehensive representation of time and space variations of  $r(M)$  are proposed on figure C.8. In this problem, the inertial effects are predominant which lead to strong disparities of  $r$  in the water. The same type of variations could be observed in air if the scale range was adapted near value 1.

## C.4 Conclusions

An augmented Lagrangian method is proposed for the numerical simulation of multi-material flows. The originality of the method is an adaptative estimate of the augmented Lagrangian parameter  $r$  according to the dimensionless form of the Navier-Stokes equations. by means of several examples, we have demonstrated that a good choice of  $r$  is necessary for multimaterial flows, to avoid parasitic currents and worsen fluid and interface behaviour. The adaptative augmented Lagrangian method can be interpreted as a penalty method for the numerical treatment of incompressibility. Future work will be devoted to the extension of this approach to other constraints, such as shearing, compressibility or elasticity in solids. The idea is to build a general model on a fixed grid for fluid-solid interactions and liquid-vapour phase change.

## C.5 References

1. S. Abadie, J.-P. Caltagirone and P. Watremez, Mécanisme de génération du jet secondaire ascendant dans un déferlement plongeant, *C. R. Acad. Sci. Paris, Série II b*, 326:553-559, 1998.
2. P. Bonmarin, Geometric properties of deep-water breaking waves, *J. Fluid Mech.*, 209:405-433, 1989.
3. C. Bernardi, V. Girault and F. Hecht, A posteriori analysis of a penalty method and application to the Stokes problem, *published by Laboratoire Jacques-Louis Lions*, R02033, 2002.

4. J. U. Brackbill, B. D. Kothe and C. Zemach, A continuum method for modelling surface tension, *J. Comput. Phys.*, 100:335-354, 1992.
5. J-P. Caltagirone and J. Breil, Sur une méthode de projection vectorielle pour la résolution des équations de Navier-Stokes, *C. R. Acad. Sci. série II b*, 327:1179-1184, 1999.
6. G. F. Carey and R. Krishnan, Convergence of iterative methods in penalty finite element approximation of the Navier-Stokes equations, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 60:1-29, 1987.
7. A. Chorin, Numerical Simulation of the Navier–Stokes Equations, *Math. Comput.*, 22:745-762, 1968.
8. M. Fortin and R. Glowinski, Méthodes de lagrangien augmenté. Application à la résolution numérique de problèmes aux limites, *Dunod, Paris*, 1982.
9. K. Goda, A multistep technique with implicit difference schemes for calculating two- or three-dimensional cavity flows, *J. Comput. Phys.*, 30:76-95, 1978.
10. J.-L. Guermond, Un résultat de convergence d'ordre deux en temps pour l'approximation des équations de Navier-Stokes par une technique de projection incrémentale, *Modél. Math. Anal. Numér.*, 30:169-189, 1998.
11. I. Gustafsson, *On first and second order symmetric factorization methods for the solution of elliptic difference equations* (Chalmers University of Technology, 1978).
12. J. Happel and H. Brenner, *Low Reynolds number hydrodynamics*, Kluwer Academic Publishers, New York, 1963.
13. F. H. Harlow and J. E. Welsh, Numerical calculation of time dependent viscous incompressible flow with free surface, *Phys. Fluids*, 8:21-82, 1965.
14. C. W. Hirt and B. D. Nichols, Volume of fluid (vof) methods for the dynamics of free boundaries, *J. Comput. Phys.*, 39:201-255, 1981.
15. D. Jamet and J. U. Brackbill, On the theory and computation of surface tension: the elimination of parasitic currents through energy conservation in the second gradient method, *J. Comput. Phys.*, 182:262-276, 2002.

16. P. Lubin, S. Abadie, S. Vincent and J.-P. Caltagirone, Fully three-dimensional direct numerical simulation of plunging breaking waves, *In Proc. Coastal Engineering 2003, 6th Intl. Conf. on Computer Modelling and Experimental Measurements of Seas and Coastal Regions, Cadiz, Spain, 253-263, 2003.*
17. P. Lubin, S. Vincent, J. Caltagirone and S. Abadie, Fully three-dimensional numerical simulation of a plunging breaker, *C. R. Acad. Sci. série II b*, 331:495-501, 2003.
18. J. Magnaudet, M. Rivero and J. Fabre, Accelerated flows around a rigid sphere or a spherical bubble, *J. Fluid Mech.*, 284:97-136, 1995.
19. R. L. Miller, Role of vortices in the surf zone prediction: sedimentation and wave forces, *R. A. Davis, R. L. Ethington (Eds), Soc. Econ. Paleontol. Mineral. Spec. Publ.*, 24:92-114, 1976.
20. S. V. Patankar, *Numerical heat transfer and fluid flow*, Hemisphere Publishing Corporation, New York, 1980.
21. D. H. Peregrine, Breaking waves on beaches, *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 15:149-178, 1983
22. R. Peyret and T. D. Taylor, *Computational methods for fluid flow*, Springer Series in Computational Physics, Springer-Verlag, 1983.
23. A. Quarteroni, F. Saleri and A. Veneziani, Factorization methods for the numerical approximation of Navier-Stokes equations, *Comput. Methods. Appl. Mech. Engrg.*, 188:505-526, 2000.
24. J.-B. Ritz and J.P. Caltagirone, Efficient solving method for unsteady incompressible interfacial flow problems, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 30 (1999) 795-811.
25. R. Scardovelli and S. Zaleski, Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow, *Annu. Rev. Fluid. Mech.*, 31:567, 1999.
26. R. Temam, Une méthode d'approximation de la solution des équations de Navier-Stokes, *Bull. Soc. Math. France*, 98:115-152, 1964.

27. H. Uzawa, *Iterative method for concave programming* (In K. J. Arrow, L. Hurwicz and H. Uzawa, editors, *Studies in linear and Nonlinear Programming*, Stanford University Press, Stanford, CA, 1958).
28. H. A. Van Der Vorst, Bi-CGSTAB: a fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of non-symmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 13:631-644, 1992.
29. J. Van Kan, A second-order accurate pressure-correction scheme for viscous incompressible flow. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 7:870-891, 1986.
30. S. Vincent and J.P. Caltagirone, Efficient solving method for unsteady incompressible interfacial flow problems, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 30 (1999) 795-811.
31. S. Vincent and J.P. Caltagirone, A One Cell Local Multigrid method for solving unsteady incompressible multi-phase flows, *J. Comput. Phys.*, 163 (2000) 172-215.
32. S. Vincent and J.P. Caltagirone, Tensorial penalisation method for solving Navier-Stokes equations, *C. R. Acad. Sci. série IIb*, 329 (2001) 607-613.
33. S. Vincent and J.P. Caltagirone, HAREM: A Hessian Approximation Redistributed over an Extended Mesh of surface tension forces, *J. Comput. Phys.*, under submission (2003).
34. D.L. Youngs, *Time-dependent multimaterial flow with large fluid distortion*, K.W. Morton and M.J. Baines, *Numerical Methods for Fluid Dynamics*, Academic Press, New-York, 1982.

