

Table des matières

	Page
Table des matières	ix
Liste des figures	xiii
Liste des tableaux	xvii
Liste des symboles	xx
Introduction	1
I – Contexte physique	5
I – 1 Ecoulements fluide-particules	6
I – 1.1 Phénomènes naturels	6
I – 1.2 Applications	6
I – 1.3 Cadre de cette étude	7
I – 2 Lits Fluidisés	8
I – 2.1 Description	8
I – 2.2 Intérêts pour l'industrie	9
I – 2.3 Cas des lits pulsés	10
I – 3 Détails sur la fluidisation	12
I – 3.1 Saut de pression	12
I – 3.2 Vitesse de fluidisation	17
I – 3.3 Classification de Geldart	20
I – 3.4 Effets de la polydispersité et de la non-sphéricité	22
I – 4 Conclusion	23
II – Modélisation	25
II – 1 Différentes échelles de longueur pour la modélisation	26
II – 1.1 Echelle micro : résolution directe	26
II – 1.2 Echelle macro : Modèles Euler-Euler	29
II – 1.3 Echelle méso : Modèles Euler-Lagrange	29
II – 2 Modèle Euler-Lagrange	30
II – 2.1 Phase continue	30
II – 2.2 Phase dispersée	32
II – 2.3 Action du fluide sur les particules	35
II – 2.4 Calcul de la fraction volumique	46
II – 2.5 Action des particules sur le fluide	52
II – 3 Conclusion	53
III – Aspects Numériques	55
III – 1 PeliGRIFF	56
III – 1.1 Généralités	56
III – 1.2 Détails	56
III – 2 Modèle implémenté	58

III – 3 Outils numériques	58
III – 3.1 Discrétisation spatiale	58
III – 3.2 Ecriture des termes	58
III – 4 Résolution numérique	62
III – 4.1 Discrétisation temporelle et splitting d'opérateur	62
III – 4.2 Résolution du problème de Stokes dégénéré	63
III – 4.3 Couplage et ordre de précision temporels	64
III – 5 Conditions aux limites et initiales	64
III – 5.1 Conditions aux limites	64
III – 5.2 Conditions initiales	67
III – 6 Optimisation du temps de calcul	68
III – 6.1 Répartition du temps de calcul	68
III – 6.2 Scaling à charge constante	69
III – 6.3 Charge par processeur	70
III – 6.4 Mise à jour du champ \mathcal{E}_f	71
III – 7 Conclusion	73
IV – Validation	75
IV – 1 Introduction	76
IV – 2 Valeurs théoriques	76
IV – 2.1 Saut de pression à travers le lit	76
IV – 2.2 Vitesse minimale de fluidisation	79
IV – 3 Lits pulsés	81
IV – 3.1 Détails sur les lits pulsés	82
IV – 3.2 Saut de pression et oscillations	86
IV – 3.3 Fraction volumique moyenne	89
IV – 4 Conclusion	90
V – Résultats	93
V – 1 Introduction	94
V – 2 Présentation des outils d'analyse	94
V – 2.1 Grandeurs observées	94
V – 2.2 Représentation des résultats	96
V – 2.3 Outils statistiques	97
V – 2.4 Echantillonnage	98
V – 3 Etude approfondie de lits 3D	103
V – 3.1 Description statistique du lit en fonction de U_{in}	103
V – 3.2 Influence de la taille du domaine	107
V – 3.3 Influence des paramètres numériques	109
V – 3.4 Paramètres de contact	111
V – 4 Etude approfondie de lits pulsés	113
V – 4.1 Type d'analyse et représentation des résultats	113
V – 4.2 Résultats	114
V – 5 Conclusion	119
VI – Multi-Echelle	121
VI – 1 Introduction	122
VI – 2 Modèle DLM-FD	122
VI – 2.1 Formulation mathématique	122
VI – 2.2 Discrétisation temporelle	124
VI – 2.3 Résolution spatiale	126
VI – 2.4 Performances informatiques	127
VI – 3 Extraction de lois de traînée	128
VI – 3.1 Dérivation des équations de Navier Stokes dans les systèmes multi-particules	128
VI – 3.2 Approche semi-empirique	129

VI – 3.3	Déduction de $f(\mathcal{E}_f)$ à partir du saut de pression	129
VI – 3.4	Approche purement empirique	130
VI – 4	Comparaison directe	132
VI – 4.1	Choix du système et dimensionnement	132
VI – 4.2	Comparaison des résultats	135
VI – 5	Conclusion	139
Conclusion et perspectives		141
Acronymes		145
Annexes		147
A	Réseaux de particules	148
B	Caractéristiques du super-calculateur ENER110	150
C	Algorigramme	151
D	Forces DLVO	153
Bibliographie		155

Table des figures

I.1	Lit fixe de particules sphériques de même diamètre	8
I.2	Lit fluidisé de particules sphériques de même diamètre. A gauche, position des particules colorées en fonction de leur vitesse. Au centre, valeur de la fraction volumique de fluide sur une section Y-Z. A droite, norme de la vitesse du fluide à travers le lit sur une section Y-Z	9
I.3	Types de lit pulsé	10
I.4	Illustration du comportement du lit pour différentes vitesses d'injection. \mathcal{E}_f représente la fraction volumique de fluide ($\mathcal{E}_f=1$: fluide sans particules, $\mathcal{E}_f=0.35$: packing maximum de particules)	11
I.5	Représentation des équations de Ergun (I.22), Carman-Kozeny (I.13), Blake-Kozeny (I.12) et Burke-Plummer (I.15)	16
I.6	Représentation schématique du saut de pression à travers le lit de particules en fonction de la vitesse d'entrée	17
I.7	Vitesse minimale de fluidisation en fonction du diamètre des particules pour un rapport de densité $\rho_p/\rho_f = 2500/1.2$. Equation (I.29) en rouge, équation (I.30) en bleu et équation (I.33) en vert	18
I.8	Vitesse minimale de fluidisation en fonction de la porosité au minimum de fluidisation pour des particules de diamètre $d_p = 1mm$ de densité $\rho_p = 2500 kg.m^{-3}$ fluidisées par de l'air $\rho_f = 1.2 kg.m^{-3}$. Equation (I.29) en rouge, équation (I.30) en bleu et équation (I.33) en vert	19
I.9	Classification de Geldart [81] des types de fluidisation de particules	20
I.10	Illustration des différents régimes de fluidisation	21
II.1	Exemple d'échelle de modélisation pour a) une approche DNS, b) une approche Euler-Lagrange et c) une approche Euler-Euler	26
II.2	Exemple de maillage non structuré épousant la surface des particules (B. Maury [150])	27
II.3	Différents types de couplage entre les phases solide et fluide en fonction de la concentration de particules (basé sur Elgobashi [59])	30
II.4	Contact entre deux particules : G_i et G_j sont les centres de gravité des particules i et j respectivement, \vec{t} et \vec{n} sont les vecteurs unitaires tangentiels et normaux, respectivement, et δ_{ij} est la distance de recouvrement	33
II.5	Evolution du coefficient de traînée en fonction du nombre de Reynolds pour une particules isolée dans un régime de transition	38
II.6	Evolution de la force de traînée en fonction de la fraction volumique de fluide \mathcal{E}_f	40
II.7	Calcul de la fraction volumique de fluide en 2D	47
II.8	Différence entre (a) le calcul exact de \mathcal{E}_f et (b) la méthode du centre de gravité	48
II.9	Exemples de configuration dans lesquelles la méthode du centre de gravité offre une mauvaise approximation de la fraction volumique de fluide	48
II.10	Illustration de la méthode de décalage de grille proposée par Alobaid <i>et al.</i> [4]	49
II.11	Illustration de la méthode des cubes englobants	50
II.12	Variation de la prise en compte du volume d'une particule dans un volume de contrôle. En bleu, méthode du centre de gravité, en vert variation exacte, en rouge la méthode du cube englobant	50
II.13	Méthode du cube poreux proposée par Link [138]	51

II.14	Illustration du calcul de la force des particules sur le fluide au prorata du volume de particule compris dans le volume de contrôle, dans le respect de la troisième loi de Newton	53
III.1	Diagramme de construction de la plateforme PeliGRIFF	56
III.2	Structure des différents modules de la plateforme PeliGRIFF	57
III.3	Couplage et échange d'informations entre les 2 phases	57
III.4	Positions des variables sur la grille décalée en 2D	59
III.5	Cellule de contrôle et position des variables pour le calcul de la première composante du terme de diffusion	59
III.6	Cellule de contrôle et position des variables pour le calcul de la première composante du terme de transport avec la méthode upwind	61
III.7	Cellule de contrôle et position des variables pour le calcul de la première composante du terme de transport avec la méthode TVD	61
III.8	Illustration des sous-itérations du solveur granulaire entre deux itérations du solveur fluide	64
III.9	Différentes conditions aux limites en 2D	65
III.10	Interpolation de la fraction volumique de fluide pour une particule proche de la face d'entrée dans le cas où $\mathcal{E}_f = 1$ est imposée sur la face inférieure du réacteur	66
III.11	Interpolation de la fraction volumique de fluide pour une particule proche de la face d'entrée dans le cas où une couche de particules est ajoutée sous la face inférieure du réacteur	67
III.12	Conditions aux limites périodiques sur les faces latérales pour les données du fluide comme pour les particules	67
III.13	Répartition du temps de calcul	69
III.14	Scaling à charge constante par nœud. Evolution du temps passé dans les différentes parties du code par rapport au temps passé lors du calcul sur un nœud plein (16 cœurs)	69
III.15	Evolution du temps de calcul en fonction du nombre de particules par cœur. Charge de référence : 20 000 particules par cœur.	70
III.16	Scaling de la résolution du problème de Stokes pour différentes charges de cellules fluides par cœur	71
III.17	Ancienne procédure de mise à jour des valeurs de la bande de recouvrement.	72
III.18	Nouvelle procédure de mise à jour des valeurs de la bande de recouvrement.	73
IV.1	Oscillations de la pression dynamique du fluide (air) sur la face d'entrée du réacteur pour $U_{in} = 2U_{mf}$. Propriétés du système données dans le tableau IV.1	77
IV.2	Ecoulement à travers un lit fixe de $40 \times 40 \times 200$ particules empilées selon un arrangement cubique simple	78
IV.3	Evolution du saut de pression à travers le lit en fonction de la vitesse d'entrée du fluide. Les paramètres de simulation sont présentés dans les tableaux IV.1-(a) et (b)	79
IV.4	Evolution du saut de pression à travers le lit en fonction de la vitesse d'entrée du fluide. Les paramètres de simulation sont présentés dans le tableau IV.1.	80
IV.5	Evolution du saut de pression à travers le lit en fonction de la vitesse d'entrée du fluide. Les paramètres de simulation sont présentés dans le tableau IV.1, la formulation employée pour la loi de traînée est celle de Huilin <i>et al.</i> [107]	81
IV.6	Illustration de la présence de murs sur la compacité d'un lit de particules lors d'une sédimentation	81
IV.7	Evolution du saut de pression à travers le lit en fonction de la vitesse d'entrée du fluide. Les paramètres de simulation sont présentés dans le tableau IV.1	82
IV.8	Lits fluidisés "2,5 D" communément employés pour les études expérimentales. En jaune, la face inférieure du réacteur ; en rouge, la surface d'injection du fluide	83
IV.9	Géométrie du dispositif expérimental de Brown [20], dimensions exprimées en millimètres	84
IV.10	Conditions aux limites discrétisées sur la face inférieure d'un lit pulsé	85
IV.11	Exemple d'évolution temporelle de la hauteur (en bleu) et de la pression en entrée (en rouge) dans un lit pulsé mono-jet pour une vitesse d'injection $U_{bulk} = 3U_{in}$	86

IV.12	Evolution temporelle de la fraction volumique de fluide entre 1s et 1.2s pour la configuration 3U-1J-550 (voir tableau IV.2)	87
IV.13	Saut de pression à travers le lit de particules pour $U_{\text{bulk}} = 1,6U_{\text{mf}}$	87
IV.14	Spectre de fréquence des oscillations de pression dynamique du fluide sur la face d'entrée du réacteur pour une vitesse d'injection $U_{\text{bulk}} = 2.6U_{\text{mf}}$ dans le cas 1J-550	88
IV.15	Comparaison de la moyenne temporelle de la fraction volumique de fluide pour une vitesse d'injection de $U_{\text{bulk}} = 1.6U_{\text{mf}}$ et des particules de $550\mu\text{m}$ de diamètre. A gauche, résultats numériques de Deb <i>et al.</i> [45]; au centre, résultats expérimentaux de Brown [20]; à droite, résultats obtenus avec le modèle DEM-CFD implémenté au cours de cette thèse	89
IV.16	Moyenne temporelle de la fraction volumique de fluide pour une vitesse d'injection de $U_{\text{bulk}} = 3U_{\text{mf}}$ et des particules de $550\mu\text{m}$ de diamètre dans les cas 1, 2 et 3 jets. Comparaison entre les résultats numérique de Deb <i>et al.</i> [45] (à gauche), les résultats expérimentaux de Brown [20] (au milieu) et les résultats obtenus avec le modèle DEM-CFD implémenté au cours de cette thèse (à droite)	91
IV.17	Comparaison de la moyenne temporelle de la fraction volumique de fluide pour $U_{\text{bulk}} = 3U_{\text{mf}}$ et des particules de $750\mu\text{m}$ de diamètre pour des injections 1, 2 et 3 jets. En haut, résultats expérimentaux de Brown; en bas, résultats obtenus avec le modèle DEM-CFD implémenté au cours de cette thèse	92
V.1	Illustration de la variation en temps et en espace de la hauteur du lit	95
V.2	Différentes décompositions de domaine utilisées pour analyser et visualiser les résultats d'analyse statistique	97
V.3	Evolution temporelle de la pression sur la face d'entrée pour différentes fréquences d'échantillonnage	99
V.4	Evolution temporelle de la hauteur maximale des particules et de la pression dynamique de fluide sur la face d'entrée d'un lit bouillonnant	99
V.5	Evolution temporelle de la hauteur maximale des particules et de la pression dynamique de fluide sur la face d'entrée d'un lit bouillonnant pour différentes fréquences d'échantillonnage	100
V.6	Valeur maximale de la vitesse des particules moyennée dans un volume de contrôle	100
V.7	Influence du temps d'échantillonnage sur les statistiques calculées	101
V.8	Evolution temporelle de somme des vitesses des particules dans le domaine (en haut) et du critère de convergence C_1 (en bas)	102
V.9	Evolution temporelle du critère de convergence C_2	103
V.10	Influence de la vitesse d'injection sur la fraction volumique de fluide	104
V.11	Influence de la vitesse d'injection sur la hauteur du lit et la pression dynamique en entrée du réacteur	105
V.12	Influence de la vitesse d'injection sur les collisions interparticulaires au sein du réacteur	105
V.13	Influence de la vitesse d'injection sur la vitesse des particules dans le réacteur	106
V.14	Influence de la vitesse d'injection sur la distribution (PDF) de vitesse des particules dans le réacteur pour le système présenté dans le tableau V.1, largeur des classes : $0,01 \text{ m.s}^{-1}$	107
V.15	Evolution des statistiques du lit en fonction de la taille du domaine	108
V.16	Distribution spatiale instantanée de la fraction volumique de fluide pour un plan de coupe passant par le milieu du domaine	109
V.17	Influence des paramètres numériques sur la précision des résultats obtenus	110
V.18	Evolution des statistiques en fonction du coefficient de restitution élastique En	112
V.19	Evolution des statistiques en fonction du coefficient de friction μ_C	113
V.20	Exemple de lit pulsé illustrant la non-homogénéité des grandeurs statistiques dans la direction transverse	114
V.21	Influence du coefficient de friction tangentielle sur la distribution spatiale de la moyenne temporelle de la fraction volumique de fluide pour un lit pulsé à un orifice d'injection	115
V.22	Evolution temporelle de la pression dynamique sur la face d'entrée du réacteur pour différents coefficients de friction	116

V.23	Influence du coefficient sur les oscillations du saut de pression dynamique sur la face d'entrée du réacteur	116
V.24	Dynamique de bullage dans le cas d'un lit fluidisé à deux orifices d'injection	117
V.25	Coalescence de bulles dans un lit pulsé de 200 000 particules sur une durée $T \in [0.8s : 0.9s]$ 118	
V.26	Remontée d'une bulle dans un lit pulsé de 300 000 particules sur une durée $T \in [0.63s : 0.85s]$	119
V.27	Iso-valeur de $\mathcal{E}_f = 0.85$ illustrant la remontée d'une bulle dans un lit pulsé 3D composé de 2 000 000 particules sur une durée $T \in [0.48s : 0.57s]$	120
VI.1	Convergence temporelle pour un écoulement à travers un assemblage cubique simple de sphère en fonction du régime d'écoulement et du type de forçage	125
VI.2	(a) Répartition des points DLM-FD à l'intérieur et sur la surface d'un disque pour une grille décalée 2D. (b) Méthode d'interpolation multi-linéaire (points entourés en bleu) et quadratique (points entourés en rouge) du champ de vitesse sur un point de la surface de la particule	126
VI.3	Comparaison de résultats de simulation par rapport à la solution analytique pour un écoulement à travers un arrangement infini cubique simple de sphères pour $Re = 0.01$.	127
VI.4	Illustration d'un écoulement à travers un lit dense de particules	130
VI.5	Illustrations de la description du champ fluide obtenu à l'aide de simulations PeliGRIFF à l'échelle micro	131
VI.6	Tailles de lits fluidisés possibles d'analyser avec les différentes approches	132
VI.7	Dimension des domaines étudiés	133
VI.8	Evolution temporelle de la hauteur du lit	135
VI.9	Profil vertical de la porosité	137
VI.10	Profil vertical de la variance de la porosité	137
VI.11	Vitesse et variance de la vitesse transversale des particules	138
VI.12	Profil vertical de la vitesse axiale des particules	138
VI.13	Profil axial de la variance de la vitesse axiale des particules	139
14	Décomposition des couches matérielles du super-calculateur ENER110	150
15	Structure des différents modules de la plateforme PeliGRIFF	151
16	Détail du calcul des champs \mathbf{u}_f et p	152

Liste des tableaux

I.1	Exemples d'applications des fluidisations granulaires denses, d'après Fan & Zhu [70]	7
II.1	Formulations de force de traînée rencontrées dans la littérature pour un régime de transition	38
IV.1	Paramètres de simulation pour les simulations présentées dans ce chapitre de validation	78
IV.2	Valeurs des vitesses d'injection et notation employée pour la reproduction des expériences de Brown [20]	84
IV.3	Paramètres de simulation pour le lit cubique simple illustré en figure IV.2-(a)	85
IV.4	Résolution du maillage exprimée en fonction du diamètre des particules dans le cas d'une grille $35 \times 3 \times 160$	85
V.1	Paramètres de simulation pour le lit fluidisé de référence employé en partie V – 3.1	104
V.2	Systèmes étudiés pour la convergence des statistiques en fonction de la taille du domaine	107
V.3	Maillages employés pour l'étude de l'influence de la taille de maille pour un domaine de section $100d_p \times 100d_p$	110
VI.1	Formulations de la fonction de porosité $f(\mathcal{E}_f)$ pour un écoulement en régime de Stokes pour de faibles concentrations de particules (Batchelor [92] et Barnea <i>et al.</i> [8]) et des concentrations de particules plus importantes (Reed <i>et al.</i> [181] et Happel [92])	129
VI.2	Paramètres de simulation pour le lit cubique simple illustré en figure IV.2-(a)	134
3	Caractéristiques du calculateur ENER110	150

Liste des symboles

Variables de la phase continue

Δp_{in}	Saut de pression dynamique à travers le lit (égal au poids relatif des particules)
μ_f	Viscosité dynamique du fluide
$\mathcal{R}e_{mf}$	Nombre de Reynolds particulaire au seuil de fluidisation $\mathcal{R}e_p = \rho_f d_p U_{mf} / \mu_f$
ρ_f	Masse volumique du fluide
$\boldsymbol{\sigma}_f$	Tenseur des contraintes dans le fluide
$\boldsymbol{\tau}_f$	Déviatorique du tenseur des contraintes dans le fluide
U_{in}	Vitesse d'injection du fluide dans le domaine
U_{mf}	Vitesse minimale de fluidisation
\boldsymbol{U}	Vitesse superficielle du fluide $\boldsymbol{U} = \mathcal{E}_f(\boldsymbol{u}_f - \boldsymbol{v}_p)$
\boldsymbol{u}_f	Vitesse interstitielle du fluide
\mathcal{E}_f	Fraction volumique de fluide, également appelé porosité du lit
p	Pression hydrodynamique
P_0	Pression hydrostatique
P_T	Pression totale du fluide
p_{in}	Pression dynamique du fluide sur la face d'entrée du domaine

Variables de la phase dispersée

δ_i^{\max}	Distance de recouvrement maximale autorisée pour une particule i
$\delta_{i,j}$	Distance de recouvrement entre les particules i et j
γ_n	Coefficient de friction dynamique normal au contact
μ_C	Coefficient de friction de Coulomb
$\boldsymbol{n}_{i,j}$	Vecteur unitaire normal au contact entre les particules i et j
$\boldsymbol{\omega}_p$	Vitesse de rotation d'une particule
ψ_p	Sphéricité des particules
ρ_p	Masse volumique des particules

τ_{part}	Temps caractéristique de déplacement des particules
$\mathbf{t}_{i,j}$	Vecteur unitaire tangentiel au contact au contact entre les particules i et j
\mathbf{v}_p	Vitesse de translation d'une particule
\mathbf{v}_{rn}	Vitesse relative normale entre deux particules
\mathbf{v}_{rt}	Vitesse relative tangentielle entre deux particules
k_n	Coefficient de rigidité normal au contact
$M_{i,j}$	Masse réduite des particules i et j
T_C	Temps de contact interparticulaire

Notations des grandeurs statistiques

Δt_{sample}	Pas de temps d'échantillonnage
$\langle \lambda \rangle_{X,T}$	Moyenne temporelle de la grandeur λ moyennée dans tout le domaine
$\langle \lambda \rangle_{X,t}$	Valeur instantanée de la grandeur λ moyennée dans tout le domaine
$\langle \lambda \rangle_{xi,T}$	Moyenne temporelle de la grandeur λ moyennée dans un volume de contrôle xi
$\langle \lambda \rangle_{xi,t}$	Valeur instantanée de la grandeur λ moyennée dans un volume de contrôle xi
f_{sample}	Fréquence d'échantillonnage
$\text{sum}(\lambda)_{X,t}$	Somme des valeurs instantanées λ dans tout le domaine
$\text{sum}(\lambda)_{xi,t}$	Somme des valeurs instantanées λ dans un volume de contrôle xi
T_{sample}	Durée d'échantillonnage
$\text{Var}(\lambda)$	Variance temporelle de la valeur λ

Introduction

Cette thèse a pour objet la modélisation numérique des écoulements fluide-particules denses dans les réacteurs chimiques de type lits fluidisés. Ce travail s'inscrit dans le cadre général de l'étude des écoulements multiphasiques à phase dispersée, thématique scientifique explorée tant par des équipes de Recherche Académique pour améliorer la connaissance générale de ce type de phénomène, que par des industriels dans le but d'améliorer les performances des procédés mettant en œuvre ce type d'écoulement. Le présent mémoire est la conclusion de trois années passées dans le département de mécanique des fluides de IFP Energies Nouvelles (IFPEN), en collaboration avec le groupe de recherche Particules, Sprays et Combustion de l'Institut de Mécanique de Fluide de Toulouse (IMFT). Durant ce temps, notre intérêt s'est porté sur l'étude des lits fluidisés denses qui représentent une catégorie d'écoulement très largement employée dans l'industrie pétrolière et para-pétrolière ainsi que dans de nombreux autres dispositifs du Génie des Procédés. En effet, ce type d'écoulement est très intéressant pour de telles applications en raison de ses forts taux de mélange favorisant l'homogénéisation de la température et des espèces chimiques, mais également grâce à la mise en mouvement de la phase solide dont le comportement s'apparente alors à celui d'un fluide, favorisant ainsi les opérations sur les particules (transport, soutirage, etc).

L'objectif de cette thèse est d'améliorer la compréhension de la dynamique du mélange fluide-particules au sein des réacteurs de type lit fluidisé bouillonnant ou lit pulsé, qui sont les deux types de lit fluidisé les plus fréquemment employés pour les applications de crackage catalytique ou de combustion chimique en boucle par exemple. Ce genre d'examen peut être mené d'une part de façon expérimentale et d'autre part à l'aide de la simulation numérique. Dans le cas d'une étude expérimentale, la quantité d'informations disponibles est limitée en raison de la difficulté d'accès aux caractéristiques de l'écoulement sans le perturber, *ie.* de façon non intrusive. De plus, la mise en place d'un dispositif expérimental est particulièrement onéreuse, et les résultats obtenus sont toujours accompagnés d'une précision propre aux moyens matériels employés, tant pour la mesure des résultats que pour le paramétrage de l'expérience. Enfin, un inconvénient non négligeable relatif aux études expérimentales est le caractère peu évolutif de la géométrie de l'installation, limitant ainsi la possibilité d'étude paramétrique. En revanche, l'étude des lits fluidisés à l'aide de la simulation numérique offre de nombreux avantages tels que l'accès aux données du fluide et des particules en tout point du domaine, sans perturber la dynamique de l'écoulement et avec une précision de la solution égale à la précision des schémas numériques et modèles éventuellement employés. De plus, grâce à la constante augmentation des capacités de calcul, une approche numérique offre la possibilité de réaliser plusieurs simulations en même temps avec différents paramètres afin d'optimiser le temps passé à obtenir des données.

Ainsi, la démarche employée pour approfondir la connaissance des mécanismes opérant au sein des lits fluidisés est basée sur une approche numérique des écoulements fluide-particules. Même si les équations de Navier-Stokes décrivant le comportement d'un fluide n'admettent toujours pas de preuve d'existence d'une solution générale, elles sont néanmoins très largement employées pour décrire les écoulements de fluides Newtoniens. Dans le cas d'une inclusion de particules dans le fluide, le traitement de l'interaction entre la phase fluide et les éléments de la phase solide ajoute de la complexité au problème étudié. La difficulté principale de compréhension et de modélisation de ces écoulements repose sur la grande diversité d'échelles de longueur présentes : de la dynamique du fluide autour d'une particule aux grandes échelles de l'écoulement contrôlées par la géométrie du domaine. En effet, il est essentiel de décrire précisément les interactions hydrodynamiques entre les inclusions de la phase dispersée et le fluide porteur pour simuler le bon comportement global d'un lit fluidisé composé, par

exemple, de milliards de particules en mouvement dans un dispositif dont la taille est de l'ordre du mètre. Le modèle implémenté et utilisé au cours de cette thèse pour étudier ce type d'écoulement est basé sur une description fine de la phase solide, permettant de connaître individuellement le déplacement de chaque particule, c'est à dire en assurant un suivi lagrangien des éléments de la phase dispersée. La phase continue est quant à elle décrite à l'aide d'une description eulérienne du fluide en résolvant les équations de Navier-Stokes de façon localement moyennée. Cette catégorie de modèle, généralement appelée Euler-Lagrange en raison du type de description de chacune des phases, se situe à mi-chemin entre les approches micro pour lesquelles le fluide est résolu de façon précise autour de chaque particule et les approches macro pour lesquelles la population de particules est décrite de façon continue à l'aide des équations Eulériennes moyennées en espace, de même que la phase fluide. L'avantage des modèles Euler-Lagrange, également appelés micro-macro, est d'offrir la possibilité de transférer des informations provenant des simulations réalisées à l'échelle micro vers les modèles macro. En effet, les informations obtenues à l'échelle micro peuvent être considérées comme exactes mais le coup de calcul ne permet pas d'étudier des systèmes composés de plus de quelques milliers de particules. Les modèles macro permettent quant à eux de simuler des systèmes dont les dimensions sont égales à celles des unités de production mais en se basant sur des hypothèses simplificatrices qui sont parfois trop sévères et ne permettent ainsi pas de reproduire la dynamique réelle de l'écoulement. Notons que le modèle utilisé dans cette thèse est ici employé pour simuler des lits fluidisés denses, mais un tel outil peut également servir à étudier de nombreux autres types d'écoulements fluide-particules, que le fluide soit un gaz ou un fluide. Ainsi, les modèles Euler-Lagrange peuvent par exemple servir à étudier le transport de sédiments dans les rivières ou dans les pipelines, mais également le transport de polluants atmosphériques.

Le plan suivi s'articule autour de six chapitres dont nous donnons ci-après une brève présentation.

Le premier chapitre est consacré à la présentation générale des écoulements fluide-particules, qui sont des phénomènes omniprésents dans la nature et dans l'industrie, ainsi qu'à l'introduction de la notion de fluidisation d'une population de particules et son rôle dans la technologie des lits fluidisés. Nous détaillons les caractéristiques physiques d'un lit fluidisé dense en nous basant sur les études menées au fil du temps par les nombreuses équipes de Recherche ayant contribué à améliorer la connaissance de ce type d'écoulement. Nous nous attardons en particulier sur la description du saut de pression à travers un lit de particules lors d'une injection de fluide dans le système et nous donnons des précisions sur l'obtention de la vitesse minimale de fluidisation, c'est à dire la vitesse à partir de laquelle l'action du fluide sur les particules est supérieure au poids de l'ensemble des particules. Nous présentons ensuite les différents régimes d'écoulement prenant place au sein des lits fluidisés en fonction des caractéristiques des particules et du fluide. Enfin, nous abordons le cas des particules non-sphériques et polydisperses et leur influence sur la fluidisation d'un lit de particules.

Le deuxième chapitre de ce mémoire traite de la modélisation numérique des écoulements fluide-particules. Nous présentons tout d'abord les trois principales échelles de longueur communément employées pour décrire les systèmes diphasiques, à savoir : micro, méso et macro. Puis nous détaillons le modèle développé et implémenté au cours de ces années pour étudier les écoulements fluide-particules denses à une échelle de longueur intermédiaire entre (i) une résolution fine de l'écoulement autour de chaque élément de la phase solide et (ii) une résolution moyennée spatialement des phases solide et fluide. Ce type de modèle utilise une description lagrangienne de la phase solide et une description eulérienne localement moyennée du fluide, ces modèles sont de ce fait fréquemment qualifiés de "Euler-Lagrange", "micro-macro" ou méso. Le jeu d'équations de Navier-Stokes régissant la phase fluide est le suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathcal{E}_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathcal{E}_f \mathbf{u}_f) = 0, \\ \frac{\partial (\rho_f \mathcal{E}_f \mathbf{u}_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \mathcal{E}_f \mathbf{u}_f \otimes \mathbf{u}_f) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_f - \mathbf{F}_{pf} + \mathcal{E}_f \rho_f \mathbf{g} \end{cases}$$

Où \mathbf{F}_{pf} représente l'action des particules sur le fluide. Les trajectoires des particules sont quant à elles décrites individuellement à l'aide de la seconde loi de Newton, c'est à dire le principe fondamental de

la dynamique :

$$\begin{cases} m_p \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = \mathbf{f}_g + \mathbf{f}_{pp} + \mathbf{f}_{fp}, \\ \mathbf{I}_p \frac{d\boldsymbol{\omega}_p}{dt} = \mathbf{T}_{pp} + \mathbf{T}_{fp} \end{cases}$$

Où \mathbf{f}_{fp} et \mathbf{T}_{fp} représentent l'action du fluide sur chaque particule et \mathbf{f}_{pp} et \mathbf{T}_{pp} la somme des actions des particules voisines. Les formulations employées pour représenter ces différents termes ainsi que la méthode de calcul de la fraction volumique de fluide \mathcal{E}_f sont analysées et commentées dans ce chapitre. Une attention particulière a été donnée au respect de l'équilibre des forces d'interaction entre les deux phases de telle sorte que le modèle implémenté fournisse des reproductions aussi fiables que possible des phénomènes physiques étudiés.

Dans le troisième chapitre, nous détaillons l'implémentation informatique du modèle introduit au chapitre précédent. En premier lieu, nous présentons de manière succincte la plateforme logicielle PeliGRIFF dans laquelle a été réalisée l'implémentation. Puis nous exposons les discrétisations spatiales et les schémas numériques employés pour résoudre le jeu d'équations de Navier-Stokes décrivant le comportement du fluide. Des améliorations de l'implémentation actuelle sont également proposées, notamment concernant le couplage temporel entre les phases fluide et solide ainsi que pour la méthode de prise de moyenne spatiale employée. Enfin après quelques précisions sur les conditions aux limites et initiales employées, nous nous attardons sur les performances informatiques du modèle implémenté. La résolution de chacune des phases est en effet parallélisée à l'aide d'une méthode de décomposition de domaine permettant de réaliser des simulations de systèmes comprenant plusieurs dizaines de millions de particules avec un très bon comportement parallèle.

Le quatrième chapitre de ce manuscrit est consacré à la validation du modèle Euler-Lagrange utilisé au cours de cette thèse. Une telle étape est nécessaire premièrement afin de s'assurer que le jeu d'équations employé est correct car il existe plusieurs variantes du modèle Euler-Lagrange comme nous le présentons au chapitre II. Deuxièmement, cela permet de vérifier la validité de l'implémentation informatique réalisée car nul n'est à l'abri d'un oubli ou d'une faute de frappe lors de l'écriture des algorithmes de résolution du problème. Troisièmement, cette étape de validation permet de s'assurer de la consistance des schémas numériques employé et de la validité des approximations sur lesquels se base le modèle. Pour cela, nous présentons tout d'abord les résultats d'une série de simulations ayant pour but de retrouver des valeurs théoriques connues pour certaines grandeurs telles que le saut de pression à travers le lit de particules ou la vitesse minimale de fluidisation. Puis des reproductions d'expériences sont présentées afin de confirmer la capacité du modèle à obtenir des solutions fiables et correspondant à la réalité. Ces comparaisons à des résultats expérimentaux sont réalisées dans le cas de lits pulsés et les résultats obtenus, tant sur la répartition de la population de particules que sur les oscillations du champ de pression dynamique à travers le lit, sont très concluants.

Une fois le modèle Euler-Lagrange validé dans différentes configurations d'écoulement, il nous est possible de l'employer pour étudier plus en détail le comportement des lits fluidisés afin d'en accroître la compréhension. Nous présentons d'abord une série d'outils statistiques permettant de décrire et de quantifier la dynamique des particules au sein du lit. Une attention particulière est donnée (i) au temps d'échantillonnage afin d'obtenir des résultats n'évoluant plus lorsque l'analyse statistique est réalisée sur un temps plus long, et (ii) à la fréquence d'échantillonnage dans le but de capturer au mieux les phénomènes instationnaires sans pour autant sauvegarder trop d'informations de simulation pour ne pas générer des volumes de données trop importants. A l'aide de ces outils statistiques, nous exposons dans un premier temps le comportement d'un lit bouillonnant en fonction de la vitesse d'injection dans le domaine. Puis, dans une configuration bi-périodique, nous étudions l'influence de la taille du domaine sur les statistiques décrivant le comportement des particules afin d'évaluer à partir de quelle section de réacteur les statistiques convergent vers une même valeur, et sont donc égales à un domaine infiniment plus grand. Nous présentons ensuite les résultats d'études paramétriques portant sur des éléments du système, certains numériques tels que les pas de temps fluide et solide ou la résolution du maillage, d'autres physiques tels que les coefficients de friction ou de restitution élastique des particules. Enfin, l'influence des paramètres de contact entre les particules est également étudiée dans le cas de lits pulsés, mettant en évidence la modification de la dynamique de création des bulles sur la face d'entrée

du réacteur.

Dans le sixième et dernier chapitre de ce mémoire, nous nous intéressons au transfert d'informations provenant de simulations réalisées à l'échelle micro afin d'améliorer les modèles de type Euler-Lagrange. Tout d'abord, nous présentons l'outil employé pour réaliser les simulations à l'échelle micro, à savoir le modèle Distributed Lagrange Multiplier/Fictitious Domain (DLM-FD), lui aussi implémenté dans la plateforme logicielle PeliGRIFF. Puis nous exposons les deux approches généralement employées pour extraire des informations des simulations à l'échelle micro pour les utiliser dans des simulations à l'échelle supérieure, c'est à dire les modèles Euler-Lagrange. Ces deux méthodes sont (i) l'extraction de lois de traînée et (ii) la comparaison directe entre systèmes identiques simulés conjointement avec les modèles micro et méso, c'est cette dernière méthode qui est retenue dans cette étude. Ainsi, nous présentons les résultats obtenus pour deux comparaisons de systèmes composés de 1 000 et 2 000 particules, tous deux simulés à l'aide des modèles DLM-FD et Euler-Lagrange.

Chapitre I

Contexte physique

Sommaire

I – 1	Ecoulements fluide-particules	6
I – 1.1	Phénomènes naturels	6
I – 1.2	Applications	6
I – 1.3	Cadre de cette étude	7
I – 2	Lits Fluidisés	8
I – 2.1	Description	8
I – 2.2	Intérêts pour l'industrie	9
I – 2.2.1	Domaines d'application	9
I – 2.2.2	Avantages et inconvénients	9
I – 2.3	Cas des lits pulsés	10
I – 2.3.1	Présentation des lits pulsés	10
I – 2.3.2	Formation de bulles	12
I – 3	Détails sur la fluidisation	12
I – 3.1	Saut de pression	12
I – 3.1.1	Loi de Darcy	13
I – 3.1.2	Equation d'Ergun	13
I – 3.1.3	Phénomène d'hystérésis	16
I – 3.2	Vitesse de fluidisation	17
I – 3.2.1	Cas général	17
I – 3.2.2	Faible Reynolds	18
I – 3.2.3	Fort Reynolds	19
I – 3.3	Classification de Geldart	20
I – 3.3.1	Groupe A	20
I – 3.3.2	Groupe B	21
I – 3.3.3	Groupe C	21
I – 3.3.4	Groupe D	21
I – 3.4	Effets de la polydispersité et de la non-sphéricité	22
I – 3.4.1	Conséquences sur le saut de pression	22
I – 3.4.2	Distribution de taille bidisperse	23
I – 3.4.3	Inversion et mélange des classes de particule	23
I – 4	Conclusion	23

I – 1 Écoulements fluide-particules

Les écoulements mettant en œuvre une inclusion de particules dans un fluide en mouvement se rencontrent dans une multitude de phénomènes naturels mais également dans de nombreux procédés industriels. Le terme “fluide” englobant en effet deux états de la matière, à savoir gazeux et liquide, et une particule pouvant quant à elle être définie comme un corps solide, déformable ou rigide, dont la taille peut varier de celle d’une molécule à celle d’un rocher de plusieurs mètres, cela nous conduit à affirmer que les écoulements fluide-particules sont omniprésents.

Mise à part la taille des particules, un des principaux paramètres caractérisant un écoulement fluide-particules est le rapport de densité entre les phases. En effet, la densité des particules immergées peut être inférieure, égale ou supérieure à celle du fluide qui les entoure. Il en résulte des forces hydrodynamiques et hydrostatiques différentes, et donc des comportements de mélange différents.

I – 1.1 Phénomènes naturels

Parmi les écoulements gaz-particules présents dans la nature, citons par exemple :

- les fumées, qui sont composées de suie¹ et/ou de cendre (fumées automobiles, industrielles, d’éruptions volcaniques, etc),
- les pollens transportés dans l’air,
- les polluants atmosphériques, dont la taille varie de quelques nanomètres à plusieurs dizaines de micromètres,
- les avalanches, qui sont composées aussi bien de flocons que d’énormes blocs de neige.

Les écoulements liquide-particules sont eux aussi très couramment rencontrés dans les milieux naturels :

- les sédiments dans les rivières peuvent avoir des tailles très variées, allant de quelques micromètres au millimètre pour les sables, et pouvant aller jusqu’au mètre pour les rochers, en passant par les graviers et les galets,
- les polluants aquatiques sont hélas très répandus, que ce soit dans les rivières ou dans les océans,
- les micro-organismes présents dans les rivières ou les océans tels que le plancton ou les algues,
- les glissements de terrain et les coulées de boue qui peuvent emporter des objets de plusieurs tonnes.

I – 1.2 Applications

Les différents types d’écoulement fluide-particules présentés précédemment sont observés par l’Homme depuis la nuit des temps et la compréhension des phénomènes physiques qui les régissent n’a cessé d’évoluer, en particulier au cours de ces derniers siècles. Les écoulements mettant en œuvre une inclusion de particules dans un fluide sont ainsi couramment utilisés pour des applications domestiques ou industrielles.

Parmi les applications domestiques, se basant ou donnant lieu à des écoulements fluide-particules, notons par exemple :

- les aspirateurs ménagers, qui créent une dépression engendrant une mise en mouvement de l’air qui transporte alors les poussières,
- la cuisson des aliments dans l’eau bouillonnante,

1. matière carbonée imbrulée

- les sprays aérosols.

Mais ce type d'écoulement est également et surtout beaucoup utilisé dans l'industrie comme par exemple :

- la découpe de matériaux et le décapage de surface par projection de sable,
- de nombreux procédés de raffinage tels que le crackage catalytique fluide (en anglais “Fluid Catalytic Cracking (FCC)”) ou la combustion chimique en boucle (en anglais “Chemical Looping Combustion (CLC)”),
- la capture du CO₂,
- la catalyse de monoxyde de carbone et d'hydrogène en vue de les convertir en hydrocarbure (procédé Fisher-Tropsch)
- le transport de pétrole en pipeline comporte également des particules solides, à savoir du sable et des petits bouts de roches emportés lorsque le pétrole brut est extrait du sous-sol, mais également des hydrates qui se forment progressivement dans la phase liquide en raison des conditions de température et de pression,
- les échangeurs de chaleur contemporains, comme par exemple les centrales photo-thermiques qui utilisent des particules à forte capacité thermique pour stocker et/ou transporter la chaleur.

Le tableau I.1 provenant de Fan & Zhu [70] référence un grand nombre d'applications industrielles mettant en œuvre des fluidisations gazeuses denses.

TABLE I.1 – Exemples d'applications des fluidisations granulaires denses, d'après Fan & Zhu [70]

Opérations physiques	Synthèses chimiques	Procédés métallurgiques et miniers	Autres applications
Echangeurs de chaleur	Synthèse de l'anhydride phtalique	Traitement de l'uranium	Combustion du charbon
Mélange de solides	Synthèse de l'acrylonitrile	Réduction d'oxyde de fer	Gazéification du charbon
Enrobage de particules	Synthèse de l'anhydride maléique	Pyrolyse de huile l'huile de schiste	Crackage catalytique fluide
Séchage	Synthèse de l'éthylène dychloride	Brulage des minerais de sulfure	Incinération des déchets
Adsorption	Transformation de essence en méthanol	Production de cristaux de silicium	Production de mâchefer
Solidification et granulation	Synthèse de l'acétate de vinyle	Production de dioxyde de titane	Culture de micro-organismes
Croissance de particules	polymérisation d'oléfine	Calcination	

I – 1.3 Cadre de cette étude

Dans cette étude nous nous concentrerons plus particulièrement sur les écoulements mettant en jeu un fluide s'écoulant à des vitesses permettant de se placer sous l'hypothèse des gaz incompressibles et donc de décrire les écoulements liquides et gazeux avec les mêmes équations (voir §II – 2.1). Même si les particules de certaines applications sont déformables et peuvent parfois perdre de la matière, *ie.* perdre du volume, nous ne traiterons ici que de particules non déformables et de volume constant. Les éléments

de la phase dispersée sont entièrement immergés dans le fluide environnant et peuvent se déplacer dans toutes les directions de l'espace, dans la limite des collisions avec les particules et obstacles voisins. Nous étudions en effet des écoulements particuliers denses au sein desquels les collisions entre objets sont très fréquentes et influencent grandement l'écoulement comme nous allons le voir par la suite. Les écoulements fluide-particules conservent un comportement de fluide malgré la très forte concentration de solide (proche de la concentration maximum). De ce fait, il est courant de parler de fluidisation de particules ou de particules fluidisées.

I – 2 Lits Fluidisés

Au cours de ces trois années de thèse, une attention particulière a été portée à l'étude des lits fluidisés denses. Ce type d'écoulement fluide-particules est fréquemment utilisé pour de nombreuses applications du Génie des Procédés, notamment dans l'industrie para-pétrolière et chimique. Dans la partie qui suit, nous présentons tout d'abord le fonctionnement général d'un lit fluidisé puis ses applications et enfin, nous nous attardons sur le cas particulier des lits pulsés qui ont fait l'objet d'une attention particulière.

I – 2.1 Description

Les lits fluidisés sont des systèmes qui font intervenir une ou plusieurs phases solides en interaction avec une phase fluide, du gaz ou du liquide injecté par le bas du domaine. La phase solide, également appelée phase dispersée, est constituée d'un grand nombre de particules indépendantes les unes des autres et dont la taille peut ne pas être la même. L'ensemble de ces particules est communément appelé "lit" quand il se trouve au fond d'un contenant. Lorsque la masse de particules reste immobile au fond du réservoir, le lit est dit "fixe" (voir figure I.1-(a)). L'ensemble des particules ne bougeant pas, son comportement est alors assimilable à celui d'un milieu poreux à travers lequel la phase continue peut circuler. Comme le montre la figure I.1-(b), le fluide voit sa vitesse d'écoulement augmentée lorsqu'il passe à travers le lit en raison du rétrécissement de section.

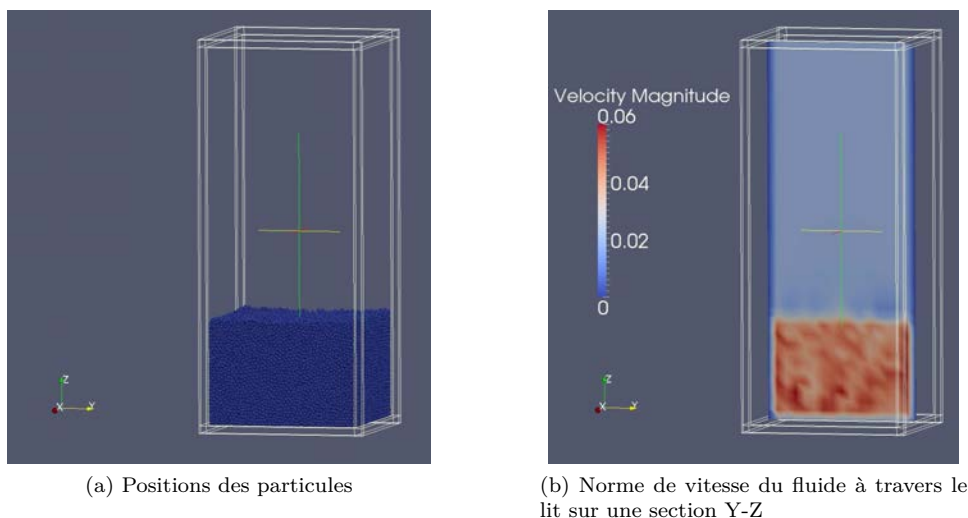


FIGURE I.1 – Lit fixe de particules sphériques de même diamètre

A partir d'une certaine valeur, le lit commence à être mobile, la valeur de la vitesse d'entrée est alors appelée vitesse minimale de fluidisation. Si la vitesse du fluide dépasse une certaine valeur, les particules bougent de plus en plus, le déplacement des éléments de la phase dispersée donne naissance à des zones de plus faible concentration de particules dans lesquelles la phase continue circule plus facilement. Cela engendre l'apparition de bulles de fluide dans le bas du domaine, qui remontent

progressivement à la surface du lit. Des particules s'élèvent puis retombent, le lit est alors "fluidisé" (voir figure I.2).

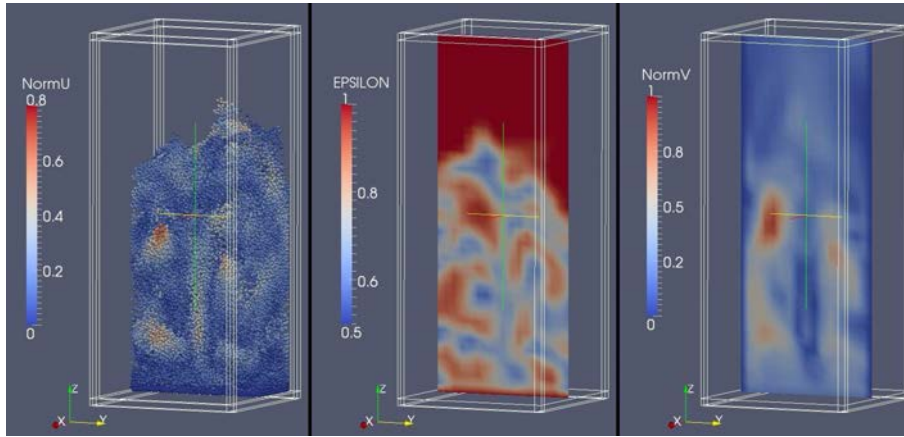


FIGURE I.2 – Lit fluidisé de particules sphériques de même diamètre. A gauche, position des particules colorées en fonction de leur vitesse. Au centre, valeur de la fraction volumique de fluide sur une section Y-Z. A droite, norme de la vitesse du fluide à travers le lit sur une section Y-Z

I – 2.2 Intérêts pour l'industrie

I – 2.2.1 Domaines d'application

Le lit fluidisé est une configuration qui se rencontre dans un grand nombre de domaines. Dans l'industrie pétrolière et la pétrochimie par exemple, les réacteurs catalytiques peuvent être à lit fixe ou à lit fluidisé (en anglais "Fluidized Bed Reactor (FBR)"). Toujours dans le monde de la pétrochimie, une technologie largement répandue dans les raffineries est le Cracking Catalytique Fluide (FCC). Les lits fluidisés se retrouvent également dans le secteur de la transformation d'énergie avec le principe de Lit Fluidisé Circulant (LFC) pour le transport des cendres de charbon par exemple, ou la Combustion en Lit Fluidisé (FBC). Un autre domaine d'application de la technologie des lits fluidisés est le traitement des eaux usées à l'aide de bioréacteurs à lit fluidisé.

I – 2.2.2 Avantages et inconvénients

La technologie des lits fluidisés est utilisée dans les domaines présentés ci-dessus car elle comporte de nombreux avantages. Parmi eux, nous pouvons par exemple citer :

- en raison du brassage continu des particules par le fluide, la température du lit est homogène, même en présence de réactions fortement endo- ou exo-thermiques,
- dans le cas où un dispositif immergé chauffant ou refroidissant est utilisé, le coefficient d'échange thermique est très élevé en raison de la circulation de la suspension,
- les particules de très petite dimension sont plus facilement utilisables qu'avec d'autres technologies,
- le comportement du mélange diphasique est proche de celui d'un fluide, ce qui facilite les opérations de maintenance à réaliser sur le lit, dans le cas d'injection ou de soutirage de particules par exemple.

Cependant, cette technique comporte des inconvénients, parmi lesquels :

- les collisions et les frottements des particules entre elles qui entraînent une diminution progressive de leur dimension (abrasion, rupture). Certaines particules, ainsi devenues trop petites, sont transportées par le fluide et sortent du réacteur, il faut alors réinjecter des particules pour maintenir une quantité constante de phase dispersée,

- ces frottements et collisions créent également des poussières de particules appelée “fines”, qui se mêlent au fluide et modifient sa rhéologie, formant ainsi des fluides complexes appelés “slurry” en anglais,
- en aval du réacteur, il est souvent coûteux de séparer le fluide des fines et des petites particules qu’il transporte,
- les vibrations engendrées par le bouillonnement du lit peuvent provoquer des secousses importantes du réacteur.

I – 2.3 Cas des lits pulsés

Le type de lit fluidisé présenté ici est souvent rencontré en Génie des Procédés, il est appelé lit pulsés, plus connu sous le nom anglais de “spouted bed”. Ci après, nous présentons le fonctionnement général des lits pulsés, puis nous nous attardons sur l’apparition de bulles de fluide dans le lit de particules et leurs conséquences sur la pression dans le réacteur.

I – 2.3.1 Présentation des lits pulsés

La catégorie des lits pulsés regroupe les réacteurs dont la surface d’injection est nettement plus petite que la section du réacteur comme l’illustre la figure I.3. Ainsi, pour que le lit de particules soit fluidisé, le fluide doit être injecté par l’orifice (en rouge) avec une vitesse U_{in} bien plus élevée que si il avait été injecté sur toute la section du réacteur (en jaune).

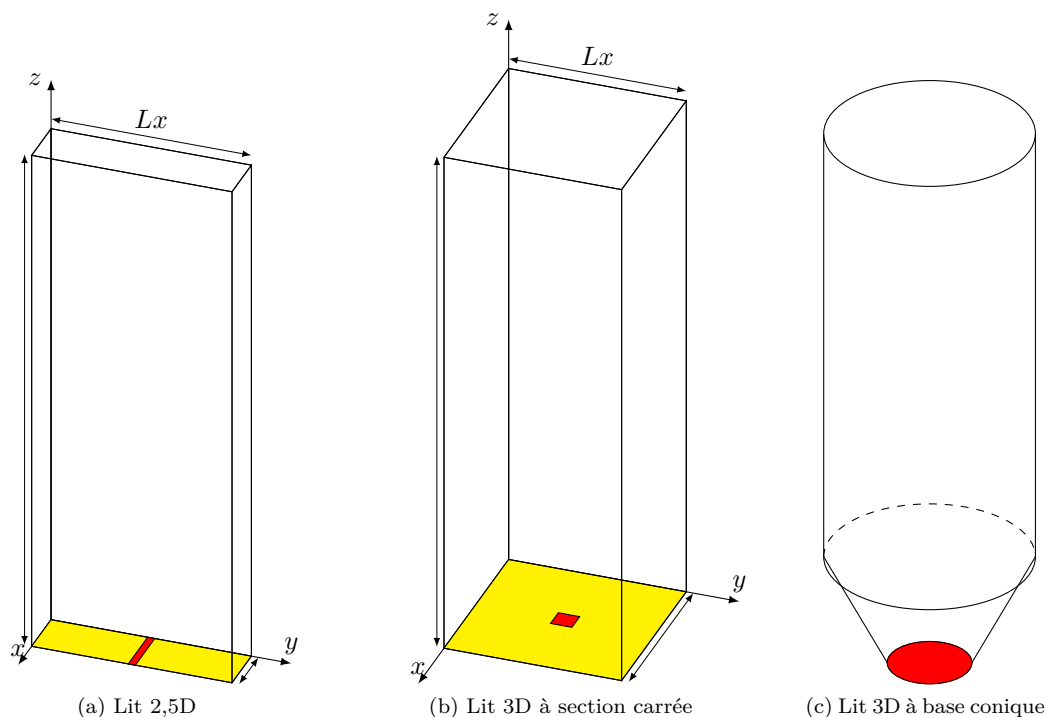


FIGURE I.3 – Types de lit pulsé

Le fluide entrant dans le domaine emporte alors les particules se trouvant sur son passage, formant ainsi une zone dépeuplée appelée jet (en anglais “spout”). Comme présenté sur la figure I.4-(a), si la vitesse d’injection n’est pas assez élevée par rapport à la hauteur du lit, cette zone dépeuplée est confinée dans la partie basse du réacteur et le fluide en mouvement se disperse dans le lit de particules pour atteindre la surface, à la manière d’un lit fixe. En revanche, si le fluide est injecté avec suffisamment de débit, des bulles de fluide se détachent du bas du domaine et entraînent avec elles des

particules jusqu'à la surface du lit, d'une part en les poussant au dessus de la bulle et d'autre part en les entraînant dans leur sillage (voir figure I.4-(b)).

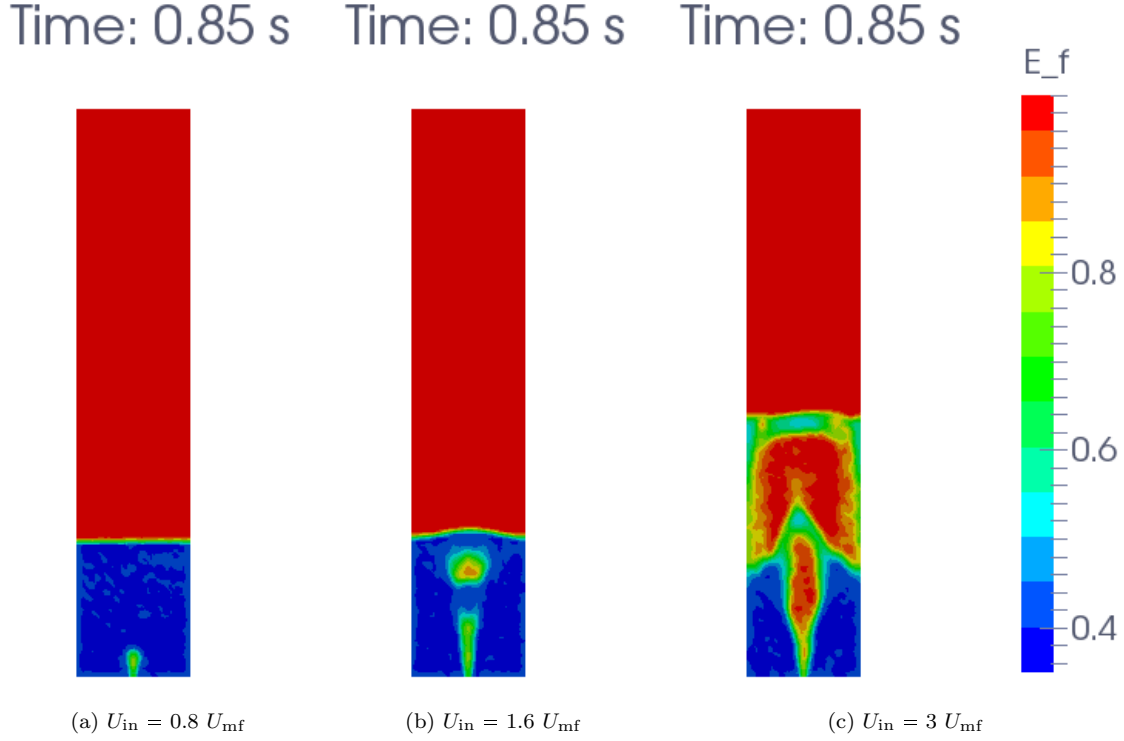


FIGURE I.4 – Illustration du comportement du lit pour différentes vitesses d'injection. \mathcal{E}_f représente la fraction volumique de fluide ($\mathcal{E}_f=1$: fluide sans particules, $\mathcal{E}_f=0.35$: packing maximum de particules)

Enfin, si la vitesse du fluide est encore plus importante, le jet charrie les particules provenant de la base du réacteur et les propulse au dessus du corps du lit. La concentration de particule étant moins élevée dans la partie haute du domaine, la surface permettant au fluide de s'écouler s'élargit et le fluide s'écoule plus lentement. Les forces de traînée exercées sur les particules sont alors moins importantes et elles retombent sur le haut du lit à la manière d'un jet de fontaine comme l'illustre la figure I.4-(c). Les particules circulent donc dans le réacteur de façon cyclique, partant du bas du réacteur, puis après avoir été transportées par le jet jusqu'au sommet de la fontaine, retombent sur le lit où elles sont peu à peu recouvertes par les particules suivantes. Les réacteurs à lits pulsés peuvent être de différentes formes : d'une part la section peut être circulaire, carrée ou rectangulaire et d'autre part, la face inférieure du réacteur peut être plane ou conique, ce qui évite les zones de stagnation dans les coins inférieurs du domaine. Enfin le réacteur peut comporter un ou plusieurs jets dont les dimensions peuvent elles aussi être différentes.

Initialement étudiés de façon expérimentale [232, 233, 159, 95], les lits pulsés commencèrent ensuite à être étudiés numériquement au milieu des années 1980. Tout d'abord en ne modélisant que le comportement global du jet à travers le lit de particules [177, 140, 18] ou en assimilant la formation de bulles de fluide dans le lit de particules à la formation de bulles de gaz dans un liquide [124]. Puis, lorsque les membres de l'équipe de l'Université d'Osaka au Japon, notamment dirigée par Tsuji, proposèrent une première version de leur modèle Discrete Element Method - Computational Fluid Dynamics (DEM-CFD) [213], ils l'appliquèrent rapidement aux lits fluidisés de type lits pulsés, dans un premier temps en 2D [211]. D'autres équipes s'intéressèrent également à ce type d'approche pour simuler les lits pulsés [227]. Les modélisations devinrent ensuite de plus en plus précises et furent étendues à la troisième dimension [115, 114] permettant d'étudier de manière plus fine le comportement du jet et la trajectoire de particules. Les membres de l'équipe de l'Université de Twente aux Pays Bas étudièrent eux aussi les

lits pulsés à l'aide d'un modèle DEM-CFD, en particulier avec les travaux de thèse de Link [139, 138].

I – 2.3.2 Formation de bulles

Lorsque le fluide est injecté dans le réacteur, il emporte des particules qui s'élèvent et laissent une zone dépeuplée en dessous d'elles. Le fluide pouvant s'écouler quasiment librement, *ie.* sans rencontrer de résistance provenant de particules entravant son déplacement, la pression sur la face d'entrée diminue. Une fois que cette région composée majoritairement de fluide a atteint une certaine hauteur, les particules présentes sur les pourtours du jet retombent dans la zone dépeuplée sous l'effet de la gravité. La présence de particules sur la trajectoire du fluide a pour effet d'entraver son écoulement et donc, comme la vitesse du fluide est imposée constante, de faire augmenter la pression sur la face d'entrée. La pression fluctue donc dans le temps au rythme de la création et du détachement des bulles de fluide qui migrent jusqu'à la surface du lit.

I – 3 Détails sur la fluidisation

Lorsque du fluide est injecté dans un lit de particules à une faible vitesse d'entrée, celui-ci s'écoule entre les particules sans modifier leur position, c'est un écoulement en lit fixe. En raison du rétrécissement de section engendré par la présence des particules, un fluide s'écoulant à la vitesse U_{in} avant de traverser un lit de particules est accéléré à la vitesse interstitielle $u_f = U_{in}/\mathcal{E}_f$ lorsqu'il s'écoule entre les particules. Cette augmentation de vitesse s'accompagne d'une augmentation de la pression dynamique du fluide. Plus le fluide est injecté rapidement dans le domaine, plus le saut de pression à travers le lit fixe est grand. Si la vitesse d'entrée du fluide augmente jusqu'à une vitesse dite vitesse minimale de fluidisation, U_{mf} , le lit de particules se soulève et commence à s'agiter, le régime de fluidisation est atteint. Nous détaillons ci-après ces deux notions importantes que sont le saut de pression à travers le lit et la vitesse minimale de fluidisation.

I – 3.1 Saut de pression

Lors de l'injection d'un fluide sous un lit fixe de particules, la pression en entrée du domaine augmente en raison de la résistance que rencontre le fluide à s'écouler à travers le milieu dense. Cette pression décroît ensuite linéairement jusqu'à la surface, c'est à dire le haut du lit. Si la vitesse d'injection augmente jusqu'à la vitesse minimale de fluidisation et au-delà, le saut de pression total à travers le lit est égal au poids des particules et du fluide les entourant :

$$-\frac{\Delta P_T}{L} = \left[(1 - \mathcal{E}_f)\rho_p + \mathcal{E}_f \rho_f \right] g \quad (\text{I.1})$$

C'est ce saut de pression qui est mesuré expérimentalement. Le dernier terme est souvent ignoré dans le cas où le fluide est un gaz ou lorsque la hauteur du lit est faible [125].

Afin d'étudier la contribution de la présence de particules dans le fluide sans prendre en compte la pression hydrostatique engendrée par le poids de la colonne de fluide, il est commun d'étudier la pression dynamique du fluide, notée ici avec une minuscule. Rappelons que les sauts de pression dynamique et total sont liés par la relation :

$$-\frac{\Delta P_T}{L} = -\frac{\Delta p}{L} - \rho_f g \quad (\text{I.2})$$

Ainsi, en combinant les équations (I.1) et (I.2), nous obtenons l'expression communément rencontrée pour exprimer le saut de pression dynamique à travers un lit de particules, parfois appelé saut de pression frictionnelle. Cette différence de pression est égale au poids relatif du lit, c'est à dire à son poids moins la poussée d'Archimède qui s'exerce sur lui.

$$-\frac{\Delta p}{L} = (1 - \mathcal{E}_f)(\rho_p - \rho_f)g \quad (\text{I.3})$$

L'évolution verticale de la pression dans un lit dense de particules, fixes ou en mouvement, en fonction des paramètres du lit et de la vitesse d'injection constitue un point important de la caractérisation du principe de fluidisation. Aussi, les écoulements à travers des milieux denses furent tout d'abord étudiés pour des régimes visqueux dès 1856 par Darcy. La description des écoulements à travers des lits fixes fut ensuite étendue à une plus large plage d'écoulements par Ergun en 1952, notamment en prenant en compte les effets inertiels.

I – 3.1.1 Loi de Darcy

Afin d'étudier les écoulements en régime visqueux à travers les milieux poreux, une série d'expériences fut mise en place par Darcy [43]. Ces travaux aboutirent à la célèbre loi de Darcy reliant le débit volumique Q au saut de pression Δp pour l'écoulement d'un fluide de viscosité μ à travers un domaine de longueur L et de section A :

$$Q = -\frac{k}{\mu_f} A \frac{\Delta p}{L} \quad (\text{I.4})$$

où k est la perméabilité spécifique du milieu poreux. Cette équation peut également être formulée sous la forme différentielle :

$$U = -\frac{k}{\mu_f} \frac{dp}{dz} \quad (\text{I.5})$$

Notons que cette expression ne prend pas en compte les effets de la gravité ni les effets inertiels du fluide. La loi de Darcy peut être dérivée à partir de nombreux modèles décrivant l'écoulement d'un fluide à travers un lit dense [195, 196, 11]. Parmi eux, le modèle de tubes capillaires parallèles est considéré comme le plus simple. Il consiste à représenter un milieu de porosité \mathcal{E}_f par un ensemble de tubes capillaires parallèles de diamètre δ_{tube} . En comparant l'écoulement stationnaire d'un fluide incompressible à travers ces tubes (équation de Hagen-Poiseuille) à la loi de Darcy, la perméabilité spécifique du milieu poreux est donnée par :

$$k = \frac{\mathcal{E}_f \delta_{\text{tube}}^2}{32} \quad (\text{I.6})$$

Le coefficient 32 de l'équation (I.6) correspond à un arrangement parallèle des tubes capillaires. Mais en réalité, la porosité et la perméabilité du milieu traversé sont reliées de façon moins évidente car le chemin emprunté par le fluide est bien plus chaotique. Ainsi, le facteur 32 de l'équation (I.6) est généralement remplacé par un paramètre empirique connu sous le nom de tortuosité.

Remarque 1 *Suivant certains modèles, la perméabilité peut être dépendante de la vitesse superficielle.*

I – 3.1.2 Equation d'Ergun

Une expression généralisée du saut de pression à travers un lit de particules fut ensuite proposée par Ergun [67]. Dans ses travaux, Ergun considéra la chute de pression comme résultant de la dissipation de l'énergie cinétique du fluide en distinguant les contributions des effets visqueux et inertiels. De plus, il considère que quatre facteurs contribuent au saut de pression, à savoir : le débit de fluide, les propriétés du fluide (telles que la viscosité et la densité), la porosité du milieu et les propriétés des particules (telles que la taille et la forme).

I – 3.1.2.a Effet du débit de fluide

L'effet du débit de fluide sur le saut de pression à travers un lit fixe de particules peut être analysé de deux manières différentes. La première consiste à considérer l'écoulement dans le milieu poreux comme un écoulement dans une multitude de canaux de telle sorte que le saut de pression soit engendré par les frottements du fluide sur les parois des canaux, de la même façon que pour le modèle de tubes capillaires parallèles présenté dans la section présentant la loi de Darcy (voir §I – 3.1.1). Pour la seconde approche, le saut de pression est considéré comme étant engendré par les forces de traînée des particules. Or, nous savons que la force de traînée d'une particule isolée est proportionnelle à la vitesse

du fluide l'environnant pour un régime visqueux et à son carré pour un régime inertiel. Ainsi, comme l'a suggéré Reynolds [183], le saut de pression peut être exprimé comme la somme de deux termes, l'un proportionnel à la vitesse du fluide et l'autre au produit de la densité par le carré de la vitesse du fluide :

$$-\frac{\Delta p}{L} = aU + b\rho_f U^2 \quad (\text{I.7})$$

Où a et b sont des facteurs à déterminer.

I – 3.1.2.b Effet des propriétés du fluide

Dans le cas où la vitesse du fluide tend vers zéro, l'équation (I.7) donne :

$$\lim_{U \rightarrow 0} \frac{1}{U} \frac{\Delta p}{L} = a \quad (\text{I.8})$$

En considérant le modèle de tubes capillaires présenté en §I – 3.1.1 et en accord avec l'équation de Hagen-Poiseuille et la loi de Darcy, le coefficient a est proportionnel à la viscosité du fluide. Ainsi l'équation (I.7) devient :

$$-\frac{\Delta p}{L} = a' \mu_f U + b\rho_f U^2 \quad (\text{I.9})$$

I – 3.1.2.c Effet de la porosité

Comme suggéré par Ergun et Orning [68], le saut de pression à travers un lit dense est influencé par la porosité \mathcal{E}_f et les paramètres a' et b sont dépendants du régime d'écoulement. Aussi, la perte d'énergie cinétique du fluide liée aux effets visqueux et aux effets inertiels peut être décrite en fonction de la porosité à l'aide de la théorie de Kozeny [123] et de la théorie de Burke et Plummer [25], respectivement.

1. Théorie de Kozeny

Pour de faibles vitesses d'écoulement, Kozeny [123] considéra qu'un milieu poreux peut être représenté comme un ensemble de canaux de différentes sections mais de longueur donnée, traversé par un écoulement laminaire totalement établi. Il obtint que le saut de pression engendré par la dissipation de l'énergie liée aux frottements visqueux est proportionnel à la porosité du milieu par la relation suivante :

$$\frac{\Delta p}{L} \propto \frac{(1 - \mathcal{E}_f)^2}{\mathcal{E}_f^3} \quad (\text{I.10})$$

L'hypothèse des canaux tubulaires parallèles donne :

$$\frac{\Delta p}{L} = 72 \frac{(1 - \mathcal{E}_f)^2}{\mathcal{E}_f^3} \frac{\mu_f U}{d_p^2} \quad (\text{I.11})$$

Mais afin de prendre en compte la tortuosité du réseau poreux, la constante 72 nécessite d'être revue. Ainsi, Blake [15] proposa 150, ce qui donne l'équation connue sous le nom de Blake-Kozeny :

$$\frac{\Delta p}{L} = 150 \frac{(1 - \mathcal{E}_f)^2}{\mathcal{E}_f^3} \frac{\mu_f U}{d_p^2}, \quad \mathcal{E}_f < 0.5 \text{ et } \mathcal{Re}_p < 10 \quad (\text{I.12})$$

Plus tard, Carman [28] proposa le coefficient 180 pour les écoulements proches du régime de Stokes. Ainsi, l'équation de Carman-Kozeny est :

$$\frac{\Delta p}{L} = 180 \frac{(1 - \mathcal{E}_f)^2}{\mathcal{E}_f^3} \frac{\mu_f U}{d_p^2}, \quad \mathcal{Re}_p < 1 \quad (\text{I.13})$$

Plus de détails concernant la théorie de Kozeny peuvent être trouvés dans la littérature (voir [196, 68, 70]).

2. Théorie de Burke et Plummer

Concernant la perte d'énergie cinétique pour des régimes d'écoulement à Reynolds plus élevés, Burke et Plummer [25] considèrent que la résistance du lit de particules peut être vue comme la somme des résistances individuelles des particules. Ainsi, le saut de pression engendré par la perte d'énergie cinétique est proportionnel à la porosité du milieu par la relation suivante :

$$\frac{\Delta p}{L} \propto \frac{(1 - \mathcal{E}_f)}{\mathcal{E}_f^3} \quad (\text{I.14})$$

Le détail des étapes amenant à l'équation (I.14) peut être trouvé dans [68] ou [70]. Ainsi, pour des écoulements fortement inertiels, la relation suivante est connue sous le nom d'équation de Burke-Plummer :

$$\frac{\Delta p}{L} = 1.75 \frac{(1 - \mathcal{E}_f)}{\mathcal{E}_f^3} \frac{\rho_f U^2}{d_p}, \quad \text{Re}_p > 1000 \quad (\text{I.15})$$

Ainsi, en substituant les équation (I.10) et (I.14) dans l'équation (I.9), nous obtenons :

$$\frac{\Delta p}{L} = a'' \mu_f U \frac{(1 - \mathcal{E}_f)^2}{\mathcal{E}_f^3} + b' \rho_f U^2 \frac{(1 - \mathcal{E}_f)}{\mathcal{E}_f^3} \quad (\text{I.16})$$

I – 3.1.2.d Effet des propriétés des particules

Soit S_0 la surface spécifique de particules exposée au fluide par unité de volume :

$$S_0 = \frac{S}{1 - \mathcal{E}_f} \quad (\text{I.17})$$

Pour des particules sphériques, S_0 peut être exprimée en fonction du diamètre des particules :

$$S_0 = \frac{6}{d_p} \quad (\text{I.18})$$

Or, les équations (I.10) et (I.14) renseignent sur le fait que les pertes d'énergie cinétique liées aux effets visqueux et inertiels sont proportionnelles au carré de S_0 et à S_0 , respectivement. Ainsi, la forme générale du saut de pression à travers un lit de particules peut s'écrire :

$$\frac{\Delta p}{L} = k_1 \frac{(1 - \mathcal{E}_f)^2}{\mathcal{E}_f^3} \frac{\mu_f U}{d_p^2} + k_2 \frac{(1 - \mathcal{E}_f)}{\mathcal{E}_f^3} \frac{\rho_f U^2}{d_p} \quad (\text{I.19})$$

Où k_1 et k_2 sont des constantes universelles qui sont déterminées expérimentalement. Pour cela, l'équation (I.19) peut être réarrangée sous la forme linéaire suivante :

$$y = k_1 + k_2 x \quad (\text{I.20})$$

Avec

$$y = \frac{\Delta p}{L} \frac{\mathcal{E}_f^3 d_p^2}{(1 - \mathcal{E}_f)^2 \mu_f U} \quad \text{et} \quad x = \frac{\rho_f U d_p}{\mu_f (1 - \mathcal{E}_f)} \quad (\text{I.21})$$

Les valeurs de k_1 et k_2 de l'équation (I.20) peuvent être obtenues en affichant les résultats expérimentaux sous la forme $y/x = f(x)$ en échelle logarithmique. Après 640 expériences réalisées avec différents paramètres, Ergun proposa les valeurs $k_1 = 150$ et $k_2 = 1.75$ qui complète ainsi la célèbre corrélation d'Ergun [67] :

$$\frac{\Delta p}{L} = 150 \frac{(1 - \mathcal{E}_f)^2}{\mathcal{E}_f^3} \frac{\mu_f U}{d_p^2} + 1.75 \frac{(1 - \mathcal{E}_f)}{\mathcal{E}_f^3} \frac{\rho_f U^2}{d_p} \quad (\text{I.22})$$

La corrélation d'Ergun et les équations de Carman-Kozeny, Blake-Kozeny et Burke-Plummer sont représentées sous la forme $y/x = f(x)$ dans la figure I.5.

En Génie des Procédés, il est courant d'exprimer le saut de pression en fonction de la vitesse du fluide de la façon suivante :

$$-\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\beta}{\mathcal{E}_f} (\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p) = 0 \quad (\text{I.23})$$

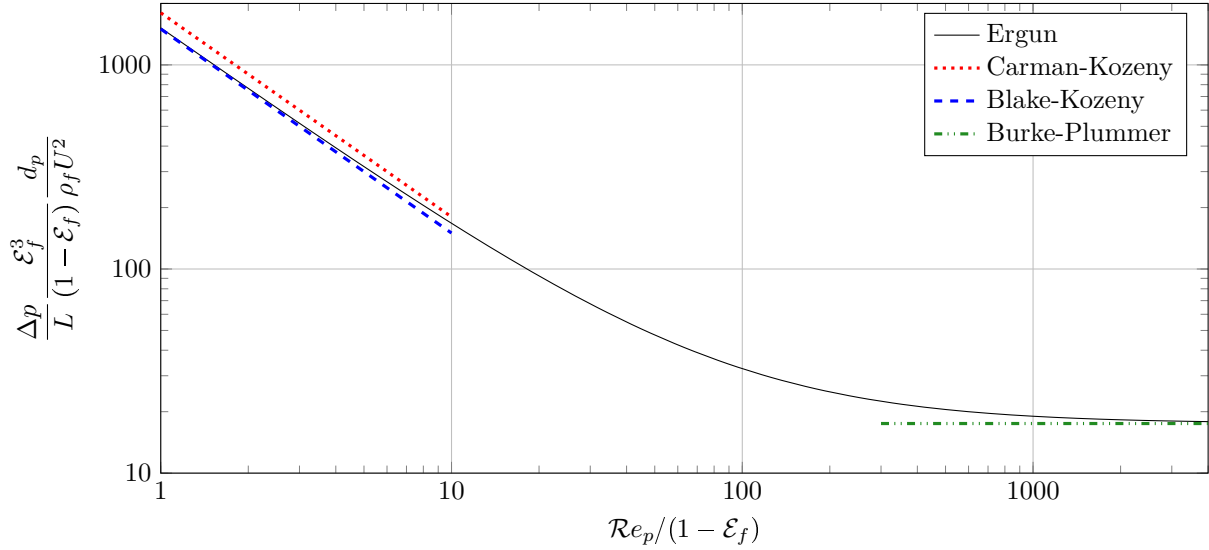


FIGURE I.5 – Représentation des équations de Ergun (I.22), Carman-Kozeny (I.13), Blake-Kozeny (I.12) et Burke-Plummer (I.15)

Où β est le coefficient de friction, également appelé coefficient d'échange de quantité de mouvement. \mathbf{u}_f est la vitesse interstitielle du fluide vue par les particules (voir §I – 2.1) et \mathbf{v}_p la vitesse de la phase solide. Dans le cas de la corrélation d'Ergun, ce coefficient s'obtient par comparaison entre les équations (I.22) et (I.23) :

$$\beta = 150 \frac{(1 - \mathcal{E}_f)^2 \mu_f}{\mathcal{E}_f d_p^2} + 1.75 \frac{(1 - \mathcal{E}_f) \rho_f |\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p|}{d_p} \quad (\text{I.24})$$

I – 3.1.3 Phénomène d'hystérésis

Pour un lit composé de particules de même taille, un phénomène d'hystérésis est observé sur le saut de pression en fonction de la vitesse d'injection, suivant que celle-ci soit croissante ou décroissante. Comme le montre le graphique I.6-(a), la pente du saut de $\Delta p / \Delta L = f(U_{\text{in}})$ n'est pas la même lorsque la vitesse d'injection augmente ou diminue progressivement. De plus, pour une vitesse croissante, un overshoot de pression a également lieu lorsque la vitesse d'injection atteint la vitesse minimale de fluidisation.

Ces deux phénomènes sont dus à l'agencement des particules dans le lit [125]. En effet, un lit dont les particules n'ont été soumises qu'aux seules forces de gravité durant leur sédimentation possède une concentration de particules plus élevée que lorsqu'elles sont également soumises aux forces hydrodynamiques d'un fluide à contre courant. Ainsi, en partant d'un lit fluidisé, lorsque la vitesse d'injection diminue, les particules s'arrangent selon une configuration minimisant la résistance au fluide, la concentration de particules dans le lit est alors $(1 - \mathcal{E}_{\text{mf}})$. La porosité résultant d'une sédimentation dans un fluide à contre courant, \mathcal{E}_{mf} , est plus grande que celle d'un lit sédimenté sous le seul effet de la gravité, \mathcal{E}_f^0 , qui est elle-même plus grande que celle d'un lit sédimenté dans un domaine vibrant $\mathcal{E}_f^{\text{vib}}$:

$$\mathcal{E}_{\text{mf}} > \mathcal{E}_f^0 > \mathcal{E}_f^{\text{vib}} \quad (\text{I.25})$$

Pour plus d'informations concernant les réseaux de particules et les taux de compacité, se référer à l'annexe A.

L'évolution du saut de pression en fonction de la vitesse d'entrée est donc différente étant donné que celui-ci dépend grandement de la fraction volumique de fluide. L'overshoot de pression résulte quant à lui de la nécessité de "décompacter" le lit, le faisant ainsi passer d'une compacité \mathcal{E}_f^0 à une compacité \mathcal{E}_{mf} [125].

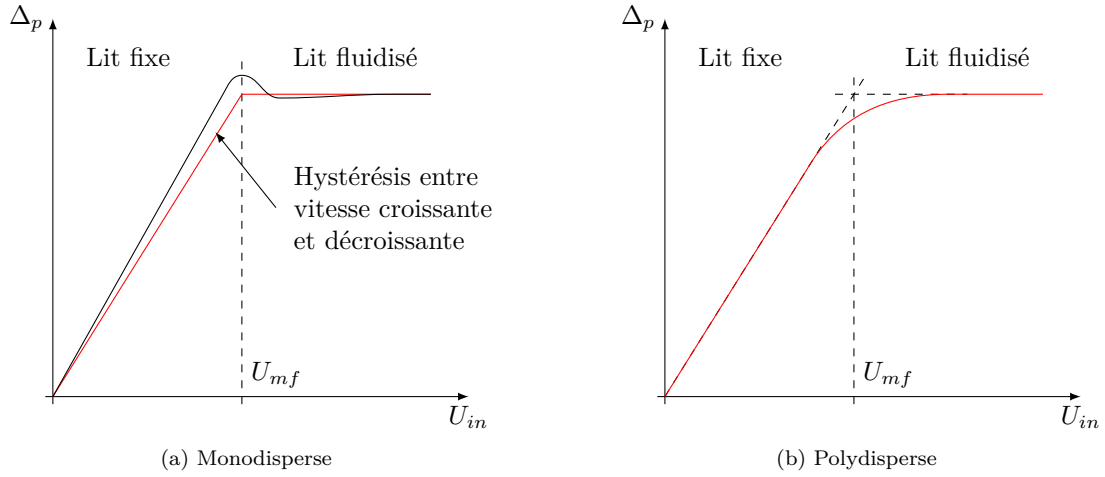


FIGURE I.6 – Représentation schématique du saut de pression à travers le lit de particules en fonction de la vitesse d'entrée

I – 3.2 Vitesse de fluidisation

Si la vitesse d'injection du fluide est augmentée jusqu'à une certaine valeur, appelée vitesse minimale de fluidisation $U_{in} = U_{mf}$, le lit de particules se soulève légèrement, le régime de fluidisation est atteint. Comme nous venons de le voir, la moyenne temporelle du saut de pression à travers le lit n'évolue plus une fois que le lit est fluidisé. En revanche, plus la vitesse d'entrée du fluide est élevée, plus le lit se soulève et se déstabilise. Des zones dépeuplées de particules se créent au sein du lit, formant ainsi des bulles de fluide, le lit est dit bouillonnant (en anglais "bubbling bed"). Pour de fortes vitesses d'injection, le régime de fluidisation à bulles devient chaotique et la taille des zones dépeuplées peut parfois atteindre celle du réacteur. Lorsque la vitesse d'entrée est suffisamment élevée, les particules ne redescendent plus, le lit est alors transporté.

I – 3.2.1 Cas général

En combinant l'équation (I.22), renseignant l'évolution du saut de pression en fonction de la vitesse d'injection, et l'équation (I.3), décrivant le saut de pression à travers un lit fluidisé, nous obtenons :

$$150 \frac{(1 - \mathcal{E}_{mf})^2}{\mathcal{E}_{mf}^3} \frac{\mu_f U_{mf}}{d_p^2} + 1.75 \frac{(1 - \mathcal{E}_{mf})}{\mathcal{E}_{mf}^3} \frac{\rho_f U_{mf}^2}{d_p} = (1 - \mathcal{E}_{mf})(\rho_p - \rho_f)g \quad (I.26)$$

Ainsi, après quelques arrangements, nous avons l'équation du second degré suivante :

$$1.75 \rho_f d_p U_{mf}^2 + 150(1 - \mathcal{E}_f) \mu_f U_{mf} - \mathcal{E}_f^3 d_p^2 (\rho_p - \rho_f)g = 0 \quad (I.27)$$

Soit Δ le discriminant de l'équation (I.27) :

$$\Delta = (150(1 - \mathcal{E}_{mf})\mu_f)^2 + 7\rho_f \mathcal{E}_{mf}^3 d_p^3 (\rho_f - \rho_p)g \quad (I.28)$$

En excluant la racine négative, nous obtenons la vitesse relative à partir de laquelle le lit commence à se soulever :

$$U_{mf} = \frac{-150(1 - \mathcal{E}_{mf})\mu_f + \sqrt{\Delta}}{3.5\rho_f d_p} \quad (I.29)$$

La figure I.7 représente l'évolution de U_{mf} en fonction du diamètre des particules pour un rapport de densité fixé. Il est important de remarquer que les courbes sont tracées en échelle logarithmique, les écarts entre la courbe et les droites sont donc importants pour $d_p \sim 10^{-3} m$. Ce graphique illustre

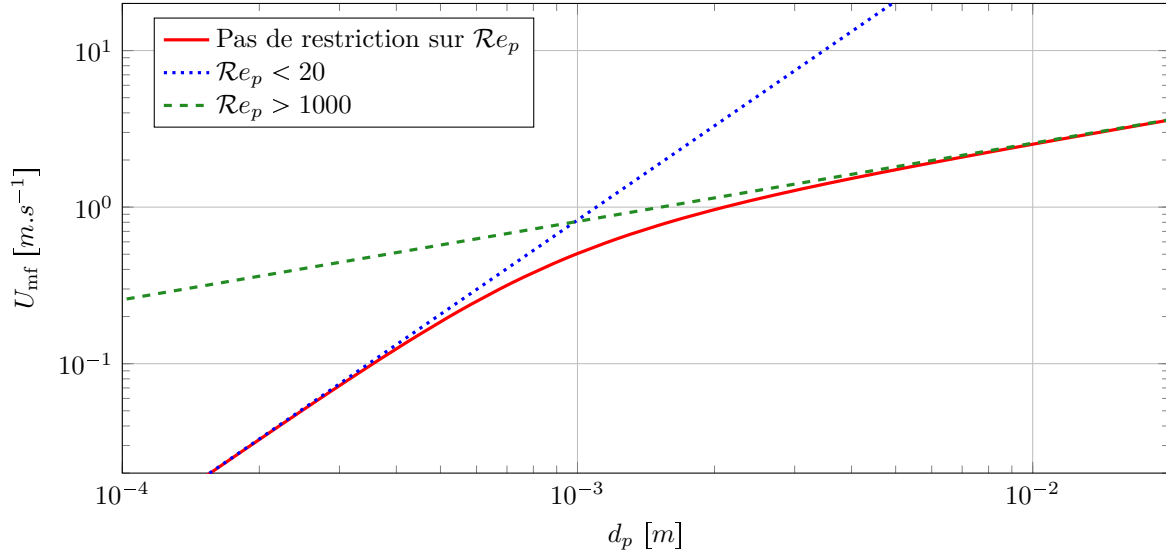


FIGURE I.7 – Vitesse minimale de fluidisation en fonction du diamètre des particules pour un rapport de densité $\rho_p/\rho_f = 2500/1.2$. Equation (I.29) en rouge, équation (I.30) en bleu et équation (I.33) en vert

la validité de l'équation (I.29) pour une large plage de nombres de Reynolds, tandis que les équations présentées dans les deux sous-parties suivantes ne sont valables que pour de faibles ou de très grandes valeurs de Re_p , mais renvoient des valeurs éloignées de U_{mf} pour des Re_p intermédiaires. Or, pour des billes de verre ($\rho_p = 2500 \text{ kg.m}^{-3}$) fluidisées par de l'air ($\rho_f = 1.2 \text{ kg.m}^{-3}$) par exemple, ce qui est une configuration fréquemment employée en laboratoire, la valeur de U_{mf} est comprise dans l'intervalle de Re_p intermédiaires pour des particules de diamètre $0.4 \text{ mm} < d_p < 2 \text{ mm}$, qui est la plage de diamètres des particules également couramment étudiée. Dans le cas où le diamètre de ces particules de verre est $d_p = 1 \text{ mm}$ et pour un lit de porosité $\mathcal{E}_{mf} = 0.37$ par exemple, le nombre de Reynolds au seuil de fluidisation est de $Re_{mf} = 31$

I – 3.2.2 Faible Reynolds

Dans le cas où le nombre de Reynolds est petit, nous avons vu précédemment que le premier terme de l'équation d'Ergun (I.22) est prépondérant face au second, le saut de pression peut alors être décrit par l'équation de Blake-Kozeny. En réécrivant l'équation d'équilibre (I.26) entre saut de pression et poids du lit, la vitesse de fluidisation s'exprime alors sous la forme :

$$U_{mf} = \frac{d_p^2(\rho_p - \rho_f)g}{150\mu_f} \frac{\mathcal{E}_f^3}{1 - \mathcal{E}_f}, \quad Re_{mf} < 20 \quad (\text{I.30})$$

L'approximation suivante fut proposée par Wen et Yu [225] :

$$\frac{1 - \mathcal{E}_{mf}}{\mathcal{E}_{mf}^3} \cong 11 \quad (\text{I.31})$$

obtenant ainsi une variante de l'équation (I.30) :

$$U_{mf} = \frac{d_p^2(\rho_p - \rho_f)g}{1650\mu_f}, \quad Re_{mf} < 20 \quad (\text{I.32})$$

Cette formulation est couramment rencontrée dans la littérature pour estimer la vitesse minimale de fluidisation pour des écoulements à faible nombre de Reynolds particulaire.

Dans le cas de particules sphériques, l'approximation (I.31) implique $\mathcal{E}_{mf} = 0.383$, ce qui est une valeur réaliste mais pas valable dans toutes les configurations. En effet, un lit sédimenté de façon

aléatoire, en anglais “Random Close Packing”, possède une porosité $0.36 < \mathcal{E}_f^0 < 0.38$ mais cette valeur peut être bien plus faible ou plus élevée dans le cas d’arrangements ordonnés des particules. Une liste non-exhaustive des différents arrangements de particules inspirés de la cristallographie est présentée en annexe A. Néanmoins, comme nous le détaillons plus loin dans ce rapport (voir §IV – 2.2), les particules se réarrangent lorsque la vitesse d’entrée est proche de la vitesse de fluidisation, et la porosité du lit est $0.37 < \mathcal{E}_{mf} < 0.39$.

Remarque 2 *Même si ces valeurs de \mathcal{E}_{mf} sont très proches, la différence de valeurs de U_{mf} auxquelles elles conduisent peut être importante comme le montre la figure I.8.*

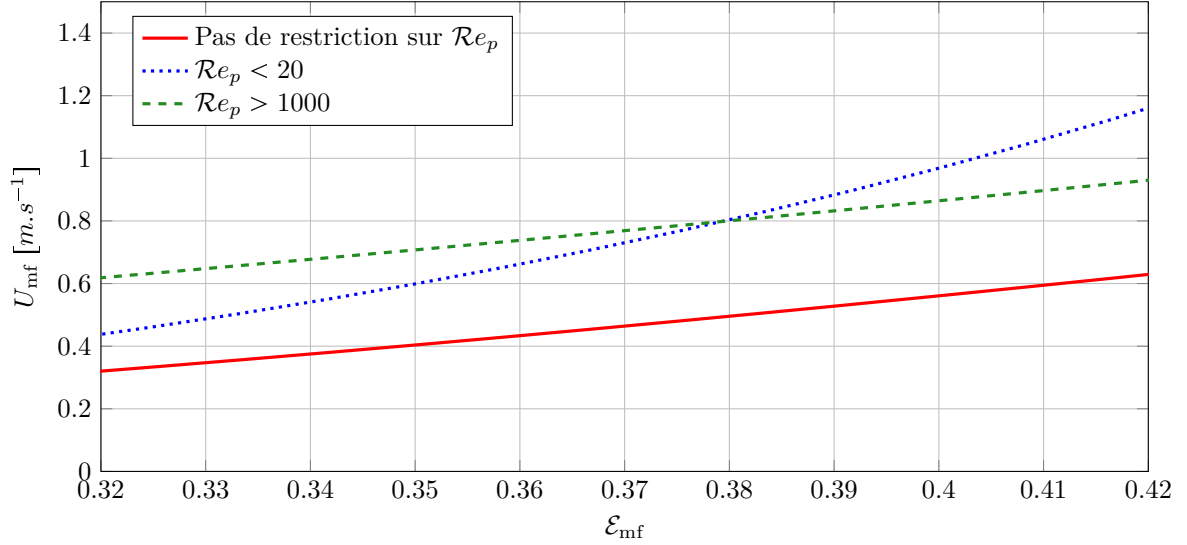


FIGURE I.8 – Vitesse minimale de fluidisation en fonction de la porosité au minimum de fluidisation pour des particules de diamètre $d_p = 1mm$ de densité $\rho_p = 2500 \text{ kg.m}^{-3}$ fluidisées par de l’air $\rho_f = 1.2 \text{ kg.m}^{-3}$. Equation (I.29) en rouge, équation (I.30) en bleu et équation (I.33) en vert

La figure I.8 illustre également l’écart entre les valeurs renvoyées par les différentes expressions de calcul de U_{mf} dans le cas d’un nombre de Reynolds intermédiaire.

I – 3.2.3 Fort Reynolds

Dans le cas où le nombre de Reynolds est grand, c’est le second terme de l’équation d’Ergun (I.22) qui est prépondérant face au premier. En écrivant l’équation d’équilibre entre la pression obtenue par l’équation de Burke-Plummer (I.15) et le poids relatif du lit (I.3), nous aboutissons à l’expression de la vitesse minimale de fluidisation valable pour des écoulements fortement inertiels :

$$U_{mf} = \sqrt{\frac{d_p(\rho_p - \rho_f)g\mathcal{E}_{mf}^3}{1.75\rho_f}}, \quad \mathcal{Re}_{mf} > 1000 \quad (\text{I.33})$$

En parcourant la littérature [87], l’expression suivante peut également être rencontrée :

$$U_{mf} = \sqrt{\frac{d_p(\rho_p - \rho_f)g}{24.5\rho_f}}, \quad \mathcal{Re}_{mf} > 1000 \quad (\text{I.34})$$

Cette expression implique $\mathcal{E}_{mf} = 0.415$, qui est la porosité correspondant à une sédimentation lente et non tassée du lit, appelée “Random Loose Packing” en anglais. Cette valeur est peu représentative de la compacité de la plupart des lits 3D pour lesquels la porosité au seuil de fluidisation est généralement plus faible, *ie.* $0.37 < \mathcal{E}_{mf} < 0.39$.

I – 3.3 Classification de Geldart

Le comportement hydrodynamique des écoulements fluide-particules dépend de la taille des particules fluidisées ainsi que de la différence de densité entre la phase dispersée et la phase continue. A partir de ces paramètres physiques et d'observations des caractéristiques de fluidisation, Geldart [83, 80, 81] proposa une classification en quatre groupes (voir figure I.9) dont les caractéristiques sont décrites dans les sous-parties suivantes. Plusieurs améliorations de cette cartographie des types de fluidisation furent proposées par la suite, par exemple par Yang [231] qui l'exprima notamment en fonction de nombres adimensionnels.

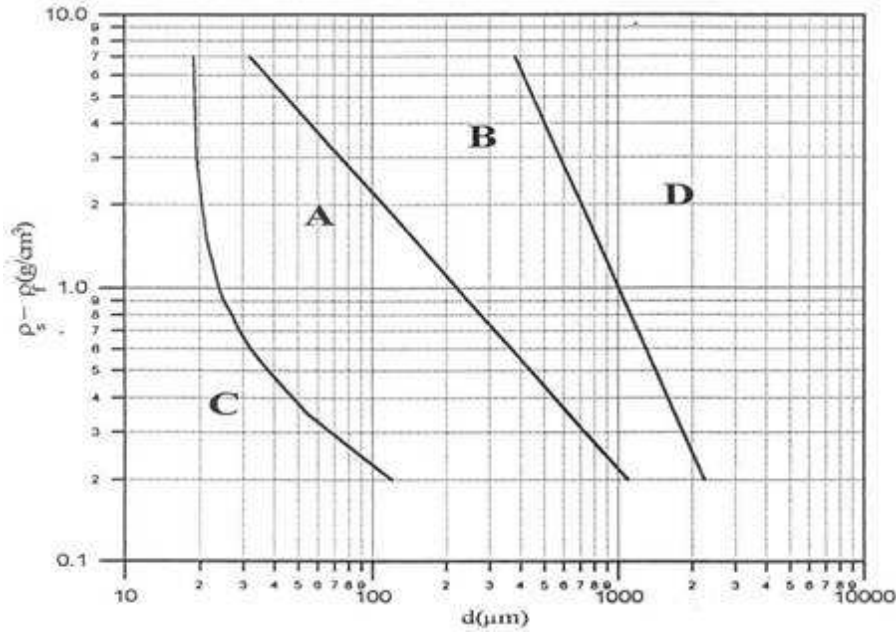


FIGURE I.9 – Classification de Geldart [81] des types de fluidisation de particules

I – 3.3.1 Groupe A

Particules dont le diamètre moyen est compris entre $30\mu m$ et $100\mu m$ et dont le comportement du lit qu'elles composent est décrit par Geldart comme suit. Ce type de poudre se fluidise facilement et la fluidisation est calme pour de faibles vitesses de fluidisation. Lorsque la vitesse injectée dans le domaine est plus importante, de petites bulles se forment dans le lit et remontent à la surface. Le lit s'élève beaucoup avant que les premières bulles n'apparaissent puis redescend une fois que le lit a atteint un régime de bullage (voir [82]). Abrahamsen et Geldart[1] ont proposé la formule suivante pour prédire la vitesse minimale de bullage :

$$U_{mb} = 33d_p \left(\frac{\rho_f - \rho_p}{\mu_f} \right)^{0.1} \quad (I.35)$$

L'expression suivante peut également être rencontrée :

$$U_{mb} = 2.07 \exp(0.716\mathcal{E}_f) \frac{d_p \rho_f^{0.06}}{\mu_f^{0.347}} \quad (I.36)$$

Remarque 3 Les particules du groupe A de la classification de Geldart sont les seules pour lesquelles la vitesse minimale de bullage est supérieure à la vitesse minimale de fluidisation, $U_{mb} > U_{mf}$. De ce fait la fluidisation passe par un stade de “fluidisation particulaire” avant d'atteindre un état de fluidisation bouillonnante.

Ces bulles, qui peuvent se scinder puis coalescer, remontent plus vite que la vitesse interstitielle du fluide et semblent avoir une taille maximale [44]. Pour faire diminuer la taille des bulles il faut élargir la plage de distribution des tailles de particule ou diminuer la taille moyenne des particules. Lorsque la vitesse superficielle du fluide est suffisamment élevée pour former des conditions d'écoulement en bouchons (en anglais "slugging"), les bulles produites sont axi-symétriques ; si la vitesse du fluide est encore augmentée, l'écoulement en bouchons passe en régime turbulent et remonte à la surface en ondulant [116]. La vitesse à laquelle ce phénomène se déclare diminue avec la taille des particules.

I – 3.3.2 Groupe B

Les particules de ce groupe, dont le diamètre moyen est compris entre $40\mu m$ et $600\mu m$ et la densité entre 1400 et $4000 kg.m^{-3}$, sont représentatives de la famille des sables. Contrairement aux poudres du groupe A, dans ce groupe, les bulles apparaissent dès la vitesse minimale de fluidisation ou légèrement au dessus. Les bulles ne se scindent pas mais peuvent coalescer et remontent à la surface plus rapidement. Contrairement au groupe A, la taille des bulles est ici indépendante de la taille moyenne des particules et de la distribution de taille. Lorsque la vitesse de fluidisation est très élevée, le phénomène d'écoulement en bouchons apparaît. Les slugs sont d'abord axi-symétriques, puis en augmentant encore la vitesse de fluidisation, deviennent asymétriques. Contrairement au groupe A, il n'y a pas d'évidence que le slugging passe en régime turbulent.

I – 3.3.3 Groupe C

Cette catégorie regroupe toutes les poudres cohésives, dont le diamètre moyen est généralement inférieur à $30\mu m$. Il est très difficile de fluidiser normalement ce genre de poudre car le lit s'élève comme un seul et même bloc si la fluidisation s'effectue dans un tube de petit diamètre. Lorsque la fluidisation est réalisée dans un plus grand réacteur, le fluide a tendance à former un canal dans la poudre et à toujours l'empreinter jusqu'à la surface, ce régime de fluidisation est appelé "channelling" en anglais. Ces complications sont dues au fait que les forces inter-particulaires sont plus élevées que celles que le fluide exerce sur les particules, ce qui est généralement la conséquence d'une très petite taille de particule, de fortes charges électrostatiques (voir annexe D), d'humidité (dans le cas où le fluide est un gaz), ou de particules collantes. Afin d'interrompre le phénomène de channelling et ainsi d'améliorer le mélange des deux phases, des dispositifs mécaniques tels que des mélangeurs ou des vibreurs peuvent être utilisés.

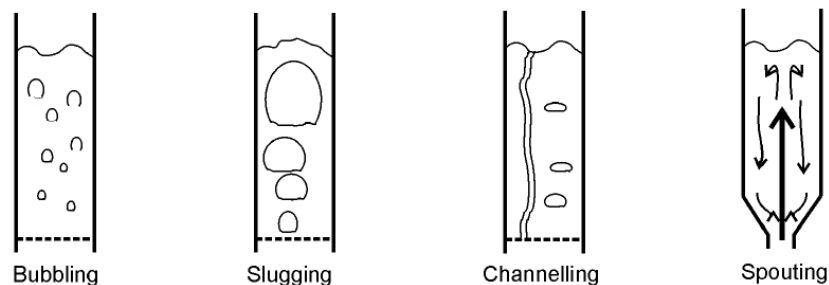


FIGURE I.10 – Illustration des différents régimes de fluidisation

I – 3.3.4 Groupe D

Ce groupe comprend les particules de grande taille et/ou de masse volumique élevée. La plupart des bulles de grande taille s'élèvent plus lentement que la vitesse interstitielle du fluide, le fluide traverse alors la bulle de bas en haut. Le régime d'écoulement autour de la particule peut être turbulent, notamment en raison de la taille des particules. Les collisions entre particules ou avec les parois peuvent causer l'attrition des particules qui peuvent alors être transportées par le fluide. Les tailles de bulle sont à peu près similaires à celles observées avec les poudres du groupe B pour des hauteurs de

lit et des vitesses égales, mais la formation de bulles ne commence pas avant plusieurs centimètres au dessus du bas du réacteur [83, 36].

I – 3.4 Effets de la polydispersité et de la non-sphéricité

Dans la réalité, les particules utilisés pour les lits fluidisés sont rarement parfaitement sphériques et possèdent même parfois un rapport de forme important. De plus, leurs dimensions suivent généralement une distribution gaussienne, ce qui entraîne des différences de caractéristique et de comportement entre un lit “idéal” et un lit “réel”.

I – 3.4.1 Conséquences sur le saut de pression

Les relations vues dans la section I – 3.1 pour décrire le saut de pression à travers un lit de particules en fonction de la vitesse d’injection dans le réacteur ont été dérivées ou extraites dans des configurations simples, mettant en œuvre des particules sphériques de même dimension. Nous abordons ici les cas des particules non sphériques et de la polydispersité.

I – 3.4.1.a Effet de la non-sphéricité sur le saut de pression

Dans le cas où la fraction volumique de fluide au repos est élevée, par exemple dans le cas de particules dont le facteur de forme est grand (extrudés, fibres) ou pour des anneaux de Raschig², où la porosité est comprise dans l’intervalle $0.6 < \mathcal{E}_f^0 < 0.98$, le saut de pression peut être beaucoup plus élevé que celui prédit par l’équation d’Ergun (I.22). Comme le rappellent Kunii et Levenspiel [125], d’autres procédures et expressions permettant de connaître le saut de pression sont données par Perry [173], se basant sur les travaux de Chilton et Colburn [35, 31, 32], mais également par Carman [28] et par Brown *et al.* [19], se basant sur les travaux de Brownell et Katz [22, 24, 23]. La méthode d’obtention du saut de pression proposée par Brown est valable pour toute valeur de \mathcal{E}_f^0 .

Notons que la corrélation d’Ergun peut quand même être utilisée dans le cas où les particules ne sont pas sphériques. Pour cela, il est nécessaire de prendre en compte le facteur de forme ψ_p dans l’équation (I.22), ainsi le saut de pression frictionnel à travers le lit en fonction de la vitesse d’entrée est donné par :

$$\frac{\Delta p}{L} = 150 \frac{(1 - \mathcal{E}_f)^2}{\mathcal{E}_f^3} \frac{\mu_f U}{(\psi_p d_p)^2} + 1.75 \frac{(1 - \mathcal{E}_f)}{\mathcal{E}_f^3} \frac{\rho_f U^2}{\psi_p d_p} \quad (\text{I.37})$$

Dans le cas où la sphéricité des particules est difficile à déterminer à priori, il est possible d’obtenir expérimentalement la sphéricité effective de l’ensemble des particules en ajustant le paramètre ψ_p de l’équation (I.37) pour que celle-ci corresponde au mieux aux résultats expérimentaux.

I – 3.4.1.b Effet de la polydispersité sur le saut de pression

Pour un lit composé de particules sphériques de tailles différentes, le saut de pression total est égal à la somme des sauts de pression engendrés par chaque classe de particule. Ainsi, si la taille des particules suit une distribution gaussienne, le saut de pression frictionnel peut être obtenu en prenant en compte le diamètre moyen des particules $\overline{d_p}$ dans la corrélation d’Ergun (I.22). Notons également que la concentration de particules dans le lit est d’autant plus élevée que la distribution de taille de particule est large. En effet, les petites particules se logent dans les interstices formées entre les particules de plus grande taille. Lorsque la distribution de taille de particule est large, les phénomènes d’hystérésis et d’overshoot de pression présentés précédemment (voir §I – 3.1.3), disparaissent. En effet, les particules les plus petites sont fluidisées à moindre vitesse, elles peuvent alors commencer à remonter dans les espaces existants entre les particules plus grosses [194]. En augmentant la vitesse d’entrée, les particules de plus grande taille sont fluidisées à leur tour. La courbe d’évolution du saut de pression en fonction de la vitesse d’entrée ressemble alors à celle du graphique I.6-(b).

2. particules tubulaires utilisées dans les colonnes de distillation et d’absorption

I – 3.4.2 Distribution de taille bidisperse

Afin de simplifier l'étude des effets de la polydispersité sur la fluidisation, il est plus commun de ne considérer que deux classes de particule. De plus, les phénomènes résultants de la présence de différentes classes de particule dans un système sont d'autant plus faciles à mettre en évidence que les rapports de densité entre les particules et le fluide qui les entoure est faible ; autrement dit, lorsque le fluide est un liquide. De ce fait, la plupart des études sur la polydispersité sont réalisées à l'aide de fluidisation liquide, également parfois appelée “teetering” en anglais [78, 63]. Les applications de la fluidisation liquide-solide sont nombreuses (voir [230, 62]). Parmi celles-ci, notons que la classification de particule par densité et/ou taille à l'aide de fluidisation liquide-solide est une technologie utilisée depuis longtemps. En effet, comme le fait remarquer Di Felice [52], le premier ouvrage faisant écho de l'utilisation de cette technique d'élutriation par l'industrie minière remonte au XVI^e siècle [104].

I – 3.4.3 Inversion et mélange des classes de particule

Lorsqu'un système est composé de plusieurs types de particule, de densité et/ou de diamètre différent, des phénomènes de mélange et de ségrégation des classes ont lieu au sein du lit. Kennedy & Bretton [117] s'inspirèrent de la loi de Fick pour caractériser la dispersion et la ségrégation des particules de différentes classes. Ces phénomènes furent d'abord observés expérimentalement et analysés puis des prédictions de comportement furent proposées. Parmi les équipes ayant réalisés des études expérimentales sur la polydispersité, notons les travaux de Garside & Al Dibouni [79, 3], de Epstein *et al.* [179, 65, 64, 66, 63, 69], de Moritomi *et al.* [157, 158] et de Gibilaro & Di Felice [86, 85, 54, 53, 51, 52].