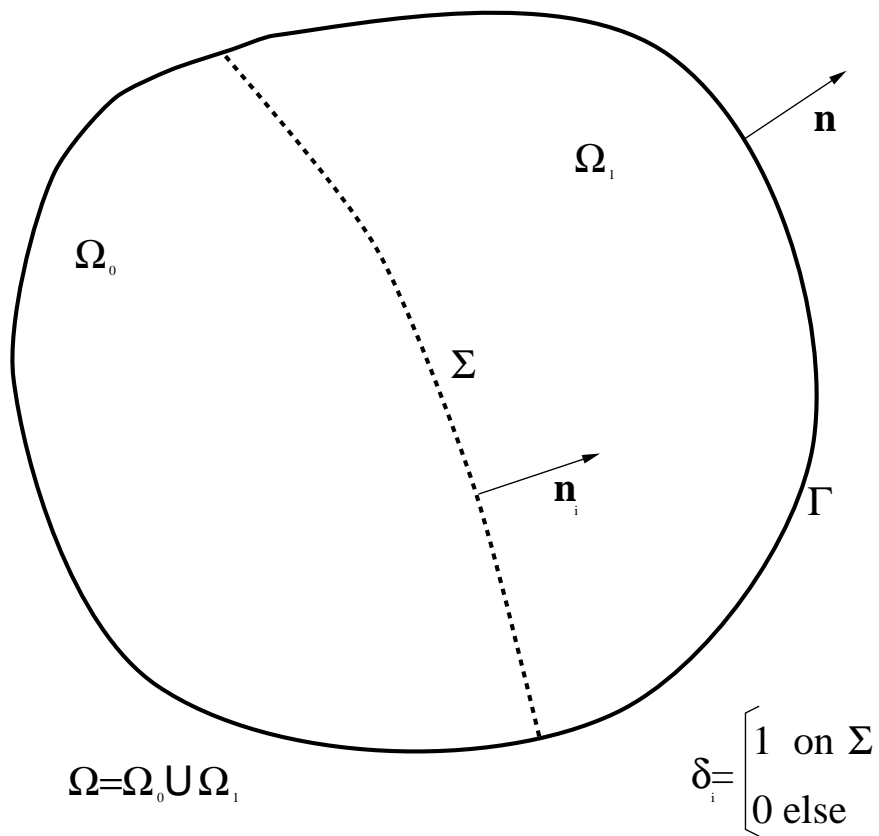
## C.6 Figures

Numerical method	Pressure jump (Pa)	Maximum velocity ( $m.s^{-1}$ )
<b>Sim1</b>	1.16	$10^{-6}$
<b>Sim2</b>	1.16	$10^{-6}$
<b>Sim3</b>	0.96	$10^{-16}$
<b>Laplace law</b>	1	0

Table 1: pressure jump and maximum velocity for the Laplace law.

Numerical method	Grid	Memory ( $Mo$ )	Computer time ( $s$ )
<b>SAL</b>	175 x 28	8.15	$3.48210^2$
<b>SAL</b>	350 x 57	23.3	$1.51010^3$
<b>SAL</b>	700 x 114	95.0	$6.00510^3$
<b>AAL</b>	175 x 28	8.2	$3.66810^2$
<b>AAL</b>	350 x 57	23.4	$1.62110^3$
<b>AAL</b>	700 x 114	95.7	$6.41610^3$

Table 2: Memory and time costs induced by the SAL and AAL methods for the numerical simulation of particle settling.

Figure C.1 : *Definition of the physical space.*



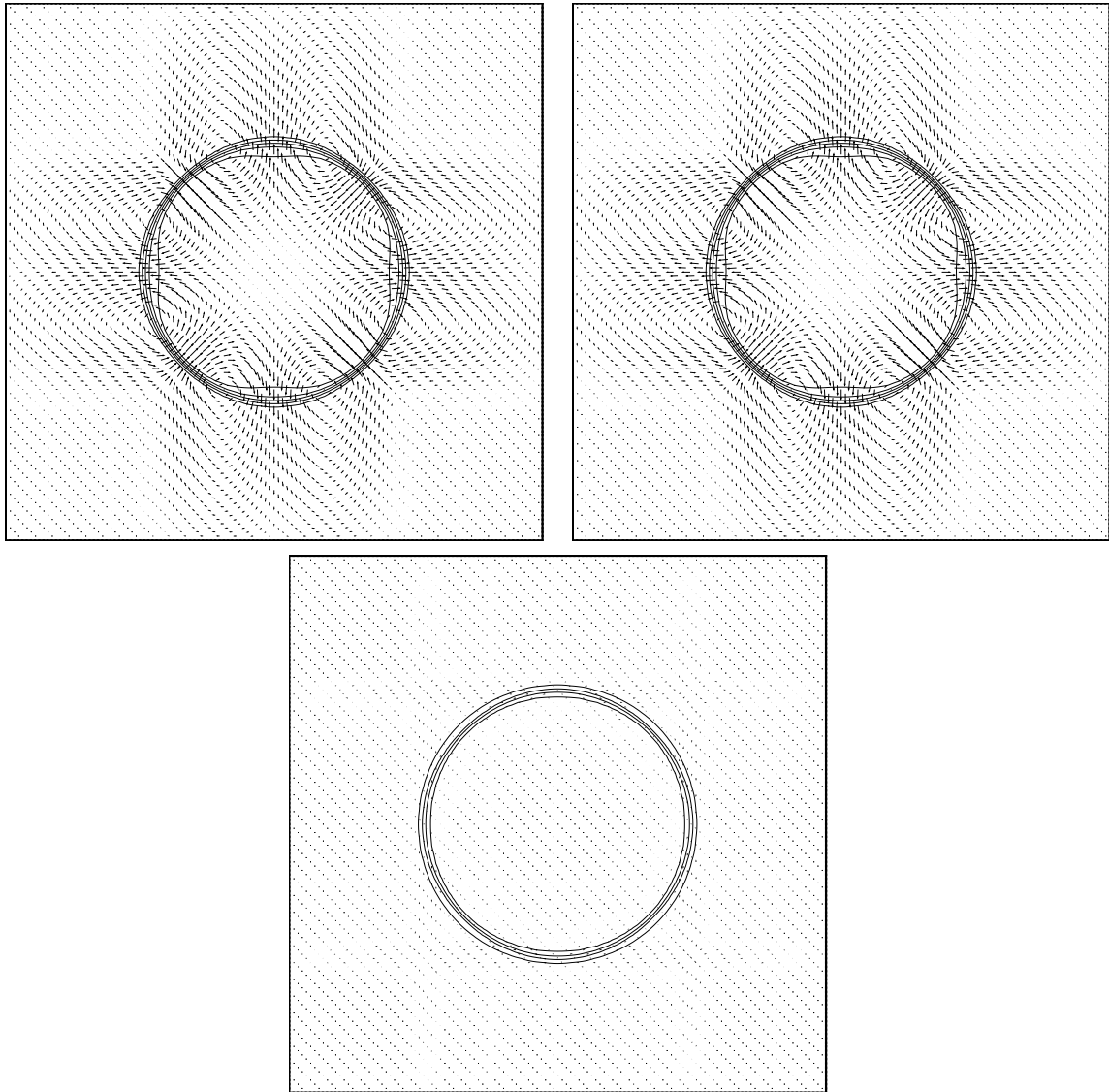


Figure C.2 : *Direct numerical simulation of spherical droplet equilibrium -  $\frac{\rho_1}{\rho_0} = 1000$ ,  $R = 0.25m$  and  $\sigma = 0.25N.m^{-1}$  - **Sim1**, **Sim2** and **Sim3** are plotted from left to right and top to bottom - Velocity profiles (1 vector over 4) and pressure isolines are presented with the same magnitude scales.*

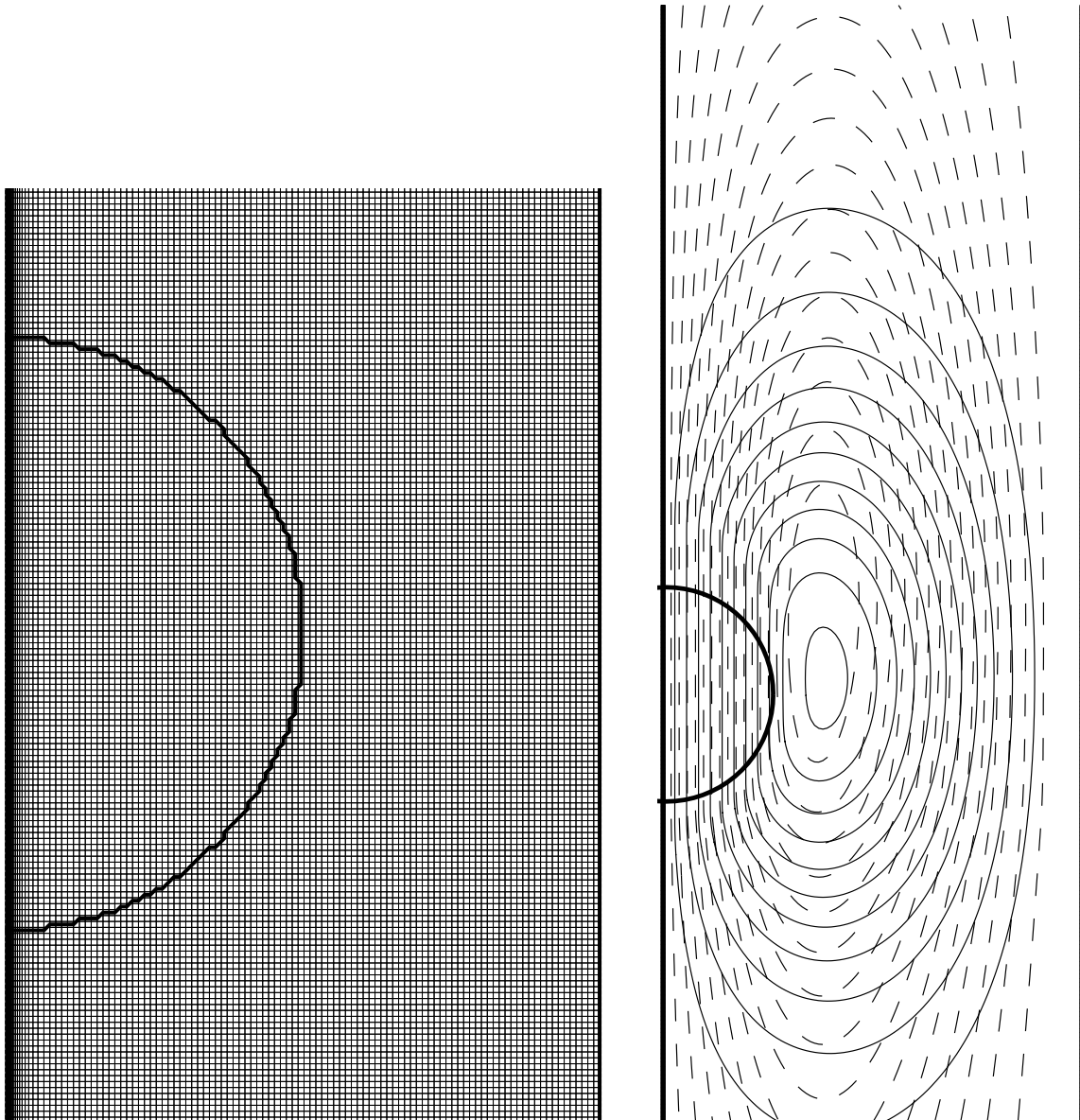


Figure C.3 : *Direct numerical simulation of spherical particle in a cylindrical vein -  $\frac{\rho_1}{\rho_0} = 6.25$ ,  $Re = 0.73$ ,  $R_p = 0.002m$  and  $R_t = 0.008m$  - Left: initial particle shape and grid - Right: particle shape and streamlines (adaptive augmented Lagrangian in solid lines and standard augmented Lagrangian in dashed lines) - Simulations are implemented on a 3D axisymetrical  $114 \times 700$  irregular grid.*