Parmi les différents sujets d'étude qu'offrent les lits fluidisés bidisperses, un phénomène intéressant est celui d'inversion des classes de particule. Soit un lit bidisperse composé de particules A plus petites et/ou plus denses que les particules de classe B, initialement distribuées de façon aléatoire. Il a été observé qu'une ségrégation avait lieu à de faibles vitesses de fluidisation, *ie.* les particules de classe A occupent la partie basse du domaine tandis que les particules de classe B migrent vers le haut du lit. En augmentant la vitesse de fluidisation, la distribution des deux classes de particule à travers le domaine est de plus en plus homogène. Lorsque les deux classes de particule sont uniformément réparties, la vitesse d'injection est alors appelée vitesse d'inversion U_{inv} . Si la vitesse d'injection continue d'être augmentée, la partie haute du lit est presque exclusivement peuplée de particules de classe A tandis que les particules de classe B occupent quant à elles le bas du réacteur. Une inversion des couches de particules a donc lieu en augmentant la vitesse d'injection du fluide à travers un lit constitué de deux classes de particule aléatoirement distribués à l'initialisation comme l'a mis en évidence Moritomi [157].

I – 4 Conclusion

Au terme de ce premier chapitre introduisant le contexte scientifique et technique de ce rapport, nous avons présenté l'omniprésence des écoulements fluide-particules dans notre quotidien et dans les procédés industriels. Nous avons plus particulièrement décrit la technologie des lits fluidisés qui est employée dans de nombreuses installations du Génie des Procédés, que ce soit sous forme de réacteur à lit fluidisé bouillonnant ou à lit pulsé. La compréhension des phénomènes qui ont lieu au sein de ce genre d'écoulement est indispensable pour améliorer les performances et les coûts de fonctionnement des procédés mettant en œuvre ce type de mélange, quelque soit l'application finale. Ainsi, nous avons présenté les grandeurs physiques caractérisant les lits fluidisés, en exposant le principe de fluidisation d'une population de particules et son lien étroit avec la chute de pression du fluide dans le système. Par ailleurs, nous avons évoqué les différents régimes de fluidisation résultant de l'influence des propriétés physiques du fluide injecté et des particules mises en mouvement. Enfin nous avons abordé les effets engendrés par la non-sphéricité et la polydispersité en taille des particules sur les caractéristiques de la fluidisation.

La complexité des phénomènes physiques mis en jeu dans les lits fluidisés, tant d'un point de vue de l'interaction hydrodynamique entre les phases solide et fluide que concernant les collisions entre les particules, font de ce type d'écoulement une source intarissable de sujets d'étude. Néanmoins, le caractère hautement chaotique ainsi que la diversité des échelles de longueur rencontrées dans les lits

fluidisés en font des systèmes difficiles à étudier, en particulier de façon expérimentale. Dans la suite de cette étude, nous étudions les mélanges fluide-particules de façon numérique à l'aide d'une approche permettant de suivre individuellement les éléments de la phase solide. Ce modèle est présenté dans le chapitre suivant et le détail de son implémentation au chapitre III.

Chapitre II

Modélisation

Sommaire

II – 1	Différentes échelles de longueur pour la modélisation	26
II – 1.1	Echelle micro : résolution directe	26
II – 1.1.1	Maillage adaptatif	26
II – 1.1.2	Maillage fixe	27
II – 1.2	Echelle macro : Modèles Euler-Euler	29
II – 1.3	Echelle méso : Modèles Euler-Lagrange	29
II – 2	Modèle Euler-Lagrange	30
II – 2.1	Phase continue	30
II – 2.2	Phase dispersée	32
II – 2.2.1	Description des forces interparticulaires	32
II – 2.2.2	Modélisation	33
II – 2.3	Action du fluide sur les particules	35
II – 2.3.1	Origine des forces	35
II – 2.3.2	Force de traînée	36
II – 2.3.3	Force de masse ajoutée	42
II – 2.3.4	Force de Basset	43
II – 2.3.5	Force de portance	43
II – 2.3.6	Moment hydrodynamique	45
II – 2.3.7	Bilan de l'action du fluide sur les particules	45
II – 2.4	Calcul de la fraction volumique	46
II – 2.4.1	Deux dimensions	46
II – 2.4.2	Trois dimensions	48
II – 2.4.3	Filtrage spatial	51
II – 2.5	Action des particules sur le fluide	52
II – 2.5.1	Types de couplage recensés	52
II – 2.5.2	Couplage implémenté	53
II – 3	Conclusion	53

II – 1 Différentes échelles de longueur pour la modélisation

En fonction de l'échelle de longueur à laquelle les écoulements fluide-particules sont décrits, différentes approches sont utilisées pour décrire le comportement des deux phases. Premièrement, à l'échelle la plus fine considérée dans cette étude, que nous appelons échelle micro, les équations de Navier-Stokes (NS) sont résolues directement autour des particules, les trajectoires de ces dernières sont quant à elles calculées individuellement de façon lagrangienne. Deuxièmement, en se plaçant à une échelle de longueur bien plus grande, que nous appelons échelle macro, les particules sont considérées comme formant une phase continue (voir figure II.1-(c)). Le comportement des deux phases, fluide et solide, est alors décrit par des équations moyennées en espace faisant intervenir la fraction volumique de chacune des phases. Entre ces deux échelles de description, il existe une troisième approche se basant sur une formulation moyennée du fluide, mais pour laquelle les trajectoires des particules sont calculées individuellement. Cette approche est souvent appelée “més”, “micro-macro” ou “Euler-Lagrange” car elle constitue une combinaison des deux échelles de longueur présentées précédemment.

La figure II.1 illustre le changement d'échelle qui est opéré lors de l'utilisation des différents modèles. Nous présentons ci-après le principe général des échelles micro, macro et méso puis cette dernière est détaillée dans la section suivante (§II – 2).

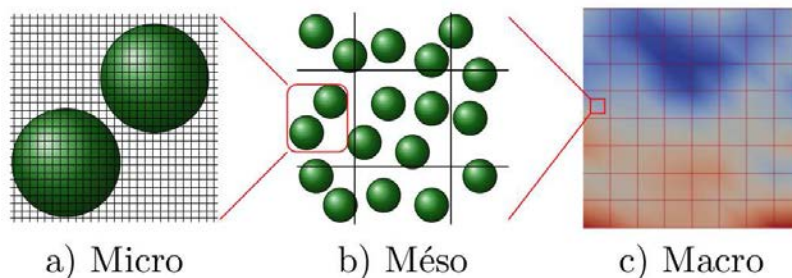


FIGURE II.1 – Exemple d'échelle de modélisation pour a) une approche DNS, b) une approche Euler-Lagrange et c) une approche Euler-Euler

II – 1.1 Echelle micro : résolution directe

Les systèmes fluide-particules peuvent être décrits en résolvant directement les équations de NS pour le fluide tandis que la trajectoire des particules est calculée individuellement. Pour mettre en place ce type de méthode où l'écoulement est résolu de façon précise autour de chaque particule, le maillage fluide doit être plus fin que la plus petite échelle spatiale caractéristique de l'écoulement. Il existe deux approches totalement différentes pour construire ce maillage, soit il occupe uniquement l'espace entre les particules, soit il est construit sur tout le domaine, y compris l'espace occupé par les particules.

Remarque 4 Dans le cas où les équations de NS ne sont résolues que dans l'espace occupé par le fluide, nous pouvons parler de résolution numérique directe (en anglais “Direct Numerical Simulation (DNS)”). L'acronyme “DNS” est également souvent employé pour les méthodes dans lesquelles les équations de NS sont résolues dans tout le domaine, fluide + particules, et où la vitesse du fluide est contrainte par différents moyens que nous présentons en partie II – 1.1.2.

II – 1.1.1 Maillage adaptatif

Dans le cas d'une inclusion d'objets dans le fluide, ici des particules, il est naturel de vouloir utiliser un maillage qui épouse la géométrie des objets¹ afin de résoudre directement les équations de NS dans le domaine occupé par le fluide. Comme l'illustre la figure II.2, pour de telles configurations, le maillage doit être non structuré afin de s'adapter au mieux aux surfaces des objets, que ceux-ci soit

1. en anglais “body fitted”

en mouvement ou non.

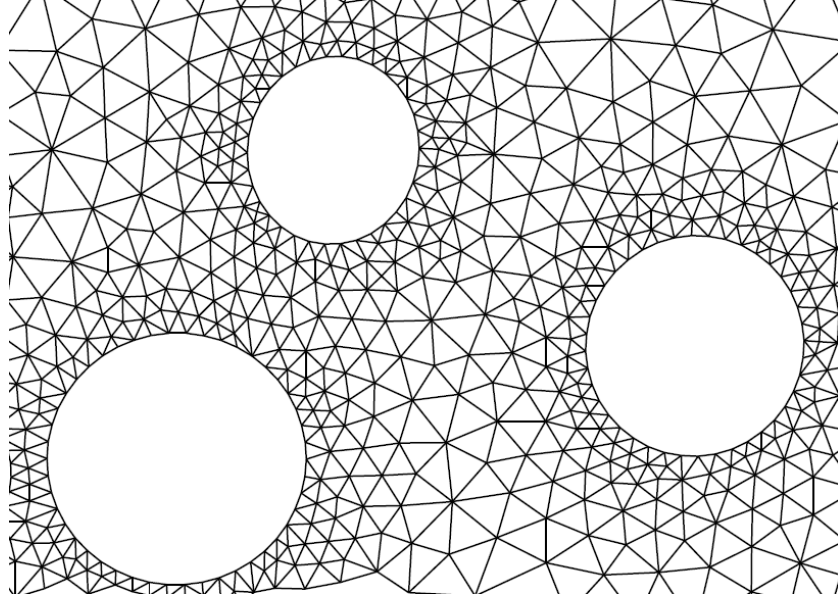


FIGURE II.2 – Exemple de maillage non structuré épousant la surface des particules (B. Maury [150])

Tout d’abord, si les objets sont fixes, le maillage est généré une seule fois avant de débiter la résolution des équations. Cette étape peut prendre du temps dans le cas de géométries complexes, comme par exemple pour un lit fixe de particules dont les zones occupées par le fluide sont parfois très étroites, rendant la construction du maillage laborieuse. En revanche, si les objets sont mobiles, le maillage construit avant la simulation nécessite d’être modifié pour prendre en compte le changement de géométrie du domaine occupé par le fluide. Si les particules se déplacent, le maillage peut être étiré, c’est à dire que les connections entre les nœuds du maillage restent les mêmes mais que les dimensions des mailles sont modifiées afin de suivre au mieux le déplacement des surfaces des objets. Mais lorsque le déplacement des objets est important, l’augmentation du rapport de forme des mailles engendre une détérioration de la solution obtenue, il est donc nécessaire de générer un nouveau maillage et de projeter la solution de l’ancien maillage sur le nouveau. Cette étape peut s’avérer très chronophage dans le cas de lit dense de particules, surtout en trois dimensions, et doit être renouvelée d’autant plus fréquemment que le déplacement des objets est important.

Ces méthodes, dans lesquelles le maillage suit le déplacement des objets de façon lagrangienne sont communément appelées Arbitrary Lagrangian Eulerian (ALE). Elles furent pour la première fois utilisées pour les écoulements fluide-particules par Hu [105, 106]. Pour plus de renseignements sur les méthode ALE et leur adaptation aux écoulements fluide-particules, voir par exemple les travaux de B. Maury [150, 132].

II – 1.1.2 Maillage fixe

Afin de s’affranchir des contraintes engendrées par l’utilisation de maillages adaptatifs, à savoir le temps passé à remailler l’espace occupé par le fluide lorsque les particules se sont déplacées, de nouvelles méthodes utilisant un maillage fixe ont été introduites. Les méthodes à maillage fixe sont également appelées méthodes de domaine fictif car elles sont basées sur l’utilisation d’un maillage occupant tout le domaine, y compris celui occupé par les particules. La vitesse du fluide calculée aux nœuds recouverts par les particules est alors totalement fictive ou égale à la vitesse des particules selon la méthode employée. Ce genre de méthode permet notamment d’utiliser des maillages cartésiens, ce qui simplifie grandement l’écriture et l’implémentation des schémas numériques.

Le cœur de ces méthodes est de faire en sorte que le fluide “voit” les particules, et que les quantités de mouvement s’échangent entre les phases fluide et solide. Parmi les différentes techniques utilisées

pour contraindre la vitesse du fluide aux nœuds concernés, citons par exemple :

- Les méthodes de frontières immergées (en anglais “Immersed Boundary Method (IBM)”), qui furent initialement proposées par Peskin [174, 175] pour modéliser les écoulements sanguins dans des cœurs humains. L’interaction entre les phases fluide et solide est modélisée en imposant des forces additionnelles dans la formulation du fluide au voisinage de l’interface à l’aide de l’opérateur de Dirac, la contrainte est donc imposée uniquement sur la surface de la particule de façon explicite. Cette méthode se base sur les hypothèses (i) d’une vitesse régulière du fluide à travers l’interface et (ii) d’objets infiniment minces (modèle initialement écrit pour des parois cardiaques). Aussi, son utilisation pour des écoulements diphasiques contenant des particules de taille finie entraîne des erreurs telles que des fuites numériques de fluide à travers les parois [229] malgré les améliorations apportées par LeVeque [133, 134] puis Li & Lai [137]. Pour plus d’information sur les méthodes IBM, se référer également aux travaux de Uhlmann [215, 216, 217].
- Les méthodes de multiplicateurs de Lagrange distribués (en anglais “Distributed Lagrange Multiplier/Fictitious Domain (DLM-FD)”). Cette approche fut introduite par Glowinski *et al.* [90, 88, 169, 89] pour des objets indéformables et fut ensuite étendue aux solides déformables par Yu [234]. Elle consiste à imposer la condition de corps rigide au sein de la particule en imposant la condition d’égalité des vitesses fluide et solide à l’aide de multiplicateurs de Lagrange. La contrainte est donc imposée sur plus de nœuds fluides qu’avec la méthode IBM et les problèmes à résoudre sont donc plus gros. Cependant, la méthode des multiplicateurs de Lagrange ne présente pas l’inconvénient des fuites de matière observées en IBM. Dans cette étude, les simulations à l’échelle micro sont réalisées à l’aide d’un modèle DLM-FD développé par l’équipe PeliGRIFF [222, 223].
- La méthode PHYSALIS développée par Prosperetti *et al.* [178, 244, 207], qui repose sur le principe de condition d’adhérence du fluide à la surface de la particule. Ainsi, en supposant que la vitesse du fluide est proche de celle de la particule dans le voisinage de l’objet, l’écoulement peut être décrit à l’aide d’une équation de Stokes dont la solution approximée est connue. La correspondance entre les solutions obtenues sur la face extérieure de la zone de Stokes et dans le reste du domaine est contrainte à l’aide d’une méthode itérative.
- La méthode de Boltzmann sur réseau (en anglais “Lattice Boltzmann Method (LBM)”). Cette approche est basée sur la dérivation des équations de Navier-Stokes à partir de l’équation de Boltzmann, qui décrit initialement la cinétique des gaz. Dans ce type de méthode, les variables du fluide sont considérées sous forme de fonctions de distribution et la manière la plus fréquemment employée pour prendre en compte la présence des particules est réalisée à l’aide d’une méthode de réflexion (en anglais “Bounce Back”) [126, 127, 128, 96, 97]. La fonction de distribution arrivant à un nœud appartenant à la phase solide est alors réfléchi vers le nœud d’origine. La simplicité d’implémentation et la précision des résultats que procure ce type de méthode en font à ce jour un outil très en vogue dans la communauté des écoulements fluide-particules.
- La méthode de force de couplage (en anglais “Force Coupling Method (FCM)”) proposée par Climent & Maxey [41, 34, 33]. Cette méthode, valable uniquement pour les écoulements en régime de Stokes, consiste à modéliser l’action des particules sur le fluide comme un terme source dans l’équation de Stokes. Le forçage est écrit sous la forme d’un développement multipolaire représentant la modification de l’écoulement engendrée par la présence de particules et l’ordre du multipole employé détermine la précision et le coût de calcul de la solution obtenue.
- La méthode de pénalisation, basée sur une reformulation du tenseur des contraintes permettant d’annuler le taux de déformation dans le volume occupé par la particule. Localement, la viscosité du fluide est augmentée fortement pour contraindre le mouvement du fluide à avoir un mouvement de corps rigide identique à celui d’une particule. Se référer par exemple aux travaux de Caltagirone & Vincent [26, 221, 220].

En résumé de cette présentation des méthodes de domaines fictifs, retenons que celle-ci offre un gain de temps considérable par rapport aux approches body fitted car le maillage reste le même durant toute

la simulation. De plus, cela rend possible l'utilisation de maillages cartésiens, ce qui facilite grandement l'écriture et l'implémentation des schémas numériques. Les détails mathématiques de la méthode DLM-FD employé dans cette étude sont présentés dans la partie relative aux simulations DNS en partie VI – 2.

II – 1.2 Echelle macro : Modèles Euler-Euler

La simulation numérique des écoulements fluide-particules, et plus généralement des écoulements multiphasiques, peut également être basée sur une approche purement eulérienne des phases. Elles sont alors considérées comme continues et s'interpénétrant entièrement [87, 61]. Ainsi, les équations de continuité et de quantité de mouvement pour chacune des phases sont respectivement :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} (\mathcal{E}_1 \rho_1) + \nabla \cdot (\mathcal{E}_1 \rho_1 \mathbf{u}_1) = 0 \end{array} \right. \quad (\text{II.1a})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} (\mathcal{E}_1 \rho_1 \mathbf{u}_1) + \nabla \cdot (\mathcal{E}_1 \rho_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1) = -\mathcal{E}_1 \nabla P_T + \mathcal{E}_1 \rho_1 \mathbf{g} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_1 + \mathbf{T}_1 \end{array} \right. \quad (\text{II.1b})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} (\mathcal{E}_2 \rho_2) + \nabla \cdot (\mathcal{E}_2 \rho_2 \mathbf{u}_2) = 0 \end{array} \right. \quad (\text{II.2a})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} (\mathcal{E}_2 \rho_2 \mathbf{u}_2) + \nabla \cdot (\mathcal{E}_2 \rho_2 \mathbf{u}_2 \mathbf{u}_2) = -\mathcal{E}_2 \nabla P_T + \mathcal{E}_2 \rho_2 \mathbf{g} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_2 + \mathbf{T}_2 \end{array} \right. \quad (\text{II.2b})$$

où $\rho_k(t, \mathbf{x}) \geq 0$ est la densité de la phase k , avec $k \in \{1, 2\}$, dont le champ de vitesse est $\mathbf{u}_k(t, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}^N$. D'autre part, $\boldsymbol{\tau}_k$ et $0 \leq \mathcal{E}_k(t, \mathbf{x}) \leq 1$ sont le tenseur des contraintes effectives et la fraction volumique de la phase k , respectivement. \mathbf{T}_k représente l'échange de quantité de mouvement entre les deux phases diminué de la contribution de la pression moyenne du fluide.

Cette approche permet de modéliser des systèmes aux dimensions bien plus étendues que l'approche DNS, c'est pourquoi ce type de modèle est souvent utilisé dans des codes de calcul industriels. En revanche, l'utilisation d'une grille fluide large ainsi que l'assimilation du solide à une phase continue impliquent une perte d'information sur le comportement des particules et du fluide. Pour y remédier, il est nécessaire de mettre en œuvre des modèles de fermeture dans le cas d'écoulements turbulents ainsi que des lois de comportement modélisant le comportement et l'action de la phase solide dans le cas d'écoulements fluide-particules. Comme le résume Batrak [10], deux approches sont communément employées pour modéliser les écoulements à phase dispersée de façon eulérienne. Dans un premier cas, les équations de la phase dispersée sont écrites de manière similaire aux équations de la phase continue comme dans la dérivation classique du modèle à deux fluides [46, 60, 176]. La seconde approche s'appuie sur le formalisme de la théorie cinétique des gaz en raison de la forte analogie entre le mouvement des particules dans un écoulement diphasique turbulent et celui des molécules de gaz à l'échelle microscopique. Dans sa version initiale, cette méthode permet ainsi de prendre en compte les collisions entre les particules mais pas l'interaction entre les particules et la turbulence [110, 156]. Puis différentes équipes inclurent cette interaction entre les phases dans leur modèle [48, 239]. Parmi ces équipes, notons les travaux de Simonin *et al.* [199, 200, 202, 201, 17]. Cette approche fut par la suite largement testée, validée et reprise par la communauté des écoulements multiphasiques [16, 7, 171, 6]. Citons également les travaux de Marchisio & Fox qui utilisent un modèle de quadrature de moments (en anglais "Quadrature Method Of Moment (QMOM)") [146, 145, 71]. Mais également ceux de Février *et al.* [76] qui, partant du principe que dans un écoulement fortement inertiel, des particules pouvaient être proches mais néanmoins avoir des vitesses différentes, proposèrent de décomposer leur vitesses en un terme corrélé et un autre décorrélé (en anglais "Random Uncorelated Motion (RUM)") [155].

II – 1.3 Echelle méso : Modèles Euler-Lagrange

Le principe des modèles Euler-Lagrange, également appelés Discrete Element Method / Computational Fluid Dynamics (DEM-CFD) ou Combined Continuum and Discrete Model (CCDM), consiste à décrire la phase continue (liquide ou gazeuse) de façon eulérienne et à assurer un suivi lagrangien des

particules. Ainsi, l'écoulement du fluide est généralement modélisé par une équation de conservation de la masse et une équation de bilan de quantité de mouvement qui prennent toutes les deux en compte la fraction volumique du fluide, comme dans le Two Fluid Model (TFM) présenté par Gidaspow [87]. L'effet des particules sur le fluide est considéré comme un terme source dans l'équation de quantité de mouvement tandis que l'action du fluide sur les particules est modélisé par une force hydrodynamique. A l'inverse de l'approche DNS, le diamètre des particules est plus petit que la taille des cellules du maillage fluide (voir figure II.1-(b)). Les modèles couplant la méthode des éléments discrets (en anglais "Discrete Element Method (DEM)") [39] pour la modélisation des particules et une approche eulérienne de la phase fluide ont été introduits par Tsuji, Kawaguchi et Tanaka en 1993 [211]. Depuis, cette approche a été reprise et modifiée par de nombreuses équipes [115, 168, 102, 227, 56]. Les systèmes ainsi modélisés comptent de plus en plus de particules et leur implémentation numérique est de plus en plus poussée [111, 50].

Durant ces trois années de thèse, nous nous sommes intéressés en particulier à cette échelle de longueur pour étudier les écoulements fluide-particules denses. Aussi, les différents éléments du modèle sont détaillés dans la suite de ce chapitre.

II – 2 Modèle Euler-Lagrange

Il existe différentes variantes de l'approche Euler-Lagrange suivant le couplage utilisé comme l'illustre la figure II.3. Pour l'étude d'écoulements fluide-particules denses, il est recommandé d'utiliser un modèle de couplage fort, où l'action des particules sur le fluide est prise en compte, de même que les collisions inter-particulaires.

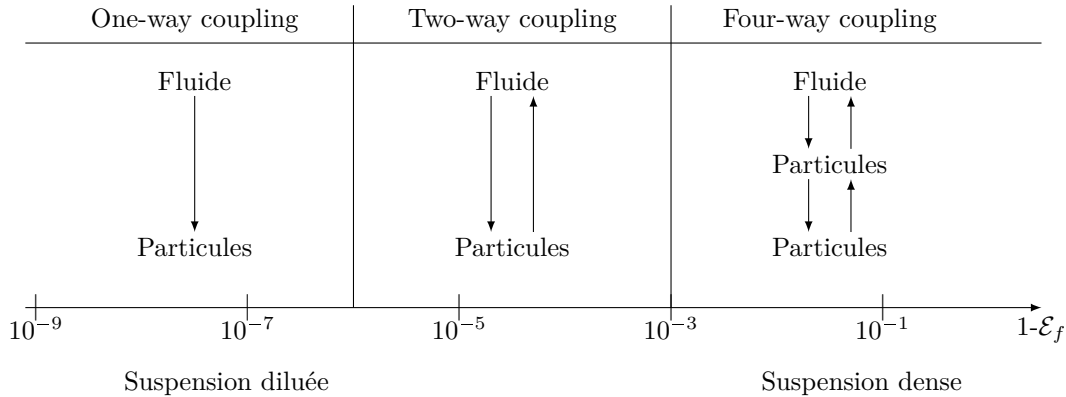


FIGURE II.3 – Différents types de couplage entre les phases solide et fluide en fonction de la concentration de particules (basé sur Elgobashi [59])

Dans la suite de cette section, nous détaillons les différentes parties du modèle, à savoir les équations régissant le fluide, puis le calcul des trajectoires des particules et des contacts inter-particulaires et enfin les éléments de couplage entre les deux phases. Dans cette étude, nous ne traitons que des particules de taille finie, les méthodes de type particules ponctuelles (en anglais "Point Particles Methods") ne sont donc pas abordées ici.

II – 2.1 Phase continue

Dans le modèle Euler-Lagrange, la description de l'écoulement fluide est basé sur le principe de variables localement moyennées proposé par Anderson et Jackson [5]. Cette étape de prise de moyenne spatiale implique que les variables du fluide soient définies sur une grille plus large que la taille des particules, avec un rapport volumique d'environ un ordre de grandeur :

$$\frac{\Delta\Omega}{V_p} \simeq \mathcal{O}(10) \quad (\text{II.3})$$

Où $\Delta\Omega$ est un volume de contrôle du domaine fluide. Dans cette étude, ce volume de contrôle correspond à une cellule du maillage.

Ainsi, le comportement du fluide est décrit par les équations de continuité et de quantité de mouvement (QDM) suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \mathcal{E}_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathcal{E}_f \mathbf{u}_f) = 0, \end{array} \right. \quad (\text{II.4a})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(\rho_f \mathcal{E}_f \mathbf{u}_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \mathcal{E}_f \mathbf{u}_f \mathbf{u}_f) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_f - \mathbf{F}_{pf} + \mathcal{E}_f \rho_f \mathbf{g} \end{array} \right. \quad (\text{II.4b})$$

Où \mathbf{F}_{pf} est une force volumique représentant l'action des particules sur le fluide au sein de chaque cellule de fluide. Le tenseur des contraintes moyenné à l'échelle d'une maille fluide, $\boldsymbol{\sigma}_f$, peut être exprimé de deux façons différentes, de ces deux expressions découlent les deux modèles proposés par Gidaspow [87] dans son TFM pour décrire la phase fluide :

- Modèle A :

Dans ce modèle-ci, le gradient de pression est réparti entre la phase continue et la phase particulaire :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \mathcal{E}_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathcal{E}_f \mathbf{u}_f) = 0 \end{array} \right. \quad (\text{II.5a})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(\rho_f \mathcal{E}_f \mathbf{u}_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \mathcal{E}_f \mathbf{u}_f \mathbf{u}_f) = -\mathcal{E}_f \nabla P_T - \mathbf{F}_{pf}^A + \nabla \cdot (\mathcal{E}_f \boldsymbol{\tau}_f) + \mathcal{E}_f \rho_f \mathbf{g} \end{array} \right. \quad (\text{II.5b})$$

- Modèle B :

Dans la seconde formulation, le gradient de pression est pris en compte uniquement du coté fluide :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \mathcal{E}_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathcal{E}_f \mathbf{u}_f) = 0 \end{array} \right. \quad (\text{II.6a})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(\rho_f \mathcal{E}_f \mathbf{u}_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \mathcal{E}_f \mathbf{u}_f \mathbf{u}_f) = -\nabla P_T - \mathbf{F}_{pf}^B + \nabla \cdot (\mathcal{E}_f \boldsymbol{\tau}_f) + \mathcal{E}_f \rho_f \mathbf{g} \end{array} \right. \quad (\text{II.6b})$$

\mathbf{F}_{pf}^A et \mathbf{F}_{pf}^B sont les forces volumiques modélisant l'action des particules sur le fluide pour les modèles A et B, respectivement. Quel que soit le modèle utilisé, l'expression de cette force volumique est de la forme :

$$\mathbf{F}_{pf} = \frac{1}{\Delta V} \sum_{i=1}^{N_p} \mathbf{f}_{fp,i} \quad (\text{II.7})$$

Néanmoins, l'expression de la force du fluide sur chaque particule, \mathbf{f}_{fp} , est différente pour chaque modèle (voir §II – 2.3). La relation entre ces deux forces volumiques est donnée par Gidaspow [87] lors de l'écriture de son TFM :

$$\mathbf{F}_{pf}^A = \frac{\mathbf{F}_{pf}^B}{\mathcal{E}_f} - \rho_f \mathcal{E}_f \mathbf{g} \quad (\text{II.8})$$

Ces deux modèles furent tout d'abord utilisés indifféremment l'un de l'autre [227, 102], même si le modèle A est considéré comme inconsistant [18, 87], mais des différences furent ensuite mises en évidence. En effet, lorsque la vitesse minimale de fluidisation est atteinte, le saut de pression totale à travers le lit doit être égal au poids des particules et du fluide. Or cela n'est pas le cas avec le modèle A comme le font remarquer Xu & Yu [228] à l'issue d'une discussion avec Homans *et al.* [227, 101]. Indépendamment du modèle, à l'état de fluidisation minimale, l'action du fluide sur une particule est égale à son poids :

$$f_{fp}^z = m_p g \quad (\text{II.9})$$

et la composante verticale de l'équation de QDM du modèle A se réduit à :

$$0 = -\mathcal{E}_f \frac{\partial P_T}{\partial z} - \frac{\sum_{N_p} f_{fp}^z}{\Delta V} - \rho_f \mathcal{E}_f g \quad (\text{II.10})$$

où f_{fp}^z est la force d'interaction du fluide sur une particule dans la direction verticale. En combinant les équations (II.9) et (II.10), l'expression obtenue pour le saut de pression à travers le lit dans le cas du modèle A est erronée en raison de la présence du terme \mathcal{E}_f devant le gradient de pression :

$$\begin{aligned} -\mathcal{E}_f \frac{\partial P_T}{\partial z} &= \frac{\sum_{N_p} m_p g}{\Delta V} + \rho_f \mathcal{E}_f g \\ &= \frac{\sum_{N_p} V_p \rho_p g}{\Delta V} + \rho_f \mathcal{E}_f g \\ &= (1 - \mathcal{E}_f) \rho_p g + \rho_f \mathcal{E}_f g \end{aligned} \quad (\text{II.11})$$

En effet, comme nous l'avons déjà évoqué dans le premier chapitre (voir §I – 3.1), le saut de pression doit être égal à la somme du poids des particules et du fluide :

$$-\frac{\partial P_T}{\partial z} = (1 - \mathcal{E}_f) \rho_p g + \rho_f \mathcal{E}_f g \quad (\text{II.12})$$

Où le gradient de pression total n'est pas multiplié par \mathcal{E}_f à l'inverse de l'équation (II.11). Cela illustre l'inconsistance du modèle A face au modèle B. La force modélisant l'action du fluide sur les particules est détaillée dans la sous-section II – 2.3.

II – 2.2 Phase dispersée

Une particule dans un lit fluidisé est libre de se mouvoir suivant un mouvement de translation et de rotation, son déplacement peut donc être décrit par la seconde loi de Newton. Ainsi, la trajectoire des particules est obtenue en résolvant le Principe Fondamental de la Dynamique (PFD) pour chaque particule :

$$\begin{cases} m_p \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = \mathbf{f}_g + \mathbf{f}_{pp} + \mathbf{f}_{fp}, \\ \mathbf{I}_p \frac{d\boldsymbol{\omega}_p}{dt} = \mathbf{T}_{pp} + \mathbf{T}_{fp} \end{cases} \quad (\text{II.13a})$$

$$\quad (\text{II.13b})$$

Où \mathbf{f}_{pp} représente la somme des forces exercées par les particules voisines et \mathbf{f}_{fp} la résultante des actions du fluide sur la particule. \mathbf{T}_{pp} est le moment dû aux composantes tangentielles des forces de contact et \mathbf{T}_{fp} est le moment hydrodynamique. \mathbf{I}_p , $\boldsymbol{\omega}_p$ et \mathbf{v}_p sont quant à eux le moment d'inertie, la vitesse angulaire et la vitesse translationnelle de la particule, respectivement.

II – 2.2.1 Description des forces interparticulaires

Les forces exercées par les particules sur leurs voisines peuvent être regroupées en 2 catégories, les forces de contact \mathbf{f}_c et les forces à distance DLVO (électrostatiques et de Van Der Waals).

II – 2.2.1.a Forces de contact

Il existe deux grandes familles de modèles pour exprimer les forces de contact entre particules et entre particules et murs, les modèles à sphères rigides et les modèles à sphères molles

1. Modèle de sphères rigides :

Dans les modèles de sphères rigides (en anglais “hard sphere model”), les collisions sont instantanées, la dynamique de collision est donc binaire et les particules ne se chevauchent pas. Afin de bien capter l'instant auquel a lieu le contact, il est important d'avoir un pas de temps très fin. Ce type de modèle est proche de ceux utilisés en dynamique moléculaire.

2. Modèles de sphères molles

Les modèles de sphères molles (en anglais “soft sphere model”), sont beaucoup utilisés pour modéliser des contacts entre objets. Avec cette méthode, les objets sont autorisés à se recouvrir partiellement pendant le choc. Contrairement à la méthode précédemment présentée, ici le choc

n'est donc pas instantané et l'équation (II.13a) est résolue pour plusieurs pas de temps à chaque contact entre deux particules ou entre une particule et un obstacle. C'est ce modèle qui sera utilisé dans la suite de l'étude (voir section II – 2.2.2).

II – 2.2.1.b Forces DLVO

Les forces DLVO, en référence à la théorie de Derjaguin, Landau, Verwey et Overbeek [49, 219], regroupent les forces d'attraction de Van Der Waals et de répulsion électrostatique existant entre des particules, électriquement chargées ou non. Leur intensité est d'autant plus importante face aux forces hydrodynamiques et de contact que les particules sont petites. C'est pourquoi ces forces sont prédominantes pour les poudres du groupe C de la classification de Geldart et sont non négligeables pour les poudres du groupe A (voir §I – 3.3). Les forces de Van der Waals prennent naissance à l'échelle moléculaire et peuvent être identifiées comme les forces de London, de Debye et de Keesom.

$$\mathbf{f}_{\text{vdw}} = \mathbf{f}_{\text{London}} + \mathbf{f}_{\text{Debye}} + \mathbf{f}_{\text{Keesom}} \quad (\text{II.14})$$

Les forces DLVO ne sont pas prises en compte dans cette étude, néanmoins elle sont détaillées en annexe D.

II – 2.2.2 Modélisation

Dans cette étude, nous ne nous intéressons qu'aux particules non polarisées et dont la taille est supérieure à $100\mu\text{m}$. Les déplacements en translation et en rotation des particules sont calculés à l'aide d'un modèle aux éléments discrets (en anglais “Discrete Element Method (DEM)”) introduit par Cundall & Strak [39], associé à un modèle de sphères molles permettant aux particules de se recouvrir légèrement pour calculer les forces de contact (voir figure II.4). Les trajectoires et contacts des particules sont résolus à l'aide du code GRAINS3D [224] développé par IFPEN. Ce logiciel permet de traiter des contacts entre des sphères et polyèdres convexes et non convexes, néanmoins, nous ne parlerons ci-après que de particules sphériques.

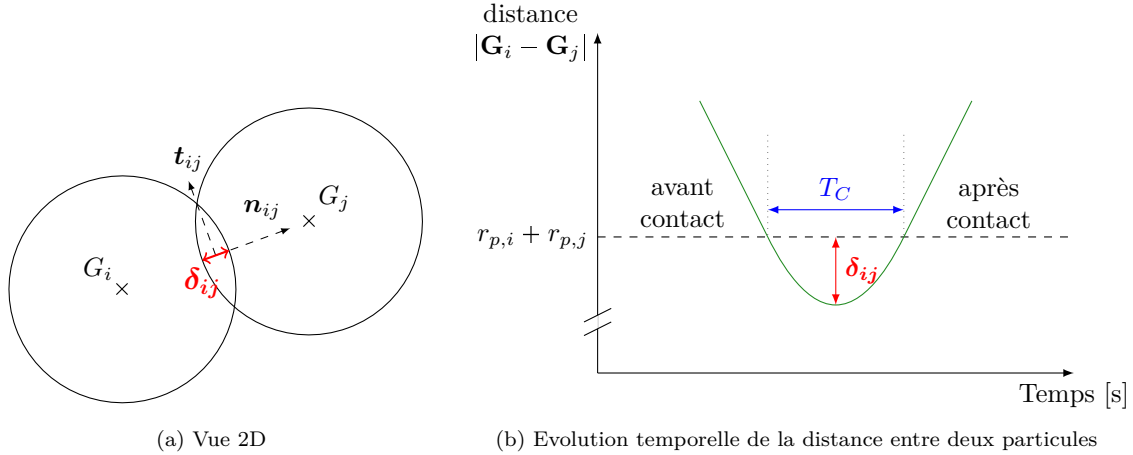


FIGURE II.4 – Contact entre deux particules : G_i et G_j sont les centres de gravité des particules i et j respectivement, \vec{t} et \vec{n} sont les vecteurs unitaires tangentiels et normaux, respectivement, et δ_{ij} est la distance de recouvrement

II – 2.2.2.a Modélisation de la force de contact

Dans le logiciel GRAINS3D, la force de contact entre deux particules i et j qui entrent en collision est modélisée par trois forces : une force de restitution élastique normale, une force de dissipation visqueuse normale et une force de friction tangentielle.

1. Force de restitution élastique :

$$\mathbf{f}_{el} = k_n \delta_{ij} \mathbf{n}_{ij} \quad (\text{II.15})$$

Où k_n est le coefficient de rigidité normal au contact, δ_{ij} la distance de recouvrement entre les particules et \mathbf{n}_{ij} le vecteur normal unitaire porté par la droite entre les centres de gravité des particules.

2. Force dynamique visqueuse :

$$\mathbf{f}_{dn} = -2\gamma_n M_{ij} \mathbf{v}_{rn} \quad (\text{II.16})$$

dans la direction normale, pour prendre en compte l'aspect dissipatif du contact, où γ_n est le coefficient de friction dynamique normal, $M_{ij} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}$ la masse réduite des particules et \mathbf{v}_{rn} la vitesse normale relative entre les particules.

3. Force de friction tangentielle :

$$\mathbf{f}_t = -\min \left\{ \mu_c |\mathbf{f}_{el}|, |\mathbf{f}_{dt}| \right\} \mathbf{t}_{ij} \quad (\text{II.17})$$

Où \mathbf{f}_{dt} représente la force de friction dissipative :

$$\mathbf{f}_{dt} = -2\gamma_t M_{ij} \mathbf{v}_{rt} \quad (\text{II.18})$$

μ_c est le coefficient de friction dynamique de Coulomb, γ_t le coefficient de friction tangentiel dissipatif et \mathbf{v}_{rt} la vitesse relative tangentielle entre les particules.

La force de collision résultante agissant sur une particule i est la somme des contributions des contacts avec les particules voisines j :

$$\mathbf{f}_{c,i} = \sum_j \mathbf{f}_{c,ij} = \sum_j (\mathbf{f}_{el} + \mathbf{f}_{dn} + \mathbf{f}_t)_{ij} \quad (\text{II.19})$$

Comme mis en évidence par Džiugys [57], l'évolution temporelle de la distance de recouvrement δ peut être obtenue à partir du PFD (II.13). En considérant $t = 0$ l'instant initial du contact, nous avons donc :

$$\frac{d^2 \delta}{dt^2} + 2\gamma_n \frac{d\delta}{dt} + \omega_0^2 \delta = 0, \quad \delta(t=0) = 0, \quad \frac{d\delta}{dt}(t=0) \quad (\text{II.20})$$

Avec $\omega_0^2 = 2k_n/m$. Remarquons que, dans cette étude, le coefficient k_n est fixé de telle sorte que le recouvrement maximal entre deux particules soit de 10% de leur rayon :

$$\delta_i^{\max} = \frac{r_{p,i}}{10} \quad (\text{II.21})$$

A partir de l'équation (II.20), nous obtenons la durée de contact :

$$T_C = \frac{\pi}{\sqrt{\omega_0^2 - \gamma_n^2}}, \quad (\text{II.22})$$

ainsi que le coefficient de restitution élastique informant sur le rapport des vitesses pré- et post-collisionnelles :

$$E_n = e^{-\gamma_n T_C} \quad (\text{II.23})$$

Dans le cas de particules sphériques, un couple de résistance au roulement [2] peut être ajouté au couple total résultant des contacts avec les autres particules. Un tel couple est ajouté afin qu'une particule roulant sur une surface plane voit sa vitesse de rotation diminuer en raison du frottement, et ne continue donc pas à rouler éternellement. Ainsi, pour une particule i en contact avec une particule j , le couple résistant s'écrit :

$$\mathbf{M}_{\text{roll},ij} = -k_{ms} |\mathbf{F}_{ij}^n| R_{ij} \frac{\boldsymbol{\omega}_{ij}}{|\boldsymbol{\omega}_{ij}|} \quad (\text{II.24})$$

Néanmoins, ce terme n'est pas pris en compte, *ie.* $k_{ms} = 0$, dans ces travaux car les configurations d'écoulement étudiées ne mettent pas en œuvre de particule roulant sur des plans. Pour plus de détail concernant la résolution du milieu granulaire voir [224].

II – 2.2.2.b Schéma numérique

Différents schémas numériques peuvent être utilisés pour intégrer le système d'équations (II.13) décrivant le déplacement des particules (voir [57]). Les caractéristiques entrant en compte dans le choix du schéma numérique sont (i) la stabilité, (ii) la précision de la solution et (iii) le temps de calcul qui doit être aussi faible que possible. Dans cette étude, un schéma d'intégration d'ordre deux est utilisé car la solution obtenue est jugée suffisamment précise pour un temps de calcul raisonnable. Le schéma choisi, de type “saute-mouton”² de Verlet [57, 130, 165], est utilisé en raison de sa grande stabilité par rapport à un schéma de type Adams-Bashforth [57, 206] par exemple. Nous détaillons ci-après uniquement le déplacement en translation d'une particule, la résolution du mouvement de rotation s'effectue de la même façon. Ainsi, la vitesse de translation d'une particule s'écrit :

$$\mathbf{v}_p(t + \Delta t/2) = \mathbf{v}_p(t - \Delta t/2) + \frac{\sum \mathbf{f}(t)}{m_p} \Delta t \quad (\text{II.25})$$

et la position de la particule est obtenu en résolvant l'équation :

$$\mathbf{x}_p(t + \Delta t) = \mathbf{x}_p(t) + \mathbf{v}_p(t + \Delta t/2) \Delta t \quad (\text{II.26})$$

Remarquons qu'une forme de “CFL solide”, intrinsèque aux modèles de sphères molles, doit être respectée afin de s'assurer qu'une particule ne se déplace pas de plus d'une épaisseur de recouvrement durant un pas de temps :

$$\Delta t_p < \frac{\delta_i^{\max}}{|\mathbf{v}_{p,i}|} \quad (\text{II.27})$$

De plus, pour des raisons de stabilité et de précision, le pas de temps employé pour la résolution du problème granulaire nécessite d'être bien plus petit que le temps de contact entre deux particules [187, 208] :

$$\Delta t_p \leq \frac{T_C}{20} \quad (\text{II.28})$$

II – 2.3 Action du fluide sur les particules

Dans les modèles Euler-Lagrange, l'échange de quantité de mouvement est calculé pour chaque particule en fonction des informations provenant du fluide environnant. Afin de caractériser les régimes d'écoulement dans le domaine, nous nous basons sur la notion de nombre de Reynolds particulaire $\mathcal{R}e_p$:

$$\mathcal{R}e_p = \frac{\rho_f d_p \mathcal{E}_f |\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p|}{\mu_f} \quad (\text{II.29})$$

II – 2.3.1 Origine des forces

Soit \mathbf{f}_{fp} la force modélisant l'action du fluide sur une particule. A l'aide d'un principe de variables localement moyennées, Anderson et Jackson [5] ont montré que cette force pouvait être écrite comme la somme d'une composante due aux variations macroscopiques du tenseur des contraintes dans le fluide $\boldsymbol{\sigma}_f$ et d'une composante \mathbf{f}'_{fp} due aux variations locales du tenseur des contraintes de l'écoulement autour d'une particule :

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_{fp} &= \int_{S_p} \boldsymbol{\sigma}'_f \mathbf{n} dS \\ &= \int_{S_p} (\boldsymbol{\sigma}_f + \boldsymbol{\sigma}''_f) \mathbf{n} dS \\ &= \int_{V_p} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_f dV + \int_{S_p} \boldsymbol{\sigma}''_f \mathbf{n} dS \\ &= V_p \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_f + \mathbf{f}'_{fp} \end{aligned} \quad (\text{II.30})$$

2. plus connu sous le nom anglais de “Leapfrog scheme”

Où σ'_f est le tenseur des contraintes ponctuelles, σ_f sa moyenne spatiale et σ''_f leur différence. En rappelant que $\sigma_f = -P_T \mathbf{I}_n + \tau_f$, où \mathbf{I}_n est la matrice identité et τ_f le déviateur du tenseur des contraintes, l'équation (II.30) peut s'écrire :

$$\mathbf{f}_{fp} = -V_p \nabla P_T + V_p \nabla \cdot \tau_f + \mathbf{f}'_{fp} \quad (\text{II.31})$$

En lien avec les deux modèles permettant de décrire le comportement de la phase fluide (voir §II – 2.1, l'action du fluide sur une particule peut être exprimée de deux façons différentes suivant si l'on utilise le modèle A (syst. (II.5)) ou le modèle B (syst. (II.6)). Comme l'ont fait remarqué Feng & Yu [73], en fonction du modèle, la force d'interaction correspondant à chacun des modèles s'écrit :

$$\mathbf{f}_{fp}^A = -V_p \nabla P_T + \mathbf{f}^A \quad (\text{II.32})$$

$$\mathbf{f}_{fp}^B = -V_p \nabla P_0 + \mathbf{f}^B \quad (\text{II.33})$$

où \mathbf{f}^A est la force d'interaction hydrodynamique, souvent représentée par la seule force de traînée, multipliée par la fraction volumique de fluide et ∇P_T le gradient de pression total. Pour le modèle B en revanche, \mathbf{f}^B est la force d'interaction hydrodynamique et le premier terme du membre de droite de l'équation (II.33) correspond au gradient de pression hydrostatique ∇P_0 . Rappelons que le saut de pression total ΔP_T dans un lit de particules peut être décomposé en un terme de pression hydrostatique ΔP_0 , un terme de pression dynamique, également appelé pression piezométrique ou manométrique, Δp , dû au mouvement relatif des particules et du fluide, et un terme de pression dû à la friction du fluide sur les parois ΔP_w qui est souvent négligé face aux deux précédents.

Parallèlement à la relation (II.8) reliant les forces volumiques d'interaction entre les deux modèles, nous avons $\mathbf{f}^B = \mathbf{f}^A / \mathcal{E}_f$. Ainsi, les équations (II.32) et (II.33) peuvent être réécrites de la façon suivante :

$$\mathbf{f}_{fp}^A = -\rho_g V_p \mathbf{g} + V_p \nabla p + \mathcal{E}_f \mathbf{f}_{hd} \quad (\text{II.34})$$

$$\mathbf{f}_{fp}^B = -\rho_g V_p \mathbf{g} + \mathbf{f}_{hd} \quad (\text{II.35})$$

Les différentes composantes qui constituent la force d'interaction hydrodynamique \mathbf{f}_{hd} sont détaillées dans les paragraphes suivants.

II – 2.3.2 Force de traînée

L'expression de la force de traînée exercée par un fluide sur une particule n'est connue de façon analytique que pour une sphère isolée dans un fluide visqueux, *ie.* dont le régime d'écoulement permet de se placer sous l'hypothèse de Stokes [204] :

$$\mathbf{f}_d = 3\pi\mu_f d_p (\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p), \quad \mathcal{Re}_p \ll 1 \quad (\text{II.36})$$

Comme l'expression exacte de la force de traînée n'est connue que dans ces conditions, la force de Stokes peut être utilisée [12, 97] afin de normaliser la force de traînée pour d'autres régimes d'écoulement et/ou en présence de particules voisines : $\mathbf{f}_d(\mathcal{E}_f, \mathcal{Re}_p)$. Ainsi, en considérant la vitesse superficielle $\mathbf{U} = \mathcal{E}_f (\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p)$ nous avons la force de traînée normalisée :

$$\mathbf{F}(\mathcal{E}_f, \mathcal{Re}_p) = \frac{\mathbf{f}_d(\mathcal{E}_f, \mathcal{Re}_p)}{3\pi\mu_f d_p \mathbf{U}} \quad (\text{II.37})$$

où \mathcal{E}_f est la fraction volumique de fluide entourant la particule dont la force de traînée est calculée. Ainsi, pour une particule isolée en régime de Stokes, nous avons bien :

$$\mathbf{F}(1, 0) = 1 \quad (\text{II.38})$$

Concernant une sphère isolée se déplaçant dans un fluide à des Reynolds plus élevés, la force de traînée est donnée par l'expression :

$$\mathbf{f}_d = \frac{1}{2} C_d \rho_f \frac{\pi d_p^2}{4} (\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p)^2 \quad (\text{II.39})$$

Où le coefficient de traînée C_d est connu de façon empirique pour des écoulements à haut Reynolds, parfois appelé régime de Newton :

$$C_d = 0.44, \quad \mathcal{Re}_p > 1000 \quad (\text{II.40})$$

Ainsi, en utilisant le formalisme de normalisation présenté dans l'équation (II.37), la force de traînée normalisée sur une particule isolée peut être ré-écrite en faisant apparaître ce coefficient de traînée :

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(1, \mathcal{Re}_p) &= \frac{\mathbf{f}_d}{3\pi\mu_f d_p \mathbf{U}} \\ &= \frac{C_d \rho_f \mathbf{U} d_p}{24\mu_f} \\ &= \frac{C_d \mathcal{Re}_p}{24} \end{aligned} \quad (\text{II.41})$$

Ci-après, nous donnons tout d'abord quelques précisions sur le coefficient de traînée, puis nous détaillons les deux catégories de formulation communément employées pour prendre en compte l'effet de la présence de particules voisines sur la force de traînée exercée sur une particule dans un fluide en mouvement : les formulations de type Wen & Yu et les formulations de type Ergun.

II – 2.3.2.a Coefficient de traînée

Pour un régime compris entre le régime de Stokes et le régime de Newton, parfois appelé régime de Allen ou régime de transition, la force de traînée exercée sur une particule isolée n'est pas une donnée facile d'accès. En effet, la couche limite autour d'une particule non-profilée se détachant périodiquement de chaque côté pour former des tourbillons dans le sillage (phénomène de lâché tourbillonnaire de Von Karman), le coefficient de traînée n'est pas évident à formuler. Comme le rappelle Di Felice [52], des propositions furent faites pour écrire le coefficient de traînée dans un régime de transition comme étant une fonction du C_D connue analytiquement dans un régime de Stokes, ($C_d = 24/\mathcal{Re}_p$) et empiriquement pour un régime inertiel ($C_D = 0.44$) :

$$C_D = \left(\left(\frac{24}{\mathcal{Re}_p} \right)^{1/\alpha} + 0.44^{1/\alpha} \right)^\alpha \quad (\text{II.42})$$

avec α approximativement égal à 2. Cette expression du coefficient de traînée est proche de celle proposée par Dallavalle [40] :

$$C_D = \left(0.63 + \frac{4.8}{\sqrt{\mathcal{Re}_p}} \right)^2 \quad (\text{II.43})$$

qui peut s'écrire sous la forme :

$$C_D = \left(\left(\frac{23.04}{\mathcal{Re}_p} \right)^{1/2} + 0.397^{1/2} \right)^2 \quad (\text{II.44})$$

En s'inspirant de Beetstra [12] et en utilisant le formalisme de l'équation (II.41), le tableau II.1 recense les autres expressions les plus communément rencontrées dans la littérature pour exprimer la force de traînée pour une particule isolée dans un régime de transition. à partir de $\mathbf{F}(1, \mathcal{Re}_p)$, le coefficient de traînée s'obtient bien sûr en réarrangeant l'équation (II.41). Ces différentes formulations de C_D sont tracées en fonction de \mathcal{Re}_p sur la figure II.5.

Remarque 5 Pour $\mathcal{Re}_p \approx \mathcal{O}(10^5)$, un saut est observé dans l'évolution de la force de traînée en fonction du Reynolds, cet intervalle de Reynolds est appelé transition critique. D'après les relevés expérimentaux, la force de traînée semble à nouveau augmenter linéairement en fonction du régime d'écoulement une fois cette zone de transition critique passée.