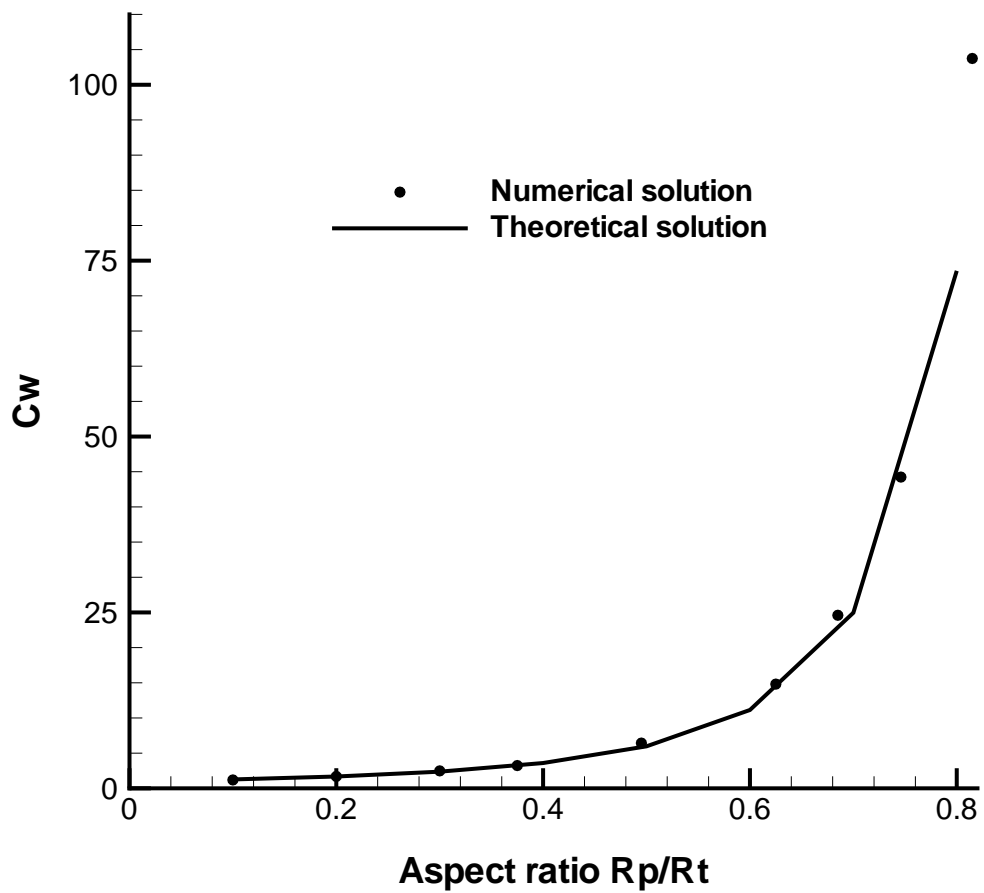


Figure C.4 : Correction coefficients for the Stokes velocity - Comparison between theoretical and numerical solutions for various aspect ratios  $\frac{R_p}{R_t}$ .

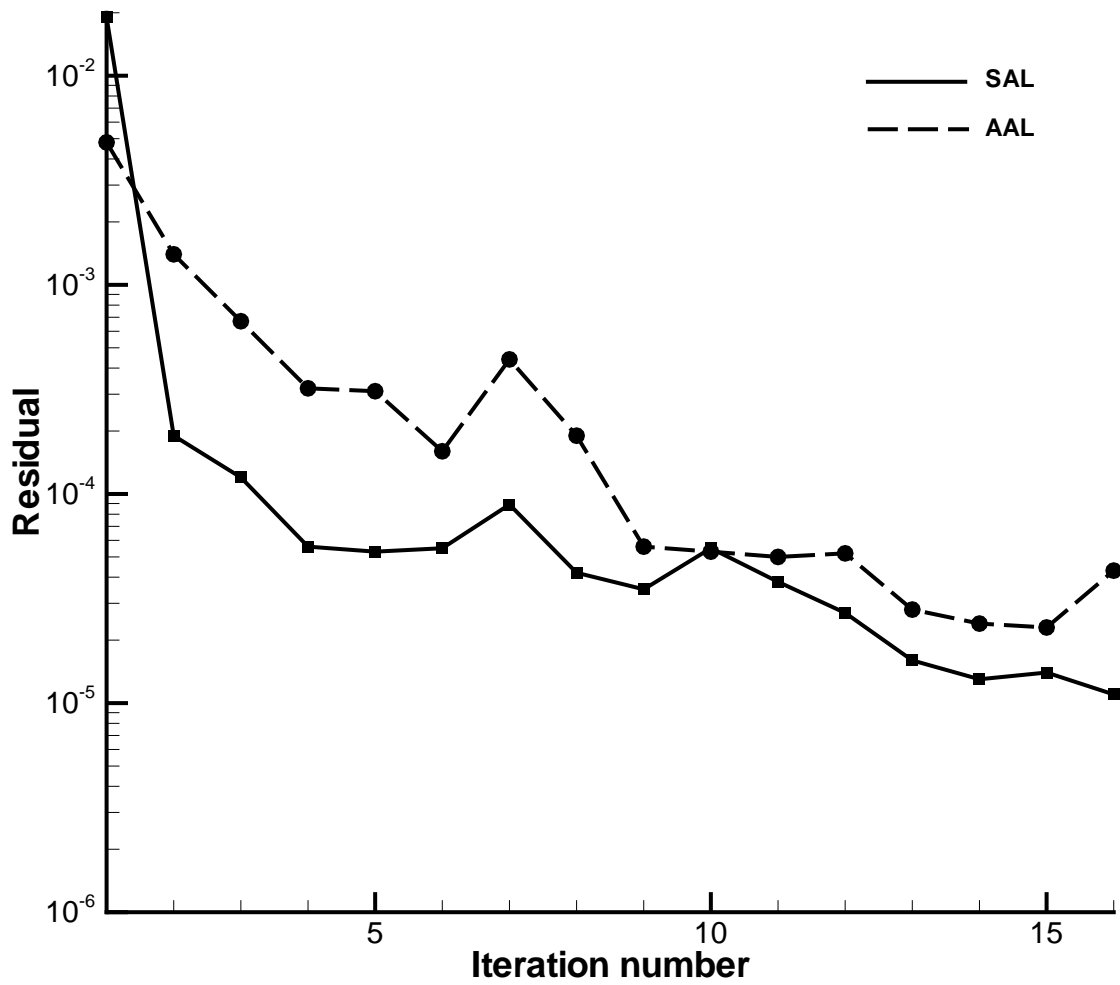


Figure C.5 : Effects of the SAL and AAL methods on the behaviour of the Bi-CGSTAB solver.

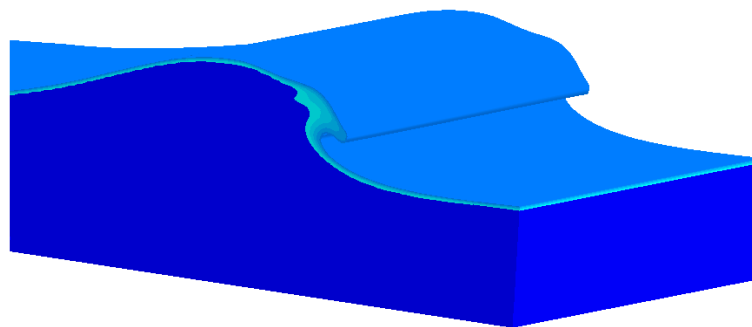


Figure C.6 : Direct numerical simulation of wave breaking - 3D free-surface before impact of the plunging jet at  $t = 0.13s$  -  $\frac{H}{L} = 0.13$  and  $\frac{d}{L} = 0.17$ .

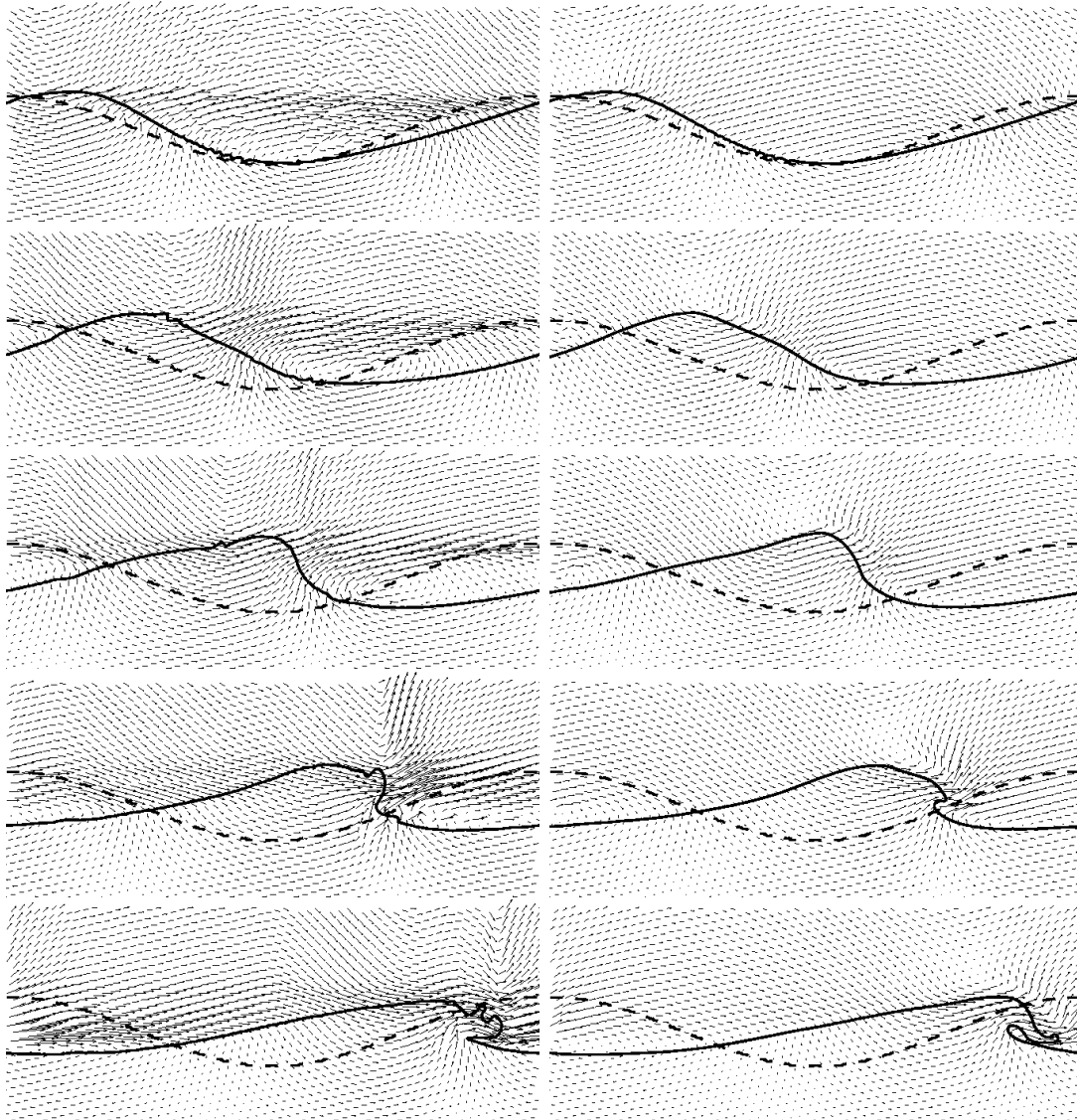


Figure C.7 : *Direct numerical simulation of wave breaking - standard augmented Lagrangian method (left column) and adaptative one (right column) at time  $t=0.018$  s,  $t=0.056$  s,  $t=0.09$  s,  $t=0.13$  s and  $t=0.17$  s - Velocity profiles (1 vector over 15), free surface (solid line) and initial condition (dashed line) are plotted -  $\frac{H}{L} = 0.13$  and*

$$\frac{d}{L} = 0.17.$$

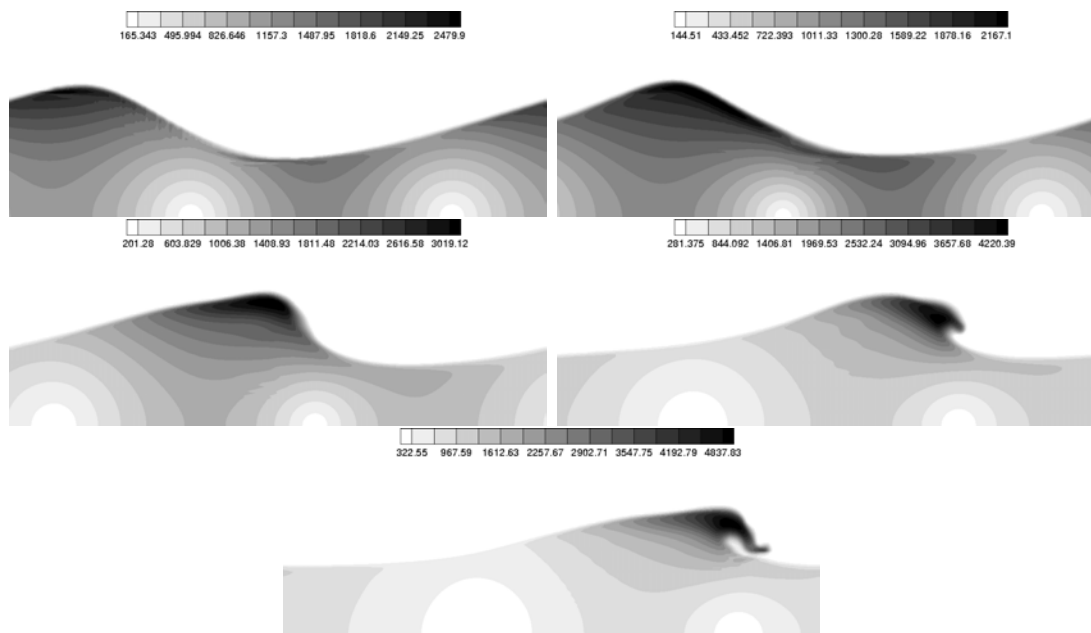


Figure C.8 : Order of magnitude and space variations of  $r(M)$  for the wave breaking problem at time  $t=0.018$  s,  $t=0.056$  s,  $t=0.09$  s,  $t=0.13$  s and  $t=0.17$  s -  $\frac{H}{L} = 0.13$  and  $\frac{d}{L} = 0.17$ .