TABLE II.1 – Formulations de force de traînée rencontrées dans la littérature pour un régime de transition

Schiller & Nauman (1935) [197]	$\mathbf{F}(1, \mathcal{R}e_p) = \begin{cases} 1 + 0.15\mathcal{R}e_p^{0.687} \\ \frac{0.44}{24}\mathcal{R}e_p \end{cases}$
Dalla & Joseph (1948) [40]	$\mathbf{F}(1, \mathcal{R}e_p) = 1 + 0.2624\mathcal{R}e_p^{0.5} + \frac{0.413}{24}\mathcal{R}e_p$
White (1974) [226]	$\mathbf{F}(1, \mathcal{R}e_p) = 1 + \frac{0.25\mathcal{R}e_p^{0.5}}{1 + \mathcal{R}e_p^{-0.5}} + \frac{0.4}{24}\mathcal{R}e_p$
Turton & Levenspiel (1986) [214]	$\mathbf{F}(1, \mathcal{R}e_p) = 1 + 0.173\mathcal{R}e_p^{0.657} + \frac{0.413}{24} \left(\frac{\mathcal{R}e_p}{1 + 16300\mathcal{R}e_p^{-1.09}} \right)$

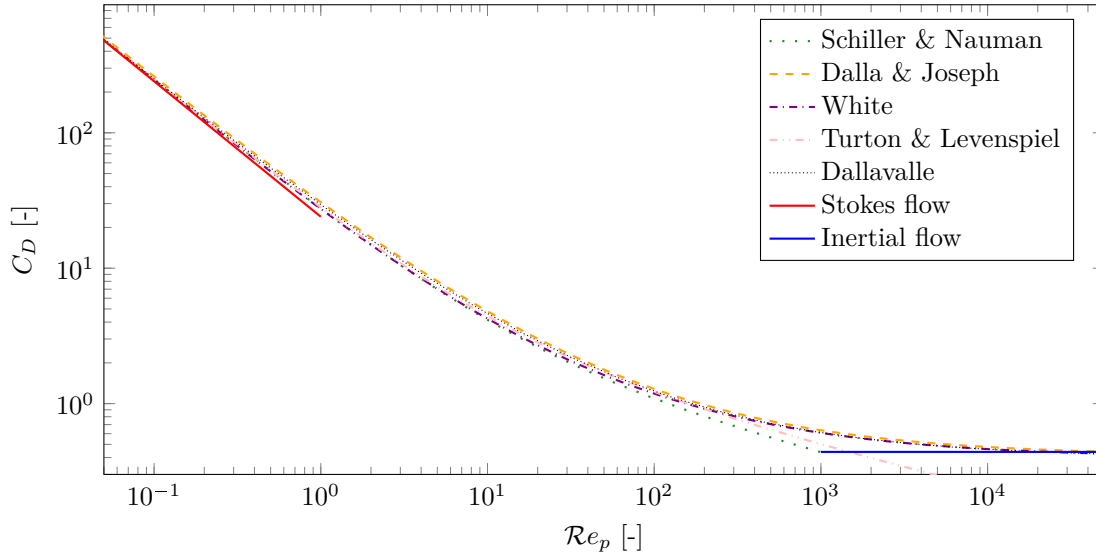


FIGURE II.5 – Evolution du coefficient de traînée en fonction du nombre de Reynolds pour une particule isolée dans un régime de transition

II – 2.3.2.b Formulation de type Wen & Yu

Pour les formulations de type “Wen & Yu”, la force de traînée s’exerçant sur une particule entourée d’autres particules est obtenue en multipliant la force de traînée sur un élément isolé par une puissance de la fraction volumique de fluide environnante afin de prendre en compte l’influence des particules voisines.

$$\mathbf{F}(\mathcal{E}_f, \mathcal{R}e_p) = \mathbf{F}(1, \mathcal{R}e_p) \mathcal{E}_f^{-\gamma} \quad (\text{II.45})$$

Pour des systèmes dilués, ce type d’approche offre une bonne approximation de la force de traînée pour tous les régimes d’écoulement car la force de traînée sur une particule isolée est connue pour différents Reynolds (voir paragraphe précédent). En revanche, ce genre de corrélation n’est généralement valable que pour des écoulements fluide-particules dilués et moyennement dilués ($\mathcal{E}_f > 0.8$).

Comme le résume Di Felice [52], le fait que γ soit presque constant pour des régimes de Stokes et inertiels a mené de nombreuses équipes travaillant sur le sujet à penser que ce coefficient était indépendant du nombre de Reynolds [225, 119, 120, 186]. Ainsi les valeurs proposées pour γ sont généralement comprises entre 3.6 et 3.8, comme par exemple la célèbre formulation de Wen & Yu [225] pour laquelle $\gamma = 3.7$. Puis les travaux de Khan & Richardson [118] mirent à mal cette hypothèse de γ constant, notamment dans des régimes d’écoulements intermédiaires. Cela fut ensuite confirmé par Di

Felice [51] qui proposa une expression de γ tenant compte du Reynolds particulière :

$$\gamma = 3.7 - 0.65 \exp \left[\frac{-(1.5 - \log \mathcal{R}e_p)^2}{2} \right] \quad (\text{II.46})$$

Notons que la combinaison des équations (II.45) et (II.46) est fréquemment employée pour décrire la force de traînée sur une particule pour une plage de \mathcal{E}_f allant du packing maximal à la particule isolée [87]. Plus de détails concernant l'extraction de lois de traînée sont donnés dans le chapitre VI.

II – 2.3.2.c Formulation de type Ergun

Les formulations que nous appelons de “type Ergun” sont basées sur l’étude du saut de pression à travers un milieu poreux et la contribution des effets visqueux et inertiels (voir §I – 3.1). Ainsi, la force de traînée normalisée peut s’écrire comme la somme d’un terme indépendant et d’un terme linéairement dépendant du nombre de Reynolds :

$$\mathbf{F}(\mathcal{E}_f, \mathcal{R}e_p) = \mathbf{F}(\mathcal{E}_f, 0) + \alpha(\mathcal{E}_f) \mathcal{R}e_p \quad (\text{II.47})$$

Comme nous l’avons vu précédemment, (§I – 3.1), les premières expressions proposées [15, 123, 25] furent de la forme :

$$\mathbf{F}(\mathcal{E}_f, 0) = \frac{a(1 - \mathcal{E}_f)}{18\mathcal{E}_f^2}, \quad \alpha(\mathcal{E}_f) = \frac{b}{18\mathcal{E}_f^2} \quad (\text{II.48})$$

Après 640 différentes expériences, Ergun [67] obtient $a = 150$ et $b = 1,75$, la combinaison de ces valeurs aux équations (II.47)-(II.48) est connue dans la littérature comme la corrélation d’Ergun. Plus tard, la différence fut faite entre différents régimes d’écoulement [72], en particulier :

$$\bullet \mathcal{R}e_p < 2.3 : \quad a = 192, \quad b = 0 \quad (\text{II.49})$$

$$\bullet 5 < \mathcal{R}e_p < 80 : \quad a = 182, \quad b = 1.92 \quad (\text{II.50})$$

$$\bullet 180 < \mathcal{R}e_p : \quad a = 225, \quad b = 1.61 \quad (\text{II.51})$$

Plus récemment, trois équipes [96, 218, 144] ont trouvé que, pour des lits denses à faible nombre de Reynolds, les meilleurs résultats étaient obtenus avec $a = 180$, ce qui correspond à l’équation de Carman [28]. Ergun [67] a quant à lui trouvé que la modification suivante de l’équation de Carman permettait d’obtenir de meilleures correspondances avec les expériences pour une valeur arbitraire de fraction volumique :

$$\mathbf{F}(\mathcal{E}_f, 0) = \frac{180(1 - \mathcal{E}_f)}{18\mathcal{E}_f^2} + \mathcal{E}_f^2(1 + 1.5\sqrt{1 - \mathcal{E}_f}) \quad (\text{II.52})$$

Koch, Hill and Ladd [96] ont, pour une plage de $\mathcal{R}e_p$ allant de 40 à 120, suggéré une expression de $\alpha(\mathcal{E}_f)$ de la forme :

$$\alpha(\mathcal{E}_f) = 0.03365\mathcal{E}_f + 0.106(1 - \mathcal{E}_f)\mathcal{E}_f + \frac{0.0116}{\mathcal{E}_f^4} \quad (\text{II.53})$$

Ce qui a servi de base à Beetstra [12], qui trouva de meilleurs résultats pour $\mathcal{R}e_p < 200$ en ajoutant un terme à l’équation (II.53) :

$$\alpha(\mathcal{E}_f) = 0.03365\mathcal{E}_f + 0.106(1 - \mathcal{E}_f)\mathcal{E}_f + \frac{0.0116}{\mathcal{E}_f^4} + \frac{6(1 - \mathcal{E}_f) - 10(1 - \mathcal{E}_f)^2}{\mathcal{E}_f^2 \mathcal{R}e_p} \quad (\text{II.54})$$

Cette même équipe [12] proposa une autre formulation pour une plage de porosité de $0.4 < \mathcal{E}_f < 0.9$ et de Reynolds $20 < \mathcal{R}e_p < 1000$. Celle ci est basée sur l’équation (II.52) et sur des constantes introduites par Turton et Levenspiel [214] :

$$\mathbf{F}(\mathcal{E}_f, \mathcal{R}e_p) = \frac{10(1 - \mathcal{E}_f)}{\mathcal{E}_f^2} + \mathcal{E}_f^2 \left(1 + 1.5\sqrt{1 - \mathcal{E}_f} \right) + \frac{0.413\mathcal{R}e_p}{24\mathcal{E}_f^2} \left[\frac{\mathcal{E}_f^{-1} + 3\mathcal{E}_f(1 - \mathcal{E}_f) + 8.4\mathcal{R}e_p^{-0.343}}{1 + 10^{3(1 - \mathcal{E}_f)} \mathcal{R}e_p^{-(1 + 4(1 - \mathcal{E}_f))/2}} \right] \quad (\text{II.55})$$

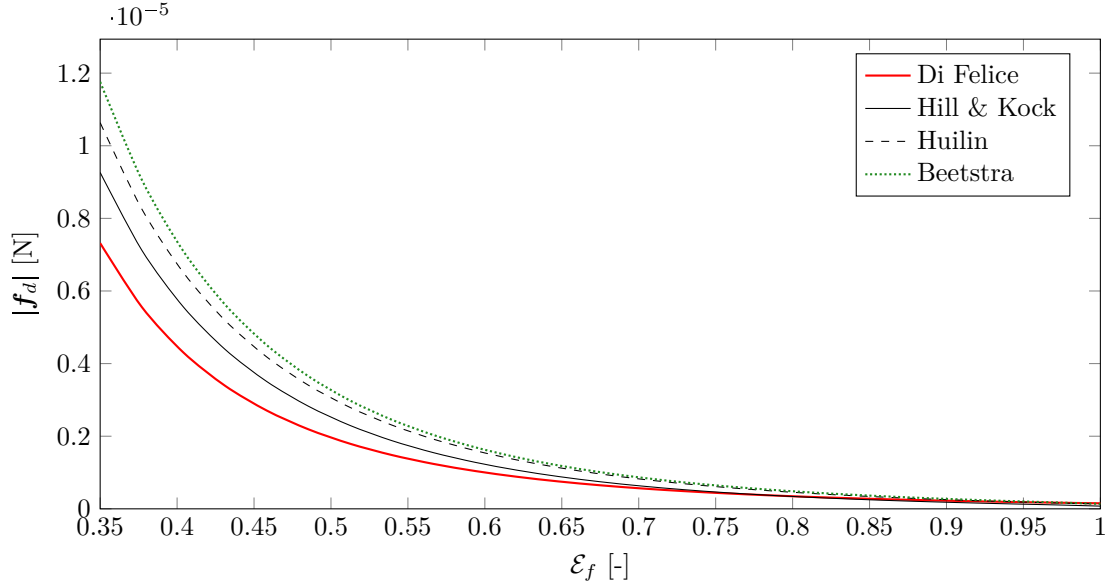


FIGURE II.6 – Evolution de la force de traînée en fonction de la fraction volumique de fluide \mathcal{E}_f

Ces différentes formulations de la force de traînée sont tracées sur la figure II.6 en fonction de \mathcal{E}_f afin de montrer les écarts non négligeables entre elles.

Ce tracé met également en évidence les fortes variations de la force de traînée en fonction de \mathcal{E}_f pour des compacités proches du packing maximal. En effet, la valeur de $|\mathbf{f}_d|$ varie du simple au double, voir même du simple au triple suivant les formulations, pour $0.35 < \mathcal{E}_f < 0.45$. Cela met en évidence la nécessité de calculer la fraction volumique du lit avec précision afin que la force de traînée appliquée aux particules soit la plus proche possible de la réalité. Or, comme nous le présentons en partie II – 2.4, les différentes méthodes de calcul de la fraction volumique de fluide dans le domaine peuvent mener à de larges écarts une fois la valeur \mathcal{E}_f interpolée au centre de gravité de la particule.

II – 2.3.2.d Commentaires sur les forces de traînée

Tout d'abord, en réutilisant la notion de coefficient d'échange de quantité de mouvement introduit dans le chapitre précédent (voir équation (I.23)) la force de traînée non normalisée peut s'écrire :

$$\mathbf{f}_d = V_p \frac{\beta}{1 - \mathcal{E}_f} (\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p) \quad (\text{II.56})$$

Rappelons que dans le cas de la corrélation d'Ergun, nous avons :

$$\beta_{Ergun} = 150 \frac{(1 - \mathcal{E}_f)^2 \mu_f}{\mathcal{E}_f d_p^2} + 1.75 \frac{(1 - \mathcal{E}_f) \rho_f |\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p|}{d_p} \quad (\text{II.57})$$

Dans le cas de la corrélation de Wen & Yu en revanche, le coefficient d'échange de quantité de mouvement s'écrit :

$$\beta_{Wen\&Yu} = \frac{3}{4} \frac{C_d \rho_f \mathcal{E}_f (1 - \mathcal{E}_f) |\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p|}{d_p} \mathcal{E}_f^{-2.7} \quad (\text{II.58})$$

Ensuite, Il est important de remarquer que ces deux types de corrélation ne permettent pas de simuler les mêmes systèmes. Les relations de type Wen & Yu (II.45) sont valides pour des systèmes dilués tandis que les relations de type Ergun (II.47) conviennent mieux aux systèmes denses. Ainsi, Gidaspow [87] proposa d'utiliser les relations de type Wen & Yu lorsque $\mathcal{E}_f > 0.8$ et les relations de type Ergun si la densité de particules est plus élevée. L'utilisation d'une telle loi de traînée entraîne quelques inconvénients, en effet cela implique une discontinuité en $\mathcal{E}_f = 0.8$, de plus la validité des corrélations de type Ergun n'est pas avérée pour des porosités aussi élevées que $\mathcal{E}_f = 0.8$. Pour améliorer

la transition entre les corrélations de type Ergun et Wen & Yu, Huillin & Gidaspow [107] ont introduit une fonction de lissage entre les deux corrélations :

$$\varphi_{gs} = \frac{\arctan[150 * 1.75(0.2 - (1 - \mathcal{E}_f))]}{\pi} + 0.5 \quad (\text{II.59})$$

Le coefficient d'échange de quantité de mouvement devient alors :

$$\beta_{\text{Huillin}} = (1 - \varphi_{gs})\beta_{\text{Ergun}} + \varphi_{gs}\beta_{\text{Wen\&Yu}} \quad (\text{II.60})$$

II – 2.3.2.e Effet de la polydispersité

L'approche la plus communément rencontrée pour modéliser de larges systèmes polydispersés consiste à considérer une particule d'une espèce i de diamètre d_i comme faisant partie d'un système monodisperse de porosité globale équivalente, sans se soucier des particules des autres espèces (voir par exemple [87, 103]). Ce type d'approximation peut mener à de grandes différences sur l'évaluation de la force de traînée. Par exemple, Beetstra *et al.* [14] ont obtenu un rapport de 5 entre les corrélations de force de traînée utilisant la compacité globale équivalente et les forces de traînée obtenues par DNS lattice-Boltzmann pour des rapports de diamètre de 1 : 4.

Des approches plus détaillées ont également été proposées, par exemple Patwardhan & Tien [170] se sont basés sur le rapport de la taille des pores sur le diamètre des particules afin d'introduire la notion de fraction volumique effective pour chacune des espèces de particule. L'idée émane du fait que, dans le cas d'une configuration bidisperse par exemple, les petites (grandes) particules sont comprises dans un milieu d'une plus grande (petite) porosité car les pores qui les entourent sont plus grandes (petites) que leur diamètre. Pour cela, chaque classe de particule est caractérisée par son diamètre et son nombre de particules. La polydispersité peut ainsi être exprimée à l'aide des nombres adimensionnels x_i et y_i qui contiennent la même information :

$$x_i = \frac{\phi_i}{\phi}, \quad y_i = \frac{d_i}{\langle d \rangle} \quad (\text{II.61})$$

Où $\phi_i = N_i \pi d_i^3 / 6V$ est la concentration de l'espèce i , et $\langle d \rangle$ est le diamètre moyen de Sauter, définit par :

$$\langle d \rangle = \frac{\sum_{i=1}^c N_i d_i^3}{\sum_{i=1}^c N_i d_i^2} \quad (\text{II.62})$$

Où c est le nombre d'espèces présentes dans le système et le nombre adimensionnel y_i est appelé indice de polydispersité.

En se basant sur l'approximation de Carman-Kozeny et sur des simulations LBM, Van Der Hoef *et al.* proposèrent une nouvelle expression pour de faibles nombres de Reynolds [218, 14] puis pour des Reynolds plus élevés [12, 13] avec des rapports de diamètres allant jusqu'à 1 : 4 :

$$\mathbf{f}_{\text{drag},i}^{\text{poly}} = ((1 - \phi)y_i + \phi y_i^2 + 0.064(1 - \phi)y_i^3) \mathbf{f}_{\text{drag},i}^{\text{mono}} \quad (\text{II.63})$$

Notons que l'introduction de puissances 2 et 3 de l'indice de polydispersité a également été proposée par Okayama *et al.* [164] sur la base de comparaison expérimentale avec un lit fluidisé bidisperse. Cello, Di Renzo & Di Maio [29] ont récemment proposé un modèle semi-empirique de force de traînée pour des systèmes polydispersés.

$$\mathbf{f}_{\text{drag},i}^{\text{poly}} = 3\pi\mu_f d_i (\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p) \alpha_i \bar{f} \quad (\text{II.64})$$

Avec :

$$\begin{aligned}\bar{f} &= K_1 + K_2 \mathcal{E}_f^4 + K_3 (1 - \mathcal{E}_f^4) \\ K_0 &= \frac{1 - \mathcal{E}_f}{1 + 3\mathcal{E}_f}, \quad K_1 = \frac{1 + 128K_0 + 715K_0^2}{\mathcal{E}_f^2(1 + 49.5K_0)}, \\ K_2 &= \frac{1 + 0.13\overline{\mathcal{R}e_p} + 6.66 \times 10^{-4} \overline{\mathcal{R}e_p}^2}{1 + 3.42 \times 10^{-2} \overline{\mathcal{R}e_p} + 6.92 \times 10^{-6} \overline{\mathcal{R}e_p}^2} - 1, \\ K_3 &= \left(\frac{2\overline{\mathcal{R}e_p}^2}{1 + \overline{\mathcal{R}e_p}} \right) \left(\frac{-410\mathcal{E}_f + 9.2 \times 10^7 \overline{\mathcal{R}e_p} K_0^{20} + 1900\mathcal{E}_f^2 - 6.6 \times 10^{-2} \overline{\mathcal{R}e_p}}{6600\mathcal{E}_f + 4.92 \times 10^{-4} \overline{\mathcal{R}e_p} - 43000\mathcal{E}_f^2 - 1.31 \times 10^{-4} \overline{\mathcal{R}e_p}^2 + 7.38 \times 10^4 \mathcal{E}_f^3} \right), \\ \alpha_i &= y_i + \frac{1 - \mathcal{E}_f}{\mathcal{E}_f} \left(\frac{1 - \mathcal{E}_f - 0.27}{1 - 0.27} \right) \frac{y_i^2 - y_i}{\sum_{j=1}^{N_c} x_j y_j}\end{aligned}$$

Où N_c est le nombre de classes de particule dans le système et $\overline{\mathcal{R}e_p}$ est le nombre de Reynolds particulaire calculé à l'aide du diamètre de Sauter :

$$\overline{\mathcal{R}e_p} = \frac{\rho_f \langle d \rangle \mathcal{E}_f (\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p)}{\mu_f} \quad (\text{II.65})$$

Cette formulation fut validée sur une large plage de nombre de Reynolds et de concentration de particules grâce à des résultats expérimentaux et des résultats de simulations LBM réalisées par Van Der Hoef *et al.* [218]. Di Renzo *et al.* [55] étudièrent les phénomènes d'inversion et de ségrégation de classe à l'aide de cette précédente formulation implémentée dans leur modèle DEM-CFD. Ils reproduirent numériquement les expériences de Epstein & LeClair [64], Moritomi *et al.* [157] et Matsuura & Akehata [149] afin de valider leur modèle. A partir de ces simulations, ils analysèrent de façon assez fine l'évolution du front de séparation entre les deux classes de particule en fonction de la vitesse d'injection dans le domaine, tout comme l'avaient précédemment fait Moritomi *et al.* [157] de façon expérimentale.

II – 2.3.3 Force de masse ajoutée

La force de masse ajoutée, également appelée force de masse virtuelle ou force de masse apparente, est une action liant l'accélération du fluide à la force résultante sur l'objet. Tout corps accélérant dans un fluide est soumis à une force de masse ajoutée, mais comme celle-ci dépend de la densité du fluide, son effet est souvent négligé lorsque la densité de l'objet est nettement plus grande que celle du fluide. En revanche, lorsque les densités sont proches, et encore plus lorsque la densité de l'objet est plus faible que celle du fluide, le terme de masse ajoutée peut être plus grand que la masse physique de l'objet.

Un objet et le fluide environnant ne pouvant pas occuper le même espace, lorsque le solide se déplace, il entraîne avec lui le fluide qui l'entoure. Soit $\sum \mathbf{F}$ la somme des forces exercées sur une particule exceptée la force de masse ajoutée, le déplacement d'une particule est alors décrit par :

$$m_p \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = \sum \mathbf{F} + C_{vm} \rho_f V_p \left(\frac{d\mathbf{u}_f}{dt} - \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} \right) + \rho_f V_p \frac{d\mathbf{u}_f}{dt} \quad (\text{II.66})$$

Cette expression fait apparaître le terme de masse ajoutée que l'on peut passer devant le terme d'accélération de la particule. L'équation précédente peut ainsi se ré-écrire, en remplaçant la dérivée totale du fluide en description lagrangienne :

$$(m_p + C_{vm} \rho_f V_p) \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = \sum \mathbf{F} + (1 + C_{vm}) \rho_f V_p \left(\frac{\partial \mathbf{u}_f}{\partial t} + \mathbf{u}_f \nabla \mathbf{u}_f \right) \quad (\text{II.67})$$

Où C_{vm} est le coefficient de masse ajoutée. Oldar & Hamilton [161, 160] proposèrent une expression de C_{vm} dépendant de l'accélération :

$$C_{vm} = \frac{1}{2} \left(2.1 - \frac{0.132}{0.12 + A_c^2} \right) \quad (\text{II.68})$$

avec A_c le nombre d'accélération :

$$A_c = \frac{(\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p)^2}{d_p \left| \frac{d\mathbf{u}_f}{dt} - \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} \right|} \quad (\text{II.69})$$

Plus récemment, Michaelides et Roig [154] suggérèrent que le coefficient de masse ajoutée ne dépend pas de l'accélération relative de la particule mais uniquement de la géométrie de l'objet immergé. Pour une sphère, ils proposèrent ainsi :

$$C_{vm} = \frac{1}{2} \quad (\text{II.70})$$

A l'heure actuelle, cette force n'est pas prise en compte dans le modèle DEM-CFD implémenté, ce qui contraint l'étude à des systèmes composés de particules dont la densité est au moins un ordre de grandeur plus importante que la densité du fluide.

II – 2.3.4 Force de Basset

La force de Basset décrit la résistance engendrée par la couche limite d'un corps immergé dans un fluide lorsqu'il ralentit ou accélère. Ce terme, qui modélise les effets visqueux, représente le retard dans l'établissement de la couche limite lorsque la vitesse de l'objet change dans le temps. Cette force, également appelée force d'histoire ou force de Boussinesq-Basset, se présente sous la forme suivante à petit \mathcal{Re}_p [182, 153, 245] :

$$\mathbf{F}_{\text{Basset}} = \frac{3}{2} d_p^2 \sqrt{\pi \rho_f \mu_f} \left[\int_0^t \frac{\frac{d\mathbf{u}_f}{dt} - \frac{d\mathbf{v}_p}{dt}}{\sqrt{t-t'}} dt' + \frac{(\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p)_0}{\sqrt{t}} \right] \quad (\text{II.71})$$

Où $(\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p)_0$ est la différence des vitesses initiales.

Comme le mentionnent Hjelmfel & Mockros [98] la force de Basset devient négligeable pour de grands rapports de densité solide / fluide. Dans cette étude, la force de Basset n'est pas prise en compte dans le bilan de quantité de mouvement.

II – 2.3.5 Force de portance

La force de portance s'exerçant sur une particule est due aux contraintes exercées par le gradient de vitesse du fluide sur la surface de l'objet. Elle est couramment décomposée en deux forces, celle de Saffman, \mathbf{f}_{LS} , et celle de Magnus, \mathbf{f}_{LM} .

$$\mathbf{f}_{\text{Lift}} = \mathbf{f}_{LS} + \mathbf{f}_{LM} \quad (\text{II.72})$$

II – 2.3.5.a Force de Saffman

La force de Saffman est générée par la distribution de pression engendrée par le gradient de vitesse du fluide. Elle fut initialement mise en évidence et formulée par Saffman [191, 192] pour de faibles nombres de Reynolds et de faibles taux de cisaillement :

$$\mathbf{F}_{LS} = 1.615 \sqrt{\rho_f \mu_f} d_p^2 (\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p) \sqrt{\left| \frac{d\mathbf{U}}{dy} \right|} \text{sign} \left(\frac{d\mathbf{u}_f}{dy} \right), \quad \mathcal{Re}_p \ll 1 \quad (\text{II.73})$$

avec les conditions restrictives sur le Reynolds de cisaillement pour un fluide s'écoulant dans un espace à deux dimensions et donc pour un cisaillement dans une seule direction :

$$\mathcal{Re}_S = \frac{\rho_f d_p^2 G}{\mu_f} \ll 1, \quad \text{Où} \quad G = \left| \frac{d\mathbf{u}_f}{dy} \right| \text{ est le taux de cisaillement} \quad (\text{II.74})$$

et

$$\mathcal{Re}_p \ll \sqrt{\mathcal{Re}_G} \quad \text{où} \quad \lambda = \frac{\sqrt{\mathcal{Re}_G}}{\mathcal{Re}_p} \gg 1 \quad (\text{II.75})$$

Dandy & Dwyer [42] ont trouvé que l'expression proposée par Saffman était valide pour des Reynolds plus grands, jusqu'à $\mathcal{Re}_p = 0.1$, et des λ plus petits, jusqu'à $\lambda = 0.224$. McLaughlin [151] trouva quant à lui que la force de portance diminuait rapidement lorsque λ diminuait. En se basant sur ces études, Mei [152] proposa une corrélation valable pour des Reynolds allant jusqu'à $\mathcal{Re}_p = 100$ et une plus large plage de λ :

$$\mathbf{F}_{LS} = 1.615 d_p^2 \sqrt{\frac{\rho_f \mu_f}{|\boldsymbol{\omega}_f|}} C_{LS} (\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p) \times \boldsymbol{\omega}_f \quad (\text{II.76})$$

Avec la rotation du fluide donnée par $\boldsymbol{\omega}_f = 0.5 \nabla \times \mathbf{u}_f$ et C_{LS} le coefficient de portance de Saffman :

$$C_{LS} = (1 - 0.3314 \sqrt{\alpha}) \exp\left(-\frac{\mathcal{Re}_p}{10}\right) + 0.3314 \sqrt{\alpha}, \quad \mathcal{Re}_p \leq 40 \quad (\text{II.77})$$

$$= 0.0524 \sqrt{\alpha \mathcal{Re}_p}, \quad \mathcal{Re}_p > 40 \quad (\text{II.78})$$

Où le coefficient α est donné par :

$$\alpha = \frac{1}{2} \frac{\mathcal{Re}_S}{\mathcal{Re}_p} \quad (\text{II.79})$$

Et où le Reynolds de cisaillement, cette fois-ci en trois dimensions, est :

$$\mathcal{Re}_S = \frac{\rho_f d_p^2 |\boldsymbol{\omega}_f|}{\mu_f} \quad (\text{II.80})$$

II – 2.3.5.b Force de Magnus

La force de Magnus [143] est engendrée par le différentiel de pression sur la surface de la particule résultant du différentiel de vitesse de rotation. Cette force est donc nulle si la rotation de la particule est égale à la rotation locale du fluide. Son expression est :

$$F_{LM} = \frac{1}{2} \frac{\pi d_p^2}{4} \rho_f C_{LM} |\mathbf{u}_{rel}| \frac{\mathbf{u}_{rel} \times \boldsymbol{\omega}_{rel}}{|\boldsymbol{\omega}_{rel}|} \quad (\text{II.81})$$

Où $\boldsymbol{\omega}_{rel}$ représente la rotation relative :

$$\boldsymbol{\omega}_{rel} = \boldsymbol{\omega}_f - \boldsymbol{\omega}_p \quad (\text{II.82})$$

$$= (0.5 \nabla \times \mathbf{u}_f) - \boldsymbol{\omega}_p \quad (\text{II.83})$$

Et où le coefficient de portance de Magnus C_{LM} est connu analytiquement pour de faibles nombres de Reynolds suite aux travaux de Rubinow & Keller [190] pour une sphère en rotation dans un fluide au repos avec $\mathcal{Re}_p < 1$. Puis la relation de Rubinow & Keller fut améliorée par Crowe [38] pour inclure le déplacement relatif de la particule par rapport au fluide, toujours pour de petits Reynolds :

$$C_{LM} = \frac{\mathcal{Re}_R}{\mathcal{Re}_p} = \frac{d_p |\boldsymbol{\omega}_{rel}|}{|\mathbf{u}_{rel}|}, \quad \mathcal{Re}_p < 1 \quad (\text{II.84})$$

Avec le nombre de Reynolds de la particule en rotation :

$$\mathcal{Re}_R = \frac{\rho_f d_p^2 |\boldsymbol{\omega}_{rel}|}{\mu_f} \quad (\text{II.85})$$

La détermination d'un coefficient de portance pour des \mathcal{Re}_p plus grands nécessite des informations expérimentales. Par exemple, Oesterlé *et al.* [163] ont mesuré la portance de Magnus sur une sphère en rotation pour $10 < \mathcal{Re}_p < 60$ et ont proposé l'expression :

$$C_{LM} = (0.35 \pm 0.1) \frac{d_p |\boldsymbol{\omega}_p|}{|\mathbf{v}_p|} \quad (\text{II.86})$$

Puis ils ont introduit la corrélation suivante basée sur des données disponibles dans la littérature ainsi que des expériences additionnelles pour $\mathcal{Re}_p < 140$ et en prenant en compte le déplacement relatif de la particule par rapport au fluide [162] :

$$C_{LM} = 0.45 + \left(\frac{\mathcal{Re}_R}{\mathcal{Re}_p} - 0.45 \right) \exp(-0.05684 \mathcal{Re}_R^{0.4} \mathcal{Re}_p^{0.3}), \quad \mathcal{Re}_p < 140 \quad (\text{II.87})$$

Tsuji [212] proposèrent eux aussi une expression du coefficient de portance suite à leurs expériences pour $550 < \mathcal{Re}_p < 1600$

$$C_{LM} = (0.2 \pm 0.05) \frac{d_p |\boldsymbol{\omega}_p|}{|\mathbf{v}_p|} \quad (\text{II.88})$$

Notons également les travaux de Lun & liu [142] qui proposèrent une corrélation valable pour une plus large plage de Reynolds :

$$C_{LM} = \frac{d_p |\boldsymbol{\omega}_p|}{|\mathbf{v}_p|}, \quad \mathcal{Re}_p \leq 1 \quad (\text{II.89})$$

$$= \frac{d_p |\boldsymbol{\omega}_p|}{|\mathbf{v}_p|} (0.178 + 0.822 \mathcal{Re}_p^{-0.522}), \quad 1 < \mathcal{Re}_p < 1000 \quad (\text{II.90})$$

Remarque 6 *Les forces de Saffman et de Magnus ont été implémentées dans le modèle DEM-CFD et leur effet sur la dynamique globale semble peu significatif. De plus, étant donné que ces corrélations furent toutes deux initialement obtenues pour des particules isolées, et que leur validité n'a jamais été prouvée pour des systèmes denses, nous préférons ne pas utiliser ces termes.*

II – 2.3.6 Moment hydrodynamique

Une particule en rotation dans un fluide est soumise à un couple hydrodynamique provenant des interactions visqueuses entre la surface de la particule et le fluide qui l'entoure. Ce moment hydrodynamique fut d'abord dérivé par Lamb [129] puis Rubinow & Keller [190] dans le cas d'un fluide au repos et d'un faible nombre de Reynolds. Puis les travaux numériques de Dennis *et al.* [47], basés sur les relevés expérimentaux de Sawatski [193] ont permis d'étendre cette expression à de plus grands nombres de Reynolds. Ainsi, pour une sphère en rotation dans un fluide en mouvement, le moment hydrodynamique est :

$$\mathbf{T} = \frac{\rho_f d_p^5}{64} C_R |\boldsymbol{\omega}_{\text{rel}}| \boldsymbol{\omega}_{\text{rel}} \quad (\text{II.91})$$

Avec C_R le coefficient de rotation :

$$C_R = \frac{64\pi}{\mathcal{Re}_R}, \quad \mathcal{Re}_R < 32 \quad (\text{II.92})$$

$$= \frac{12.9}{\sqrt{\mathcal{Re}_R}} + \frac{128.4}{\mathcal{Re}_R}, \quad 32 \leq \mathcal{Re}_R < 1000 \quad (\text{II.93})$$

$$(\text{II.94})$$

Où $\boldsymbol{\omega}_{\text{rel}}$ est la vitesse de rotation relative, voir eq (II.82).

Remarque 7 *De la même manière que les forces de Saffman et de Magnus, le moment hydrodynamique a été implémenté dans le modèle mais la validité de l'équation (II.91) est discutable étant donné la configuration diluée dans laquelle a été dérivée la corrélation. De même, son effet sur la dynamique globale du système reste peu significatif.*

II – 2.3.7 Bilan de l'action du fluide sur les particules

Pour résumer, l'action du fluide prise en compte dans le modèle DEM-CFD se limite à la force de traînée et à la poussée d'Archimède. Ainsi, l'équation (II.35) s'écrit :

$$\mathbf{f}_{fp}^B = -V_p \rho_f \mathbf{g} + \mathbf{f}_d + \cancel{\mathbf{f}_{\text{Lift}}} + \cancel{\mathbf{f}_{\text{Basset}}} + \cancel{\mathbf{f}_{\text{VM}}} \quad (\text{II.95})$$

En effet, l'expression de la poussée d'Archimède est toujours la même, quelque soit la concentration de particules environnante. La force de traînée s'exerçant sur une particule est quant à elle bien décrite pour des concentrations allant de la particule isolée au packing maximum, et pour des écoulements allant du régime de Stokes au régime inertiel. De plus, dans les configurations étudiées, la force de traînée est majoritairement dans le sens contraire du poids des particules, elle constitue donc la principale force hydrodynamique engendrant la fluidisation du lit.

Les autres forces hydrodynamiques ne sont quant à elles pas prises en compte ou pas “activées” dans le modèle implémenté. En effet, il est communément admis [98] que les forces de Basset et de masse ajoutée sont négligeable par rapport à la force de traînée pour des rapports de densité solide / fluide importants. Or comme les systèmes étudiés ici sont composés de particules de densité $\rho_p \geq 1500 \text{ kg.m}^{-3}$ majoritairement fluidisées par de l’air, ces forces peuvent ainsi être négligées. Néanmoins, nous reconnaissons qu’il serait intéressant de prendre en compte le terme de masse ajoutée pour pouvoir simuler des systèmes avec de faibles rapports ρ_p/ρ_f .

Concernant les forces de portance de Saffman et de Magnus, la validité des expressions présentées précédemment n’est assurée que dans le cas de particules isolées. A notre connaissance, aucune corrélation n’a été proposée pour prendre en compte l’effet des particules voisines, de même qu’aucun résultat ne permet d’affirmer que les expressions décrivant \mathbf{f}_{Lift} pour des particules isolées sont valables pour des concentration plus élevées. C’est pourquoi, même si ces termes sont désormais implémentés dans la plateforme PeliGRIFF, nous préférons ne pas les prendre en compte dans le bilan des forces agissant sur les particules. Le terme représentant le moment hydrodynamique n’est lui non plus pas “activé” dans le modèle pour les mêmes raisons.

II – 2.4 Calcul de la fraction volumique

La fraction volumique de fluide \mathcal{E}_f , également appelé porosité, est le complément à 1 de la densité de particules ϕ . Elle s’obtient de la façon suivante :

$$\mathcal{E}_f = 1 - \phi \quad (\text{II.96})$$

$$= 1 - \frac{1}{V_{c,j}} \sum_{i=0}^{N_p} \theta_{i,j} V_{p,i} \quad (\text{II.97})$$

Où $\theta_{i,j}$ est la portion du volume de la particule i présent dans le volume de contrôle j . Le calcul de cette grandeur est un point important dans le couplage entre les phases continue et dispersée car la fraction volumique de fluide environnant une particule influe beaucoup sur la valeur de la force de traînée comme le montre la figure II.6. De plus, le calcul de cette valeur impose des contraintes sur la taille des mailles du domaine fluide. En effet, afin de modéliser le plus précisément possible le comportement du fluide dans le domaine, il est intéressant d’avoir un maillage fluide précis. Mais la taille des mailles fluide ne peut pas être trop petite car si le calcul de la fraction volumique est exact une maille fluide ne peut pas être plus petite qu’une particule ($\Delta x \geq d_p$) car le cas contraire engendrerait des valeurs de \mathcal{E}_f trop faibles (allant jusqu’à zéro) pour lesquelles les formulations de force de traînée ne sont pas valables. Néanmoins, le troisième paragraphe ci-dessous décrira la prise de moyenne spatiale qui peut permettre l’utilisation d’une grille plus fine. Mais avant cela, nous présentons ci-dessous des méthodes de calcul de \mathcal{E}_f pour des configurations où les volumes de contrôle correspondent à la grille principale du fluide.

II – 2.4.1 Deux dimensions

Dans le cas d’un système en dimension 2 (2D), le calcul de la fraction volumique de fluide dans une cellule est relativement aisé. Néanmoins, les valeurs obtenues ne sont pas les mêmes que pour un système en dimension 3 (3D), que se soit expérimentalement ou numériquement. Or, les lois de traînée présentées précédemment (voir §II – 2.3.2) furent dérivées à partir de systèmes 3D, une correction nécessite donc d’être apportée pour obtenir par exemple les mêmes vitesses minimales de fluidisation.

II – 2.4.1.a Calcul

En deux dimensions, que la particule soit à cheval sur 2 ou sur 4 cellules, la valeur exacte de \mathcal{E}_f peut facilement être calculée à l’aide de principes géométriques élémentaires. Dans un cercle de rayon R , nous avons les angles suivants (voir figure II.7 pour la correspondance des notations) :

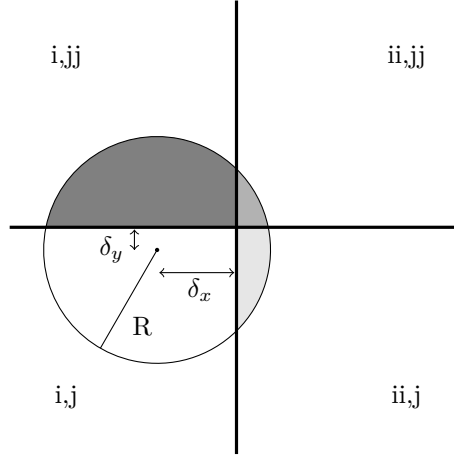


FIGURE II.7 – Calcul de la fraction volumique de fluide en 2D

$$\alpha = 2 \cos^{-1} \frac{\delta_x}{R} \quad (\text{II.98})$$

$$\beta = 2 \cos^{-1} \frac{\delta_y}{R} \quad (\text{II.99})$$

$$\gamma = 90 + \frac{180 - \alpha}{2} + \frac{180 - \beta}{2} \quad (\text{II.100})$$

A l'aide desquels nous pouvons calculer les surfaces suivantes :

$$A_{ii} = A_{ii,j} + A_{ii,jj} = \frac{R^2}{2} (\alpha - \sin \alpha) \quad (\text{II.101})$$

$$A_{jj} = A_{i,jj} + A_{ii,jj} = \frac{R^2}{2} (\beta - \sin \beta) \quad (\text{II.102})$$

$$A_{i,j} = \delta_x \delta_y + \frac{y \sqrt{R^2 - \delta_y^2}}{2} + \frac{x \sqrt{R^2 - \delta_x^2}}{2} + \pi R^2 \frac{\gamma}{2\pi} \quad (\text{II.103})$$

$$A_{ii,jj} = A_{ii} + A_{jj} + A_{i,j} - \pi R^2 \quad (\text{II.104})$$

II – 2.4.1.b Correction

La fraction volumique calculée de la façon présentée précédemment repose sur une analyse en deux dimensions tandis que les différentes corrélations utilisées pour approcher la force de traînée sont établies pour des systèmes 3D. Pour corriger cette incohérence, il est nécessaire de transformer la fraction volumique 2D (\mathcal{E}_f^{2D}) en fraction volumique 3D (\mathcal{E}_f^{3D}). Certains auteurs [211, 227, 115] considèrent le système 2D comme ayant une épaisseur égale à un diamètre de particule et multiplient donc la valeur 2D par d_p , ce qui revient à étudier des cylindres de facteur de forme unitaire. Le volume des particules est ainsi sur-évalué et la fraction volumique de fluide sous-évaluée, ce qui entraîne une mauvaise valeur de la force de traînée. D'autres ont proposé des méthodes basées sur l'agencement des particules lorsque le système est au packing maximum en 2D et en 3D. Ainsi, en comparant l'agencement hexagonal 2D à l'agencement Cubique à Faces Centrées (CFC) 3D, Hoomans *et al.* [102] ont proposé :

$$\mathcal{E}_f^{3D} = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi\sqrt{3}}} (1 - \mathcal{E}_f^{2D})^{3/2}, \quad (\text{II.105})$$

tandis que Ouyang et Li [166] se sont basés sur la différence entre la configuration hexagonale d'un empilement 2D et l'agencement hexagonal d'un empilement 3D. L'équation ainsi obtenue est proche de celle de Hoomans *et al.* :

$$\mathcal{E}_f^{3D} = 1 - \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi\sqrt{3}}} (1 - \mathcal{E}_f^{2D})^{3/2}, \quad (\text{II.106})$$

II – 2.4.2 Trois dimensions

Le calcul de la fraction volumique en trois dimensions est bien plus compliqué qu'en deux dimensions. En effet, lorsque la particule est à cheval sur un nœud du maillage par exemple, la proportion de particule présente dans chacun des 8 volumes de contrôle ne peut pas être obtenue par les mêmes principes trigonométriques triviaux qu'en deux dimensions. Différentes méthodes sont alors utilisées pour établir une valeur approchée de la fraction volumique.

II – 2.4.2.a Méthode du centre de gravité

La méthode la plus simple et la moins coûteuse en temps de calcul consiste à considérer la particule comme intégralement présente dans le volume de contrôle dès lors que le centre de gravité de la particule est géométriquement présent dans le volume de contrôle (voir figure II.8).

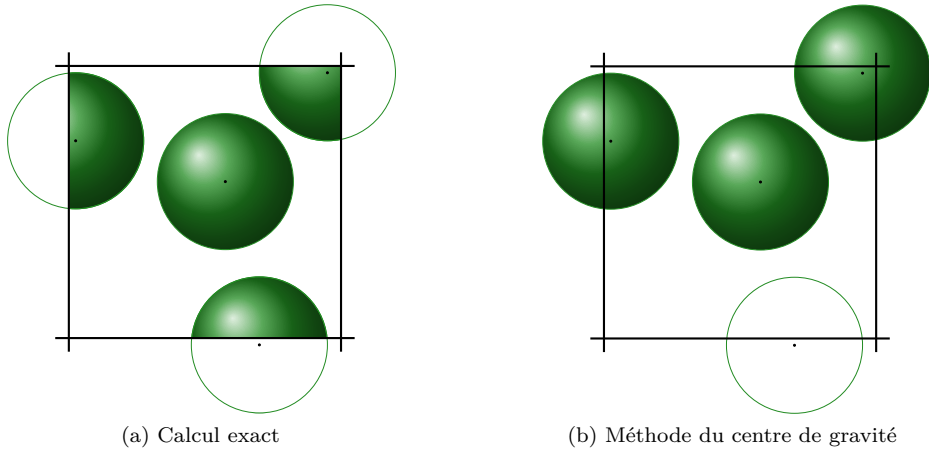


FIGURE II.8 – Différence entre (a) le calcul exact de \mathcal{E}_f et (b) la méthode du centre de gravité

L'emploi de cette méthode nécessite l'utilisation d'un grand rapport $\Delta x/d_p$ car l'erreur commise sur le calcul de \mathcal{E}_f est d'autant plus importante que ce rapport est proche de 1. En effet, la valeur \mathcal{E}_f peut être sur-estimée ou sous-estimée selon si le centre de gravité est proche de la surface du volume de contrôle, à l'intérieur ou à l'extérieur, respectivement (voir figure II.9). En pratique, les équipes

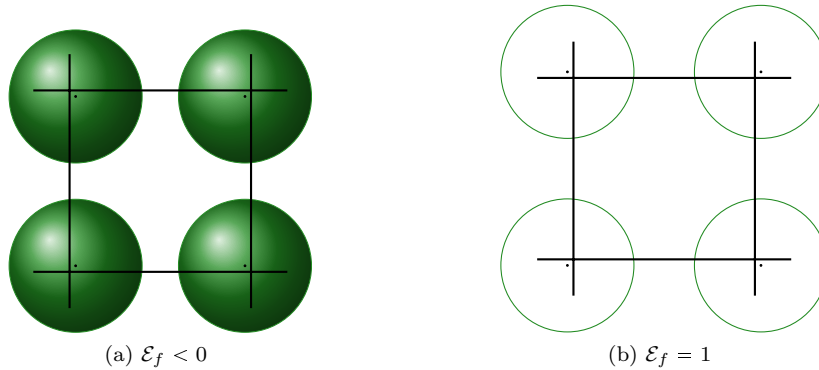


FIGURE II.9 – Exemples de configuration dans lesquelles la méthode du centre de gravité offre une mauvaise approximation de la fraction volumique de fluide

choisissent une taille de maille $\Delta x = 3d_p$ pour Tsuji *et al.* [211, 210, 209] par exemple, ou jusqu'à $\Delta x = 5d_p$ pour Hoomans *et al.* [102]. Cette méthode, qui fut la première implémentée dans cette étude, a permis de calculer \mathcal{E}_f de façon satisfaisante avec une taille de maille supérieure ou égale à $2.8d_p$. En

deçà de cette taille de maille, premièrement l'erreur commise devient importante et deuxièmement, la discontinuité en temps de \mathcal{E}_f dans une cellule lorsque des particules entrent ou sortent du volume de contrôle génère des instabilités numériques qui peuvent mener à l'arrêt de la simulation comme nous le présentons en partie III – 4.2. Or, l'emploi d'une grille fluide large entraîne, dans certains cas, une sous-résolution spatiale de la modélisation de l'écoulement fluide. D'autres méthodes furent alors proposées afin de tâcher de réduire la taille des mailles et ainsi de mieux modéliser la dynamique de l'écoulement.

II – 2.4.2.b Méthode de décalage de grille

Afin de réduire l'erreur commise lors de la prise en compte ou non d'une particule qui se trouve sur la limite intérieure ou extérieure d'un volume de contrôle, une méthode de décalage de grille (en anglais “offset method”) fut introduite. A notre connaissance, cette technique fut initialement proposée par Alobaid *et al.* [4]. Cette méthode consiste à réaliser plusieurs tests successifs sur l'appartenance ou non du centre de gravité d'une particule à un volume de contrôle, tout en décalant la grille dans chaque direction d'une distance de plus ou moins un rayon de particule (voir figure II.10). De la sorte, lorsqu'une particule est proche de la frontière d'un volume de contrôle, la contribution de son volume ne sera que partielle si elle n'est pas comprise dans chaque volume de contrôle décalé. Cette méthode n'a

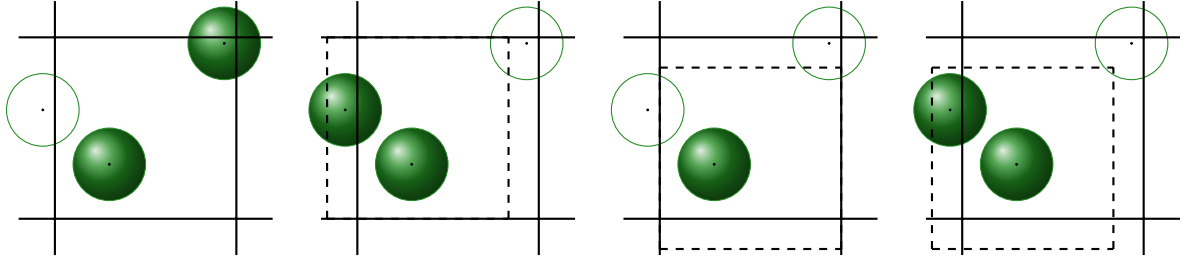


FIGURE II.10 – Illustration de la méthode de décalage de grille proposée par Alobaid *et al.* [4]

pas été implémentée car elle ne fait que réduire les discontinuités de \mathcal{E}_f en temps lorsqu'une particule entre ou sort d'un volume de contrôle. De plus, la multiplication des tests d'appartenance pour chacun des volumes de contrôle décalés augmente mécaniquement le temps de calcul du champ \mathcal{E}_f de façon significative.

II – 2.4.2.c Méthode des cubes englobants

La méthode de centre de gravité initialement implémentée (voir §II – 2.4.2.a) possède trois inconvénients non-négligeables. Tout d'abord, la nécessité d'avoir un rapport $\Delta x/d_p$ au moins égal à 2,8 implique que l'interpolation des variables du fluide au centre de gravité des particules ne sera pas très précise du fait de la taille des mailles par rapport à la taille des particules. Ensuite, ce fort rapport $\Delta x/d_p$ engendre une sous-résolution de l'écoulement fluide en raison du faible nombre de cellules présentes dans la grille fluide. Enfin, le fait que le volume d'une particule soit entièrement associé à une et une seule cellule fluide engendre des discontinuités en temps dès qu'une particule entre ou sort du volume de contrôle, ce qui provoque des oscillations numériques. Cet effet est en particulier dû à la résolution du terme instationnaire de l'équation de conservation (II.6a) et est détaillé en partie III – 4.2.

Une seconde approche fut implémentée au cours de cette thèse afin de contourner les problèmes de la méthode de centre de gravité présentés précédemment. Celle-ci consiste à considérer les particules comme étant des cubes (resp. carrés) au lieu de sphères (resp. disques) en 3D (resp. 2D) dont les dimensions sont les mêmes que le diamètre mais dont les volumes sont également rendus égaux à l'aide d'un coefficient $\pi/6$ (resp. $\pi/4$). Ainsi, lorsqu'une particule recouvre plusieurs cellules du maillage fluide, le volume de celle-ci est plus facilement attribuable aux cellules qui la détiennent (notamment dans le cas du recouvrement de 8 cellules en 3D).

Soit $\theta_{i,j}$ l'approximation de la fraction de la particule i appartenant au volume de contrôle j . Ce

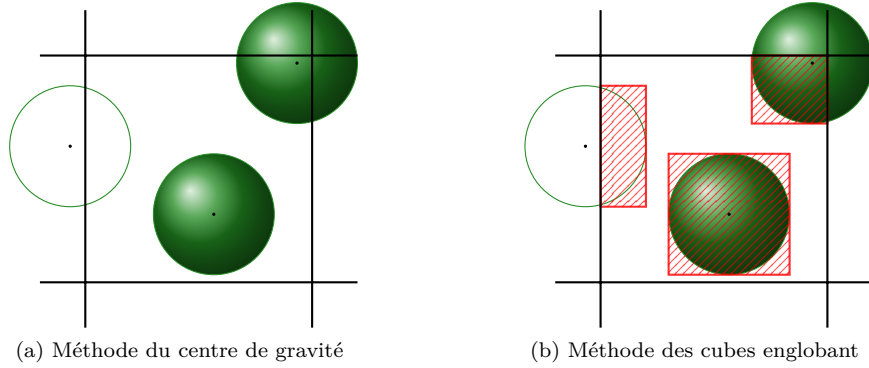


FIGURE II.11 – Illustration de la méthode des cubes englobants

coefficient est égale au rapport du volume du cube présent dans la cellule sur le volume total du cube :

$$\theta_{i,j} = \frac{V_{\text{intérieur}}}{V_{\text{total}}} \quad (\text{II.107})$$

La fraction volumique de fluide ainsi calculée est de la forme :

$$\mathcal{E}_{f,j} = 1 - \frac{1}{V_{c,j}} \sum_{i=0}^{N_p} \theta_{i,j} V_{p,i} \quad (\text{II.108})$$

De cette manière, la variation de la fraction volumique de fluide est lissée puisque le volume d'une particule entrant ou sortant dans un volume de contrôle est linéaire et proche de la variation réelle comme l'illustre la figure II.12.