# Bibliographie

- R. Abrahamsen, A. et D. Geldart. Behaviour of gas-fluidised beds of fine powders. part 1. homogeneous expansion. *Powder Tech*, 26:35, 1980.
- K. Anderson, S. Sundaresan, et R. Jackson. Instabilities and the formation of bubbles in fluidized beds. *Journal of Fluid Mechanics*, 193:75–110, 1995.
- T. B. Anderson et R. Jackson. Fluid mechanical description of fluidized beds. equation of motion. *Ind. Engng Chem. Fundam.*, 6(4):527–539, 1967.
- T. B. Anderson et R. Jackson. Fluid mechanical description of fluidized beds. stability of the state of uniform fluidization. *Ind. Engng Chem. Fundam.*, 7:12–21, 1968.
- P. Angot. *Contribution à l'étude des transferts thermiques dans des systèmes complexes; application aux composants électroniques*. PhD thesis, Université de Bordeaux 1, 1989.
- E. Arquis et J.P. Caltagirone. Sur les conditions hydrodynamiques au voisinage d'une interface milieu fluide-milieu poreux : application à la convection naturelle. *C. R. Acad. Sci. Série II b*, 299:1–4, 1984.
- A.B. Basset. *A Treatise on Hydrodynamics*. Dover, 1888.
- G.K. Batchelor. Sedimentation in a dilute dispersion of spheres. *Journal of Fluid Mechanics*, 52:245–268, 1972.
- G.K. Batchelor. A new theory of the instability of a uniform fluidized bed. *Journal of Fluid Mechanics*, 193:75–110, 1988.
- A. Boëlle. *Validation d'un modèle à deux-fluides appliqué à la simulation des lits fluidisés*. PhD thesis, Dpt. Laboratoire Nationale d'hydraulique (EDF), 1997.

- R. Bouard. *Etude de l'écoulement autour d'un cylindre soumis à une transmutation uniforme après un départ impulsif, pour des nombres de Reynolds allant de 0 à  $10^4$* . PhD thesis, Université de Poitiers, 1983.
- R. Byron Bird, R.C. Armstrong, et O. Hassager. *Dynamics of Polymeric liquids: Volume I Fluid Mechanics*. John Wiley and Sons, 1977.
- J-P. Caltagirone et S. Vincent. Tensorial penalisation method for solving navier-stokes equations. *C. R. Acad. Sci. Série II b*, 329:607–613, 2001.
- N.F. Carnahan et K.E. Starling. Equation of state for non-interacting rigid spheres. *J. Chem. Phys.*, 51:635–637, 1969.
- S. Chapman et G. Cowling. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. Cambridge Mathematical Library, Cambridge, 1970.
- Y.S. Chong, D.A. Ratkowsky, et N. Epstein. Effect of particle shape on hindered settling in creeping flow. *Powder Technol.*, 23:55–66, 1979.
- R. Clift, J.R. Grace, et M.E. Weber. *Bubbles, drops and particles*. Academic Press, New York, 1978.
- J.W. Demmel, S.C. Eisenstat, J.R. Gilbert, X.S. Li, et J.W.H. Liu. A supernodal approach to sparse partial pivoting. *SIAM J. Matrix Analysis and Applications*, 20(3):720–755, 1999.
- S. Ergun. Fluid flow through packed columns. *Chem. Eng. Prog.*, 48(2):89–94, 1952.
- A.F. Fortes, D.D. Joseph, et T.S. Lundgren. Nonlinear mechanics of fluidization of beds of spherical particles. *Journal of Fluid Mechanics*, 177:95–134, 1987.
- M. Fortin et R. Glowinski. *Méthodes de lagrangien augmenté. Application à la résolution numérique de problèmes aux limites*. Dunod, 1982.
- P.U. Foscolo et L.G. Gibilaro. Fluid dynamic stability of fluidised suspensions. *Chem. Engng. Sci.*, 42(6):1489–1500, 1987.
- G. Galliero. *Thermodiffusion dans les fluides de Lennard-Jones par dynamique moléculaire*. PhD thesis, Université bordeaux 1, 2003.



- D. Geldart. Types of gaz fluidisation. *Powder Technology*, 7:285–292, 1973.
- F. Gevrin. *Modélisation dynamique de la fluidisation solide-liquide*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2002.
- R. Glowinski, T.W. Pan, T.I. Hesla, D.D. Joseph, et J. Périaux. A fictitious domain approach to the direct numerical simulation of incompressible viscous flow past moving rigid bodies: application to particulate flow. *J. Comput. Phys.*, 169:363–426, 2001.
- A. Gobin, H. Neau, O. Simonin, J.-R. Llinas, V. Reiling, et J.-L. Sélo. Numerical simulation of a gas phase polymerisation reactor. *ECCOMAS Computational Fluid Dynamics Conference, September*, 2001.
- H. Grad. On the kinetic theory of rarefied gases. *Communication on Pure and Applied Mathematics*, 2(4):331–407, 1949.
- D.J. Gunn. Transfer of heat or mass to particles in fixed and fluidized beds. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 21:467, 1978.
- I. Gustafsson. On first and second order symmetric factorization methods for the solution of elliptic difference equations. *Technical report, Chalmers University of Technology*, 1978.
- E. Guyon, J.P. Hulin, et L. Petit. *Hydrodynamique physique*. Ed. CNRS, 1991.
- J. Happel et H. Brenner. *Low Reynolds Number Hydrodynamics*. Kluwer Academic Publishers, 1983.
- F.H. Harlow et J.E. Welsh. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow with free surface. *Phys. Fluids*, 8:2182–2189, 1965.
- S.E. Harris et D.G. Crighton. Solitons, solitary waves and voidage disturbances in gas-fluidized beds. *Journal of Fluid Mechanics*, 266:243–276, 1994.
- H. Hasimoto. On the periodic fundamental solution of the stokes equations and their applications to viscous flow past a cubic array of spheres. *Journal of Fluid Mechanics*, 5:317–328, 1959.
- J. He et O. Simonin. Modélisation numériques des écoulements turbulents gaz-solides en conduite verticale. pages 243–276, Chatou, France, 1994. Rapport EDF HE/94/021A, Electricité de France.

- C.W. Hirt et B.D. Nichols. Volume of fluid (vof) methods for the dynamics of free boundaries. *J. Comput. Phys.*, 39:201–255, 1981.
- G. Homsy, M. El-Kaissy, M., et A. Didwania. Instability waves and the origin of bubbles in fluidized beds-ii. *Int. J. Multiphase Flow*, 6:305–318, 1980.
- H. H. Hu. Direct simulation of flows of solid-liquid mixtures. *Int. J. Multiphase Flow*, 22:335–352, 1996.
- H. H. Hu, N.A. Patankar, et M.Y. Zhu. Direct numerical simulations of fluid-solid systems using the arbitrary lagrangian-eulerian technique. *J. Comput. Phys.*, 169:427–462, 2001.
- R. Jackson. The mechanics of fluidized beds. part i: the stability of the state of uniform fluidisation. *Trans. Insts. Chem. Engrs.*, 41:13–21, 1963.
- J.T. Jenkins et M.W. Richman. Kinetic theory for plane flows of a dense gas of identical, rough, inelastic, circular disks. *Phys. Fluids*, 28(12):3485–3494, 1985.
- A.A. Johnson et T.E. Tezduyar. Numerical simulation of fluid-particle interactions. Venezia (Italy), 1995. Proceedings of the International Conference on Finite Elements in Fluids.
- K. Khadra. *Méthodes adaptatives de raffinement local multigrille, applications aux équations de Navier-Stokes et de l'énergie*. PhD thesis, Université de Bordeaux 1, 1994.
- K. Khadra, P. Angot, Parneix S., et J.P. Caltagirone. Fictitious domain approach for numerical modelling of navier-stokes equations. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 34:651–684, 2000.
- I. Kim, S. Elghobashi, et W. Sirignano. Three-dimensional flow over two spheres placed side by side. *Journal of Fluid Mechanics*, 246:465–488, 1993.
- J. Kim, D. Kim, et H. Choi. An immersed boundary finite volume method for simulations of flow in complex geometries. *J. Comput. Phys.*, 171:132–150, 2001.
- N. Lecoq, F. Feuillebois, N. Anthore, R. Anthore, F. Bostel, et C. Petipas. Precise measurement of particle-wall hydrodynamic interactions at low reynolds number using laser interferometry. *Phys. Fluids A*, 5(1):3–12, 1993.
- R.J. LeVeque. Numerical methods for conservation laws. ETH Zurich, Birkhauser, 1990.

- S. Lim et Peskin C.S. Simulations of the whirling instability by the immersed boundary method. *SIAM J. Sci. Comput.*, 25:2066–2083, 2004.
- J.T.C. Liu. Note on a wave-hierarchy interpretation of fluidized beds. *Proc, R. Soc. Lon.*, A380:229–239, 1982.
- C.K.K. Lun et S.B. Savage. The effect of an impact velocity dependent coefficient of restitution on stresses developed by sheared granular material. *Acta Numerica*, 63: 14–44, 1986.
- A. Massol. *Simulations numériques d'écoulement à travers des réseaux fixes de sphères monodisperses et bidisperses pour des nombres de Reynolds modérés*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2004.
- B Maury. A many-body lubrication model. *C. R. Acad. Sci.*, 325:1053–1058, 1997.
- B Maury. Direct simulations of 2d fluid-particle flows in biperiodic domains. *J. Comput. Phys.*, 156:325–351, 1999.
- J.A. Mulholland, R.K. Srivastava, et J.O.L. Wendt. Influence of droplet spacing on drag coefficient in nonevaporating, monodisperse streams. *AIAA Journal*, 26(10):1231–1237, 1988.
- D.J. Needham et J.H. Merkin. The propagation of a voidage disturbance in a uniform fluidized bed. *Journal of Fluid Mechanics*, 131:427–454, 1983.
- M. Nicolas. *Modélisation numérique des écoulements fluides/particules-Définition d'un modèle de simulation directe-Application à la sédimentation*. PhD thesis, Université Paris VI, 1997.
- S. Osher et J.A. Sethian. Fronts propagating with curvature dependent speed: algorithm based on hamilton-jacobi formulations. *J. Comput. Phys.*, 79:12–49, 1988.
- N.A. Patankar, P. Singh, D.D. Joseph, R. Glowinski, et T.W. Pan. A new formulation of the distributed lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows. *Int. J. Multiphase Flow*, 26:1509–1524, 2000.
- S.V. Patankar. *Numerical heat transfer and fluid flow*. Hemisphere Publishing Corporation, New York (USA), 1980.

- C.S. Peskin. Numerical analysis of blood flow in the heart. *J. Comput. Phys.*, 25:220–252, 1977.
- T.N. Randrianarivelo, G. Pianet, S. Vincent, et J.P. Caltagirone. Numerical modelling of solid particle motion using a new penalty method. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 47, Issue 10-11:1245–1251, 2005.
- W.E. Ranz et W.R. Marshall. Evaporation from drops. *Chem. Engng Prog.*, 48(4):173, 1952.
- S.B. Reddy Karri. Fluidized bed hydrodynamics. *Particulate Solid Research Inc.*, 1993.
- J.F. Richardson et W.N. Zaki. Sedimentation and fluidisation. part i. *Trans. Instn Chem. Engrs*, 32:35–53, 1954.
- H-P. Riquarts. On heat transfer between particles and fluid in aerated beds. *Ger. Chem. Eng.*, 3:286–295, 1980.
- J.B. Ritz. *Instabilité en onde plane dans un lit fluidisé liquide-solide*. PhD thesis, Université Paris VI, 1997.
- J.B. Ritz et J.P. Caltagirone. A numerical continuous model for the hydrodynamics of fluid particle systems. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 30(8):1067–1090, 1999.
- P.N. Rowe et K.T. Claxton. P. n. rowe et k. t. claxton. *Trans. Instn. Chem. Engrs.*, 43: 321–331, 1965.
- P.N. Rowe et G.A. Henwood. Drag forces in a hydraulic model of a fluidised bed -part 1. *Trans. Instn. Chem. Engrs.*, 39:43–54, 1961.
- I. Ryming. *Dynamique des fluides*. Presses Polytechniques Romanes, 1985.
- P. Sagaut. *Large Eddy simulation for Incompressible Flows*. Springer-Verlag, Berlin, 1998.
- A.S. Sangani et A. Acrivos. Slow flow through a periodic array of spheres. *Journal of Fluid Mechanics*, 8:343–360, 1982.
- O. Simonin et J. He. Eulerian prediction on the particle behaviour in a turbulent boundary layer. Erlangen (FRG), 1992. Proc. 6<sup>th</sup> Workshop on Two-Phase Flow Predictions.