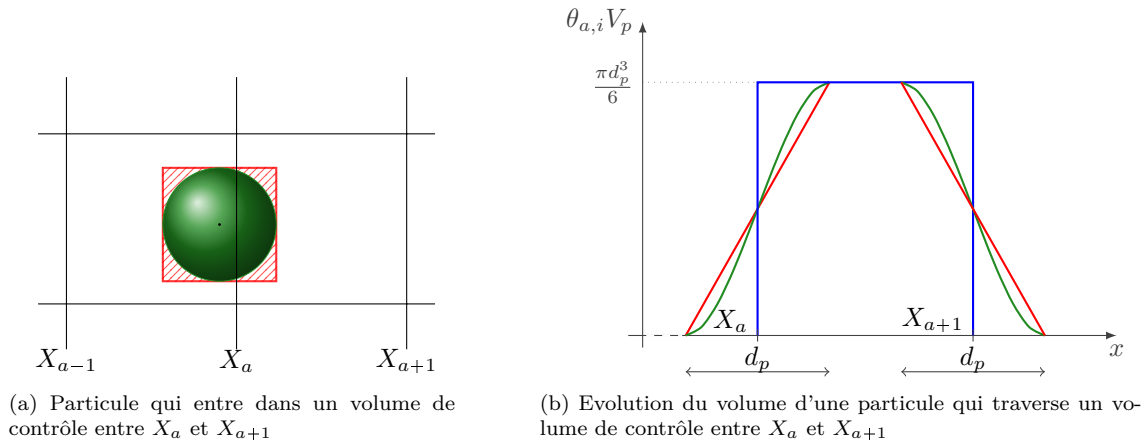


FIGURE II.12 – Variation de la prise en compte du volume d'une particule dans un volume de contrôle. En bleu, méthode du centre de gravité, en vert variation exacte, en rouge la méthode du cube englobant

D'une part, l'utilisation de cette nouvelle méthode par rapport à celle du centre de gravité fait disparaître les oscillations numériques lors de la résolution du problème de Stokes dégénéré car les variations temporelles du champ \mathcal{E}_f sont continues et non plus continues par morceaux (voir §III – 4.2). D'autre part, la méthode du cube englobant offre la possibilité d'utiliser des maillages plus fins, ce qui permet de modéliser plus finement l'écoulement fluide. Des simulations ont été réalisées avec des maillages dont le rapport $\Delta x/d_p$ est proche de l'unité sans souci numérique. En revanche, la prise de moyenne spatiale n'est alors pas satisfaite, il est donc nécessaire de réaliser un filtrage spatial des données, notamment lors du calcul du champ \mathcal{E}_f , ce qui est présenté dans la sous-partie suivante.

Remarque 8 *Il est important de mettre en évidence qu'avec les méthodes présentées précédemment, dans le cas d'une particule isolée par exemple, le calcul de la fraction volumique dans la cellule où se trouve la particule renvoie une valeur différente en fonction de la taille des mailles.*

II – 2.4.3 Filtrage spatial

Afin de résoudre les équations de NS sur un maillage le plus fin possible pour capter au mieux la dynamique du fluide tout en ayant des volumes de contrôle suffisamment larges pour permettre une moyennisation spatiale satisfaisante, il est nécessaire de découpler ces deux grilles.

Nous recensons ci-après des exemples de distinction de grilles et détaillons ensuite l'approche employée par Link *et al.* [138] car cette méthode représente la dernière amélioration majeure à apporter au modèle DEM-CFD développé au cours de cette thèse.

II – 2.4.3.a Exemples de filtrage spatial

Un tel filtrage peut par exemple être réalisé en superposant deux grilles l'une sur l'autre (voir *eg.* [75] ou [4] pour une mise en pratique) afin de calculer la fraction volumique de fluide sur une grille puis l'interpoler sur une grille plus fine qui sert au calcul des variables du fluide. Mais la méthode la plus en accord avec le principe de variables localement moyennées introduit par Anderson & Jackson [5] ou sa variante proposée plus tard par Zhang & Prosperetti [242, 241, 243] consiste à filtrer spatialement les variables. Pour cela, il est nécessaire de répartir les contributions ponctuelles aux cellules voisines. Une telle approche fut par exemple mise en œuvre par l'équipe de Kuipers de l'Université de Twente, notamment au cours de la thèse de Link [138], nous en détaillons le principe dans le paragraphe suivant. Notons également les travaux de Desjardins *et al.* de l'Université de Cornell [172, 27] qui utilisent une fonction noyau permettant de répartir les variables sur les cellules environnantes et donc de lisser les discontinuités.

II – 2.4.3.b Méthode du cube poreux

Afin de s'affranchir des restrictions de taille minimale de maille fluide engendré par le calcul de \mathcal{E}_f , et donc de pouvoir raffiner librement le maillage pour modéliser la dynamique de l'écoulement avec précision, Link *et al.* [138] ont proposé une méthode de cube poreux.

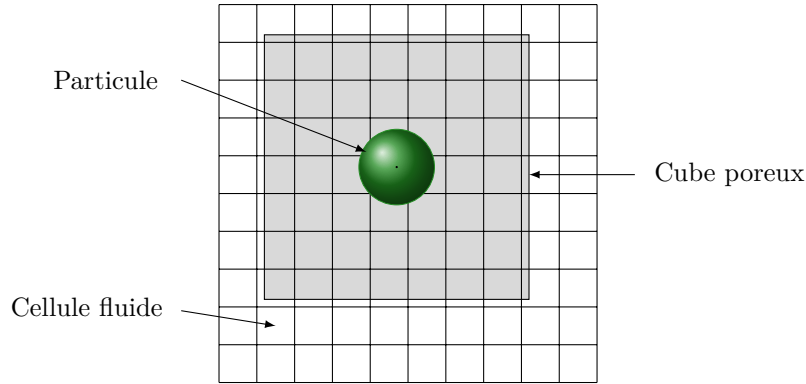


FIGURE II.13 – Méthode du cube poreux proposée par Link [138]

Comme le montre la figure II.13, cette méthode consiste à considérer chaque particule comme un cube poreux dont la largeur est proportionnelle au diamètre de la particule à une constante près :

$$d_{cube} = a d_p \quad (\text{II.109})$$

Le volume de ce cube doit au moins être égal au volume de la particule, ce qui implique :

$$a \geq \left(\frac{\pi}{6}\right)^{1/3} \quad (\text{II.110})$$

Dans leurs travaux, Link *et al.* prennent $2 < a < 5$. La porosité d'un cube poreux représentant une particule est le rapport du volume occupé par une particule par le volume du cube :

$$\mathcal{E}_f^{\text{cube}} = \frac{V_p}{V_{\text{cube}}} = \frac{\pi}{6a^3} \quad (\text{II.111})$$

La contribution du volume d'une particule est alors ajouté à chaque cellule du maillage fluide au prorata de la porosité du cube et du volume de la cellule fluide recouvert par le cube poreux. La fraction volumique de fluide dans une maille fluide j est donc calculée à l'aide des cubes poreux qui recouvrent la maille :

$$\mathcal{E}_{f,j} = 1 - \mathcal{E}_f^{\text{cube}} \sum_{i \in N_c} \theta_{i,j} \quad (\text{II.112})$$

Où $\theta_{i,j}$ est la fraction volumique de la maille j occupée par le cube i , et N_c est le nombre de cubes poreux recouvrant la maille j .

II – 2.5 Action des particules sur le fluide

Afin de respecter la troisième loi de Newton, la force résultant de l'action des particules sur le fluide doit être égale à la somme des forces exercées par le fluide sur les particules mais orientée en sens contraire. Nous présentons ici les différents types de couplage rencontrés dans la littérature puis détaillons celui implémenté dans cette étude.

II – 2.5.1 Types de couplage recensés

Etant donné que les écoulements fluide-particules denses sont le théâtre de fortes interactions entre les deux phases présentes dans le domaine, chacun s'entend sur le fait qu'il est indispensable de capturer au mieux les échanges de quantité de mouvement. Comme le résumant Feng & Yu [73], trois différents types de couplage entre les phases solide et fluide furent proposés par les équipes travaillant sur les modèles Euler-Lagrange, indifféremment de l'utilisation des modèles A et B.

1. Dans le premier cas, la force volumique modélisant l'action des particules sur le fluide est calculée sur la grille fluide de façon localement moyennée, comme dans le TFM de Gidaspow [87]. Les forces du fluide sur les particules sont quant à elles calculées individuellement, en fonction de la vitesse relative entre le fluide et chaque particule. Il est important de souligner que ce type de couplage ne garantit pas l'équilibre des forces dans chaque cellule, il est donc à proscrire.
2. Pour le deuxième type de couplage, l'action des particules sur le fluide est à nouveau calculée à l'échelle localement moyennée, comme dans le cas précédent. Mais la force du fluide sur les particules est cette fois ci calculée à partir de cette force volumique afin de respecter l'équilibre des forces dans chaque cellule et donc dans tout le domaine :

$$\mathbf{f}_{hd} = \frac{\mathbf{F}_{pf} \Delta V}{N_p} \quad (\text{II.113})$$

Où N_p est le nombre de particules dans un volume de contrôle dont le volume est ΔV . Néanmoins, ce type de couplage ne permet pas de décrire de façon précise le comportement des particules au sein d'une cellule. En effet, tous les éléments solides au sein d'un volume de contrôle n'ont pas la même vitesse de translation ; à ce titre, la force qu'exerce le fluide sur les particules doit être différente pour chaque élément.

3. Enfin, le troisième type de couplage peut être vu comme l'opposé du deuxième modèle présenté précédemment. En effet, le principe consiste à calculer la force du fluide sur chaque particule individuellement puis à considérer l'action des particules sur le fluide dans chaque cellule comme étant la somme des forces du fluide sur les particules pour tous les éléments présents dans le volume de contrôle :

$$\mathbf{F}_{pf} = \frac{1}{\Delta V} \sum_{N_p} \mathbf{f}_{hd} \quad (\text{II.114})$$

Cette approche est largement adoptée par la communauté depuis qu'elle fut proposée par Xu & Yu [227]. Elle permet en effet de calculer individuellement l'action du fluide sur les particules tout en respectant la troisième loi de Newton. C'est ce type de couplage que nous avons implémenté dans ces travaux et qui est détaillé ci-après.

II – 2.5.2 Couplage implémenté

Comme nous l'avons expliqué dans le paragraphe précédent, il est important de respecter l'équilibre des forces dans chaque cellule. De plus, afin d'éviter les oscillations numériques, il est intéressant de lisser la force volumique \mathbf{F}_{pf} dans le temps. En effet, lorsqu'une particule entre ou sort d'un volume de contrôle, son action sur le fluide est prise en compte en un point différent du maillage. Ainsi, nous appliquons la méthode présentée précédemment pour le calcul de la fraction volumique de fluide, à savoir la méthode des cubes englobants (voir §II – 2.4.2.c).

$$\mathbf{F}_{pf} = \frac{1}{\Delta V} \sum_{N_p} \theta \mathbf{f}_{hd} \quad (\text{II.115})$$

De la sorte, l'action d'une particule sur le fluide peut être répartie sur différents volumes de contrôle si elle en recouvre plusieurs, au prorata du volume de particule présent dans le volume de contrôle. Cette force volumique est considérée comme un terme source et est ajoutée au second membre de l'équation de quantité de mouvement (II.6b) et la figure II.14 illustre la répartition des contributions des forces en fonction des différents volumes de contrôle de la grille décalée.

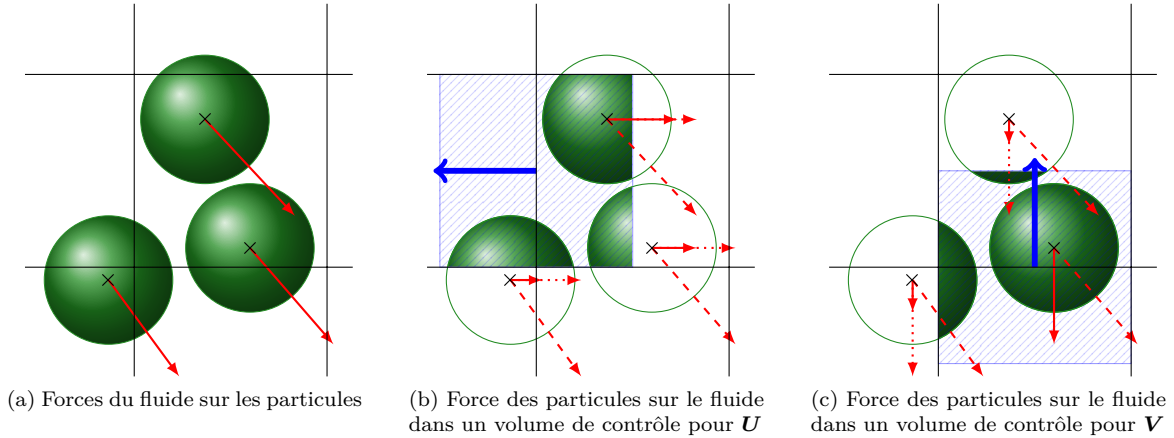


FIGURE II.14 – Illustration du calcul de la force des particules sur le fluide au prorata du volume de particule compris dans le volume de contrôle, dans le respect de la troisième loi de Newton

II – 3 Conclusion

Au cours de ce chapitre portant sur la modélisation des écoulements fluide-particules, nous avons tout d'abord présenté différentes échelles de longueur pour la modélisation, regroupée en trois groupes, micro, méso et macro. Nous avons ensuite présenté plus en détails l'échelle de longueur méso, parfois appelée micro-macro ou modèle Euler-Lagrange, qui a fait l'objet d'une implémentation informatique au cours de cette thèse et qui a servi d'outil pour étudier les écoulements fluide-particules denses de type lit fluidisé.

Une attention particulière est donnée à la justesse du modèle utilisé, c'est à dire à la concordance des termes de couplage employés pour chacune des phases afin de ne pas confondre les modèles A et B du modèle à deux fluides de Gidaspow. De plus, nous nous sommes attachés à respecter l'équilibre de quantité de mouvement dans chaque volume de contrôle ainsi qu'à calculer de façon aussi précise

que possible la fraction volumique de fluide dans chaque cellule du maillage, ce qui a par la même occasion permis de lisser les variations temporelles des champs \mathcal{E}_f et \mathbf{F}_{pf} . Néanmoins, nous rappelons qu'une amélioration non négligeable pourrait être apportée quant à la prise de moyenne spatiale du terme \mathcal{E}_f dans le domaine. Cela permettrait par la même occasion de découpler la grille fluide du filtre spatial permettant de calculer la fraction volumique de fluide, et ainsi de générer des maillages aussi fins que nécessaire pour s'adapter à la dynamique de l'écoulement. Enfin, les différentes forces modélisant l'action du fluide sur les particules ont été étudiées, et plus particulièrement la force de traînée qui constitue la contribution principale de l'échange de quantité de mouvement.

L'implémentation du modèle présenté dans ce chapitre offre la possibilité d'étudier un large champ d'applications, en particulier les lits fluidisés denses en raison de la prise en compte des contacts interparticulaires. Les détails de l'implémentation informatique des termes du modèle sont donnés au chapitre III et une série de tests de validation est présentée au chapitre IV.

Chapitre III

Aspects Numériques

Sommaire

III – 1	PeliGRIFF	56
III – 1.1	Généralités	56
III – 1.2	Détails	56
III – 2	Modèle implémenté	58
III – 3	Outils numériques	58
III – 3.1	Discrétisation spatiale	58
III – 3.2	Ecriture des termes	58
III – 3.2.1	Terme de diffusion	59
III – 3.2.2	Terme d'advection	60
III – 4	Résolution numérique	62
III – 4.1	Discrétisation temporelle et splitting d'opérateur	62
III – 4.2	Résolution du problème de Stokes dégénéré	63
III – 4.3	Couplage et ordre de précision temporels	64
III – 5	Conditions aux limites et initiales	64
III – 5.1	Conditions aux limites	64
III – 5.1.1	Condition d'entrée	65
III – 5.1.2	Face de sortie	66
III – 5.1.3	Faces latérales	66
III – 5.2	Conditions initiales	67
III – 5.2.1	Phase continue	67
III – 5.2.2	Phase dispersée	68
III – 6	Optimisation du temps de calcul	68
III – 6.1	Répartition du temps de calcul	68
III – 6.2	Scaling à charge constante	69
III – 6.3	Charge par processeur	70
III – 6.3.1	Augmentation du nombre de particules	70
III – 6.3.2	Augmentation de la taille du domaine fluide	71
III – 6.4	Mise à jour du champ \mathcal{E}_f	71
III – 6.4.1	Ancienne méthode	72
III – 6.4.2	Nouvelle méthode	72
III – 7	Conclusion	73

III – 1 PeliGRIFF

Au cours de ces trois années de thèse, l'étude numérique des écoulements fluide-particules a été réalisée à l'aide des codes PeliGRIFF^{1,2} pour la partie fluide et GRAINS3D pour la partie granulaire. Ces logiciels de simulation sont développés au sein d'IFPEN depuis une dizaine d'années et la principale contribution de ce travail de thèse est l'implémentation d'un modèle Euler-Lagrange dans cette plateforme logicielle. Nous présentons ci-après l'architecture générale de ces deux codes ainsi que le schéma de communication leur permettant d'échanger des informations.

III – 1.1 Généralités

La figure III.1 illustre schématiquement l'imbrication des bibliothèques C++ du code PeliGRIFF. Pour les simulations de suspensions, les trajectoires et les contacts sont traités à l'aide du code de simulation granulaire GRAINS3D. La résolution du problème fluide est quant à elle basée sur la plateforme open-source PELICANS, développée par l'Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire (IRSN), dans laquelle une branche spécifique pour la résolution par volumes finis sur grille décalée a été développée par l'équipe PeliGRIFF.

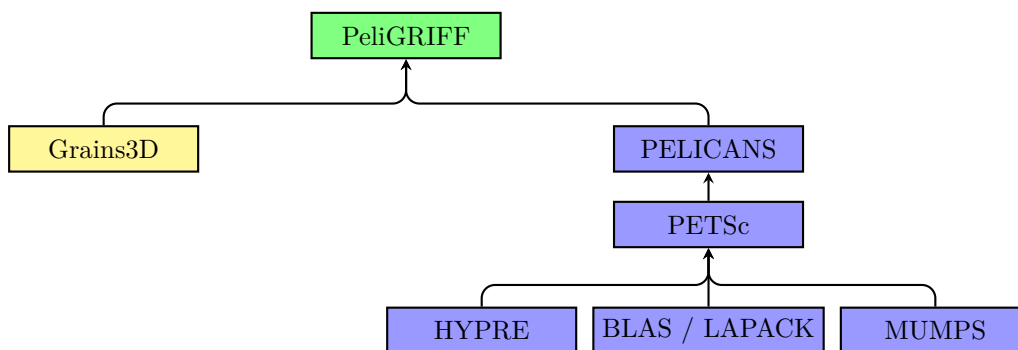


FIGURE III.1 – Diagramme de construction de la plateforme PeliGRIFF

Cette plateforme permet d'utiliser différentes bibliothèques d'algèbre linéaire, à savoir soit des solveurs propres à PELICANS, soit des bibliothèques externes telles que PETSc³ ou UMFPACK⁴. La bibliothèque de résolution des systèmes linéaires choisie pour PELICANS dans cette étude est PETSc, développée par l'Argonne National Laboratory près de Chicago. La bibliothèque PETSc utilise par défaut les routines provenant des bibliothèques BLAS⁵ et LAPACK⁶, mais pour améliorer la rapidité d'inversion des systèmes matriciels, différentes bibliothèques externes peuvent être utilisées. Dans PeliGRIFF, nous utilisons en particulier le préconditionneur multi-grille HYPRE développé au Lawrence Livermore National Laboratory, ainsi que le solveur multifrontal direct MUMPS⁷ développé par un regroupement de laboratoires français. Le choix de ces bibliothèques ainsi que des versions utilisées se fait au moment de la compilation du code, par passage d'argument au compilateur. Le compilateur utilisé dans cette étude est gcc 4.8.2

III – 1.2 Détails

PeliGRIFF est un code modulaire permettant de simuler aussi bien des écoulements bi-fluides à l'aide d'une méthode Level-Set tout en tenant compte de la coalescence de bulles, que les écoulements fluide-particules en prenant en compte ou non les aspects thermiques et/ou chimiques. Le modèle

1. Parallel Efficient Library for GRains In Fluid Flow (PeliGRIFF)
2. <http://www.peligriff.com>
3. Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation (PETSc)
4. Unsymmetric Multifrontal sparse Factorization PACKAGE (UMFPACK)
5. Basic Linear Algebra Subprograms (BLAS)
6. Linear Algebra PACKage (LAPACK)
7. Multifrontal Massively Parallel sparse direct Solver (MUMPS)

DEM-CFD développé au cours de cette thèse a été implémenté dans la plateforme existante dans une version Volumes Finis structurés (voir figure III.2).

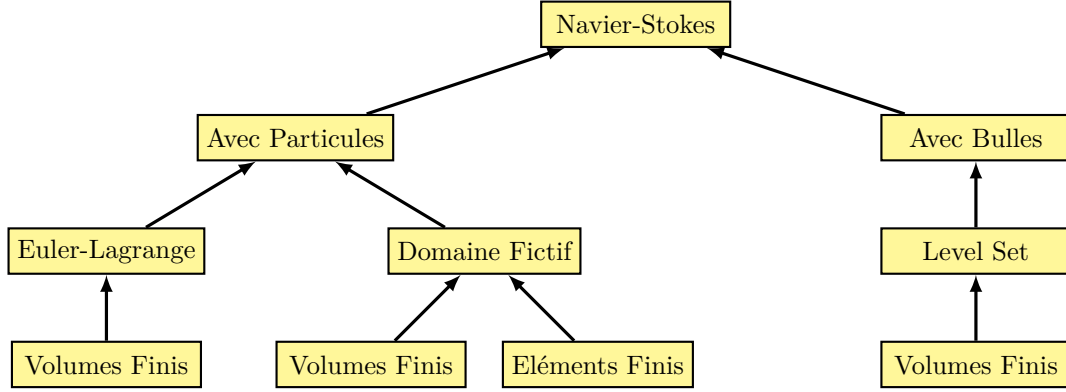


FIGURE III.2 – Structure des différents modules de la plateforme PeliGRIFF

Afin de coupler les solveurs fluide et granulaire, il est nécessaire que ceux-ci s'échangent régulièrement des informations. Pour cela le code PeliGRIFF, qui pilote la simulation, peut accéder librement aux objets de GRAINS3D et en particulier aux particules. Il peut ainsi leur attribuer les données provenant du fluide interpolées au centre de gravité de chacune d'entre elles, comme par exemple le gradient de pression, la vitesse du fluide et fraction volumique de fluide. Le code GRAINS3D peut alors calculer la force de traînée en fonction des données qui viennent de lui être transmises. Après avoir calculé les forces de contacts, le solveur granulaire résout alors le PFD et met à jour la vitesse et la position des particules. PeliGRIFF récupère ensuite la position, le volume et la force de traînée de chaque particule pour mettre à jour la fraction volumique du fluide ainsi que pour calculer la force volumique résultant de l'action des particules sur le fluide (voir équation (II.115)).

La figure III.3 illustre schématiquement l'échange d'informations entre les deux codes. Une version plus détaillée de l'enchaînement des opérations réalisées est présentée sous forme d'algorithme en annexe C.

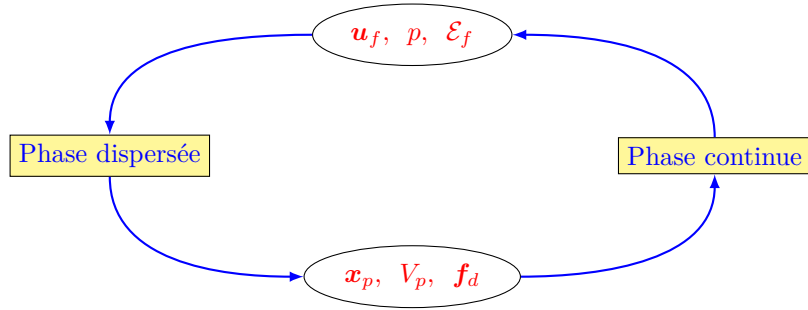


FIGURE III.3 – Couplage et échange d'informations entre les 2 phases

Les codes GRAINS3D et PeliGRIFF sont entièrement parallélisés par une méthode de décomposition de domaine à l'aide de la librairie Message Passing Interface (MPI). Le domaine d'étude est ainsi décomposé en plusieurs sous-domaines qui sont pris en charge par différentes unités de calcul, également appelé cœur de calcul. La décomposition de domaine utilisée dans cette étude est la même pour les parties fluide et solide. Ainsi, la communication entre les deux codes est optimisée car les informations des particules sont directement accessibles (sous forme de pointeurs) par le fluide. Certaines implémentations utilisent quand à elles des décompositions de domaine différentes pour les phases fluide et solide, à savoir généralement un seul processeur pour la phase fluide et plusieurs pour la phase granulaire. Les informations granulaires provenant des différents sous-domaines sont alors envoyées au processeur traitant le fluide sous forme de message MPI, ce processeur renvoie ensuite les informations du fluide à chacun des sous-domaines traitant les particules. Ce schéma de communication ne semble

pas optimum car une grande quantité d'informations est envoyée à chaque itération, ce qui engendre du temps de communication qu'il est préférable de réduire. Les performances parallèles et les temps de calculs des différentes parties du codes sont présentés plus loin dans ce chapitre (voir §III – 6). Pour plus d'informations concernant ces deux codes et les méthodes numériques qui y sont implémentées, voir [224, 222, 223, 237, 236].

III – 2 Modèle implémenté

Comme nous l'avons détaillé précédemment (voir §II – 2.1), l'écoulement fluide est décrit par les équations de Navier-Stokes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \mathcal{E}_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathcal{E}_f \mathbf{u}_f) = 0 \end{array} \right. \quad (\text{III.1a})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_f \left(\frac{\partial (\mathcal{E}_f \mathbf{u}_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathcal{E}_f \mathbf{u}_f \mathbf{u}_f) \right) = -\nabla p - \mathbf{F}_{pf} + \nabla \cdot (2\mu \mathcal{E}_f \mathbf{D}) \end{array} \right. \quad (\text{III.1b})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{F}_{pf} = \frac{\sum_{i=1}^{n_p} \mathbf{f}_{fp_i}}{\Omega} \end{array} \right. \quad (\text{III.1c})$$

La trajectoire d'une particule i est quant à elle obtenue en résolvant le système d'équations de Newton :

$$\left\{ \begin{array}{l} m_p \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = V_p(\rho_p - \rho_f)\mathbf{g} + \mathbf{f}_c + \mathbf{f}_d \end{array} \right. \quad (\text{III.2a})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{I}_p \frac{d\boldsymbol{\omega}_p}{dt} = \mathbf{T}_p \end{array} \right. \quad (\text{III.2b})$$

A la différence de l'équation de QDM du système (II.5), l'équation (III.1b) ne comprend pas le terme de gravité $\rho_f \mathcal{E}_f \mathbf{g}$. La pression ainsi calculée correspond à la pression dynamique et ne comprend pas la pression hydrostatique correspondant à la colonne de fluide. Néanmoins, en prenant en compte le poids relatif dans l'équation de Newton (III.2), la poussée d'Archimède subit par les particules est correcte.

III – 3 Outils numériques

Afin de résoudre les équations aux dérivées partielles du système (III.1), celles-ci sont discrétisées spatialement et temporellement.

III – 3.1 Discrétisation spatiale

Dans cette étude, nous ne traitons que des géométries simples, parallélépipédiques rectangles pour la plupart, que nous discrétisons à l'aide de maillages cartésiens qui peuvent être uniformes ou non. Le domaine d'étude est discrétisé à l'aide d'une grille décalée et le système (III.1) est résolu à l'aide d'un schéma volumes finis Marker And Cell (MAC) [93]. Comme l'illustre la figure III.4, la pression p et la fraction volumique de fluide \mathcal{E}_f sont localisées au centre des mailles, et les vitesses aux interfaces des volumes de contrôle.

III – 3.2 Ecriture des termes

Nous présentons ci-après le détail de la discrétisation spatiale des termes de diffusion et d'advection du système (III.1).

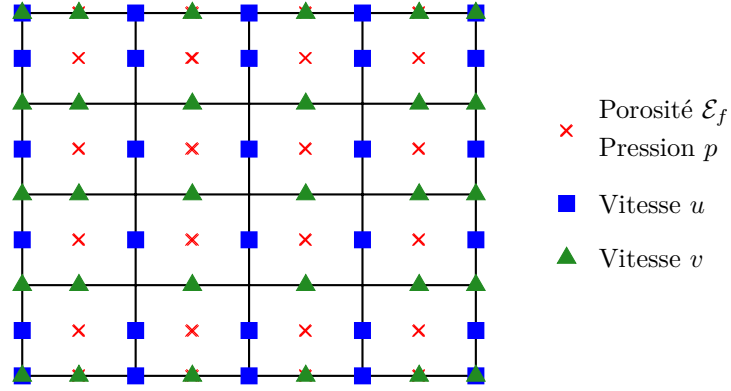


FIGURE III.4 – Positions des variables sur la grille décalée en 2D

III – 3.2.1 Terme de diffusion

En deux dimensions, le terme de diffusion de l'équation (III.1b) peut s'écrire :

$$\nabla \cdot (2\mu\mathcal{E}_f \mathbf{D}) = 2 \left(\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu\mathcal{E}_f \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\mu\mathcal{E}_f}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) \\ &\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\mu\mathcal{E}_f}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu\mathcal{E}_f \frac{\partial v}{\partial y} \right) \end{aligned} \right) \quad (\text{III.3})$$

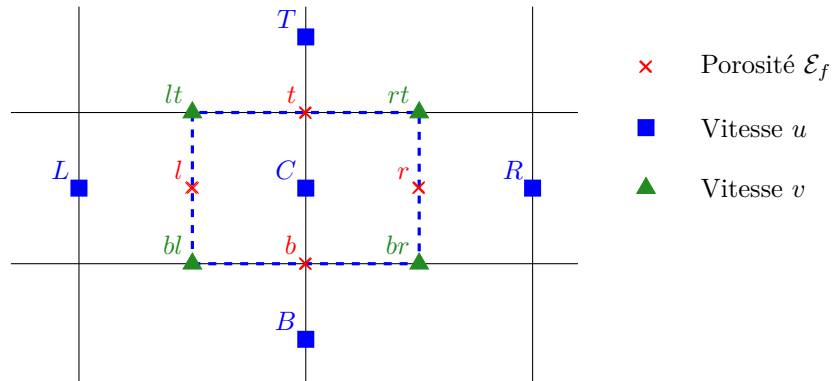


FIGURE III.5 – Cellule de contrôle et position des variables pour le calcul de la première composante du terme de diffusion

En intégrant la première composante sur un volume de contrôle $d\Omega_u$ de la grille décalée (voir figure

III.5), nous pouvons écrire la formulation continue suivante :

$$\begin{aligned}
 \nabla_x \cdot (2\mu\mathcal{E}_f \mathbf{D}) &= \int_{V_u} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu\mathcal{E}_f \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\mu\mathcal{E}_f}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) \right) d\Omega_u \\
 &= \oint_{\partial V_u} \mu\mathcal{E}_f \frac{\partial u}{\partial x} \mathbf{n}_x dS_u + \oint_{\partial V_u} \frac{\mu\mathcal{E}_f}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \cdot \mathbf{n}_y dS_u \\
 &= \left[\mu\mathcal{E}_{f,r} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_r - \mu\mathcal{E}_{f,l} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_l \right] \Delta y_C \\
 &\quad + \left[\frac{\mu\mathcal{E}_{f,t}}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_t - \frac{\mu\mathcal{E}_{f,b}}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_b + \frac{\mu\mathcal{E}_{f,t}}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)_t - \frac{\mu\mathcal{E}_{f,b}}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)_b \right] \Delta x_C
 \end{aligned}$$

Que nous écrivons sous la forme discrète :

$$\begin{aligned}
 \nabla_x \cdot (2\mu\mathcal{E}_f \mathbf{D}) &\approx \mu\mathcal{E}_{f,r} \frac{\Delta y_C}{\Delta x_r} (u_R - u_C) - \mu\mathcal{E}_{f,l} \frac{\Delta y_C}{\Delta x_l} (u_C - u_L) \\
 &\quad + \frac{\mu\mathcal{E}_{f,t}}{2} \frac{\Delta x_C}{\Delta y_t} (u_T - u_C) - \frac{\mu\mathcal{E}_{f,b}}{2} \frac{\Delta x_C}{\Delta y_b} (u_C - u_B) \\
 &\quad + \frac{\mu\mathcal{E}_{f,t}}{2} \frac{\Delta x_C}{\Delta x_t} (v_{rt} - v_{lt}) - \frac{\mu\mathcal{E}_{f,b}}{2} \frac{\Delta x_C}{\Delta x_b} (v_{rb} - v_{lb})
 \end{aligned}$$

Les fractions volumiques $\mathcal{E}_{f,t}$ et $\mathcal{E}_{f,b}$ sont obtenues à l'aide d'une interpolation multilinéaire des nœuds voisins à l'ordre 1. L'écriture de la deuxième composante est similaire à la première et l'extension à la troisième dimension se fait quant à elle naturellement.

III – 3.2.2 Terme d'advection

Le terme de transport de l'équation de QDM (III.1b) est utilisé sous la forme conservative $\nabla \cdot (\mathcal{E}_f \mathbf{u}_f \mathbf{u}_f)$. Ainsi, en intégrant sur un volume de contrôle $d\Omega \subset \mathbb{R}^n$, et en appliquant le théorème de Green-Ostrograski⁸, nous obtenons l'intégrale suivante sur la surface de contrôle $dS \subset \mathbb{R}^{n-1}$:

$$\int_V (\nabla \cdot (\mathcal{E}_f \mathbf{u}_f \mathbf{u}_f)) \cdot d\Omega = \oint_{\partial V} (\mathcal{E}_f \mathbf{u}_f \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{n}) dS \quad (\text{III.4})$$

La quantité advectée est la vitesse superficielle du fluide $\mathcal{E}_f \mathbf{u}_f$. Comme les nœuds de vitesse et de fraction volumique ne sont pas localisés aux même endroits (voir §III – 3.1), le champ \mathcal{E}_f est interpolé à l'emplacement des nœuds de vitesse, il est alors noté $\tilde{\mathcal{E}}_f$. Dans la suite de cette partie concernant l'implémentation du terme de transport, cette quantité est définie par la lettre Φ . Ainsi le terme d'advection s'écrit $\nabla \cdot (\Phi \mathbf{u}_f)$.

Nous présentons ci-après le détail de l'implémentation de l'équation (III.4) en deux dimensions pour la première composante du terme d'advection. Deux schémas numériques ont été implémentés pour la discrétisation du terme de transport, un schéma Upwind d'ordre 1 et un schéma TVD d'ordre 2.

III – 3.2.2.a Schéma upwind

La figure III.6 illustre la discrétisation spatiale utilisée pour le transport de la quantité Φ selon x . Les composantes de vitesse \tilde{u}_l , \tilde{u}_r , \tilde{v}_b et \tilde{v}_t sont calculées au centre des faces du volume de contrôle (en vert sur le schéma) à partir d'une interpolation linéaire des nœuds voisins. L'écriture du terme d'advection dans le cas d'un maillage cartésien est particulièrement intuitive car cela revient à un

8. également appelé théorème de flux-divergence

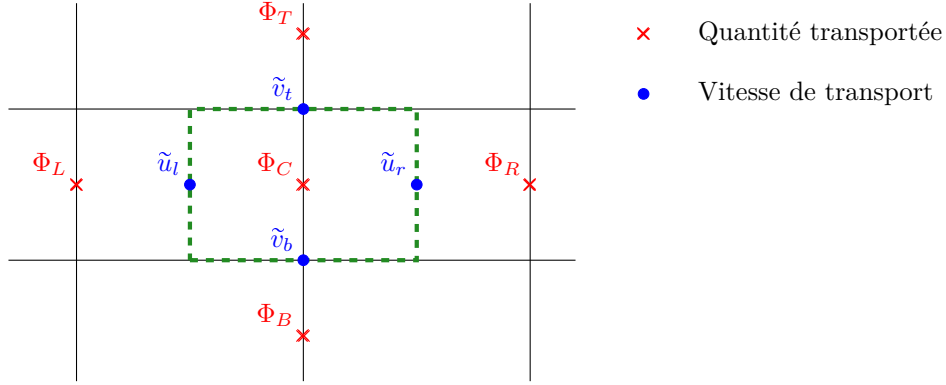


FIGURE III.6 – Cellule de contrôle et position des variables pour le calcul de la première composante du terme de transport avec la méthode upwind

calcul de différences finies dans chaque direction. Ainsi, dans le cas où ces vitesses sont positives, nous pouvons écrire :

$$\oint_{\partial V_u} \Phi \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{n} dS_u = (\Phi_C \tilde{u}_r - \Phi_L \tilde{u}_l) \cdot \Delta y + (\Phi_C \tilde{v}_t - \Phi_B \tilde{v}_b) \cdot \Delta x \quad (\text{III.5})$$

III – 3.2.2.b Schéma TVD

Le terme d'advection peut également être résolu à l'aide d'un schéma garantissant la monotonicité⁹, c'est à dire un schéma respectant la propriété de Variation Totale Décroissante (TVD). Ce schéma est d'ordre 2 dans tout le domaine à l'exception du voisinage des bords du domaine. En effet, le stencil employé pour transporter la valeur $\Phi = \tilde{\mathcal{E}}_f \mathbf{u}_f$ utilise les deux nœuds amonts. Cela pose donc problème pour la couche de cellules voisines des bords du domaine dans le cas où les conditions aux limites ne sont pas périodiques. Le schéma utilisé est alors le même que le schéma upwind à l'ordre 1 présenté précédemment.

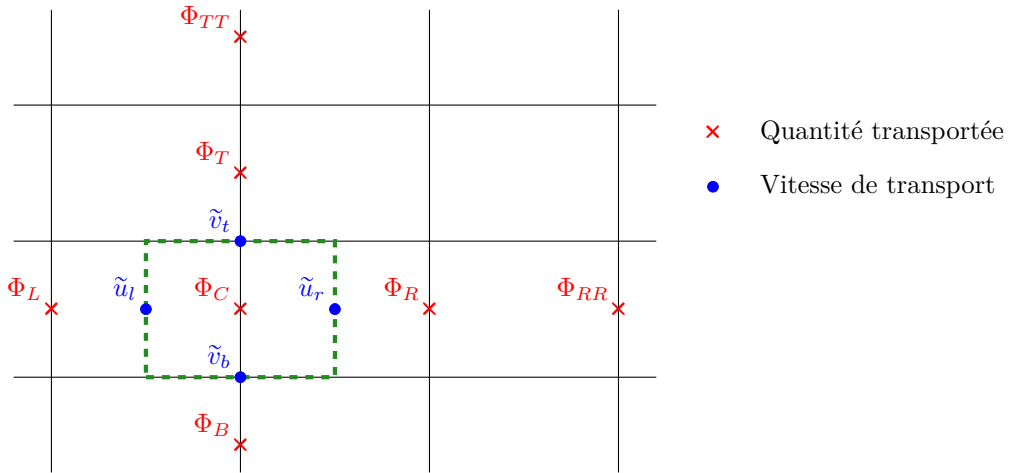


FIGURE III.7 – Cellule de contrôle et position des variables pour le calcul de la première composante du terme de transport avec la méthode TVD

Dans le cas où $\tilde{u}_l, \tilde{u}_r, \tilde{v}_b$ et $\tilde{v}_t \geq 0$, la première composante, $\Phi = \tilde{\mathcal{E}}_f u_x$ s'écrit sous forme discrète :

$$\int_{\partial S_u} \Phi \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{n} dS_u = (F_r - F_l) \cdot \Delta y + (F_t - F_b) \cdot \Delta x \quad (\text{III.6})$$

9. et permettant donc d'éviter les oscillations numériques non désirées

Avec F le flux sur chacune des faces de la cellule de contrôle. En s'appuyant sur la notation détaillée dans la figure III.7, les flux sont calculés de la façon suivante :

$$\begin{cases} F_r = 0.5 \left[\tilde{u}_r (\Psi_{RR} + \Psi_R) - |\tilde{u}_r| (\Psi_{RR} - \Psi_R) \right] \\ F_l = 0.5 \left[\tilde{u}_l (\Psi_L + \Psi_{LL}) - |\tilde{u}_l| (\Psi_L - \Psi_{LL}) \right] \\ F_t = 0.5 \left[\tilde{u}_t (\Psi_{TT} + \Psi_T) - |\tilde{u}_t| (\Psi_{TT} - \Psi_T) \right] \\ F_b = 0.5 \left[\tilde{u}_b (\Psi_B + \Psi_{BB}) - |\tilde{u}_b| (\Psi_B - \Psi_{BB}) \right] \end{cases} \quad (\text{III.7})$$

Les termes Ψ sont des reconstructions linéaires par morceau de la variable discrète Φ :

$$\begin{cases} \Psi_{RR} = \Phi_R - \frac{x_R - x_r}{x_{RR} - x_R} \varphi_{rr} (\Phi_{RR} - \Phi_R) \\ \Psi_R = \Phi_C + \frac{x_r - x_C}{x_R - x_C} \varphi_r (\Phi_R - \Phi_C) \\ \Psi_{LL} = \Phi_L + \frac{x_l - x_L}{x_C - x_L} \varphi_l (\Phi_C - \Phi_L) \\ \Psi_L = \Phi_C - \frac{x_C - x_l}{x_R - x_C} \varphi_r (\Phi_R - \Phi_C) \\ \Psi_{TT} = \Phi_T - \frac{y_T - y_t}{y_{TT} - y_T} \varphi_{tt} (\Phi_{TT} - \Phi_T) \\ \Psi_T = \Phi_C + \frac{y_t - y_C}{y_T - y_C} \varphi_t (\Phi_T - \Phi_C) \\ \Psi_{BB} = \Phi_B + \frac{y_b - y_B}{y_C - y_B} \varphi_b (\Phi_C - \Phi_B) \\ \Psi_B = \Phi_C - \frac{y_C - y_b}{y_T - y_C} \varphi_t (\Phi_T - \Phi_C) \end{cases} \quad (\text{III.8})$$

Où φ est un limiteur de pente. Son rôle est de faire repasser localement le schéma au premier ordre afin d'éviter l'apparition d'oscillations non physiques. Dans cette étude, nous utiliserons un limiteur de pente Superbee :

$$\varphi(\theta) = \max(0, \min(1, 2\theta), \min(2, \theta)) \quad (\text{III.9})$$

Avec θ la pente de la valeur advectée, par exemple :

$$\varphi_{rr} = \varphi(\theta_{rr}) = \varphi \left(\frac{\Phi_R - \Phi_C}{\Phi_{RR} - \Phi_R} \right) \quad (\text{III.10})$$

III – 4 Résolution numérique

Afin de résoudre numériquement le problème de Navier-Stokes (III.1) dans des régimes d'écoulement ne permettant pas de négliger le terme inertiel de l'équation de QDM, une méthode communément employée consiste à découpler les variables de vitesse et de pression. Nous présentons ci-après le splitting d'opérateurs employé dans cette étude, ainsi que le détail d'un des sous-problèmes émanant de cette séparation d'opérateurs. Dans cette étude, la discrétisation temporelle des équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement est la suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_f \frac{\mathcal{E}_f^n \mathbf{u}_f^{n+1} - \mathcal{E}_f^{n-1} \mathbf{u}_f^n}{\Delta t} - \nabla \cdot (2\mu \mathcal{E}_f^n \mathbf{D}^{n+1}) = -\nabla p^{n+1} - \mathbf{F}_{pf} - \rho_f \nabla \cdot (\mathcal{E}_f^{n-1} \mathbf{u}_f^n \mathbf{u}_f^n) \end{array} \right. \quad (\text{III.11a})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\mathcal{E}_f^n - \mathcal{E}_f^{n-1}}{\Delta t} + \nabla \cdot (\mathcal{E}_f^n \mathbf{u}_f^{n+1}) = 0 \end{array} \right. \quad (\text{III.11b})$$

III – 4.1 Discrétisation temporelle et splitting d'opérateur

La décomposition d'opérateurs utilisée pour découpler les variables de vitesse et de pression est un schéma à pas fractionnaires de Marchuk-Yanenko (MY) [148, 147]. Le problème initial (III.11) est alors séparé en deux sous-problèmes :

- Un problème d'advection-diffusion

$$\rho_f \frac{\mathcal{E}_f^n \mathbf{u}_f^* - \mathcal{E}_f^{n-1} \mathbf{u}_f^n}{\Delta t} - \nabla \cdot (2\mu \mathcal{E}_f^n \mathbf{D}^*) = -\mathbf{F}_{pf} - \rho_f \nabla \cdot (\mathcal{E}_f^{n-1} \mathbf{u}_f^n \mathbf{u}_f^n) \quad (\text{III.12})$$

- Un problème de Stokes dégénéré

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_f \frac{\mathcal{E}_f^n \mathbf{u}_f^{n+1} - \mathcal{E}_f^n \mathbf{u}_f^*}{\Delta t} = -\nabla p^{n+1} \\ \frac{\mathcal{E}_f^n - \mathcal{E}_f^{n-1}}{\Delta t} + \nabla \cdot (\mathcal{E}_f^n \mathbf{u}_f^{n+1}) = 0 \end{array} \right. \quad (\text{III.13a})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_f \frac{\mathcal{E}_f^n \mathbf{u}_f^{n+1} - \mathcal{E}_f^n \mathbf{u}_f^*}{\Delta t} = -\nabla p^{n+1} \\ \frac{\mathcal{E}_f^n - \mathcal{E}_f^{n-1}}{\Delta t} + \nabla \cdot (\mathcal{E}_f^n \mathbf{u}_f^{n+1}) = 0 \end{array} \right. \quad (\text{III.13b})$$

Cela permet de traiter chaque problème séparément, et donc de choisir une méthode de résolution adaptée à chacun d'entre eux. La vitesse \mathbf{u}_f^* est une solution intermédiaire, résultant de la résolution du problème d'advection-diffusion.

Le sous-problème d'advection-diffusion (III.12) est résolu à l'aide de la méthode du gradient conjugué préconditionné. Comme la matrice de masse est à diagonale dominante, nous employons un préconditionneur de Jacobi. Le sous-problème de Stokes dégénéré (III.13) est quant à lui résolu par le biais d'une méthode de projection L_2 .

III – 4.2 Résolution du problème de Stokes dégénéré

Les principales étapes de la résolution du sous-problème (III.13) sont les suivantes :

1. Tout d'abord, l'opérateur de divergence est appliqué à l'équation (III.13a) :

$$-\Delta p^{n+1} = \frac{\rho_f}{\Delta t} \left(\nabla(\mathcal{E}_f^n \mathbf{u}_f^{n+1}) - \nabla(\mathcal{E}_f^n \mathbf{u}_f^*) \right) \quad (\text{III.14})$$

2. L'équation de conservation de la masse (III.13b) est ensuite injectée dans (III.14) :

$$\Delta p^{n+1} = \frac{\rho_f}{\Delta t} \left(\frac{\mathcal{E}_f^n - \mathcal{E}_f^{n-1}}{\Delta t} + \nabla(\mathcal{E}_f^n \mathbf{u}_f^*) \right) \quad (\text{III.15})$$

3. Puis l'équation (III.14) est intégrée sur un volume de contrôle $d\Omega$:

$$\int_{\Omega} \Delta p^{n+1} d\Omega = \frac{\rho_f}{\Delta t} \left(\int_V \frac{\mathcal{E}_f^n - \mathcal{E}_f^{n-1}}{\Delta t} d\Omega + \int_{\partial V} (\mathcal{E}_f^n \mathbf{u}_f^*) \mathbf{n} dS \right) \quad (\text{III.16})$$

4. Une fois le champ de pression connu, le nouveau champ de vitesse peut être calculé à partir de l'équation (III.13a) :

$$\frac{\rho_f \mathcal{E}_f^n}{\Delta t} \mathbf{u}_f^{n+1} = -\nabla p^{n+1} + \frac{\rho_f \mathcal{E}_f^n}{\Delta t} \mathbf{u}_f^* \quad (\text{III.17})$$

Comme évoqué dans la partie traitant du calcul de la porosité (§II – 2.4), l'intégration de l'équation (III.16) peut engendrer des oscillations numériques amenant à l'arrêt des simulations si le calcul de \mathcal{E}_f n'est pas réalisé correctement. En effet, si la prise en compte d'une particule dans un volume de contrôle est faite de façon binaire lorsque une particule quitte ou entre dans une cellule (*ie.* si la “particle center method” est utilisée), la variation temporelle de la fraction volumique de fluide est discontinue. Ainsi, la dérivée temporelle calculée est d'autant plus grande que le pas de temps est petit :

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\mathcal{E}_f^n - \mathcal{E}_f^{n-1}}{\Delta t} = \pm \infty \quad (\text{III.18})$$

Ce phénomène est désormais évité grâce à l'utilisation de la méthode de calcul de \mathcal{E}_f présentée dans le paragraphe III – 6.4.2.

III – 4.3 Couplage et ordre de précision temporels

La méthode en temps employée pour résoudre l'équation de QDM est une méthode implicite de Crank Nicolson à l'ordre 2 [37]. Mais la décomposition d'opérateurs de Marchuk Yanenko employée dans cette étude est à l'ordre 1 avec une erreur commise en $\mathcal{O}(\Delta t/Re)$, l'ordre en temps de l'algorithme général n'est donc lui aussi que d'ordre 1. La précision temporelle de cette méthode peut être améliorée en utilisant un splitting temporel tel que le splitting de Strang symétrisé [205] qui permet de récupérer une solution à d'ordre 2 en temps. Pour cela, les problèmes -A- d'advection-diffusion (III.12) et -B- de Stokes dégénéré (III.13) doivent être résolus deux fois pour chaque itération temporelle en respectant l'ordre AB puis BA.

Une autre source d'erreur temporelle concerne le couplage entre les phases fluide et solide. En effet, nous avons vu précédemment que les informations du fluide étaient transmises à la phase solide à la fin de chaque itération et qu'entre deux itérations du solveur fluide, plusieurs itérations du solveur granulaire pouvaient être réalisées si $\Delta t_p < \Delta t_f$. Dans l'état actuel de l'implémentation du modèle DEM-CFD, les informations prises en compte par la phase solide pour chaque pas de temps Δt_p sont celles provenant de la dernière itération fluide. Or, le pas de temps du solveur fluide est généralement beaucoup plus grand que celui du solveur granulaire car Δt_f nécessite de respecter la Courant-Fredrich-Levy (CFL) pour un maillage relativement large tandis que Δt_p doit être suffisamment précis pour traiter les contacts interparticulaires. Plusieurs itérations solides sont alors réalisées entre chaque itération fluide comme l'illustre la figure III.8.

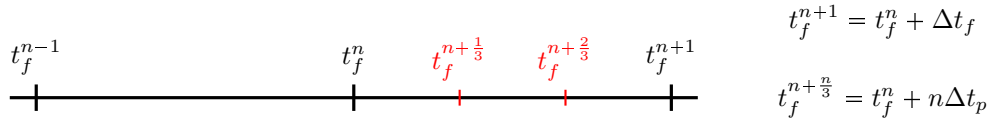


FIGURE III.8 – Illustration des sous-itérations du solveur granulaire entre deux itérations du solveur fluide

Cela a pour conséquence de créer une erreur de couplage temporelle entre les deux phases car si les particules se déplacent trop entre deux itérations du solveur fluide, les informations qui leur ont été attribuée à la fin de la dernière itération fluide ne correspondent plus à leur environnement. Pour réduire l'erreur commise, il serait intéressant de réaliser une interpolation temporelle des valeurs du fluide à chaque itération du solveur granulaire pour chaque mise à jour de la position des particules. Cette méthode se rapprocherait alors de la Méthode des Caractéristiques et l'erreur commise serait de l'ordre l'interpolation réalisée.

III – 5 Conditions aux limites et initiales

Pour que le problème soit bien posé, il est nécessaire d'imposer des conditions au bord et des conditions initiales pour chaque variable du système. Nous nous placerons dans le cas d'un domaine 2D afin de simplifier les notations et les schémas.

III – 5.1 Conditions aux limites

Les systèmes étudiés dans cette étude sont de forme rectangulaire et les conditions limites peuvent être de 4 types : entrée, sortie, mur et périodique (voir figure III.9).

Pour les conditions d'entrée et de sortie, les particules rebondissent sur ces faces tandis que le fluide, lui, peut s'écouler. Ce type de condition est imposé afin de conserver la même quantité de particules dans le domaine tout au long de la simulation, et cela même si des particules atteignent le haut du domaine, ce qui en pratique n'arrive que très rarement, voir jamais, de telle sorte que le mélange évolue librement.

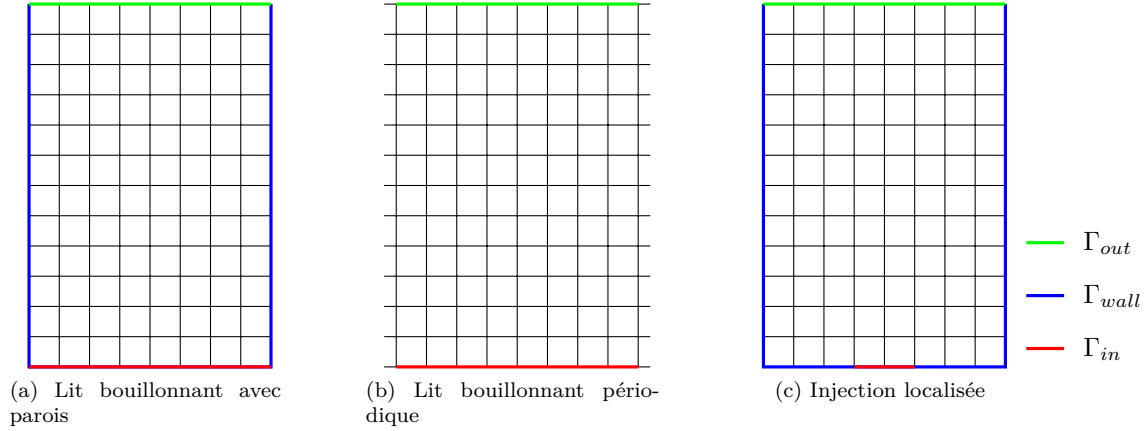


FIGURE III.9 – Différentes conditions aux limites en 2D

III – 5.1.1 Condition d'entrée

La zone d'entrée du fluide Γ_{in} peut être égale soit à la totalité de la face inférieure du domaine dans le cas d'un lit fluidisé bouillonnant (voir III.9-(a)), soit à une partie de cette même face dans le cas d'un lit pulsé (voir figure III.9-(b)). Sur cette surface d'injection, nous imposons une vitesse d'entrée verticale :

$$\mathbf{U}_{in} = (0, U_{in}), \quad \forall t \geq t_0 \quad (\text{III.19})$$

La condition au bord pour la pression sur la face d'entrée est quant à elle une condition de Neumann. Concernant la condition aux limites de la fraction volumique de fluide, afin de respecter l'équation de conservation de la masse (III.1a) en tout point du domaine, il est nécessaire d'imposer la condition suivante sur la face d'entrée :

$$\mathcal{E}_{f,in} = 1, \quad \forall t \geq t_0 \quad (\text{III.20})$$

En effet pour un état stationnaire, un lit fixe par exemple, l'équation de conservation de la masse dans un des volumes de contrôle jouxtant la face d'entrée se réduit à :

$$\nabla \cdot (\mathcal{E}_f \mathbf{u}_f) = 0 \quad (\text{III.21})$$

Soit, en 2D :

$$(\mathcal{E}_f \mathbf{u}_f)_R - (\mathcal{E}_f \mathbf{u}_f)_L + (\mathcal{E}_f \mathbf{u}_f)_T - (\mathcal{E}_f \mathbf{u}_f)_B = 0 \quad (\text{III.22})$$

Le lit de particules étant homogène, les termes $(\mathcal{E}_f \mathbf{u}_f)_R$ et $(\mathcal{E}_f \mathbf{u}_f)_L$ s'annulent. Aussi, la vitesse du fluide en entrée, \mathbf{U}_{in} , est accélérée dans le lit en raison du rétrécissement de section engendré par les particules, la valeur de cette vitesse interstitielle est $\mathbf{U}_{in}/\mathcal{E}_f$. Ainsi, la fraction volumique de fluide sur la face d'entrée doit nécessairement être égale à 1 car $\mathbf{u}_B = \mathbf{U}_{in}$:

$$\mathcal{E}_{f,B} = (\mathcal{E}_f \mathbf{u}_f)_T / \mathbf{u}_B \quad (\text{III.23})$$

$$= (\mathcal{E}_{f,bulk} \frac{\mathbf{U}_{in}}{\mathcal{E}_{f,bulk}}) / \mathbf{U}_{in} \quad (\text{III.24})$$

$$= 1 \quad (\text{III.25})$$

L'imposition de cette condition au bord engendre des conséquences non-négligeables sur le résultat de l'interpolation multi-linéaire réalisée pour attribuer la valeur de \mathcal{E}_f aux particules se trouvant dans la zone comprise entre les nœuds imposés sur la face d'entrée et la première rangée de nœuds calculés.

En effet, comme l'illustre la figure III.10, une particule dont le centre de gravité se trouve sous la première rangée de nœuds \mathcal{E}_f calculés se verra attribuer une valeur comprise entre la valeur 1 fixée en entrée et la valeur dans le reste du lit (ici $\mathcal{E}_{f,bulk} = 0.4$ pour l'exemple). En d'autres termes, la valeur

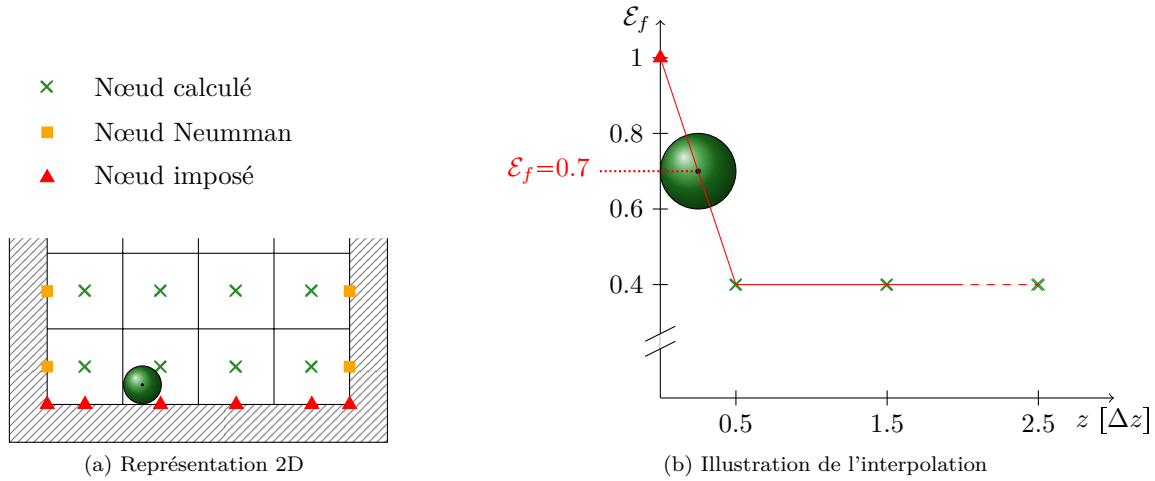


FIGURE III.10 – Interpolation de la fraction volumique de fluide pour une particule proche de la face d'entrée dans le cas où $\mathcal{E}_f = 1$ est imposée sur la face inférieure du réacteur

\mathcal{E}_f des particules comprises dans cette zone est surestimée. Il en résulte que la force de traînée calculée pour ces particules est plus faible que dans le reste du lit car cette force diminue rapidement lorsque la fraction volumique de fluide augmente (voir figure II.6). Cela a pour conséquence qu'une couche de particules reste présente sur la face inférieure du domaine pour des vitesses d'injection où elles auraient dû être fluidisées. Ce phénomène n'étant pas souhaité, une astuce est employée pour corriger la valeur \mathcal{E}_f interpolée.

Si l'on ajoute une couche de cellules supplémentaire sous le domaine physique, la valeur \mathcal{E}_f attribuée à une particule reposant sur la face inférieure du réacteur est alors toujours interpolée entre 1 et la valeur dans le lit, mais cette fois-ci, la position du centre de gravité est plus éloignée du point de pondération de valeur 1 (voir figure III.11). La force de traînée calculée sur les particules présentes dans cet intervalle est ainsi plus proche de celle calculée pour les autres particules du lit, ce qui est plus réaliste.

III – 5.1.2 Face de sortie

La condition au bord sur la face de sortie est une condition de Neumann pour la vitesse et la fraction volumique de fluide. Remarquons que le flux de fluide sur cette face est constant et égale au flux entrant par le bas du domaine, cela même si le profil de vitesse n'est pas uniforme. La pression sur cette face est quant-à-elle imposée à 0.

Rappelons d'une part que le terme de gravité étant absent de l'équation de quantité de mouvement, la pression dans le système est la pression hydrodynamique. D'autre part, comme nous étudions ici des configurations où le régime d'écoulement est modéré, le terme de pression généré par la friction du fluide sur les parois, Δp_w , est faible devant la pression frictionnelle engendrée par la présence de particules dans le fluide. Ainsi, la pression mesurée entre les faces d'entrée et de sortie est assimilable au saut de pression à travers le lit. Notons que dans le cas d'une configuration bi-périodique, nous avons $\Delta p_w = 0$.

III – 5.1.3 Faces latérales

Deux types de conditions aux bords peuvent être imposées sur les faces latérales du domaine Γ_{wall} . Dans un premier cas, ces faces sont des parois que les particules ne peuvent pas traverser et les collisions mur-particules sont traitées de la même façon que les contacts entre particules. Une condition d'adhérence, *ie.* de Dirichlet homogène, est imposée sur ces murs pour le fluide afin d'assurer l'adhérence du fluide à la paroi. Concernant la pression et la fraction volumique de fluide, les conditions

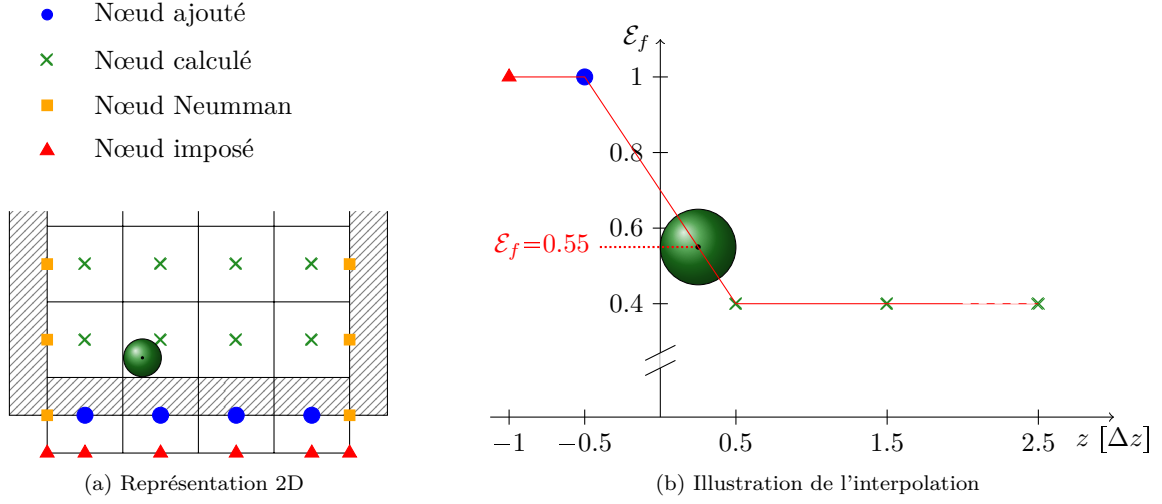


FIGURE III.11 – Interpolation de la fraction volumique de fluide pour une particule proche de la face d'entrée dans le cas où une couche de particules est ajoutée sous la face inférieure du réacteur

aux bords sont de type Neumann homogène. Une telle condition est appliquée pour \mathcal{E}_f pour éviter le même problème d'interpolation que sur la face d'entrée. Dans le second cas, les conditions aux bords sont périodiques pour la vitesse, la pression, la fraction volumique et les particules. Cela signifie que les nœuds proches des bords du domaine sont en fait vus comme étant voisins des nœuds se trouvant de l'autre côté du domaine (voir figure III.12). De la même façon, une particule se déplaçant en direction d'une frontière latérale apparaîtra de l'autre côté lorsqu'elle la traversera.

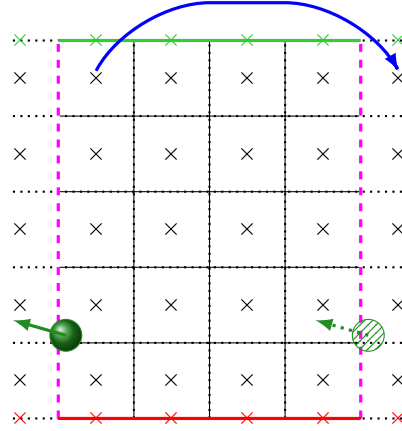


FIGURE III.12 – Conditions aux limites périodiques sur les faces latérales pour les données du fluide comme pour les particules

III – 5.2 Conditions initiales

III – 5.2.1 Phase continue

A $t = 0s$, la vitesse du fluide est fixée à $\mathbf{U}^0 = \mathbf{U}_{in}$ dans tout le domaine à l'exception des faces latérales Γ_{wall} où la vitesse est, comme nous l'avons vu dans la sous-section précédente, nulle si ces faces sont des murs. La fraction volumique est quant à elle calculée avant la première itération pour

les nœuds qui ne sont pas contraints, *ie.* tous sauf ceux de la face d'entrée.

A l'état initial, le champ de vitesse \mathbf{u}_f^0 est donc erroné car le fluide ne "voit" pas les particules. De même, lors de la première itération, le champ erroné \mathbf{u}_f^0 est utilisé pour le calcul du champ \mathbf{u}_f^1 , celui-ci est donc lui-même erroné, mais moins qu'à l'état initial puisque la conservation de la masse est vérifiée, et ainsi de suite. La vitesse du fluide dans le lit oscille donc légèrement lors des premières itérations puis ce phénomène s'estompe rapidement. Néanmoins, les effets de cette condition initiale mal posée sont imperceptibles sur la dynamique de l'écoulement.

III – 5.2.2 Phase dispersée

La position des particules au commencement d'une simulation DEM-CFD peut être déterminée de deux façons différentes. Dans un premier cas, les particules sont placées dans le domaine selon un arrangement choisi par l'utilisateur, qui peut être aléatoire. Cela offre la possibilité de positionner les particules selon des arrangements particuliers dont la porosité est connue de façon analytique. Des exemples de réseaux de particules et leurs caractéristiques sont présentés en annexe A. La seconde méthode permettant d'obtenir la position des particules pour lancer une simulation couplée consiste à réaliser une simulation granulaire sèche, c'est à dire sans couplage avec le fluide, à l'aide du code GRAINS3D et d'utiliser la position des particules issue de cette première simulation. Cela permet par exemple de réaliser une sédimentation granulaire dans le but d'obtenir un lit dense de particules disposées de façon aléatoire. Les valeurs de la porosité du lit ainsi sédimenté peuvent varier entre le loose packing ($\mathcal{E}_f \simeq 0.42$) et le close packing ($\mathcal{E}_f \simeq 0.36$) selon le temps de sédimentation et la vibration ou non du réacteur.

Au cours de cette simulation granulaire sèche, les particules sont soumises à leur propre poids et aux forces de contact présentées dans la partie II – 2.2.1. Néanmoins, la poussée d'Archimède est également prise en compte dans le bilan des forces afin que le recouvrement δ_{ij} entre 2 particules i et j soit calculé avec le poids relatif des particules tout comme dans une simulation couplée PeliGRIFF. Si ce n'est pas le cas, le lit de particules obtenu numériquement est plus dense car les particules se recouvrent plus. Lors du démarrage d'une simulation couplée, le lit se détend alors brusquement lors de la première itération pour retrouver la situation d'équilibre correspondant à la prise en compte de la poussée d'Archimède dans le PFD (II.13).

III – 6 Optimisation du temps de calcul

Afin de tester les performances du modèle numérique implémenté, une batterie de simulations a été réalisée sur le super-calculateur ENER110 de IFPEN dont les caractéristiques sont présentées dans le tableau de l'annexe B. Les simulations sont réalisées sur des multiples de 16 cœurs (un nœud plein) afin de garantir une quantité constante de mémoire allouée à chacun des cœurs de calcul et s'affranchir ainsi des problèmes d'accès et de gestion de la mémoire inhérents aux architectures multi-cœurs telles que celle d'ENER110 (voir schéma en annexe B pour plus de renseignements). Les performances ainsi étudiées sont uniquement celles de l'implémentation MPI et non celles liées à la gestion et accès mémoire des données. Nous présentons tout d'abord un aperçu de la répartition du temps de calcul puis les performances parallèles du modèle DEM-CFD sont analysées à travers différents tests de scaling. Enfin, nous détaillons une nouvelle méthode informatique de mise à jour des zones de recouvrement.

III – 6.1 Répartition du temps de calcul

Les diagrammes de la figure III.13 montrent la répartition des temps de calcul pour une simulation réalisée sur un nœud plein. Pour cette simulation, la charge par cœur est de 30 000 particules et le domaine fluide est composé de $8 \times 8 \times 80$ cellules. Comme la décomposition de domaine est la même pour les phases fluide et solide, le nombre de cellules fluides traitées par unité de calcul est faible par rapport, par exemple, aux simulations de type DNS pour lesquelles le nombre de cellules par cœur peut atteindre le million d'unités. Pour le modèle DEM-CFD, la majeure partie du temps de calcul est ainsi passée à résoudre le problème granulaire.

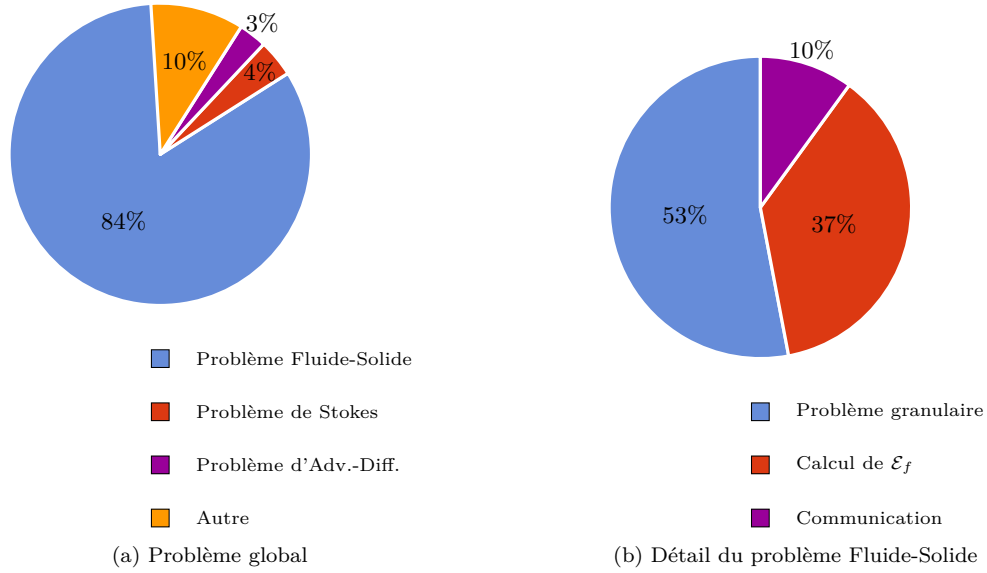


FIGURE III.13 – Répartition du temps de calcul

III – 6.2 Scaling à charge constante

Des tests de performance parallèle ont également été réalisés pour évaluer la capacité du code à modéliser des systèmes de grande taille. Pour cela, la charge par cœur est maintenue constante, ici 80 000 particules par cœur et des simulations ont été réalisées sur un nombre croissant de nœuds de calculs entre 1 et 32 nœuds. Pour rappel, un nœud de calculs de la machine ENER110 est composé de 16 cœurs. Les tests ont donc été réalisés sur des systèmes comptant entre 1 280 000 et 40 960 000 particules. La figure III.14 montre l'évolution du temps passé dans chacune des parties du code en fonction du nombre de nœuds de calcul utilisé, et donc de la taille du domaine modélisé.

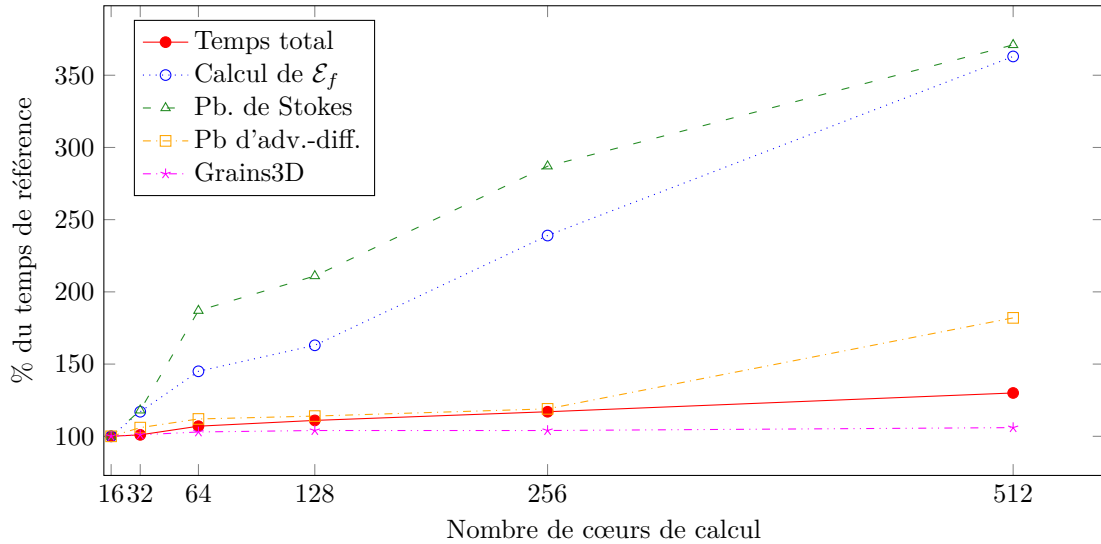


FIGURE III.14 – Scaling à charge constante par nœud. Evolution du temps passé dans les différentes parties du code par rapport au temps passé lors du calcul sur un nœud plein (16 cœurs)

Ce graphique met en évidence le très bon comportement parallèle du solveur granulaire GRAINS3D.

En effet, la résolution du problème inter-particulaire ne prend que 6 % de temps de calcul supplémentaire lors du passage de 16 à 512 cœurs. Il est important de remarquer que comme cette partie du code représente la majeure partie du temps de calcul total, les performances globales du code sont elles aussi relativement bonnes. En effet, le calcul total sur 512 cœurs ne prend que 20% de temps de plus que le cas de référence sur 16 cœurs. En revanche, certaines parties comme la résolution du problème de Stokes et le calcul de \mathcal{E}_f notamment, présentent un mauvais comportement parallèle car leur temps de calcul augmente considérablement lorsqu'un plus grand nombre de cœurs est utilisé.

Concernant le problème de Stokes, cette chute de performance est probablement due à la méthode de calcul employée pour la résolution du problème de Poisson (III.15). En effet, la matrice du laplacien de pression est initialisée à l'aide du préconditionneur multigrille AMG-BOOMER de la librairie HYPRE. Or cette méthode de résolution est d'autant plus efficace que le nombre de cellules traitées par unité de calcul est grand comme nous le mettons en évidence dans le paragraphe §III – 6.3.2. La mauvaise performance parallèle observée peut également provenir de la décomposition de domaine employée. En effet, le domaine est ici divisé uniquement dans les deux directions transverses et non dans la direction verticale afin d'obtenir une charge de particules par cœur approximativement constante. Les performances du préconditionneur multigrille ne sont donc pas optimales. Une factorisation Incomplète de type "Low-Up" (ILU) a également été testée mais sans amélioration notable.

L'autre partie du code présentant un mauvais comportement parallèle est le calcul de la fraction volumique de fluide. Néanmoins, en étudiant en détail le temps passé dans cette partie du code, il s'avère que la partie chronophage et dont le scaling n'est pas satisfaisant n'est pas le calcul du champ \mathcal{E}_f à proprement parler mais l'étape qui lui fait suite, à savoir la synchronisation du champ avec les sous-domaines voisins. Une nouvelle implémentation de cette étape de synchronisation a été développée pour améliorer ses performances parallèles, son fonctionnement général est présenté en partie §III – 6.4.

III – 6.3 Charge par processeur

Afin de parfaire la compréhension du comportement du code, des tests ont également été réalisés en augmentant la charge par cœur de calcul, indépendamment pour le fluide et pour les particules.

III – 6.3.1 Augmentation du nombre de particules

Le graphique III.15 représente l'évolution du temps passé par chacune des principales parties du code lorsque le nombre de particules par cœur est multiplié par 2, 4 puis 6, passant alors de 20 000 initialement à 40 000 puis 80 000 et enfin 120 000. Ce test est réalisé sur 1 seul nœud plein et les dimensions du domaine restent identiques, seule la hauteur du lit varie.

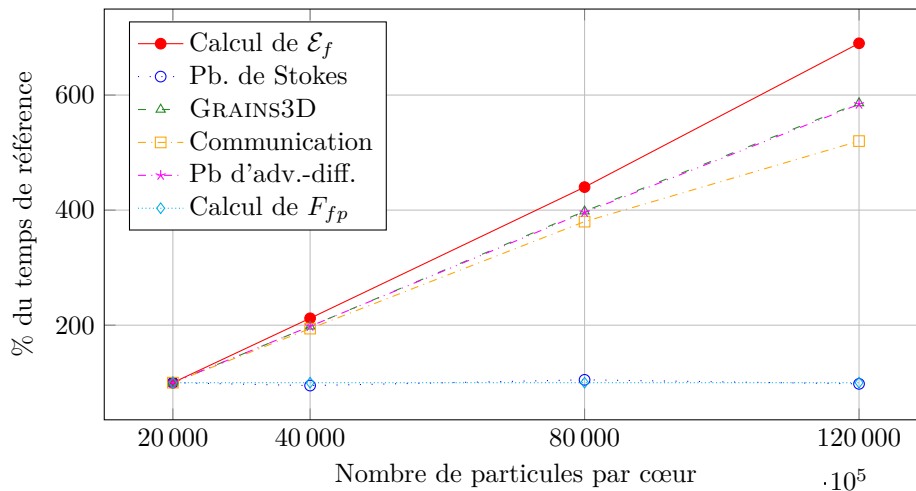


FIGURE III.15 – Evolution du temps de calcul en fonction du nombre de particules par cœur. Charge de référence : 20 000 particules par cœur.

Nous observons tout d'abord que le temps de calcul passé dans la partie granulaire augmente presque linéairement en fonction du nombre de particules par cœur. Cela est en accord avec les performances théoriques de ce code, à savoir une augmentation en $n \log(n)$ pour un système n fois plus grand (voir [224] pour plus de détail). Les parties relatives à la transmission des informations de la partie fluide ($\mathcal{E}_f, \mathbf{u}_f, p$) vers le module de couplage fluide-solide de GRAINS3D et le calcul de la porosité et de la force F_{fp} se comportent elles aussi comme on pouvait l'attendre, à savoir une augmentation presque linéaire en fonction du nombre de particules dans le domaine. Concernant la résolution des problèmes d'advection-diffusion (III.12) et de Stokes (III.13), leur durée reste quant à elle inchangée car le nombre de cellules fluides par cœur reste constant. Ce test met donc en évidence le fait qu'une augmentation de la charge de particules par cœur entraîne une augmentation globalement linéaire du temps passé à la résolution du problème granulaire pur et au couplage fluide-particules.

III – 6.3.2 Augmentation de la taille du domaine fluide

Pour finir cette série de tests sur les performances informatiques, des simulations ont été réalisées sur 16, 32 et 64 cœurs en augmentant progressivement le nombre de cellules fluide par cœur de calcul. La hauteur du domaine est conservée (80 cellules), mais le nombre de cellules sur la section est augmenté, passant de 8×8 à 16×16 puis à 32×32 . Contrairement à une simulation DNS, nous devons ici conserver un certain rapport entre la taille des mailles et le diamètre de particule $\Delta x/d_p$, ici cette valeur est de 2.5. Pour augmenter le nombre de cellules sur la section, il est donc nécessaire d'augmenter la taille du domaine. En d'autres termes, il n'est pas possible de raffiner le maillage pour augmenter la charge de cellule par cœur.

A titre informatif, la hauteur initiale du lit de particules est gardée constante mais le nombre de particules sur la section varie en fonction de la taille du domaine modélisé. Le graphique III.16 illustre la progression du temps de calcul par cœur en fonction du nombre de nœuds utilisé pour les trois différentes charges par cœur énoncées précédemment. Cette figure illustre l'amélioration des performances parallèles de la résolution du problème de Stokes en fonction du nombre de cellules fluides par cœur.

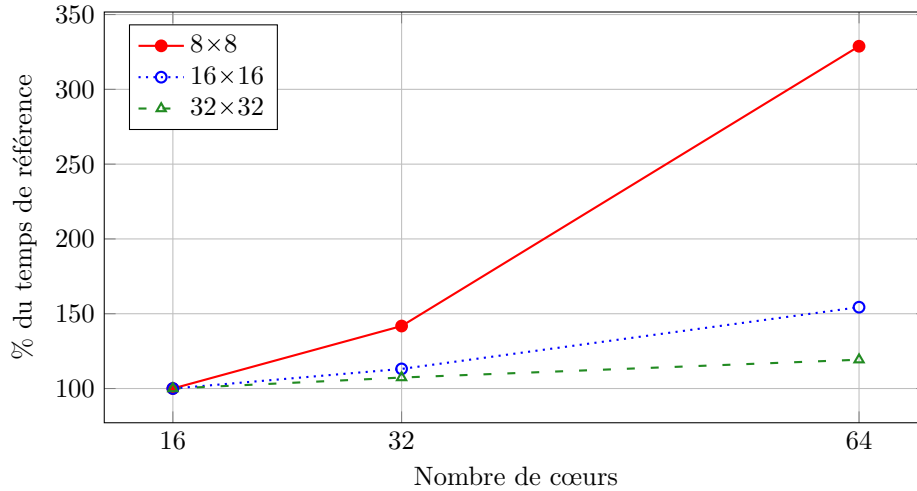


FIGURE III.16 – Scaling de la résolution du problème de Stokes pour différentes charges de cellules fluides par cœur

III – 6.4 Mise à jour du champ \mathcal{E}_f

Les tests de performances parallèles présentés en §III – 6.2 ont mis en évidence un mauvais comportement parallèle de la synchronisation du champ \mathcal{E}_f . Pour tenter de résoudre ce problème, une nouvelle implémentation de la mise à jour des valeurs se trouvant dans la zone de recouvrement a été développée. L'ancienne méthode est d'abord présentée, puis la nouvelle implémentation est détaillée.

Pour rappel, cette étape de mise à jour est nécessaire car un processeur réalise le calcul des valeurs qui lui appartiennent, mais les processeurs voisins nécessitent de connaître les valeurs des cellules qui sont contigües à leur sous-domaine car elles interviennent dans les schémas numériques.

III – 6.4.1 Ancienne méthode

La première méthode de communication implémentée utilisait le schéma de communication représenté en figure III.17. Son déroulement est le suivant :

1. Les valeurs calculées par le sous-domaine **A** (entourées en bleu sur la figure III.17) sont copiées dans le vecteur global.
2. Les valeurs du sous-domaine **A**, y compris les valeurs halozones (provenant de la bufferzone du sous-domaine **B**), sont copiées du vecteur global vers le vecteur local.
3. Les valeurs sont copiées du vecteur local vers le champ, ainsi tous les nœuds, y compris ceux de la zone de recouvrement, ont la bonne valeur.

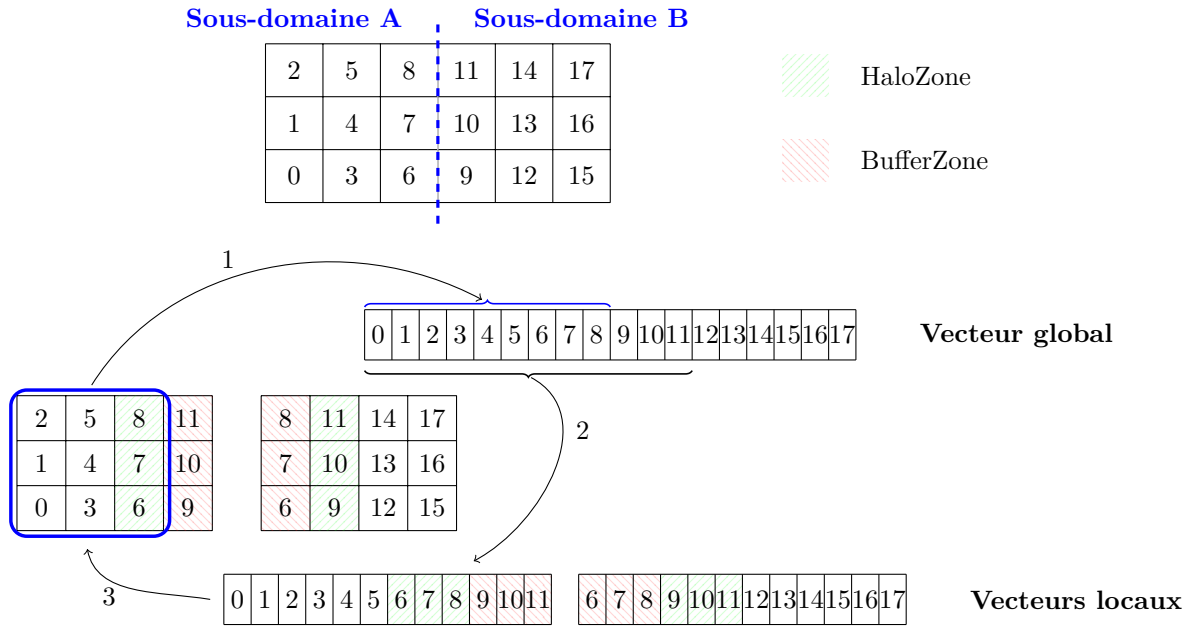


FIGURE III.17 – Ancienne procédure de mise à jour des valeurs de la bande de recouvrement.

Cette méthode, coûteuse en temps de communication, n'est pas optimale car les valeurs ne faisant pas partie de la bufferzone sont tout de même copiées dans le vecteur global puis local avant d'être "recopiées" sur le sous-domaine de départ alors qu'elles ne sont d'aucune utilité aux sous-domaines voisins. Il est à noter que la contre-performance de cette méthode est d'autant plus grande que le nombre de valeurs dans la zone de recouvrement est petit devant le nombre de valeurs dans tout le sous-domaine.

III – 6.4.2 Nouvelle méthode

Afin d'améliorer les performances de la mise à jour du champ \mathcal{E}_f dans les zones de recouvrement, une nouvelle méthode de communication a été implémentée. Désormais, le déroulement de l'opération est le suivant :

1. La liste de toutes les valeurs de la bufferzone du sous-domaine 0 (en vert) est constituée.
2. Cette liste est envoyée à tous les sous-domaines voisins.

3. Les voisins identifient les valeurs qui sont dans leur halozone et stockent leur pointeur dans un vecteur.
4. Les voisins envoient ce vecteur au sous-domaine 0.
5. Le sous-domaine 0 associe les valeurs de sa bufferzone aux voisins qui les détiennent dans leur halozone.
6. Par la suite, le sous-domaine 0 n'enverra à ses voisins que les valeurs qui les concernent.

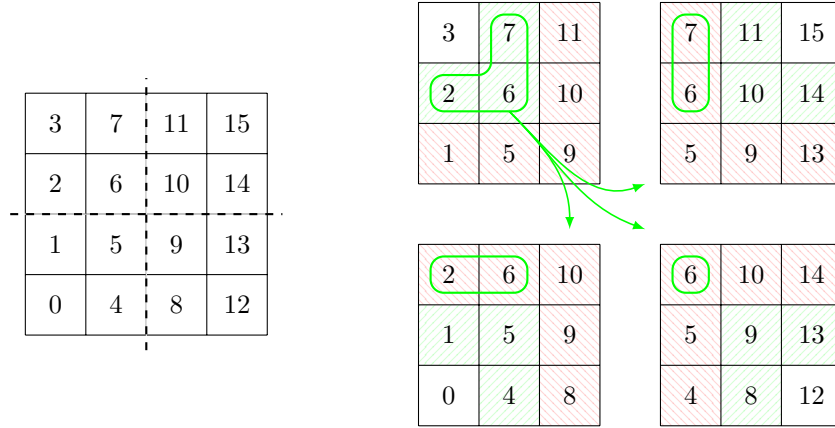


FIGURE III.18 – Nouvelle procédure de mise à jour des valeurs de la bande de recouvrement.

Cette méthode est bien plus efficace que la précédente car la taille des messages envoyés est réduite au strict minimum (seulement les valeurs utiles) et les messages ne sont envoyés qu'aux sous-domaines concernés et non à tous les voisins.

L'implémentation de cette nouvelle méthode de synchronisation du champ \mathcal{E}_f a permis d'une part de réduire de 10% le temps passé dans cette étape pour un calcul sur un nœud plein, mais surtout, son comportement parallèle a été nettement amélioré puisque cette étape ne prend plus que 30% de plus entre 16 et 256 cœurs, au lieu de 150% avec l'ancienne méthode.

III – 7 Conclusion

Dans ce troisième chapitre, les méthodes numériques développées et utilisées pour résoudre les équations du modèle DEM-CFD introduit précédemment ont été détaillées. Les performances informatiques de chacune des parties du code ont été étudiées afin d'identifier ses faiblesses et ses points forts. Des solutions ont été proposées et des modifications apportées afin d'améliorer les performances et la précision du modèle implémenté. Les différents tests de scaling, réalisés sur des systèmes comportant jusqu'à plusieurs dizaines de millions de particules, ont abouti à de très bonnes performances parallèles du code. Ainsi nous pouvons affirmer que le modèle DEM-CFD implémenté au cours de cette thèse est un outil permettant de réaliser des simulations de systèmes dont les dimensions, en terme de nombre de particules et de taille de domaine, sont égales à celles de systèmes pouvant également être étudiés à l'aide de modèle Euler-Euler. Des améliorations peuvent encore être apportées au modèle, notamment pour l'interpolation temporelle des données fluides transmises à la phase fluide, ainsi que concernant la distinction entre la grille fluide et les volumes de contrôle employés pour la prise de moyennes spatiales.

Chapitre IV

Validation

Sommaire

IV – 1	Introduction	76
IV – 2	Valeurs théoriques	76
IV – 2.1	Saut de pression à travers le lit	76
IV – 2.2	Vitesse minimale de fluidisation	79
IV – 3	Lits pulsés	81
IV – 3.1	Détails sur les lits pulsés	82
IV – 3.1.1	Vitesses dans les lits fluidisés	82
IV – 3.1.2	Configuration étudiée	82
IV – 3.2	Saut de pression et oscillations	86
IV – 3.2.1	Présentation	86
IV – 3.2.2	Valeur moyenne	87
IV – 3.2.3	Fluctuations de pression	88
IV – 3.3	Fraction volumique moyenne	89
IV – 3.3.1	Vitesse d'injection $U_{\text{bulk}} = 1.6U_{\text{mf}}$	89
IV – 3.3.2	Vitesse d'injection $U_{\text{bulk}} = 3U_{\text{mf}}$	90
IV – 4	Conclusion	90

IV – 1 Introduction

Afin de valider l'implémentation du modèle DEM-CFD présenté en partie II – 2, une série de tests de validation a été réalisée. Ce travail de validation est nécessaire car, d'une part, comme il existe deux "variantes" majeures du modèle DEM-CFD (modèles A et B), il est fréquent que des équipes utilisent des termes de couplage d'un modèle pour l'autre, comme par exemple un facteur \mathcal{E}_f en trop ou en moins dans l'expression de la force hydrodynamique. Ce genre d'erreur courante fut relevé lors de l'échange entre Kafui *et al.* et Feng & Yu par exemple [112, 74, 113], suivi de la mise au point de Feng & Yu [73]. D'autre part, nul n'est à l'abri d'une erreur d'implémentation ou d'un mauvais choix de schéma numérique ou d'approximation dans le modèle, c'est pourquoi il est nécessaire de réaliser une série de tests de validation.

Une partie de ces vérifications est basée sur l'obtention de grandeurs théoriques telles que le saut de pression à travers le lit de particules ou la vitesse minimale de fluidisation. Le modèle a également été validé en reproduisant des expériences menées par d'autres équipes et en comparant les résultats de simulation réalisées à l'aide de notre modèle aux résultats expérimentaux trouvés dans la littérature. A l'exception de la figure IV.6 qui illustre une simulation GRAINS3D, l'ensemble des résultats présentés dans ce chapitre est issu de simulations réalisées avec notre modèle DEM-CFD implémenté dans la plateforme PeliGRIFF.

IV – 2 Valeurs théoriques

Comme nous l'avons détaillé dans la section I – 3, la fluidisation d'un lit de particules est caractérisée par le débit de fluide et ses propriétés, la fraction volumique de fluide ainsi que les propriétés des particules. La conformité de la prise en compte de ces paramètres dans le modèle peut être vérifiée en contrôlant le saut de pression à travers le lit de particules ainsi que la vitesse minimale de fluidisation. Dans cette partie, les systèmes étudiés sont de section carrée et, à l'exception de la partie portant sur l'influence de la présence de parois sur la fluidisation, toutes les simulations présentées ici sont réalisées avec des conditions aux limites bi-périodiques.

IV – 2.1 Saut de pression à travers le lit

Le saut de pression à travers le lit de particules est un critère de validation idéal car l'obtention de cette grandeur est relativement simple, que ce soit expérimentalement ou numériquement, et sa valeur théorique est connue pour un lit fluidisé de particules. En effet, comme mentionné dans la partie I – 3.1, pour qu'un lit de particules soit fluidisé, le gradient de pression entre le haut et le bas du lit doit être égal à la somme du poids des particules et du poids du fluide occupant l'espace entre les particules. Avec P_T la pression totale, nous avons donc :

$$-\frac{dP_T}{dH_{\text{bed}}} = [\rho_p(1 - \mathcal{E}_f) + \rho_f \mathcal{E}_f]g \quad (\text{IV.1})$$

C'est ce gradient de pression qui est obtenu expérimentalement en mesurant la différence de pression entre deux hauteurs du réacteur.

Afin d'obtenir le gradient de pression dynamique engendré par la présence des particules, il est donc nécessaire de soustraire la contribution de la pression hydrostatique engendrée par le poids de la colonne de fluide :

$$-\frac{dp}{dH_{\text{bed}}} = -\frac{dP_T}{dH_{\text{bed}}} - \rho_f g \quad (\text{IV.2})$$

Le gradient de pression ainsi obtenu en combinant les équations (IV.1) et (IV.2) est alors égal aux poids relatif des particules, c'est à dire à leur poids amputé de la contribution de la poussée d'Archimède qui s'exerce sur elles :

$$-\frac{dp}{dH_{\text{bed}}} = (\rho_p - \rho_f)(1 - \mathcal{E}_f)g \quad (\text{IV.3})$$

Ainsi, le saut de pression dynamique à travers un lit de particules dont la hauteur initiale au repos est de h_0 pour une porosité de $\mathcal{E}_{f,0}$ est donnée par la relation :

$$-\frac{\Delta p}{H_0} = (\rho_p - \rho_f)(1 - \mathcal{E}_{f,0})g \quad (\text{IV.4})$$

Il est intéressant de remarquer que cette relation est en réalité indépendante de la porosité du lit. En effet, pour une quantité de particules N_p et une hauteur de lit H , l'équation (IV.4) peut être réécrite :

$$-\frac{\Delta p}{H} = (\rho_p - \rho_f) \left(\frac{N_p V_p}{\Delta V} \right) g \quad (\text{IV.5})$$

$$= (\rho_p - \rho_f) \left(\frac{N_p V_p}{L_x L_y H} \right) g \quad (\text{IV.6})$$

C'est à dire :

$$-\Delta p = (\rho_p - \rho_f) \frac{N_p V_p}{L_x L_y} g \quad (\text{IV.7})$$

Remarque 9 Dans cette étude, comme le terme de gravité ($\mathcal{E}_f \rho_f g$) n'est pas pris en compte dans l'équation de quantité de mouvement (III.1), la pression obtenue sur la face d'entrée est la pression dynamique.

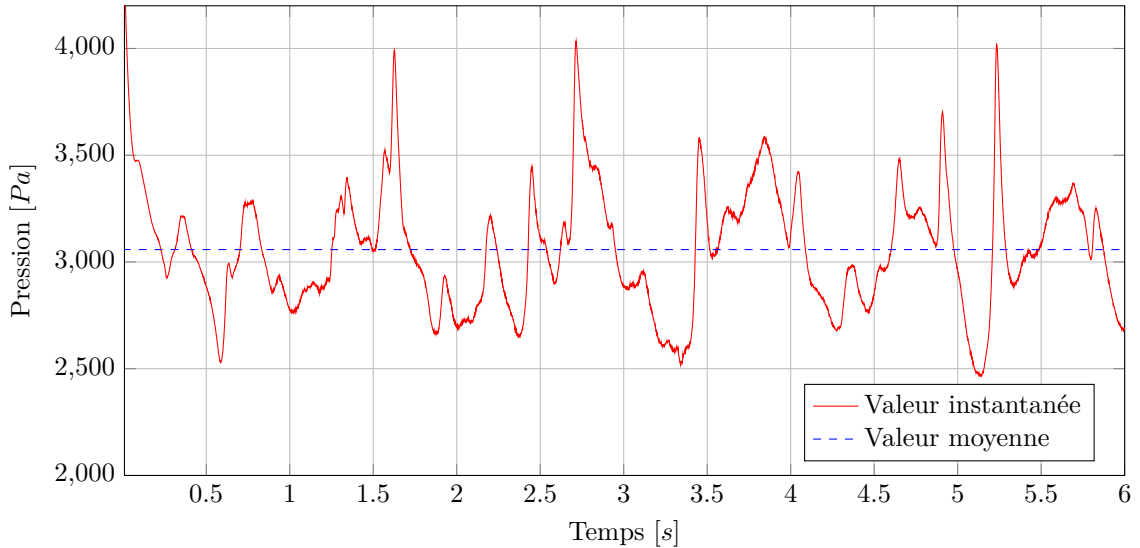


FIGURE IV.1 – Oscillations de la pression dynamique du fluide (air) sur la face d'entrée du réacteur pour $U_{\text{in}} = 2U_{\text{mf}}$. Propriétés du système données dans le tableau IV.1

Comme l'illustre la figure IV.1, la pression sur la face d'entrée d'un lit bouillonnant oscille constamment. L'amplitude de ces variations de pression est d'autant plus grande que la vitesse d'injection est importante. Néanmoins, peu importe la vitesse de fluidisation, la moyenne temporelle du saut de pression à travers le lit reste égale à la valeur théorique obtenue à l'aide de l'équation (IV.7) pour des vitesses de fluidisation qui sont jusqu'à un ordre de grandeur plus élevées que la vitesse minimale de fluidisation, ce qui est logique étant donné que la quantité de particules dans le lit reste constante. Pour des vitesses de fluidisation plus élevées, allant jusqu'à engendrer le transport de la phase solide, la différence de pression à travers le lit augmente légèrement en fonction de la vitesse d'injection. Cela est dû à l'augmentation des contraintes du fluide sur les parois ainsi qu'à l'augmentation de l'intensité des contacts particules-parois.

TABLE IV.1 – Paramètres de simulation pour les simulations présentées dans ce chapitre de validation

(a) Lit de particules		(b) Phase fluide			
Paramètre	Valeur	Paramètre	air	eau	huile d'olive
N_p [–]	320 000	ρ_f [$kg.m^{-3}$]	1.2	1000	915
$Lx \times Ly \times Lz$ [m^3]	$0.08 \times 0.08 \times 0.6$	μ_f [$Pa.s$]	1.8×10^{-5}	1	0.1
$\mathcal{E}_{f,0}^C$ [–]	0.476	Δp_{in} [Pa]	3 080	1 025	1 200
H_0 [m]	0.4	$U_{mf}^{0.38}$ [$m.s^{-1}$]	0.7	8.7×10^{-3}	1.35×10^{-4}
d_p [m]	2×10^{-3}	$\mathcal{R}e_{mf}^{0.38}$ [–]	93	17	2×10^{-2}
ρ_p [$kg.m^{-3}$]	1 500				

Le saut de pression obtenu lors d'une injection à travers un lit de particules peut également être comparé à la valeur empirique résultant de la corrélation proposée par Ergun [67] que nous avons déjà étudiée dans la partie I – 3.1.2 et dont nous rappelons l'expression :

$$-\frac{dp}{dz} = 150 \frac{(1 - \mathcal{E}_f)^2}{\mathcal{E}_f^3} \frac{\mu_f U_{in}}{d_p^2} + 1.75 \frac{(1 - \mathcal{E}_f)}{\mathcal{E}_f^3} \frac{\rho_f U_{in}^2}{d_p} \quad (IV.8)$$

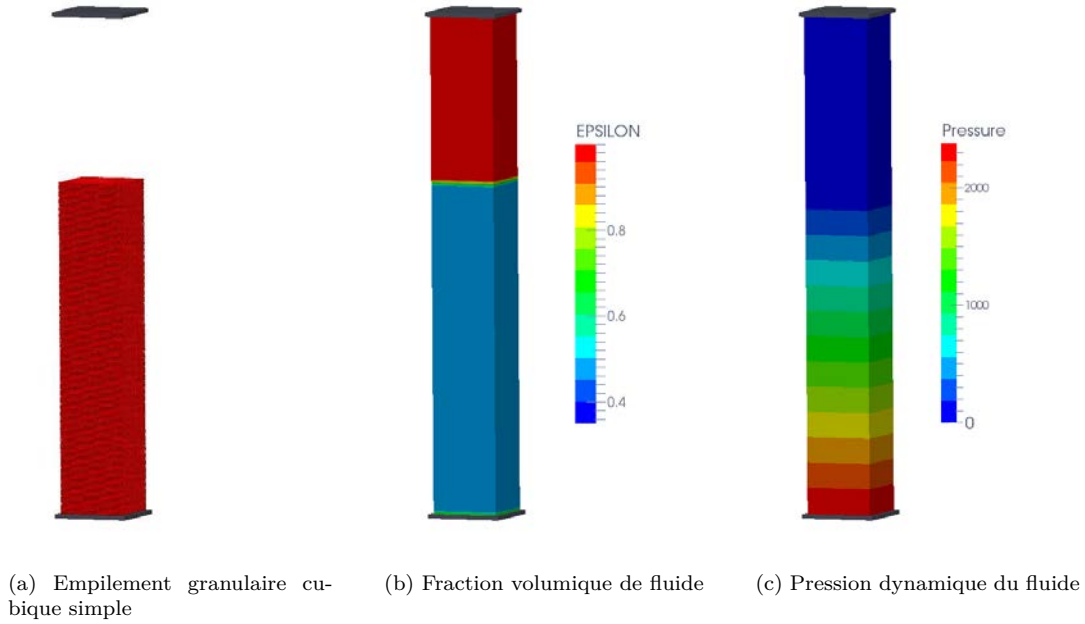


FIGURE IV.2 – Ecoulement à travers un lit fixe de $40 \times 40 \times 200$ particules empilées selon un arrangement cubique simple

Tout d'abord, cette équation met en évidence que le gradient vertical de pression dynamique est une constante, c'est à dire que pour une vitesse d'injection donnée dans un lit de particules uniformément réparties, *ie.* pour U_{in} et \mathcal{E}_f constants, la pression chute linéairement en fonction de la hauteur du lit. Ceci est illustré par la figure IV.2-(c) pour un lit fixe dont les caractéristiques sont données dans le tableau IV.1.

Ensuite, comme nous l'avons évoqué dans la partie I – 3.1.2, l'équation d'Ergun (IV.8) prend en compte la perte de charge due aux effets visqueux ainsi que celle engendrée par les effets inertiels. Ainsi, le saut de pression croît linéairement avec la vitesse d'injection lorsque le Reynolds est faible,

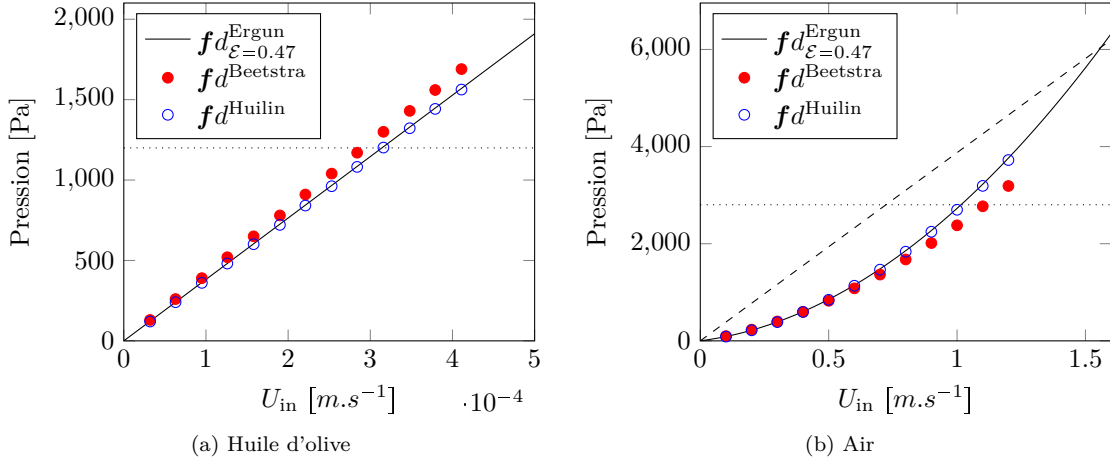


FIGURE IV.3 – Evolution du saut de pression à travers le lit en fonction de la vitesse d'entrée du fluide. Les paramètres de simulation sont présentés dans les tableaux IV.1-(a) et (b)

et au carré de la vitesse d'injection si l'écoulement est inertiel. Ce comportement est bien retrouvé par les simulations comme l'illustrent les graphiques de la figure IV.3 représentant l'évolution du saut de pression dans un lit fixe de 320 000 particules, disposées selon un arrangement cubique simple, *ie.* dont la porosité est égale à $\mathcal{E}_f = 0.476$, dans les cas où le fluide injecté est de l'huile d'olive ainsi que de l'air. En effet, dans le cas où de l'huile est injectée, le Reynolds au seuil de fluidisation (voir §I – 3.2) est de $\mathcal{Re}_{mf}^{0.38} = 2 \times 10^{-2}$ et l'évolution du saut de pression à travers le lit en fonction de la vitesse d'injection est linéaire, tandis que pour une fluidisation au gaz, $\mathcal{Re}_{mf}^{0.38} = 93$ et $\Delta p = f(U_{in})$ est alors quadratique.

IV – 2.2 Vitesse minimale de fluidisation

Comme nous l'avons vu en partie I – 3.2, la vitesse minimale de fluidisation est une grandeur directement liée au saut de pression à travers le lit de particules. Rappelons que le seuil de fluidisation est atteint lorsque les forces hydrodynamiques exercées sur le lit sont égales ou supérieures au poids total du lit et qu'il est possible de connaître approximativement la vitesse minimale de fluidisation en posant l'égalité entre la corrélation d'Ergun (I.22) et le poids relatif du lit (I.3). La valeur de U_{mf} est alors obtenue en résolvant l'équation du second degré suivante :

$$1.75\rho_f d_p U_{mf}^2 + 150(1 - \mathcal{E})\mu_f U_{mf} - \mathcal{E}_f^3 d_p^2 (\rho_p - \rho_f)g = 0 \quad (IV.9)$$

Afin de vérifier l'aptitude du modèle DEM-CFD implémenté à retrouver cette vitesse minimale de fluidisation, le fluide est injecté dans un lit de particules sédimentées en augmentant progressivement le débit d'injection. Le seuil de fluidisation est considéré atteint lorsque le saut de pression à travers le lit n'évolue plus en fonction de la vitesse d'injection.

En appliquant l'équation (IV.9) à la configuration présentée dans le tableau IV.1, la vitesse minimale de fluidisation obtenue est de 0.67 m.s^{-1} pour une fraction volumique moyenne de fluide dans le lit sédimenté de $\mathcal{E}_{mf} = 0.37$. En revanche, pour $\mathcal{E}_{mf} = 0.4$, nous avons $U_{mf} = 0.78 \text{ m.s}^{-1}$, c'est à dire une vitesse 17% plus élevée que dans le cas où $\mathcal{E}_{mf} = 0.37$, c'est à dire pour une porosité seulement 8% plus faible. Cela met en évidence la forte dépendance de la vitesse minimale de fluidisation avec la fraction volumique de fluide dans le lit. Or, l'empilement de particules se réarrange sous l'effet des forces hydrodynamiques, même pour des vitesses d'injection inférieures à la vitesse minimale de fluidisation. Il en résulte une légère expansion du lit, et donc une modification de la fraction volumique moyenne de celui-ci. Plus la vitesse d'injection se rapproche de la vitesse minimale de fluidisation théorique, plus le lit de particules vibre et frémit pour s'arranger de façon à ce que la résistance engendrée par la présence des particules soit minimale. C'est pourquoi il est difficile de déterminer avec exactitude la porosité du lit qu'il faut prendre en compte dans l'équation (IV.9) afin de calculer la vitesse minimale de fluidisation théorique U_{mf} .