- P. Singh, D.D. Joseph, T.I. Hesla, R. Glowinski, et T.W. Pan. A distributed lagrange multiplier/fictitious domain method for viscoelastic particulate flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 91:165–188, 2000.
- M. Sussman et P. Smereka. Axisymmetric free boundary problems. *Journal of Fluid Mechanics*, 341:269–294, 1994.
- R. Tal, D.N. Lee, et W.A. Sirignano. Heat and momentum transfer around a pair of spheres in viscous flow. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 27(11):1953–1962, 1984.
- M. Uhlmann. An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows. *J. Comput. Phys.*, 209:448–476, 2005.
- S.O. Unverdi et G.T. Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *J. Comput. Phys.*, 100:25–37, 1992.
- H.A. Van Der Vorst. Bi-cgstab: a fast and smoothly converging variant of bi-cg for the solution of non-symmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 13:631–644, 1992.
- S. Vincent, J.P. Calatagirone, P. Lubin, et T.N. Randrianarivelo. An adaptative augmented lagrangian method for three-dimensional multimaterial flows. *Computers & Fluids*, 33:1273–1289, 2004.
- S. Vincent et J.P. Calatagirone. Efficient solving method for unsteady incompressible interfacial flow problems. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 30:795–811, 1999.
- S. Vincent et J.P. Calatagirone. A one cell local multigrid method for solving unsteady incompressible multi-phase flows. *J. Comput. Phys.*, 163:172–215, 2000.
- J.M. Virepinte. *Etude du comportement dynamique et thermique de gouttes en régime d'interaction dans le cas de jets rectilignes*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure de l'Aéronautique et de l'Espace, 1999.
- N. Wakao, S. Kaguei, et T. Funazkri. Effect of fluid dispersion coefficients on particle-to-fluid heat transfer coefficients in packed beds. *Chem. Eng. Sci.*, 34:325, 1979.
- D. Wan et S. Turek. Direct numerical simulation of particulate flow via multigrid fem techniques and the fictitious boundary method. *in submission in IJNMF*, 2005.

- C. Wen et Y. H. Yu. Mechanics of fluidization. *Chem. Engng. Symp. Ser.*, 62(62):100–111, 1966.
- D.L. Youngs. *Time-dependent multimaterial flow with large fluid distortion*. K.W. Morton and M.J. Baines, Numerical Methods For Fluids Dynamics, Academic Press, New York, 1982.
- W. Zhang, R. Noda, et M. Horio. Evaluation of lubrication force on colliding particles for dem simulation of fluidized beds. 158:92–101, 2005.
- C. Zhu, S.-C. Liang, et L.-S. Fan. Particle wake effects on the drag force of an interactive particle. *Int. J. Multiphase Flow*, 20(1):117–129, 1994.

# Etude des interactions hydrodynamiques fluides/solides. Application aux lits fluidisés

## Résumé :

Nous avons développé au cours de ce travail un modèle de simulation numérique directe afin de calculer les interactions hydrodynamiques entre le fluide et les particules. Ce modèle fait appel à une formulation originale du tenseur des contraintes des équations de Navier-Stokes. Nous l'avons décomposé en quatre expressions distinguant les contributions de compression, d'élongation, de cisaillement et de rotation. Quatre viscosités, associées à chaque contrainte, sont également introduites. Grâce à cette décomposition, nous sommes en mesure de simuler, à partir des seules équations de Navier-Stokes, le comportement d'un fluide visqueux incompressible ou celui d'un solide indéformable. Parallèlement à cela, nous avons développé une méthode de pénalisation pour imposer la contrainte d'incompressibilité du fluide et celle de non déformation du solide. Cette technique est fondée sur la méthode de lagrangien augmenté que nous avons généralisée à l'imposition de la contrainte de non déformation du solide. Les tests de validation ont montré l'efficacité de la méthode pour la simulation de particules en sédimentation à différents nombres de Reynolds. Le modèle numérique a ensuite été appliqué pour la simulation de l'écoulement à travers un ensemble de sphères fixes disposées dans un arrangement cubique face centré. Cette configuration idéale de lits fluidisés a permis d'identifier les modifications du coefficient de traînée  $C_d$  d'une particule de cet ensemble comparée à celui d'une particule isolée dans les mêmes conditions d'écoulement. La deuxième application fut l'étude d'un réseau de particules mobiles réparties de façon aléatoire initialement.

**Mots-clés :** Simulation numérique directe, interactions fluide/solide, pénalisation, méthode de domaines fictifs, lits fluidisés, lagrangien augmenté

## Study of fluid/solid hydrodynamic interactions. Application to fluidised beds

## Abstract :

During this thesis, a direct numerical simulation model has been developed in order to calculate the hydrodynamic interaction between fluid and solid particles. This model uses an original formulation of the stress tensor of Navier-Stokes equations. Indeed, it has been decomposed into four expressions highlighting its different parts, namely, compression, elongation, pure shearing and rotation. Four viscosities have also been introduced in association to each previous part. Thanks to this decomposition, we were able to simulate the behaviour of a non-deformable solid or the behaviour of an incompressible viscous fluid just using the single set of Navier-Stokes equations. Besides, a penalty method has been developed so as to impose both the incompressibility of the fluid and the non-deformable property of the solid. This penalty method is based on the augmented Lagrangian one, extended to the constraint of non-deformability of the solid. Test validations on the sedimentation of solid particles at various Reynolds number proved its effectiveness. The numerical model has been applied to the simulation of a flow through an array of fixed spheres ordered in a face centred cubic arrangement. This ideal configuration of fluidised beds has permitted to identify the modification of the drag coefficient  $C_d$  of one particle of this ensemble compared to the drag coefficient of an isolated sphere in the same flow conditions. The second application was the study of an array of moving spheres with a random initial arrangement. The results are in agreement with literature data testifying the effectiveness of the numerical modeling.

**Key-word:** Direct Numerical Simulation, Fluid/solid interactions, penalty method, Fictitious domain method, Fluidized beds, Augmented Lagrangian