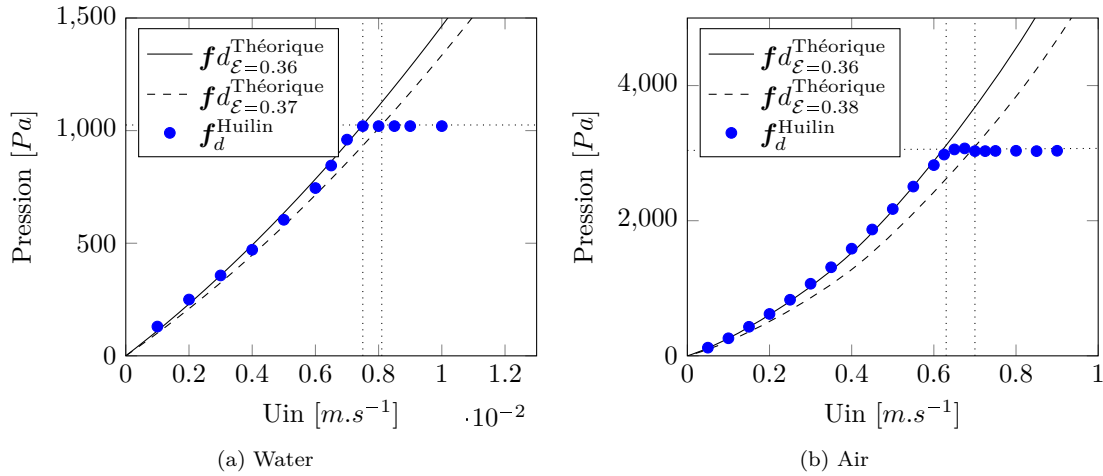


FIGURE IV.4 – Evolution du saut de pression à travers le lit en fonction de la vitesse d'entrée du fluide. Les paramètres de simulation sont présentés dans le tableau IV.1.

Comme l'illustre la figure IV.4-(a), la vitesse minimale de fluidisation obtenue par la simulation est comprise entre $7.5 \cdot 10^{-3} \text{ m.s}^{-1}$ et $8.1 \cdot 10^{-3} \text{ m.s}^{-1}$ pour une injection d'eau, ce qui correspond à une porosité du lit comprise dans l'intervalle $0.36 < \mathcal{E}_{\text{mf}} < 0.37$. Concernant la fluidisation avec de l'air (figure IV.4-(b)), la vitesse minimale de fluidisation obtenue est comprise entre 0.63 m.s^{-1} et 0.7 m.s^{-1} , ce qui correspond à une porosité du lit comprise dans l'intervalle $0.36 < \mathcal{E}_{\text{mf}} < 0.38$.

Ces résultats sont en accord avec les valeurs théoriques attendues, que ce soit pour la porosité du lit au seuil de fluidisation, la vitesse minimale de fluidisation ou pour le saut de pression à travers le lit. Soulignons le fait que le saut de pression dynamique nécessaire à la fluidisation du lit est plus faible dans le cas d'une fluidisation liquide en raison de la contribution de la poussée d'Archimède, en accord avec la prédiction de l'équation (IV.7) :

$$\Delta p_{\text{eau}} = 1028 \text{ Pa} < \Delta p_{\text{air}} = 3080 \text{ Pa} \quad (\text{IV.10})$$

Il est également intéressant d'étudier l'influence des conditions aux limites sur la concentration de particules dans le domaine, et donc sur le saut de pression à travers le lit. Les mêmes tests de fluidisation ont donc été réalisés pour des systèmes comportant des parois latérales à la place des conditions aux limites bi-périodiques utilisées jusqu'à lors.

Comme l'illustre la figure IV.5, la valeur du gradient de pression est plus faible, à vitesse d'injection égale, dans le cas d'un domaine borné par des parois latérales. Ainsi, la vitesse d'injection nécessaire pour atteindre le saut de pression équivalent au poids relatif du lit de particules doit être plus importante que dans le cas bi-périodique. Ce résultat est la conséquence d'une compacité plus faible du lit dans le cas d'un système avec parois latérales qu'avec des conditions aux limites bi-périodiques. En effet, la présence de parois latérales empêche les particules de s'arranger de façon aléatoire aux abords des obstacles, engendrant des zones de plus faible densité de particules sur une épaisseur d'au moins deux diamètres de particule, la porosité globale du lit est donc plus élevée que lorsque les particules peuvent se répartir librement comme dans un domaine infini. Cette différence de compacité est illustrée sur la figure IV.6 pour la situation exagérée d'un empilement de 10 000 particules dans un domaine de section $5d_p \times 5d_p$. La hauteur du lit sédimenté est en effet alors 8% plus élevée dans le cas de présence de parois latérales, ce qui conduit à une porosité de 40% dans le cas avec parois, contre 36% pour des conditions aux limites bi-périodiques.

Un dernier test sur le saut de pression à travers le lit de particules a été réalisé afin de chercher à mettre en évidence le phénomène d'hystérésis qui se manifeste entre les gradients de pression obtenus avec des vitesses d'injection croissante et décroissante (voir §I – 3.1.3). La figure IV.7 illustre le résultat obtenu dans le cas d'un système comportant des parois latérales.

La différence de pente entre les courbes correspondant aux vitesses d'injection croissantes et décroissantes est peu marquée mais néanmoins présente, que ce soit dans le cas d'une fluidisation liquide

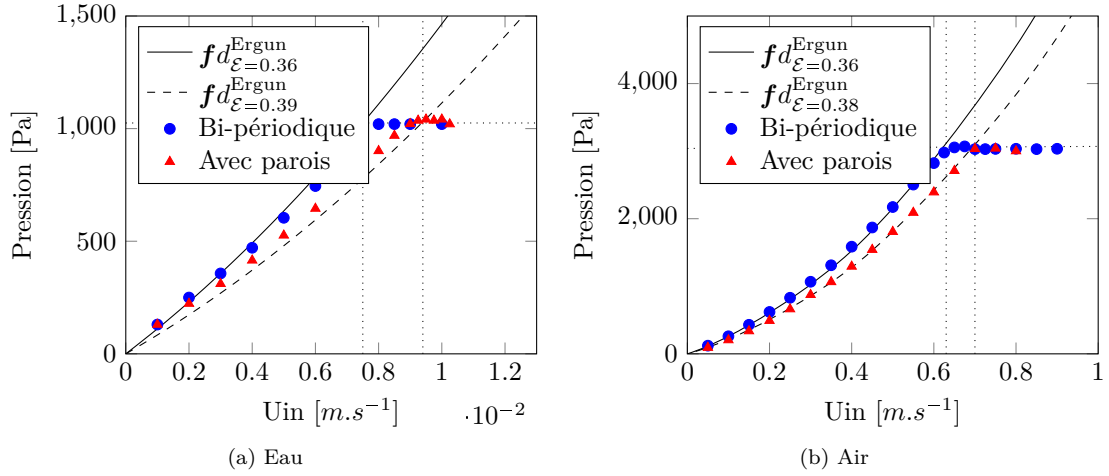


FIGURE IV.5 – Evolution du saut de pression à travers le lit en fonction de la vitesse d'entrée du fluide. Les paramètres de simulation sont présentés dans le tableau IV.1, la formulation employée pour la loi de traînée est celle de Huilin *et al.* [107]

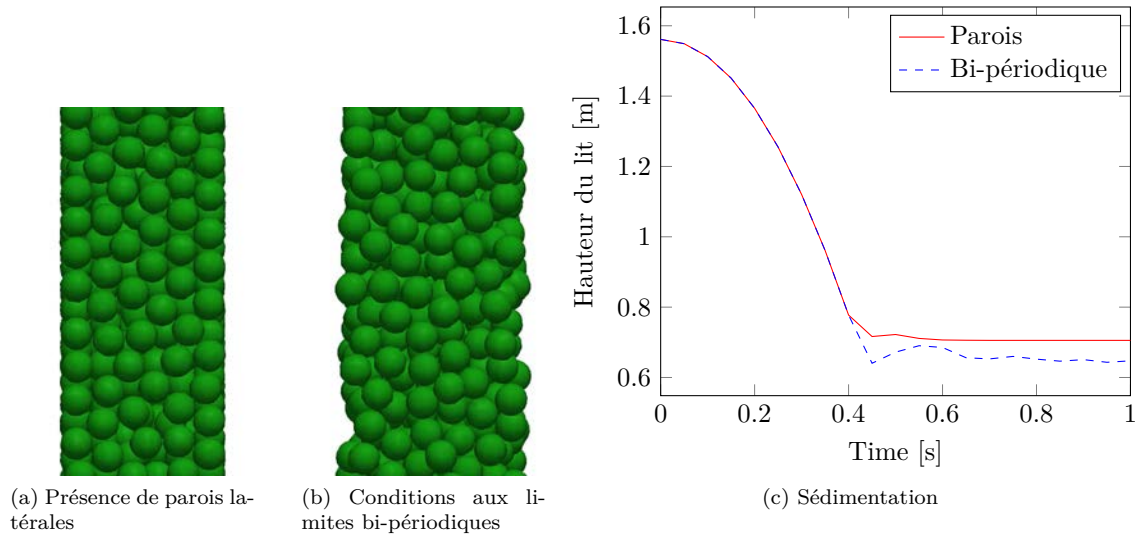


FIGURE IV.6 – Illustration de la présence de murs sur la compacité d'un lit de particules lors d'une sédimentation

ou gazeuse. Il serait intéressant de réaliser d'autres tests avec des configurations différentes pour tâcher de mettre ce phénomène plus en évidence, par exemple avec une hauteur de lit initiale plus élevée. Notons que la largeur du domaine ainsi que les propriétés mécaniques des particules, notamment le coefficient de friction de Coulomb, peuvent également influencer sur la différence de saut de pression entre des vitesses d'injection croissante et décroissante.

IV – 3 Lits pulsés

Une autre partie de la validation du modèle implémenté est basée sur des comparaisons à des résultats expérimentaux publiés dans la littérature. Les résultats de validation présentés ici concernent l'étude de lits pulsés, dont le fonctionnement général est présenté en partie I – 2.3. Après avoir donné quelques détails sur les lits pulsés et la raison de leur utilisation comme configuration de validation,

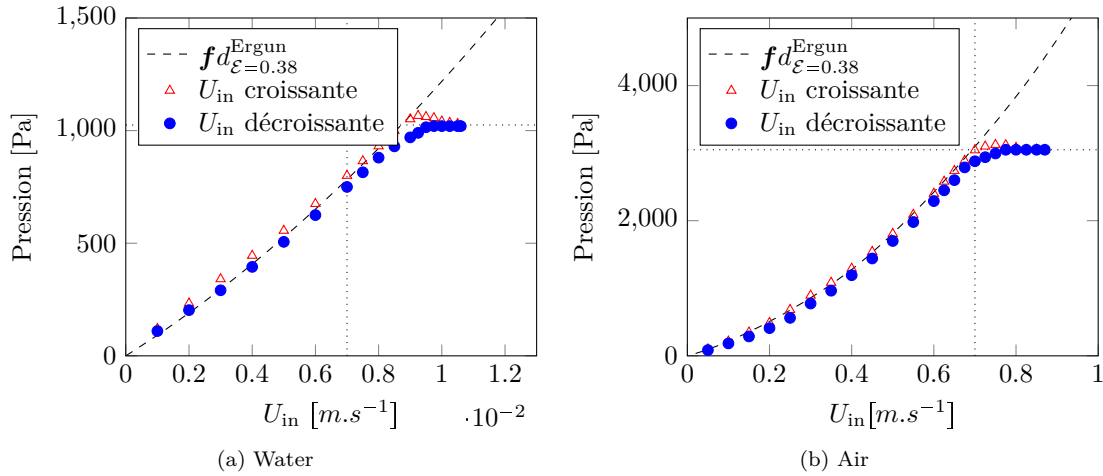


FIGURE IV.7 – Evolution du saut de pression à travers le lit en fonction de la vitesse d'entrée du fluide. Les paramètres de simulation sont présentés dans le tableau IV.1

nous présentons les résultats obtenus pour des comparaisons à des résultats expérimentaux ainsi que numériques.

IV – 3.1 Détails sur les lits pulsés

Le comportement des lits pulsés est particulièrement dépendant des contacts entre les particules, et de ce fait, les collisions entre les particules nécessitent d'être modélisées avec justesse et précision. C'est pourquoi il est communément admis que les approches Euler-Lagrange sont particulièrement adaptées à la modélisation des lits pulsés, contrairement aux approches Euler-Euler où les collisions entre les particules sont modélisées de façon plus approximative. Les modèles DEM-CFD sont également plus intéressants que les simulations totalement résolues car le nombre de particules contenues dans ce type de réacteurs est d'au minimum plusieurs dizaines de milliers d'éléments, ce qui représente un temps de simulation considérable pour des simulations DNS.

IV – 3.1.1 Vitesses dans les lits fluidisés

Afin de faciliter les notations des vitesses dans les lits fluidisés, introduisons une nouvelle expression de la vitesse du fluide dans le lit en fonction de la vitesse d'injection et du rapport des surfaces entre l'orifice d'injection et la section du domaine :

$$U_{bulk} = U_{in} \frac{l_x^{in} l_y^{in}}{L_x L_y} \quad (IV.11)$$

Où L_x et L_y sont les dimensions de la section du domaine alors que l_x^{in} et l_y^{in} sont les dimensions de l'orifice d'injection. Ainsi dans le cas des lits bouillonnants étudiés jusqu'à maintenant, pour lesquels la surface d'injection était égale à la totalité de la face inférieure du domaine, nous avons $U_{bulk} = U_{in}$. Mais dans le cas des lits pulsés, la surface de l'orifice ou des orifices d'injection est généralement bien plus petite que la section du domaine. Or, le fluide qui est injecté par l'orifice occupe ensuite la totalité du domaine, et perd ainsi de la vitesse car le débit est conservé. La vitesse U_{bulk} représente donc la vitesse vue par les particules dans le lit.

IV – 3.1.2 Configuration étudiée

Notons que la profondeur des dispositifs expérimentaux de lits pulsés est habituellement de seulement quelques couches de particules et que la profondeur de la fente d'injection est égale à la profondeur du réacteur (voir figure IV.8).

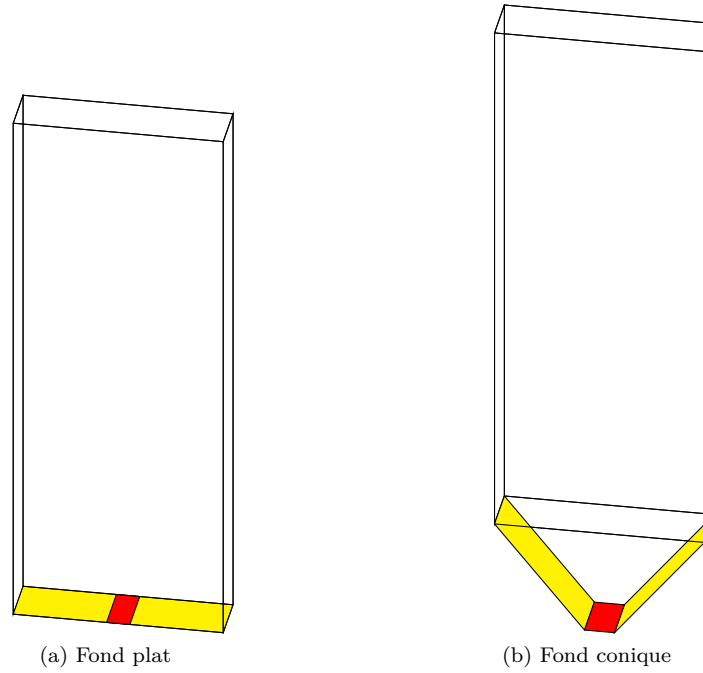


FIGURE IV.8 – Lits fluidisés “2,5 D” communément employés pour les études expérimentales. En jaune, la face inférieure du réacteur ; en rouge, la surface d’injection du fluide

Cela facilite la visualisation du jet et donc la compréhension de ce type de lit fluidisé. En effet, les dimensions des structures créées au sein du réacteur, à savoir les bulles de fluide et les amas de particules, atteignent alors aisément la distance entre les plus proches parois, les rendant ainsi visibles de l’extérieur du domaine. Les résultats expérimentaux de lits pulsés étant particulièrement nombreux dans la littérature, ce type d’écoulement offre la possibilité de valider le modèle DEM-CFD implémenté au cours de cette thèse. Nous comparons ici nos résultats de simulations à ceux obtenus expérimentalement par Brown [20] de l’Université de Virginia Tech lors de ses travaux de thèse ainsi qu’à la reproduction numérique de ces mêmes expériences ultérieurement réalisée par Deb *et al.* [45] de la même Université. Les simulations de Deb ont été réalisées à l’aide d’un modèle Euler-Lagrange similaire à celui développé dans cette présente étude.

IV – 3.1.2.a Géométrie du domaine et vitesses d’injection

Le domaine étudié est une boîte parallélépipédique dans laquelle le fluide peut être injectée par un, deux ou trois orifices selon la configuration souhaitée. Les dimensions du domaine sont indiquées sur la figure IV.9.

Le fluide injecté dans le domaine est de l’air à température ambiante et les vitesses d’injection étudiées sont $U_{\text{bulk}} = 1.6U_{\text{mf}}$ et $U_{\text{bulk}} = 3U_{\text{mf}}$ (voir §IV – 3.1.1 pour les notations). Les valeurs des vitesses d’injection sont détaillées dans le tableau IV.2 en fonction du nombre d’orifice d’injection du fluide et de la taille des particules.

IV – 3.1.2.b Particules employées

Les particules sont en verre ($\rho_p = 2500 \text{ kg.m}^{-3}$) et deux tailles de particule ont été étudiées : des particules de diamètre $d_p = 550 \mu\text{m}$ pour lesquelles le régime de fluidisation appartient à la classe B de la classification de Geldart (voir §I – 3.3) et des particules de diamètre $d_p = 750 \mu\text{m}$ correspondant à un régime de fluidisation du groupe D de cette même classification. En dehors de la densité et de la taille, les propriétés mécaniques (élasticité, coefficient de friction) des particules ne sont pas données dans les travaux de Brown. En revanche, Deb *et al.* [45] mentionnent les paramètres de contact utilisés pour la reproduction numérique de l’expérience : le coefficient de restitution élastique est de $E_n = 0.9$

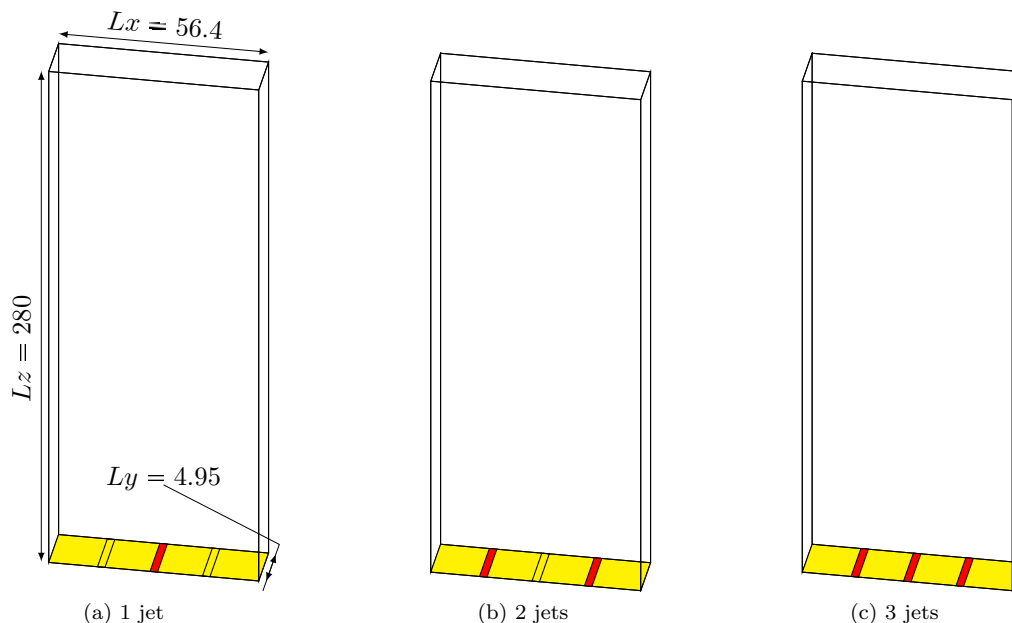


FIGURE IV.9 – Géométrie du dispositif expérimental de Brown [20], dimensions exprimées en millimètres

TABLE IV.2 – Valeurs des vitesses d'injection et notation employée pour la reproduction des expériences de Brown [20]

U_{bulk}	Nombre de jet(s)	Notation		$U_{\text{in}} [m.s^{-1}]$	
		cas 1	cas 2	cas 1	cas 2
$1.6 U_{\text{mf}}$	1	1p6U-1J-550	1p6U-1J-750	13.44	24.08
	2	1p6U-2J-550	1p6U-2J-750	6.72	12.04
	3	1p6U-3J-550	1p6U-3J-750	4.48	8.03
$3.0 U_{\text{mf}}$	1	3U-1J-550	3U-1J-750	25.2	45.15
	2	3U-2J-550	3U-2J-750	12.6	22.58
	3	3U-3J-550	3U-3J-750	8.4	15.05

et le coefficient de friction de Coulomb est $\mu_c = 0.1$.

Etant donné que ces travaux ont été réalisés par les membres du même laboratoire, nous utilisons les mêmes paramètres de contact que ceux donnés par Deb pour cette étape de validation. Comme nous l'avons déjà évoqué en introduction de cette partie traitant des lits pulsés, la modélisation de la phase granulaire est très importante car la dynamique de l'ensemble du lit est impactée par les collisions inter-particulaires. Cela est mis en évidence dans la partie V – 4 lors de l'étude de l'influence des propriétés mécaniques des particules sur la dynamique des lits fluidisés bouillonnants et pulsés.

IV – 3.1.2.c Maillage

Le maillage employé pour la reproduction de l'expérience de Brown est identique à celui utilisé par Deb *et al.* [45] et comporte 35 mailles dans la direction transverse et seulement 3 dans la profondeur, le nombre de mailles dans la direction axiale est quant à elle dépendante de la hauteur de domaine simulée (160 mailles pour 280mm). En effet, pour de faibles vitesses d'injection, $U_{\text{bulk}} = 1.6U_{\text{mf}}$ par exemple, les particules restent dans la partie basse du domaine ($h_{\text{bed}} < 80mm$), il n'est donc pas nécessaire de réaliser les simulations sur un domaine aussi haut que l'expérience de Brown. Tous ces paramètres sont synthétisés dans le tableau IV.3.

TABLE IV.3 – Paramètres de simulation pour le lit cubique simple illustré en figure IV.2-(a)

Paramètre	Cas 1	Cas 2
Nombre de particules	100 000	50 000
d_p [μm]	550	750
ρ_p [$kg.m^{-3}$]	2500	2500
Geldart	groupe B	groupe D
U_{mf} [$m.s^{-1}$]	0.24	0.43
Δp_{in} [Pa]	765	970
Domaine [mm^3]	$56.4 \times 4.95 \times 280$	
Maillage	$35 \times 3 \times 160$	
Résolution	$35 \times 3 \times 160$	
ρ_f [$kg.m^{-3}$]	1.2	
μ_f [$kg.m^{-3}.s^{-1}$]	$1.8 \cdot 10^{-5}$	

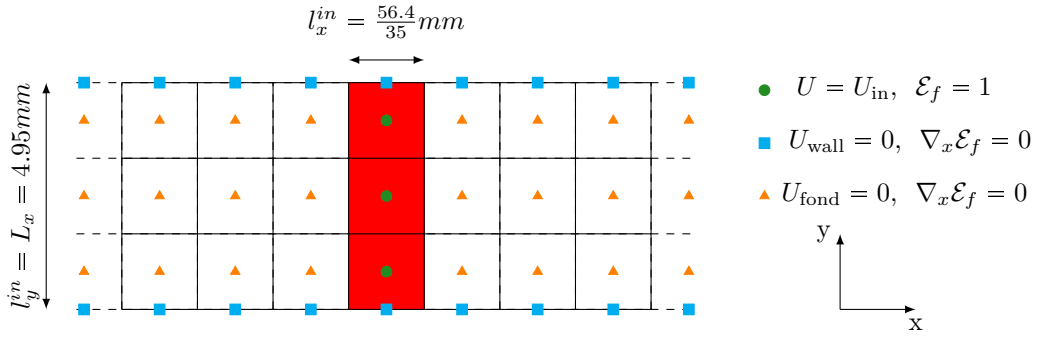


FIGURE IV.10 – Conditions aux limites discrétisées sur la face inférieure d'un lit pulsé

La résolution du maillage utilisé est relativement faible pour modéliser l'écoulement (voir tableau IV.4 et figure IV.10), mais il est très difficile, voir impossible, de faire autrement pour deux raisons majeures. D'une part, il est nécessaire de respecter la largeur des orifices d'injection ainsi que la distance qui les sépare les uns des autres afin de reproduire fidèlement l'expérience de référence. Nous avons certes tenté de raffiner le maillage dans la direction transverse (x), tout en conservant la position des orifices d'injection. La vitesse d'injection doit alors être augmentée au prorata de la diminution de surface d'injection pour conserver le débit (voir §IV – 3.1.1), mais les résultats n'ont pas été concluants. D'autre part, la taille des mailles ne peut pas être trop petite par rapport au diamètre des particules comme nous l'avons énoncé lors de la définition du modèle en partie II – 2.4. Ainsi, en raison de la faible profondeur du domaine, le nombre de cellules dans la profondeur du domaine doit être égale soit à 3 soit à 4 afin de conserver un rapport $2.2 \leq \Delta y/d_p \leq 1.65$ dans le cas $d_p = 550 \mu m$, ou $3 \leq \Delta y/d_p \leq 2.25$ dans le cas $d_p = 750 \mu m$, conformément aux restrictions évoquées en partie II – 2.4. Peu de différences ont été observées lors de l'utilisation de 4 mailles dans la direction de la profondeur, ainsi nous avons fait le choix de conserver la même configuration que Deb, à savoir 3 cellules dans la profondeur.

TABLE IV.4 – Résolution du maillage exprimée en fonction du diamètre des particules dans le cas d'une grille $35 \times 3 \times 160$

d_p	$\Delta x/d_p$	$\Delta y/d_p$	$\Delta z/d_p$
$550 \mu m$	2.93	3	3.18
$750 \mu m$	2.15	2.2	2.33

IV – 3.2 Saut de pression et oscillations

La validation présentée ici est basée sur la moyenne temporelle et la fréquence des oscillations du saut de pression à travers le lit de particules ainsi que la moyenne temporelle de la distribution des particules dans le réacteur .

IV – 3.2.1 Présentation

De la même manière que pour les lits bouillonnants, le saut de pression dynamique à travers le lit de particules constitue un critère de validation intéressant car cette valeur est facilement disponible expérimentalement comme numériquement. De plus, comme le montre la figure IV.11, son évolution temporelle est particulière. En effet, lorsque l'on débute la fluidisation d'un lit pulsé, celui-ci passe

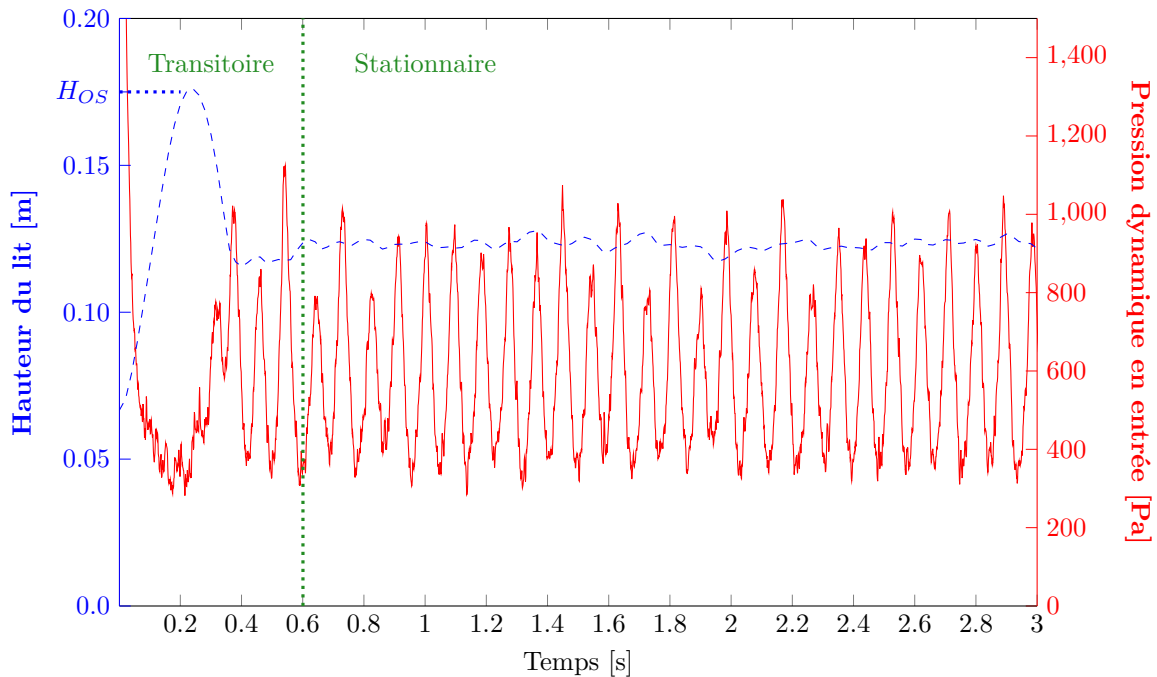


FIGURE IV.11 – Exemple d'évolution temporelle de la hauteur (en bleu) et de la pression en entrée (en rouge) dans un lit pulsé mono-jet pour une vitesse d'injection $U_{bulk} = 3U_{in}$

par un régime transitoire (ici entre 0s et 0.6s environ), avant d'atteindre un état stationnaire de fluidisation. Durant les premiers instants de la fluidisation (ici entre 0s et 0.1s), la pression sur la face d'entrée est très élevée en raison du "bouchon" que forme le lit de particules au repos. Puis la hauteur du lit croît rapidement sous l'effet des forces hydrodynamiques, ce qui entraîne une chute de pression sur la face d'entrée car peu de particules entravent la course du fluide à sa sortie du jet. Le lit atteint alors une hauteur maximum, que nous appellerons "hauteur d'overshoot" (H_{OS}), avant de redescendre et d'atteindre le régime stationnaire durant lequel les fluctuations de la hauteur du lit restent faibles. Au cours de cet état stationnaire, une succession de bulles de fluide migre à travers le milieu granulaire, entraînant les particules se trouvant au dessus du jet vers la surface du lit comme l'illustre la figure IV.12. Si la vitesse d'injection n'est pas trop élevée, les bulles éclatent doucement en arrivant à la limite de séparation particules/fluide. De plus, peu de particules sont emportées par l'écoulement, créant ainsi des zones de stagnation (en anglais "dead zones") dans les coins inférieurs des réacteurs. En revanche, lorsque la vitesse d'injection est plus élevée, les bulles formées sont bien plus larges, et emportent ainsi plus de particules jusqu'à la surface. L'énergie cinétique transmise aux éléments de la phase solide par le fluide propulse alors les particules bien au dessus du lit lorsque les bulles éclatent. La pression sur la face d'entrée oscille alors régulièrement au rythme de la création de bulles. Nous présentons ci-après les résultats de validation concernant la moyenne de ce saut de

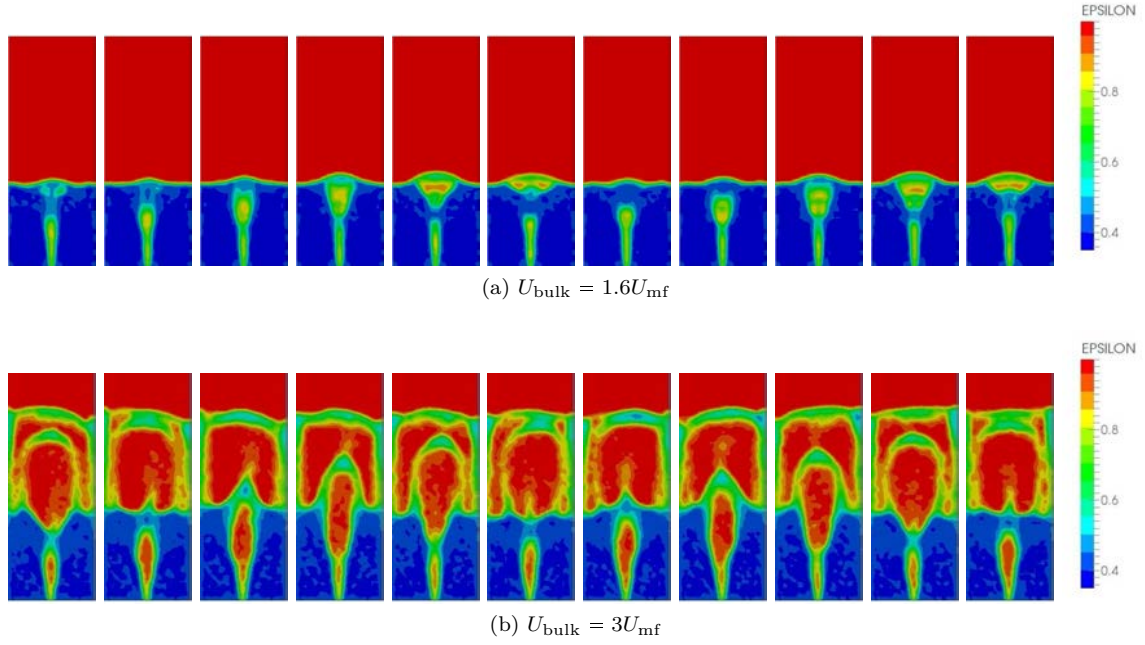


FIGURE IV.12 – Evolution temporelle de la fraction volumique de fluide entre 1s et 1.2s pour la configuration 3U-1J-550 (voir tableau IV.2)

pression ainsi que la fréquence des oscillations.

IV – 3.2.2 Valeur moyenne

Comme nous l'avons vu précédemment avec la mise en évidence de zones mortes dans la partie basse du réacteur, la totalité des particules n'est pas fluidisée lors d'une fluidisation de type lit pulsé. De ce fait, contrairement aux fluidisations homogènes ou bouillonnantes pour lesquelles toutes les particules sont soulevées par le fluide (voir §IV – 2.1), la pression moyenne sur la face d'entrée d'un réacteur à lit pulsé est inférieure au poids des particules dans le lit.

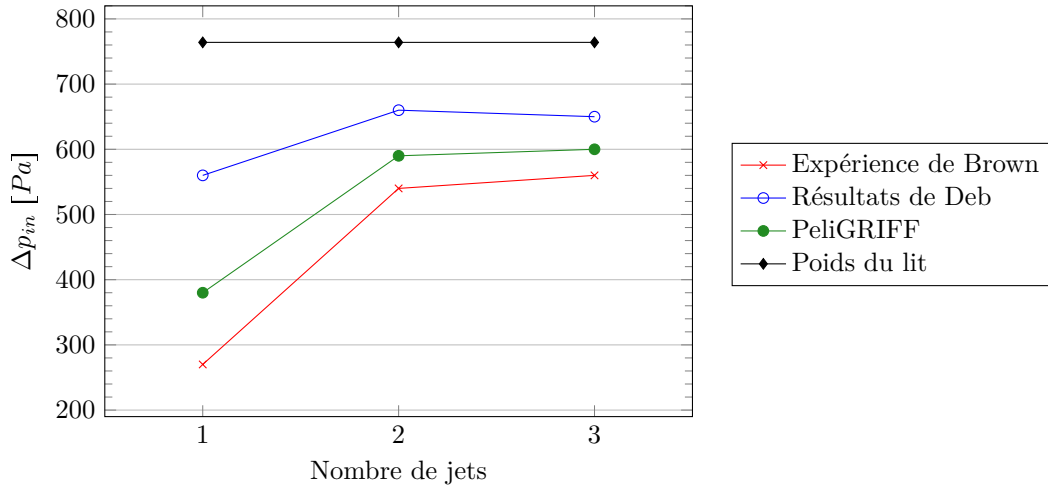


FIGURE IV.13 – Saut de pression à travers le lit de particules pour $U_{\text{bulk}} = 1,6U_{\text{mf}}$

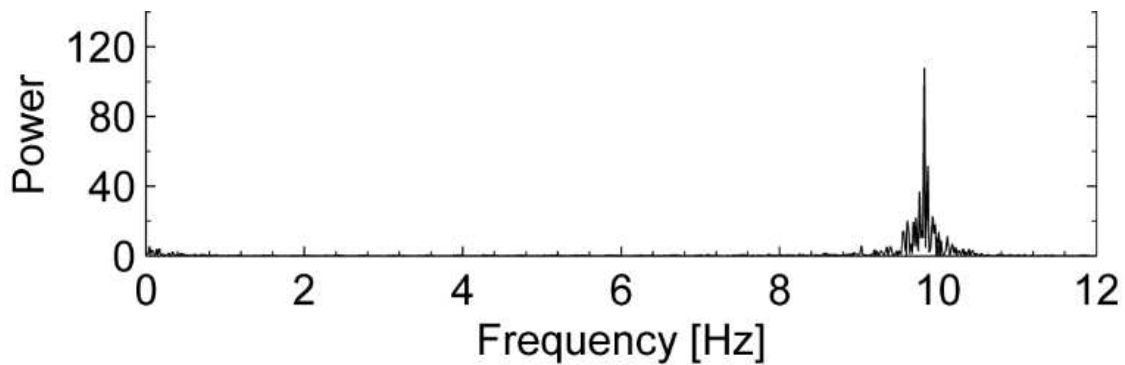
La figure IV.13, inspirée de la figure 3 de Deb *et al.* [45], illustre le saut de pression à travers le lit de particules de $550\mu\text{m}$ de diamètre pour 1, 2 et 3 jets et une vitesse d'injection de $U_{\text{bulk}} = 1.6U_{\text{mf}}$.

Dans le cas d'un jet unique, les résultats obtenus avec le modèle DEM-CFD implémenté sont assez éloignés des résultats expérimentaux de Brown mais moins que ne le sont ceux de Deb. Ces derniers émettent l'hypothèse que cette différence de résultat pourrait être due soit à un effet de channeling plus important lors de la fluidisation expérimentale, soit à une surestimation de la force de traînée lors de la simulation. Les résultats numériques pour les cas 1p6Umf-2J-550 et 1p6Umf-3J-550 sont quant à eux plus proches des résultats expérimentaux.

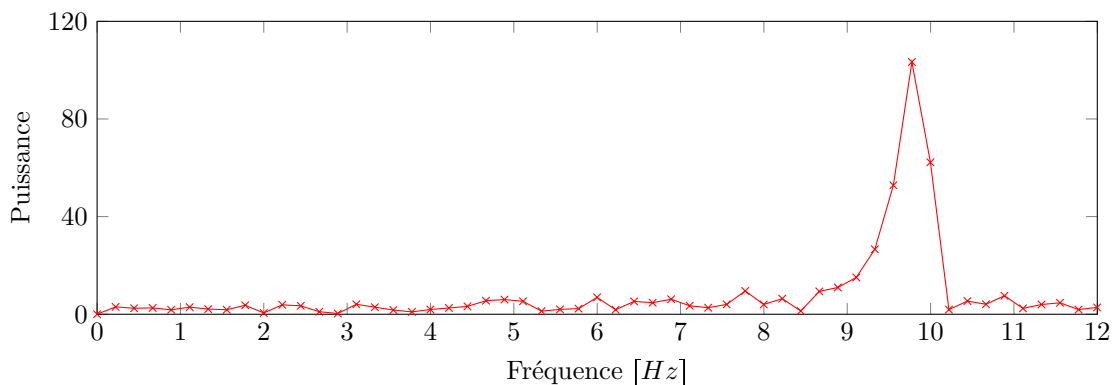
Des tests ont été réalisés avec différentes formulations de la force de traînée (Beetstra, Di Felice, Huilin), mais cela ne modifie que très peu le résultat obtenu pour le saut de pression moyen à travers le lit. En revanche, la modification des paramètres de collisions inter-particulaires influent beaucoup sur ce résultat, mais la dynamique globale de l'écoulement est elle aussi grandement impactée (modification de la forme et de la fréquence d'apparition des bulles) et ne correspond plus à l'expérience de Brown comme nous le présentons en partie §V – 4.2.1.

IV – 3.2.3 Fluctuations de pression

Rappelons tout d'abord que les fluctuations du saut de pression à travers le lit sont engendrées par la création puis le détachement de bulles à la sortie du jet de fluide. Comme le montre la figure IV.11, la pression dynamique fluctue autour de la valeur moyenne décrite précédemment (voir §IV – 3.2.2). Ces oscillations sont régulières et leur amplitude est quasiment constante, ce qui amène logiquement à une analyse par transformée de Fourier.



(a) Résultats de Brown [20] figure 7e



(b) Résultats PeliGRIFF

FIGURE IV.14 – Spectre de fréquence des oscillations de pression dynamique du fluide sur la face d'entrée du réacteur pour une vitesse d'injection $U_{\text{bulk}} = 2.6U_{\text{mf}}$ dans le cas 1J-550

La figure IV.14 montre le spectre de fréquence des oscillations obtenues expérimentalement par Brown pour $U_{\text{bulk}} = 2.6U_{\text{mf}}$ pour la configuration 1J-550, ainsi que la reproduction numérique de cette expérience réalisée avec le modèle Euler-Lagrange développé au cours de cette thèse. La fréquence fondamentale des oscillations obtenues à l'aide du modèle DEM-CFD est sensiblement identique à la

fréquence obtenue expérimentalement par Brown. Cela signifie que la fréquence d'apparition et de détachement des bulles est bien simulée par notre modèle. La puissance du signal est elle aussi très proche des résultats de référence, ce qui indique une bonne reproduction de l'amplitude des oscillations de pression. Ces résultats nous permettent de dire que la dynamique générale de l'écoulement est bien reproduite par le modèle implémenté.

IV – 3.3 Fraction volumique moyenne

Un autre critère de comparaison que nous avons employé afin de valider l'implémentation du modèle DEM-CFD et de tester ses capacités à reproduire des expériences physiques et la distribution spatiale de la fraction volumique de fluide. Pour cela, le champ \mathcal{E}_f est moyenné en temps pendant une période suffisamment longue afin que les valeurs convergent vers une valeur constante en temps, nous noterons $\langle \mathcal{E}_f \rangle_T$ cette valeur. Les critères de convergence temporelle des résultats sont détaillés en partie §V – 2.4.2.

Les représentations de la distribution de \mathcal{E}_f obtenus à partir des résultats de nos simulations sont comparés à ceux obtenus expérimentalement par Brown [20] et numériquement par Deb *et al.* [45]. A nouveau, les résultats concernent les configurations présentées précédemment dans les tableaux IV.3 et IV.2. Ci-après nous présentons donc les comparaisons pour des particules de $550\mu\text{m}$ et $750\mu\text{m}$ de diamètre et pour des vitesses d'injection de $U_{\text{bulk}} = 1.6U_{\text{mf}}$ et $U_{\text{bulk}} = 3U_{\text{mf}}$.

IV – 3.3.1 Vitesse d'injection $U_{\text{bulk}} = 1.6U_{\text{mf}}$

Dans le cas d'une vitesse d'injection de $U_{\text{bulk}} = 1.6U_{\text{mf}}$, nous avons vu en section IV – 3.2.1 que les bulles de fluide formées à la sortie de l'orifice d'injection éclataient doucement en arrivant à la surface du lit (voir figure IV.12 par exemple). Ainsi la figure IV.15 permet de comparer les résultats expérimentaux de Brown et de Deb à ceux obtenus à l'aide de notre modèle pour le cas 1.6U-1J-550. Nous observons d'une part que la hauteur du dôme créé dans le prolongement du chemin de

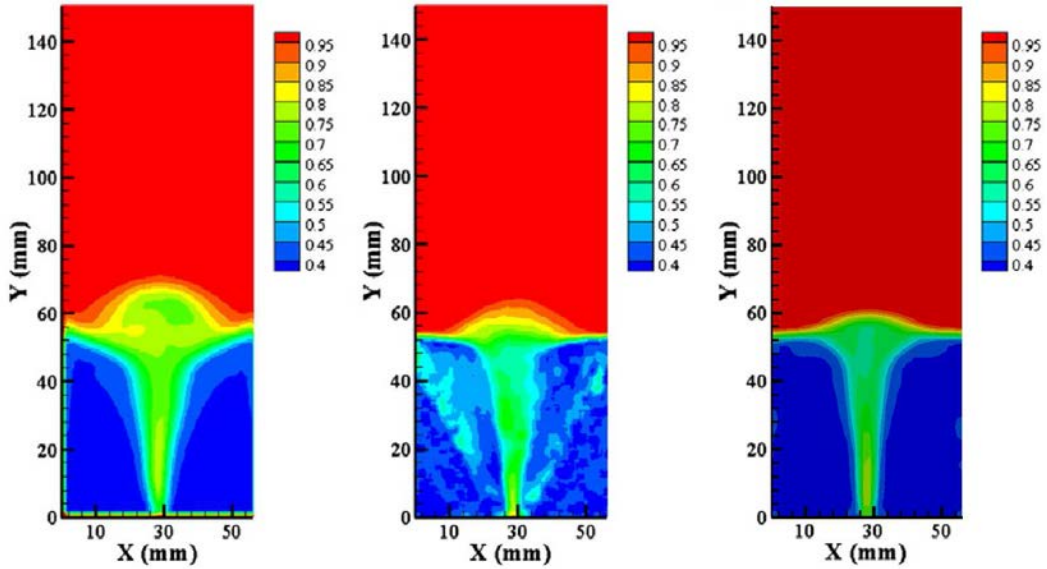


FIGURE IV.15 – Comparaison de la moyenne temporelle de la fraction volumique de fluide pour une vitesse d'injection de $U_{\text{bulk}} = 1.6U_{\text{mf}}$ et des particules de $550\mu\text{m}$ de diamètre. A gauche, résultats numériques de Deb *et al.* [45]; au centre, résultats expérimentaux de Brown [20]; à droite, résultats obtenus avec le modèle DEM-CFD implémenté au cours de cette thèse

migration des bulles, *ie.* l'endroit où explosent les bulles, est sensiblement identique à celle obtenue expérimentalement par Brown. D'autre part, la largeur du canal formé par le passage des bulles, *ie.* la zone dépeuplée au dessus de l'orifice d'injection, est du même ordre de grandeur que celle des

résultats de référence. Cela nous permet donc de dire que la répartition spatiale de $\langle \mathcal{E}_f \rangle_T$ est fidèlement reproduite par notre modèle pour ce régime d'écoulement.

IV – 3.3.2 Vitesse d'injection $U_{\text{bulk}} = 3U_{\text{mf}}$

La répartition spatiale de la variable $\langle \mathcal{E}_f \rangle_T$ a également été comparée aux résultats de Brown et à ceux de Deb pour une vitesse d'injection plus élevée, $U_{\text{bulk}} = 3U_{\text{mf}}$, correspondant à un régime pulsé pour lequel les particules se déplacent beaucoup plus que dans le régime de bullage présenté précédemment (voir figure IV.12). Cette comparaison a été réalisée pour les deux classes de particules, $d_p = 550\mu\text{m}$ et $d_p = 750\mu\text{m}$.

IV – 3.3.2.a Particules $d_p = 550\mu\text{m}$

La figure IV.16 permet de comparer les résultats obtenus expérimentalement par Brown et numériquement par Deb aux nôtres. Pour ce régime d'écoulement, et cette taille de particule ($d_p = 550\mu\text{m}$), les résultats obtenus dans cette étude sont proches de ceux présentés par Brown, notamment pour les cas multi-jets où la hauteur du dôme et l'endroit où coalescent les jets sont en accord avec l'expérience. Pour le cas 3Umf-1J-550 en revanche, les résultats de simulation sont plus éloignés de ceux de Brown. Néanmoins, comme le montre la figure IV.16, les résultats obtenus dans cette étude (à droite) se rapprochent plus de l'expérience (au milieu) que ceux de Deb (à gauche), en particulier en ce qui concerne la hauteur de la fontaine ainsi que la distribution de $\langle \mathcal{E}_f \rangle_T$ aux abords des parois du domaine.

IV – 3.3.2.b Particules $d_p = 750\mu\text{m}$

Le cas des particules de diamètre $d_p = 750\mu\text{m}$ n'a pas été étudié par Deb, nos résultats numériques sont donc comparés uniquement aux résultats expérimentaux de Brown. Comme nous pouvons l'observer sur la figure IV.17, la distribution de $\langle \mathcal{E}_f \rangle_T$ obtenue dans cette étude est similaire aux résultats de Brown, en particulier dans les cas multi-jets, pour lesquels la hauteur de coalescence des jets est identique. Cependant, de la même manière que pour la classe de particule $d_p = 550\mu\text{m}$, la reproduction du cas mono-jet n'est pas parfaitement identique. Néanmoins, la hauteur du jet est sensiblement égale, de même que la forme conique de la surface du lit de particules. La zone de stagnation est elle aussi relativement bien reproduite.

IV – 4 Conclusion

En conclusion de ce chapitre portant sur la validation du modèle DEM-CFD développé au cours de cette thèse, nous pouvons considérer que les équations utilisées ainsi que leur résolution numérique sont correctes et que les différents éléments de couplage implémentés permettent de reproduire des écoulements fluide-particules denses dans des configurations géométriques complexes. En effet, d'une part nous avons mis en évidence que le saut de pression dynamique à travers le lit ainsi que la vitesse minimale de fluidisation obtenus lors de fluidisations liquides ou gazeuses sont conformes aux prévisions. Cela indique que les termes d'interaction entre les deux phases émanant du modèle B de Gidaspow [87] ont bien été implémentés, *ie.* que le gradient de pression est bien traité et que l'expression de la force de traînée ne comprend pas un facteur \mathcal{E}_f en trop ou en moins comme parfois rencontré dans la littérature. D'autre part, les résultats obtenus lors des comparaisons à des études expérimentales et numériques pour des écoulements en lit pulsés mono- et multi-jets comprenant des particules de diamètre $d_p = 550\mu\text{m}$ et $d_p = 750\mu\text{m}$, c'est à dire pour des particules appartenant aux classes B et D, respectivement, de la classification de Geldart, nous montrent que le modèle implémenté offre la possibilité de reproduire fidèlement une large plage d'écoulement en lit fluidisé.

Le modèle développé durant cette thèse permet donc d'étudier les caractéristiques des écoulements fluide-particules denses de type lits fluidisés bouillonnants ainsi que des lits pulsés mono- ou multi-jets. Ainsi, dans le chapitre suivant, nous présentons des résultats d'études paramétriques et de phénomènes physiques.

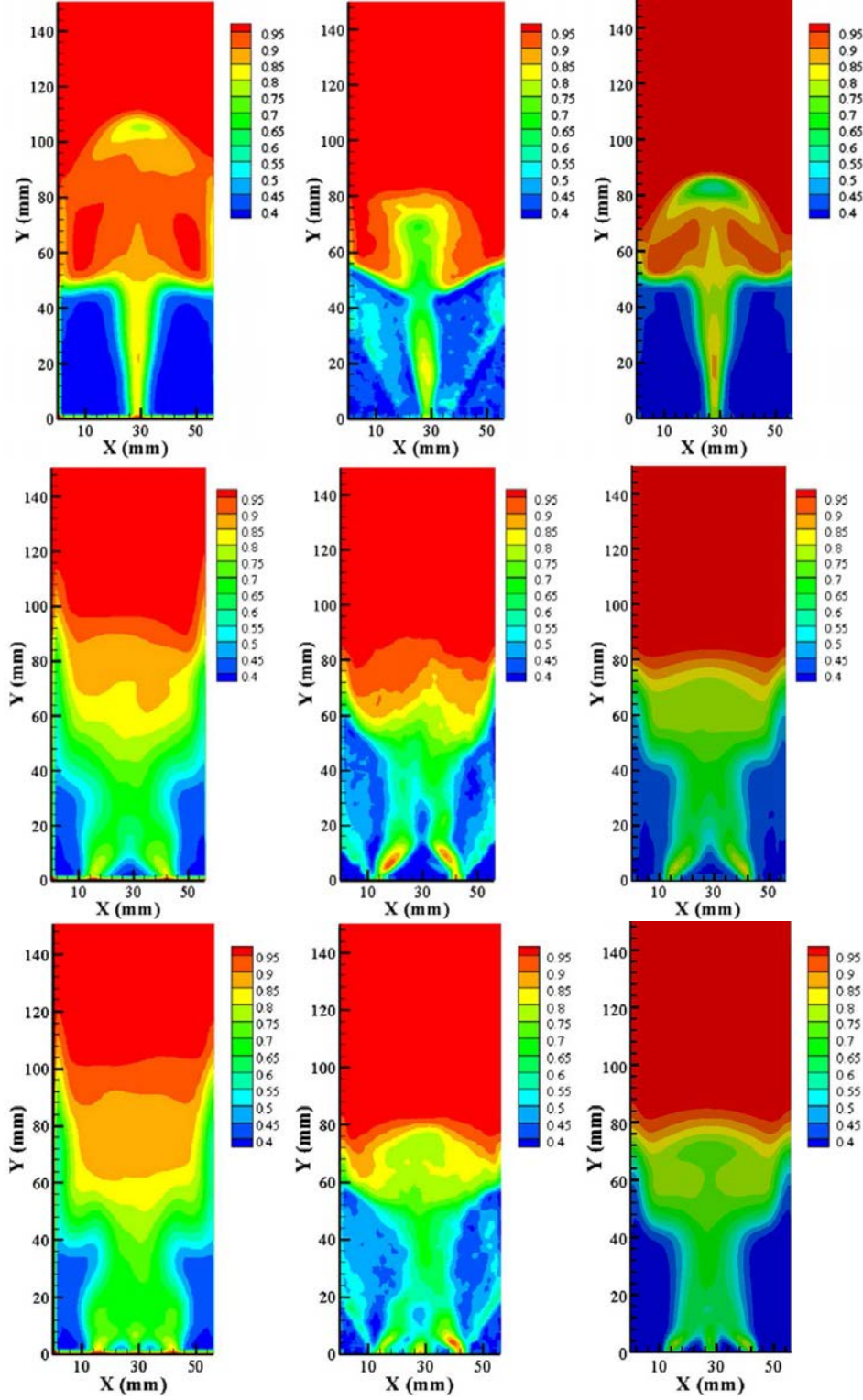


FIGURE IV.16 – Moyenne temporelle de la fraction volumique de fluide pour une vitesse d'injection de $U_{\text{bulk}} = 3U_{\text{mf}}$ et des particules de $550\mu\text{m}$ de diamètre dans les cas 1, 2 et 3 jets. Comparaison entre les résultats numérique de Deb *et al.* [45] (à gauche), les résultats expérimentaux de Brown [20] (au milieu) et les résultats obtenus avec le modèle DEM-CFD implémenté au cours de cette thèse (à droite)

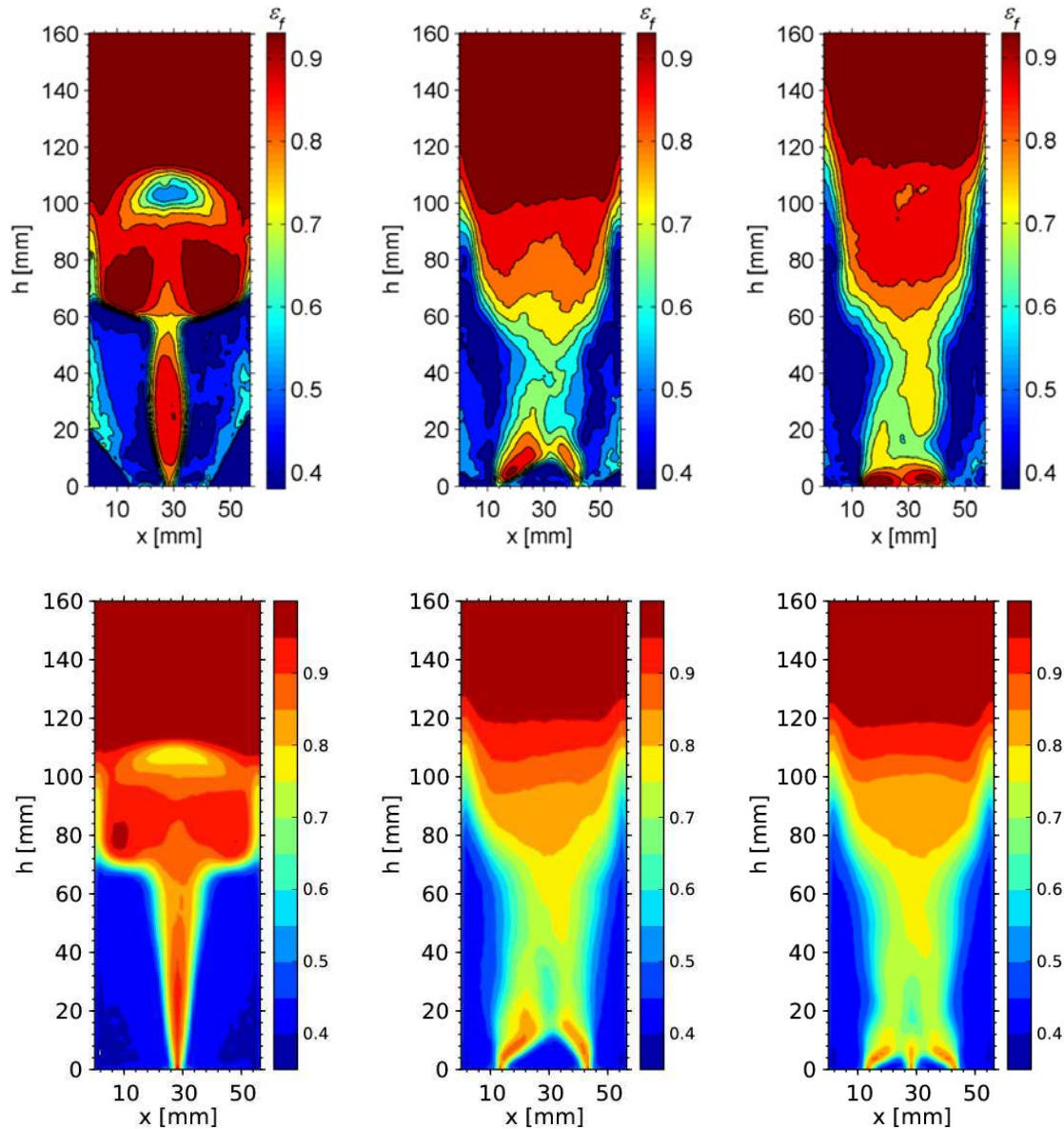


FIGURE IV.17 – Comparaison de la moyenne temporelle de la fraction volumique de fluide pour $U_{bulk} = 3U_{mf}$ et des particules de $750\mu m$ de diamètre pour des injections 1, 2 et 3 jets. En haut, résultats expérimentaux de Brown ; en bas, résultats obtenus avec le modèle DEM-CFD implémenté au cours de cette thèse



Chapitre V

Résultats

Sommaire

V – 1	Introduction	94
V – 2	Présentation des outils d’analyse	94
V – 2.1	Grandeurs observées	94
V – 2.1.1	Précisions sur la fraction volumique	95
V – 2.1.2	Précisions sur la hauteur du lit	95
V – 2.2	Représentation des résultats	96
V – 2.3	Outils statistiques	97
V – 2.4	Echantillonnage	98
V – 2.4.1	Fréquence d’échantillonnage	98
V – 2.4.2	Temps d’échantillonnage	101
V – 3	Etude approfondie de lits 3D	103
V – 3.1	Description statistique du lit en fonction de U_{in}	103
V – 3.1.1	Fraction volumique de fluide	104
V – 3.1.2	Hauteur du lit et saut de pression	104
V – 3.1.3	Collisions entre les particules	105
V – 3.1.4	Vitesse des particules	106
V – 3.2	Influence de la taille du domaine	107
V – 3.3	Influence des paramètres numériques	109
V – 3.3.1	Influence de la taille de grille	109
V – 3.3.2	Influence du pas de temps de la phase solide	110
V – 3.3.3	Influence du pas de temps de la phase fluide	111
V – 3.4	Paramètres de contact	111
V – 3.4.1	Coefficient de restitution élastique	112
V – 3.4.2	Coefficient de Coulomb	112
V – 4	Etude approfondie de lits pulsés	113
V – 4.1	Type d’analyse et représentation des résultats	113
V – 4.2	Résultats	114
V – 4.2.1	Influence des paramètres de contact	114
V – 4.2.2	Dynamique de bullage dans le cas d’une double injection	116
V – 4.2.3	Modification de la géométrie	117
V – 5	Conclusion	119

V – 1 Introduction

Le modèle Euler-Lagrange introduit au chapitre II a été validé dans différentes configurations d'écoulement comme nous l'avons présenté au chapitre IV. De plus, nous avons vu au chapitre III que les possibilités de calcul qu'offre l'implémentation informatique de ce modèle permettent de simuler des systèmes comportant plusieurs dizaines voire centaines de millions de particules dans des temps de calculs raisonnables. Rappelons que cette approche méso est bien plus adaptée dans certains cas à l'étude approfondie des écoulements fluide-particules denses que ne le sont les approches macro. En effet, pour les modèles Euler-Euler, les collisions entre les particules ne sont pas traitées explicitement et les trajectoires individuelles des particules ne sont pas connues. Il en résulte ainsi une perte d'informations cruciales résultant du fait que la dynamique des lits fluidisés denses est grandement influencée par les contacts inter-particulaires comme nous le mettons en évidence dans la suite de ce chapitre. L'approche micro offre quant à elle une reproduction certes plus fidèle des interactions fluide-particules que ne le permettent les modèles méso, servant ainsi de simulation de référence comme nous le présentons au chapitre VI, mais la taille maximum des systèmes que cette approche permet de simuler n'offre pas la possibilité d'étudier la formation et l'évolution des structures présentes dans un lit 3D. Or, comme nous le présentons dans la suite de ce chapitre, la dynamique générale d'un lit fluidisé est grandement influencée par la taille du domaine.

Dans ce chapitre, nous utilisons donc le modèle DEM-CFD implémenté comme outil pour étudier de manière approfondie les écoulements fluide-particules denses dans des configurations de lits fluidisés bouillonnants et de lits pulsés.

V – 2 Présentation des outils d'analyse

Afin d'étudier de façon détaillée la dynamique des particules au sein du lit, une panoplie d'outils d'analyse a été développée. Ces post-traitements sont réalisés à posteriori, c'est à dire qu'une partie des données des phases fluide et solide est conservée après la simulation et les outils présentés ici sont appliqués à ces données une fois la simulation terminée. Ces résultats sont obtenus à partir de scripts écrits en langage python et exécutés en séquentiel. Nous expliquons tout d'abord le choix de la fréquence à laquelle les caractéristiques du lit sont analysées, puis nous introduisons la notion de convergence des statistiques et enfin, nous présenterons les grandeurs observées.

V – 2.1 Grandeurs observées

Dans cette étude, nous avons fait le choix d'étudier majoritairement la dynamique des particules plutôt que les données du fluide. En effet, même si l'observation du champ fluide peut s'avérer intéressante, nous estimons que l'étude de la phase solide constitue une source d'information plus riche et plus utile à la compréhension de la dynamique de l'écoulement fluide-particules. Néanmoins, la pression dynamique du fluide sur la phase d'entrée est elle aussi étudiée. Ainsi, les différentes grandeurs étudiées dans cette étude sont :

- la position des particules, qui nous permet d'étudier la fraction volumique de fluide,
- la vitesse des particules V_{3D} , ainsi que les 3 composantes, V_x , V_y et V_z , et leur norme $|V_{3D}|$, $|V_x|$, $|V_y|$ et $|V_z|$. Ces grandeurs nous renseignent sur l'énergie cinétique des particules ainsi que sur les trajectoires privilégiées des particules,
- les collisions interparticulaires, qui renseignent sur le nombre de contacts dans le domaine ou en une zone précise de l'espace. Combinée à la vitesse des particules, cette information est utile pour estimer l'énergie dissipée lors des contacts,
- la pression sur la face d'entrée, qui à travers ses fluctuations nous renseigne sur le taux d'agitation dans le lit, notamment les oscillations verticales du lit.

Ces différentes grandeurs peuvent être étudiées à l'aide de leur moyenne et variance temporelle soit dans tout le domaine, soit localement dans des volumes de contrôle (voir §V – 2.2).

V – 2.1.1 Précisions sur la fraction volumique

La fraction volumique de fluide est une grandeur fréquemment analysée dans les études de lits fluidisés. Cette grandeur est, rappelons le, le complément à un de la concentration volumique en particules (voir eq. (II – 2.4)). Ainsi, la répartition spatiale de sa moyenne temporelle renseigne par exemple sur la probabilité de présence de particules et donc les zones comportant les plus grandes surfaces de contact entre les particules et le fluide. Cette information est par exemple utile en Génie des Procédés car les diverses réactions chimiques ayant lieu au sein du lit sont directement liées à la surface de solide exposée au fluide environnant. La variance de la fraction volumique de fluide nous informe quant à elle sur le taux de renouvellement de la population de particules dans un volume de contrôle donné. Cette information est elle aussi cruciale pour le Génie des Procédés car d’une part, les réactions entre les phases fluide et solide sont souvent exothermiques et il est alors impératif d’avoir un brassage de la suspension afin d’homogénéiser la température dans le réacteur. D’autre part, la réaction chimique entre les phases n’est pas optimisée dans le cas d’une zone de stagnation de particules dans le domaine, car le fluide s’y écoule à faible vitesse comparé aux zones de fortes variations de \mathcal{E}_f , et la concentration locale en réactif chimique s’amenuise.

V – 2.1.2 Précisions sur la hauteur du lit

Notons que la position des particules permet également d’obtenir la hauteur du lit. Cette grandeur macro, qui peut sembler facile à déterminer au premier abord, dépend en réalité de la définition employée pour l’obtenir. En effet, l’interface entre le lit de particules et la zone occupée uniquement par du fluide est une variable de l’espace et du temps comme l’illustre la figure V.1.

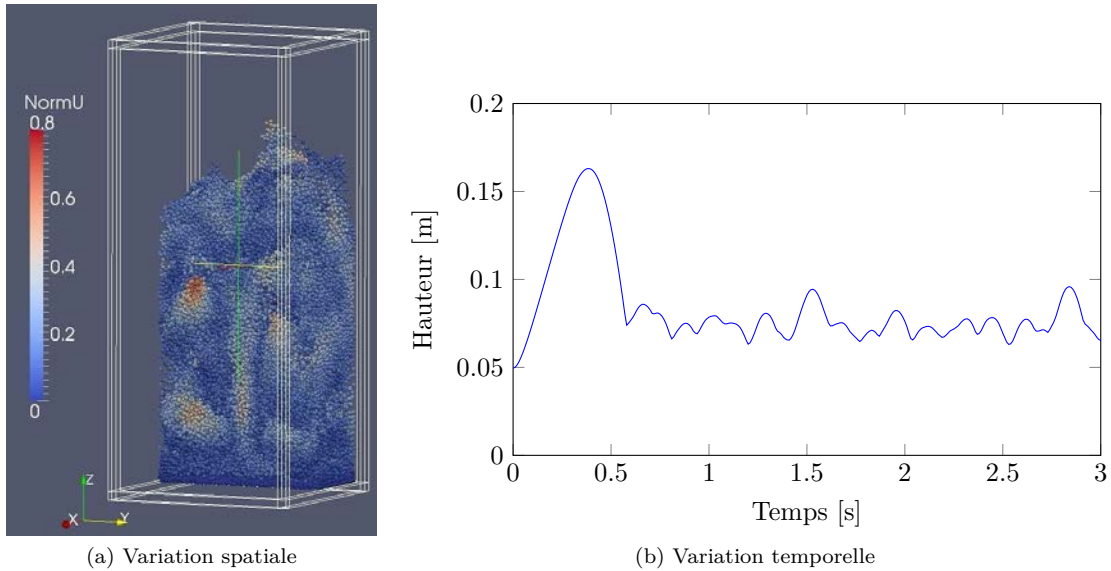


FIGURE V.1 – Illustration de la variation en temps et en espace de la hauteur du lit

Ainsi, plusieurs méthodes peuvent mener à une grandeur appelée hauteur de lit mais dont les valeurs calculées ne sont pas forcément les mêmes.

1. Une première approche, naïve, consiste à considérer la hauteur de la plus haute particule du domaine. Chacun s’entend sur le fait qu’au vue de la figure V.1, la valeur obtenue par cette méthode est très approximative et sur-estimée car la dynamique du lit engendre des bulles de fluide qui éclatent en arrivant à la surface, propulsant des particules bien au dessus du reste du lit.

Cette approche peut être améliorée en évaluant la hauteur d’une certaine quantité de particules, par exemple les 100 particules les plus hautes, mais cela mène toujours au même problème de

représentativité de l'ensemble du lit, notamment dans une configuration comportant plusieurs dizaines de millions de particules par rapport à une simulation comportant quelques milliers de particules.

Une seconde amélioration de cette méthode consiste à évaluer la hauteur d'un pourcentage de l'ensemble du lit, par exemple les 1 ou 2 % de particules les plus élevées. Cela permet de s'affranchir de la question de représentativité car la quantité relative de particules utilisée pour déterminer la hauteur du lit est constante, quelque soit le nombre d'éléments dans le système. Par exemple Pepiot & Desjardins [172] utilise ce type de méthode pour déterminer la hauteur en dessous de laquelle se trouvent 99% des particules.

2. L'approche décrite ici consiste à calculer la hauteur moyenne des particules dans le lit et à multiplier la valeur obtenue par 2. Cette méthode peut donner des résultats corrects dans le cas d'un lit au repos ou faiblement bouillonnant. Mais lorsque la surface du lit commence à se déstabiliser, les valeurs obtenues sont plus approximatives, et l'erreur commise s'accroît lorsque la vitesse d'injection augmente, *ie.* lorsque s'étale la zone de transition entre le lit de particules et la zone de fluide pur.
3. Une autre approche qu'il est possible d'utiliser se base sur la distribution verticale de la fraction volumique de fluide \mathcal{E}_f (qui renseigne, rappelons le, sur la densité de particules). Pour cela, cette valeur doit être moyennée localement dans des volumes de contrôle horizontaux comme présenté dans la figure V.2, puis une valeur seuil de \mathcal{E}_f est choisie pour définir à partir de quelle hauteur la présence de particules est considérée négligeable.

Notons que cette méthode est similaire à la première car la valeur seuil de \mathcal{E}_f correspond à une certaine quantité de particules dans le domaine.

4. Enfin, pour prendre en compte les variations spatiales de la hauteur du lit, *ie.* le fait que la hauteur du lit ne soit pas la même sur toute la section du réacteur, le domaine peut être discrétisé comme l'illustre la figure V.2-(c). La hauteur de la ou des particules les plus élevées peut ainsi être mesurée de la même manière qu'avec les méthodes 1 ou 3 mais dans chaque volume de contrôle. La hauteur totale du lit est alors obtenue en moyennant la hauteur de chaque volume de contrôle.

Dans cette étude, après avoir longuement employée la deuxième méthode, la hauteur du lit est désormais déterminée à l'aide de la quatrième méthode.

V – 2.2 Représentation des résultats

En raison de l'aspect tridimensionnel du type d'écoulement étudié, le type de représentation employé pour analyser les résultats doit être choisi avec attention. Dans un lit fluidisé bouillonnant, un moyen couramment utilisé (par exemple [172]) pour étudier la dynamique des particules au sein du lit est de représenter les valeurs étudiées en fonction de la hauteur dans le réacteur. Pour cela, le domaine est divisé en volumes de contrôles horizontaux de section égale à celle du réacteur (voir schéma V.2-(a)). L'épaisseur de ces volumes de contrôle détermine la résolution de la distribution verticale des grandeurs étudiées. Dans cette étude, l'épaisseur des volumes de contrôle est arbitrairement fixée à un diamètre de particule, la discrétisation de la distribution verticale des grandeurs observées semble alors suffisamment précise.

Cependant, il est important de préciser que plus la grille d'analyse utilisée est fine, plus le temps d'échantillonnage, *ie.* le temps sur lequel l'analyse statistique est réalisée, doit être élevé, à fréquence d'échantillonnage égale. En effet, plus le volume de contrôle est petit, plus le nombre de particules qu'il contient est faible, les variations de la valeur analysée sont ainsi plus élevées sur un même laps de temps car l'entrée ou la sortie d'une particule de cette zone a une plus grande incidence sur la valeur calculée. Le temps d'échantillonnage nécessaire à une distribution homogène et convergée en temps des statistiques des particules dans le domaine est détaillé en partie V – 2.4.2.

En outre, afin d'étudier certains paramètres, tels que l'influence de la présence de parois sur le pourtour du réacteur par rapport à une simulation bi-périodique par exemple, le même type d'étude peut être réalisée de façon transversale en découpant le domaine en volumes de contrôle verticaux dans

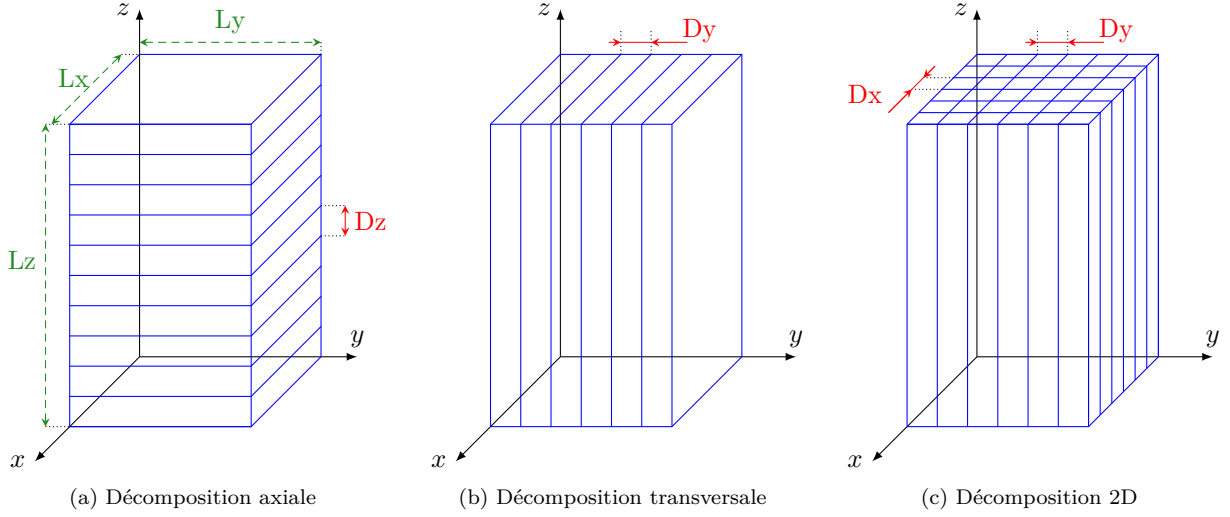


FIGURE V.2 – Différentes décompositions de domaine utilisées pour analyser et visualiser les résultats d'analyse statistique

une ou deux direction(s) (voir schéma V.2-(b) et (c)). A nouveau, l'épaisseur des volumes de contrôle est choisie comme étant égale au diamètre des particules.

V – 2.3 Outils statistiques

Afin d'analyser les grandeurs recensées en section V – 2.1, différentes opérations statistiques peuvent être appliquées à la population de particules composant le lit. Tout d'abord, une valeur λ peut être moyennée en espace, soit dans un volume de contrôle xi , soit dans tout le domaine, à chaque instant t , nous notons cette valeur $\langle \lambda \rangle_{xi,t}$ et $\langle \lambda \rangle_{X,t}$, respectivement. Pour un volume de contrôle comportant Np_{xi} particules, nous avons donc :

$$\langle \lambda \rangle_{xi,t} = \frac{1}{Np_{xi}} \sum_{p=0}^{Np_{xi}} \lambda_{p,t} \quad (V.1)$$

Puis la moyenne temporelle de ces moyennes spatiales peut être calculée, sa notation est alors $\langle \lambda \rangle_{xi,T}$ et $\langle \lambda \rangle_{X,T}$ pour la moyenne locale et globale, respectivement. Ainsi, dans un volume de contrôle et pour N_T pas de temps, nous avons :

$$\langle \lambda \rangle_{xi,T} = \frac{1}{T} \sum_{t=0}^{N_T} \langle \lambda \rangle_{xi,t} \quad (V.2)$$

Ce type de prise de moyenne temporelle détermine la valeur moyennée dans un volume de contrôle ou dans le domaine. Néanmoins, cette valeur ne tient pas compte du nombre de particules présentes dans chaque volume de contrôle. En effet, dans la formule de calcul de $\langle \lambda \rangle_{xi,T}$, la valeur instantanée $\langle \lambda \rangle_{xi,t}$ a le même poids, que la valeur soit calculée à partir de la grandeur d'une particule isolée ou à partir d'un groupe de particules.

Afin de prendre en compte une forme de pondération dans le calcul de la moyenne temporelle, une seconde méthode de calcul est introduite. Elle se base sur la somme des grandeurs dans chaque volume de contrôle à un instant donné $\langle Sum(\lambda) \rangle_{xi,t}$, cette grandeur est notée $\langle Sum(\lambda) \rangle_{xi,T}$ pour la moyenne temporelle locale et $\langle Sum(\lambda) \rangle_{X,T}$ pour la moyenne temporelle dans tout le domaine. Dans le but de rendre la valeur calculée par cette méthode indépendante de la taille des volumes de contrôle, ce résultat est normé par le volume de contrôle ΔV_{xi} . Ainsi, nous avons :

$$Sum(\lambda)_{xi,t} = \frac{1}{\Delta V_{xi}} \sum_{p=0}^{Np_{xi}} \lambda_{p,t} \quad (V.3)$$

et :

$$\langle Sum(\lambda) \rangle_{xi,T} = \frac{1}{T} \sum_{t=0}^{N_T} Sum(\lambda)_{xi,t} \quad (V.4)$$

En complément de ces deux formulations de la moyenne temporelle, la dispersion des valeurs instantanées par rapport à ces moyennes est étudiée à l'aide de la variance. La variance temporelle d'une grandeur λ est définie par la formule générale :

$$Var(\lambda) = \langle \lambda - \langle \lambda \rangle_T \rangle_T^2 \quad (V.5)$$

Néanmoins, dans cette étude nous utilisons la formule alternative de Koenig :

$$Var(\lambda) = \langle \lambda^2 \rangle_T - \langle \lambda \rangle_T^2 \quad (V.6)$$

Cette formule est appliquée aux variables λ ou $Sum(\lambda)$ dans chaque volume de contrôle xi où dans tout le domaine.

V – 2.4 Echantillonnage

Le lits fluidisés bouillonnants ou pulsés sont des systèmes instationnaires dans le sens où les caractéristiques instantanées du lit (positions et vitesses des particules par exemple) changent continuellement. Cependant, si la dynamique générale du lit est observée sur une durée suffisamment longue, le comportement du système semble atteindre un état pseudo stationnaire d'agitation durant lequel les valeurs caractérisant le lit peuvent être moyennée. Afin d'étudier ce genre de système, nous avons donc mené deux types d'analyse, le premier concerne l'évolution temporelle des phénomènes, et le second est une étude moyennée en temps.

Les systèmes étudiés dans ce travail comportent généralement plusieurs centaines de milliers d'éléments solides et plusieurs dizaines de milliers de nœuds fluides, la sauvegarde de toutes ces données à chaque itération engendrerait donc des volumes de données très importants. C'est pourquoi, il est nécessaire de définir d'une part une fréquence d'échantillonnage f_{sample} adéquate à l'étude dynamique, et d'autre part une durée minimale d'échantillonnage T_{sample} afin que les statistiques des variables étudiées soient convergées.

V – 2.4.1 Fréquence d'échantillonnage

Pour capturer les phénomènes instationnaires se déroulant au sein du lit de particules, il est nécessaire de déterminer une fréquence d'échantillonnage minimale à partir de laquelle les résultats sont considérés comme acceptables. En effet, à l'inverse des grandeurs temporellement moyennées pour lesquelles une f_{sample} trop grande peut généralement être comblée par une T_{sample} plus longue, l'étude des variables instantanées nécessite une f_{sample} adaptée à la dynamique de l'écoulement.

Dans le cas d'un lit pulsé, la fréquence minimale d'échantillonnage peut être déterminée en observant les oscillations temporelles de la pression dynamique de fluide sur la face d'entrée du réacteur Δp_{in} , qui comme nous l'avons vu précédemment, varie autour d'une valeur moyenne au rythme de l'apparition de bulles dans le domaine. La figure V.3 illustre cette évolution temporelle pour différents pas de temps d'échantillonnage $\Delta t_{sample} = 1/f_{sample}$.

Nous considérons que la dynamique du lit est suffisamment bien capturée pour un pas de temps d'échantillonnage inférieurs à $\Delta t_{sample} = 0.005s$, soit $f_{sample} = 200Hz$. En reliant cette valeur à la fréquence des oscillations de pression sur la face d'entrée du lit (voir §IV – 3.2.3) qui est ici d'environ $f_{pressure} = 10Hz$, nous obtenons la condition qu'il est nécessaire de respecter pour bien observer l'évolution de la pression :

$$T_{sample} < \frac{1}{20} T_{pressure} \quad \Longleftrightarrow \quad f_{sample} > 20 f_{pressure} \quad (V.7)$$

Concernant les lits fluidisés bouillonnants, la détermination d'une fréquence minimale d'échantillonnage à partir de grandeurs issues de la dynamique de l'écoulement est autrement plus difficile que pour des lits pulsés. En effet, comme l'illustre la figure V.4, aucune fréquence majeure ne se détache au vu

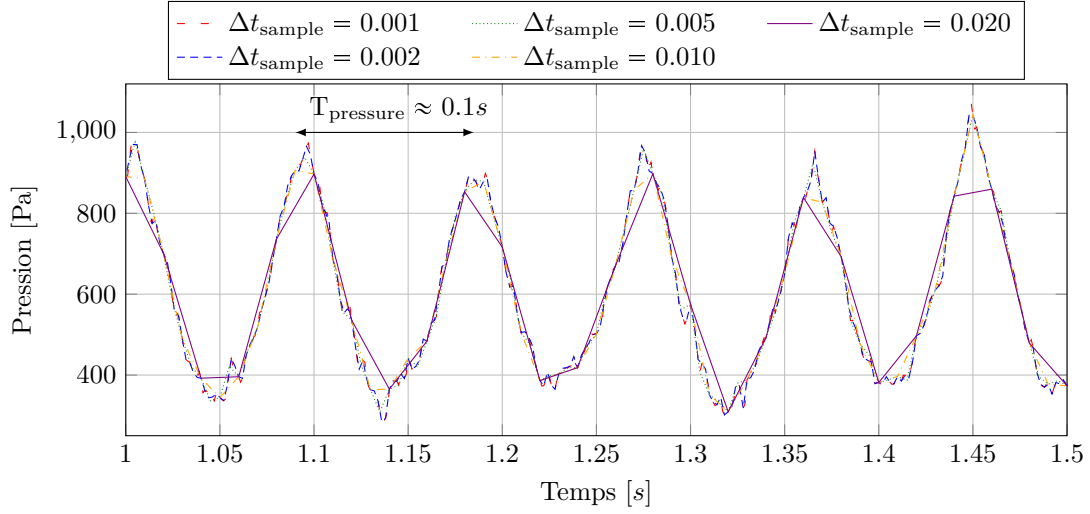


FIGURE V.3 – Evolution temporelle de la pression sur la face d'entrée pour différentes fréquences d'échantillonnage

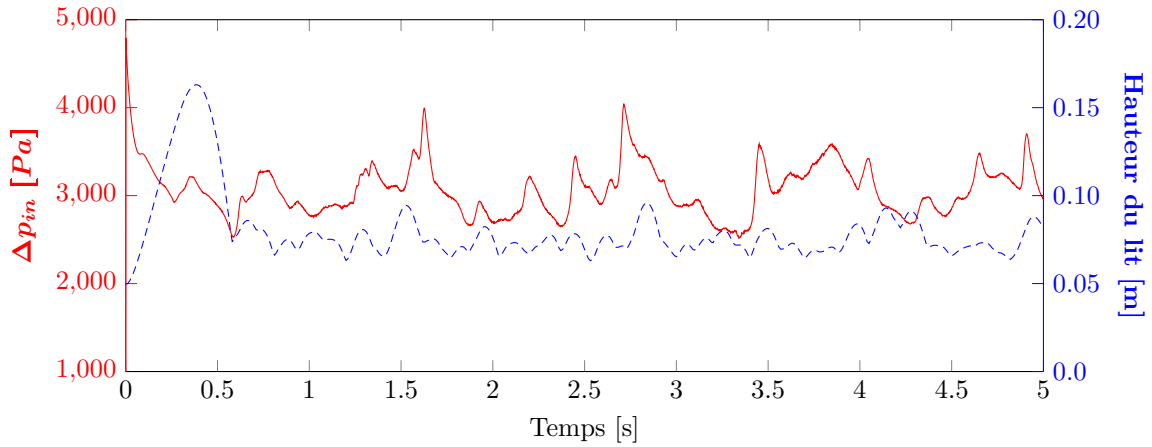


FIGURE V.4 – Evolution temporelle de la hauteur maximale des particules et de la pression dynamique de fluide sur la face d'entrée d'un lit bouillonnant

de l'évolution temporelle de la hauteur du lit ou de Δp_{in} . Dans cette étude, le critère utilisé dans le cas d'un lit fluidisé bouillonnant est alors soumis à l'appréciation que nous avons de la description des oscillations. Ainsi, en se basant sur la figure V.5, nous considérons qu'à partir d'un pas de temps d'échantillonnage $\Delta t_{\text{sampling}} = 0.02s$, la dynamique du système est suffisamment bien représentée.

Ce pas de temps d'échantillonnage peut être relié à des caractéristiques de l'écoulement telles que la vitesse des particules dans le lit et le diamètre des particules. De ces grandeurs peut être formulé un temps caractéristique que nous appelons temps caractéristique de déplacement des particules :

$$\tau_{\text{part}} = \frac{d_p}{\langle \mathbf{v}_p \rangle_{xi,t}} \quad (\text{V.8})$$

Où $\langle \mathbf{v}_p \rangle_{xi,t}$ est la valeur maximale, atteinte à un temps d'échantillonnage t , de vitesse moyennée dans un volume de contrôle xi . Pour l'exemple employé, l'évolution temporelle de la vitesse maximale localement moyennée $\langle \mathbf{v}_p \rangle_{xi}$ est tracée sur la figure V.6 en indiquant la hauteur dans le domaine où cette vitesse maximale est atteinte. Nous observons que $\langle \mathbf{v}_p \rangle_{xi}$ ne dépasse qu'occasionnellement la valeur $0.7m.s^{-1}$ pour notre cas de référence contenant des particules de $1mm$ de diamètre fluidisées avec une

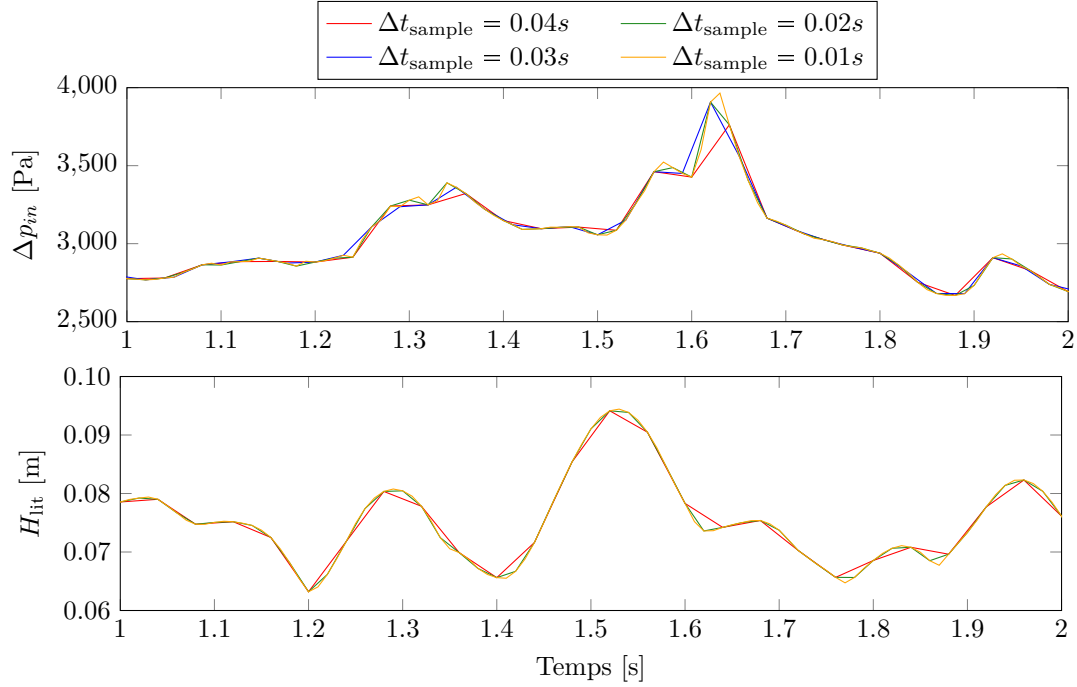


FIGURE V.5 – Evolution temporelle de la hauteur maximale des particules et de la pression dynamique de fluide sur la face d'entrée d'un lit bouillonnant pour différentes fréquences d'échantillonnage

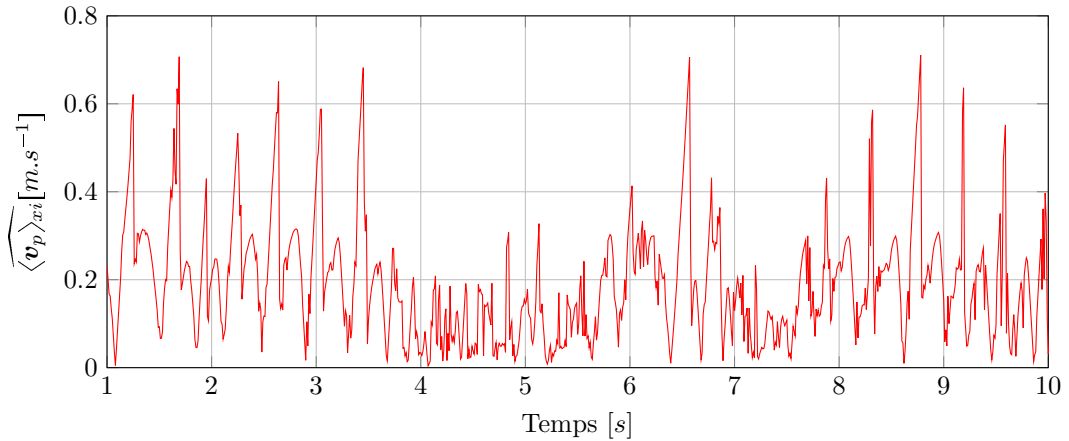


FIGURE V.6 – Valeur maximale de la vitesse des particules moyennée dans un volume de contrôle

vitesse $U_{\text{in}} = 3U_{\text{mf}}$. Ainsi, en reliant le pas de temps d'échantillonnage au temps caractéristique τ_{part} , nous obtenons :

$$\Delta t_{\text{sample}} = 15 \tau_{\text{part}} \quad (\text{V.9})$$

Et la fréquence d'échantillonnage correspondante est $f_{\text{sample}} = 1/\Delta t_{\text{sample}}$. Cette méthode de calcul a été testée sur des systèmes comportant différentes tailles de particule et pour des vitesses de fluidisation allant de $U_{\text{in}} = 1.5U_{\text{mf}}$ à $U_{\text{in}} = 8U_{\text{mf}}$ et la description obtenue de la dynamique est satisfaisante dans toutes les configurations.

Remarque 10 Les méthodes de calculs de f_{sample} présentées ici sont basées sur une pré-étude du comportement du lit, ie. une première fluidisation sur un petit système et durant quelques oscillations de la hauteur du lit de particules afin d'estimer la vitesse maximale des particules. Il serait intéressant de pouvoir estimer la vitesse maximale des particules dans le lit en fonction des paramètres de la

fluidisation. Une telle étude a été entreprise mais n'a pas abouti à une formulation concluante, principalement en raison de la multitude de facteurs entrant en compte : caractéristiques des particules et du fluide bien sûr, mais également dimensions du domaine (un même ensemble de particules dans une colonne étroite n'a pas le même comportement que dans un réacteur plus large).

V – 2.4.2 Temps d'échantillonnage

Comme nous pouvons l'observer sur la figure V.7, les moyennes temporelles des variables décrivant le comportement du lit dépendent du temps d'échantillonnage. C'est pourquoi la détermination d'un critère de convergence temporelle est important afin de savoir à partir de quel moment les statistiques n'évoluent plus lorsque le temps d'échantillonnage est augmenté.

Précisons que ces statistiques sont calculées une fois la phase transitoire de fluidisation passée, c'est à dire après la première seconde au regard de la figure V.5

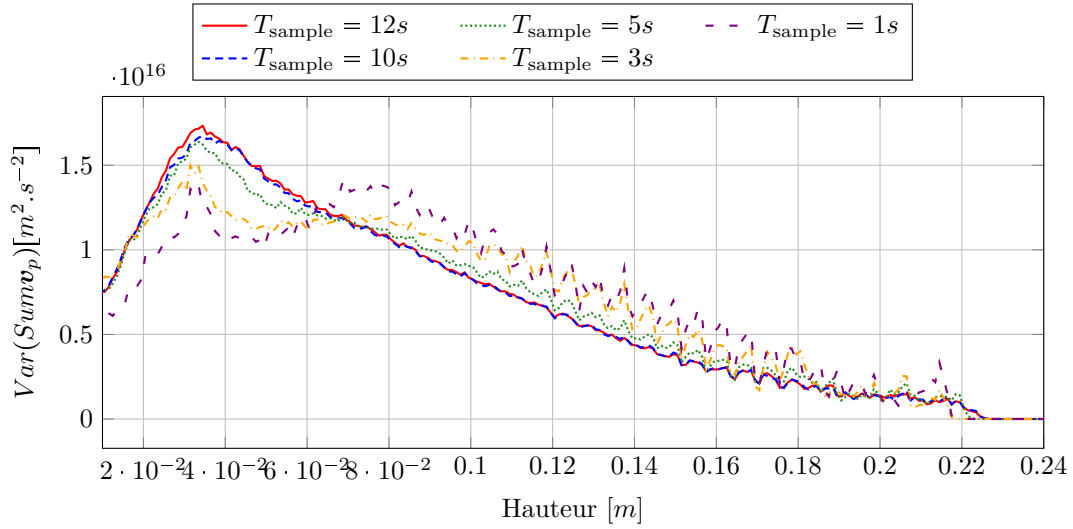


FIGURE V.7 – Influence du temps d'échantillonnage sur les statistiques calculées

Plusieurs grandeurs peuvent avoir ce rôle de critère de convergence, nous détaillons ci-après deux méthodes utilisées dans cette étude qui nous permettent de considérer les temps d'échantillonnage comme suffisamment longs.

V – 2.4.2.a Premier critère de convergence

Le premier critère de convergence est basé sur la variation temporelle de la norme de vitesse de la totalité des particules :

$$\langle Sum|\mathbf{v}_p|\rangle_{X,T} = \frac{1}{T_{\text{sample}}} \int_t \sum_{p=0}^{N_p} |\mathbf{v}_{p,t}| \quad (\text{V.10})$$

Soit sous forme discrétisée :

$$\langle Sum|\mathbf{v}_p|\rangle_{X,T} = \frac{1}{N_T} \sum_{t=0}^T \sum_{p=0}^{N_p} \mathbf{v}_{p,t} \quad (\text{V.11})$$

Chacun s'accorde sur le fait que lorsque l'on allonge le temps d'échantillonnage, cette grandeur tend vers une valeur constante.

Ainsi, le premier critère de convergence est considéré comme atteint lorsque les fluctuations temporelles de $\langle|\mathbf{v}_p|\rangle_{X,T}$ sont faibles. La grandeur observée est décrite par l'expression suivante :

$$C_1 = \frac{1}{\langle Sum|\mathbf{v}_p|\rangle_{X,T} - \langle Sum|\mathbf{v}_p|\rangle_{X,T}^{t-n\Delta t_{\text{sample}}}} \cdot \frac{\langle Sum|\mathbf{v}_p|\rangle_{X,T}^t - \langle Sum|\mathbf{v}_p|\rangle_{X,T}^{t-n\Delta t_{\text{sample}}}}{n \Delta t_{\text{sample}}} \quad (\text{V.12})$$

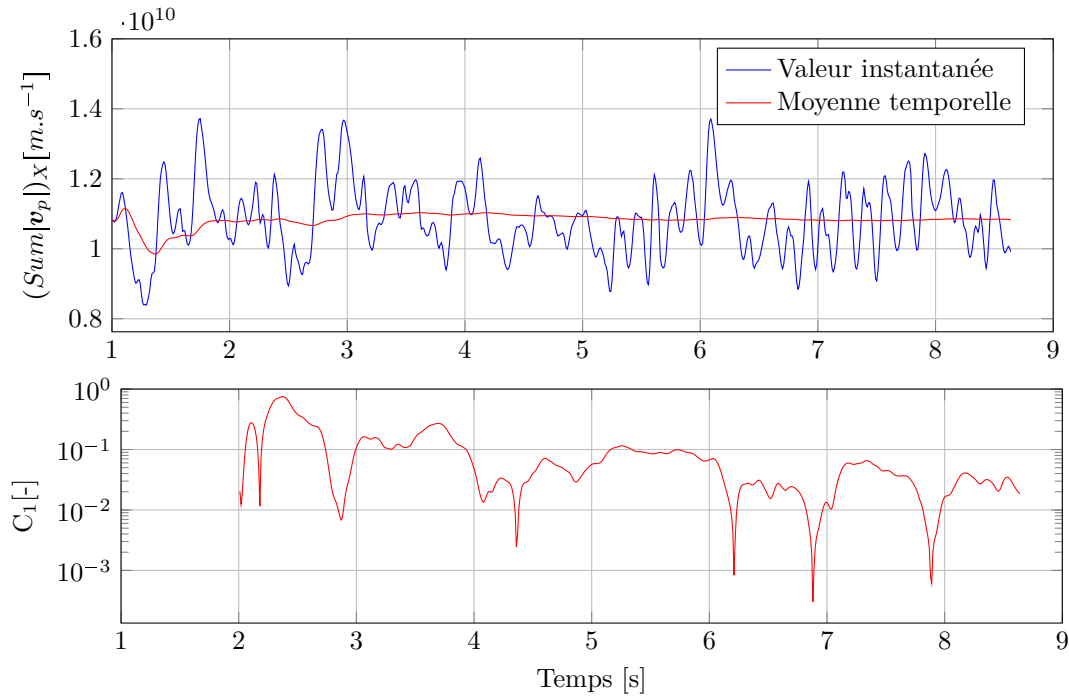


FIGURE V.8 – Evolution temporelle de somme des vitesses des particules dans le domaine (en haut) et du critère de convergence C_1 (en bas)

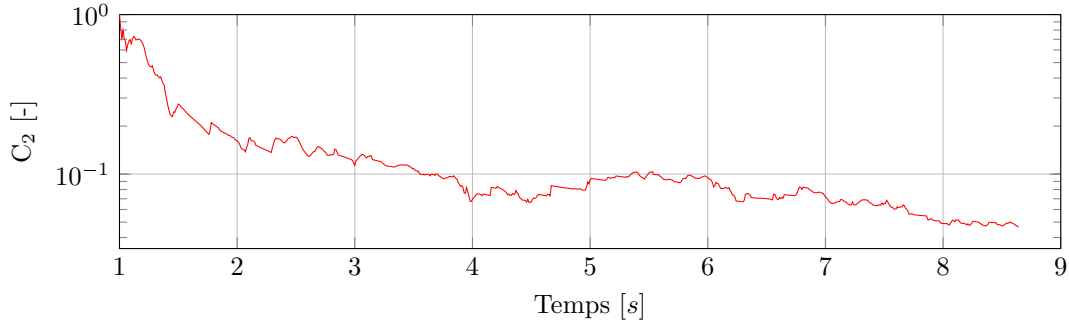
Où $\langle \widehat{\text{Sum}|\mathbf{v}_p|} \rangle_{X,T}$ et $\langle \widehat{\text{Sum}|\mathbf{v}_p|} \rangle_{X,T}$ sont les valeurs maximale et minimale, respectivement, atteintes par la moyenne temporelle de la vitesse de l'ensemble des particules. Le temps d'étude est considéré comme suffisamment long lorsque $C_1 < 0.05$. En outre, cette condition doit être respectée un certain nombre de fois consécutives pour s'assurer de ne pas avoir atteint un plateau provisoire, c'est pourquoi la dérivée est calculée sur n pas de temps d'échantillonnage, ici nous choisissons n de telle sorte que $n \Delta t_{\text{sample}} = 1s$. La figure V.8 illustre l'évolution temporelle de norme de vitesse de l'ensemble des particules ainsi que de sa moyenne temporelle (en haut). La figure V.8 présente quant à elle la diminution de la pente de la moyenne temporelle, *ie.* la grandeur C_1 (en bas).

V – 2.4.2.b Second critère de convergence

Une autre grandeur a également été étudiée afin de s'assurer que les statistiques ne diffèrent plus lorsque le temps d'échantillonnage est augmenté. Celui-ci est basé sur la moyenne temporelle de la vitesse verticale des particules dans le domaine. Ainsi, considérons d'une part $\langle \mathbf{v}_z \rangle_{xi,T}$ la moyenne temporelle de la vitesse moyenne des particules dans le volume de contrôle xi et $\langle \widehat{\mathbf{v}_z} \rangle_{xi,T}$ la valeur maximale parmi les volumes de contrôle qui composent le système. D'autre part, $\langle |\mathbf{v}_z| \rangle_{xi,T}$ est la grandeur obtenue par le même principe de moyenne spatiale puis temporelle mais cette fois-ci avec la norme de la vitesse. Le second critère de convergence porte sur le quotient des deux valeurs précédemment introduites :

$$C_2 = \frac{\langle \widehat{\mathbf{v}_z} \rangle_t}{\langle |\mathbf{v}_z| \rangle_t} \quad (\text{V.13})$$

Cette grandeur nous renseigne sur l'évolution de la vitesse verticale moyenne dans le réacteur. Etant donné que les particules restent confinées dans le système, C_2 tend graduellement vers zéro car les quantités de particules se déplaçant vers le haut et vers le bas se compensent progressivement. La figure V.9 illustre l'évolution temporelle de la grandeur C_2 pour un lit fluidisé bouillonnant.



(a) Convergence

FIGURE V.9 – Evolution temporelle du critère de convergence C_2

V – 3 Etude approfondie de lits 3D

Dans un lit fluidisé de grande dimension, de nombreux phénomènes 3D ont lieu, tels que la formation de bulles et de grappes (en anglais “clusters”) de particules. Ces phénomènes peuvent difficilement être étudiés expérimentalement car il faudrait pour cela utiliser des appareils de mesure intrusifs qui modifient la formation et l’évolution de ces structures. De plus, ces dispositifs de mesure permettent d’obtenir seulement une faible quantité d’informations, il n’est donc pas possible d’obtenir la totalité des informations des champs de vitesse et de pression du fluide, de même que toutes les trajectoires et collisions des particules. Il existe certes des moyens de mesure non-intrusifs tels que la vélocimétrie par image de particules¹, l’imagerie par résonance magnétique² ou le suivi de particules par émission de positron³ mais ces dispositifs sont beaucoup plus lourds et contraignants à mettre en place que des simulations Euler-Lagrange. En effet, les dispositifs de PIV ne permettent de visualiser que les particules se trouvant proche de la paroi du réacteur faisant face à la caméra optique. Or les bulles de fluide d’un lit bouillonnant 3D remontent majoritairement par le centre du réacteur et la vitesse du fluide et des particules est quasiment nulle sur les parois, la caméra ne visualise alors pas la dynamique de l’ensemble de l’écoulement. Concernant les techniques de MRI et de PEPT, les dispositifs expérimentaux sont généralement très lourds et coûteux à mettre en place. De plus, une telle installation est peu évolutive, c’est à dire qu’une expérience est généralement dimensionnée pour une seule configuration d’écoulement fluide-particules, il n’est alors pas possible d’étudier par exemple l’influence de la densité du fluide ou de la dimension du réacteur. L’approche méso implémentée durant cette thèse est en revanche particulièrement adaptée à l’étude approfondie des lits fluidisés 3D car la taille des systèmes qu’il est possible d’étudier avec cette échelle de modélisation permet aux structures d’évoluer librement au sein du lit. De plus, le suivi lagrangien des particules et le traitement des contacts assurent une modélisation plus proche de la réalité que les modèles Euler-Euler et offrent la possibilité d’étudier en détail la dynamique des particules.

Ci après, nous présentons une analyse statistique du comportement d’un lit fluidisé bouillonnant pour différentes vitesses d’injection, puis nous nous basons sur certaines de ces valeurs statistiques pour étudier l’influence de certains paramètres sur la dynamique de l’écoulement.

V – 3.1 Description statistique du lit en fonction de U_{in}

Afin de mieux comprendre les phénomènes se déroulant au sein d’un lit bouillonnant, nous présentons ici un ensemble de courbes décrivant la dynamique du fluide et des particules pour différentes vitesses d’injection. Les statistiques ont été obtenues en respectant les critères de convergence présentés précédemment (voir §V – 2.4.2) afin que les résultats ne soient pas dépendants de la durée d’analyse. Les paramètres du lit fluidisé bouillonnant présenté dans cette partie sont référencés dans le tableau V.1.

1. en anglais “Particle Image Velocimetry (PIV)”
2. en anglais “Magnetic Resonance Imaging (MRI)”
3. en anglais “Positron Emission Particle Tracking (PEPT)”

TABLE V.1 – Paramètres de simulation pour le lit fluidisé de référence employé en partie V – 3.1

Paramètre	Valeur
Nombre de particules	100 000
d_p	1 mm
ρ_p	1500 [kg.m ⁻³]
ρ_f	1.2 [kg.m ⁻³]
μ_f	1.8×10^{-5} [Pa.s]
U_{mf}	0.24 [m.s ⁻¹]
Δp_{in}	370
Domaine	$0.1 \times 0.1 \times 0.2$ [m ³]
Maillage	$200 \times 200 \times 400$

V – 3.1.1 Fraction volumique de fluide

Comme nous pouvons le voir sur la figure V.10-(a), pour de faibles vitesses d'injection ($1.5U_{mf}$ et $2U_{mf}$), la moyenne temporelle de la fraction volumique de fluide dans la partie basse du réacteur, $\mathcal{E}_{f,bulk}$, est quasiment uniforme et la transition entre le lit de particules et la zone ne comportant que du fluide ($\mathcal{E}_f = 1$) s'effectue sur une zone restreinte, *ie.* un plage d'une dizaine de d_p . Dans cette zone, les fluctuations de \mathcal{E}_f , représentées par $Var(\mathcal{E}_f)_{xi}$ sur la figure V.10-(b), sont élevées car la porosité du lit oscille au rythme des bulles entre une zone dense ($\mathcal{E}_f \simeq 0.5$) et une zone entièrement dépeuplée.

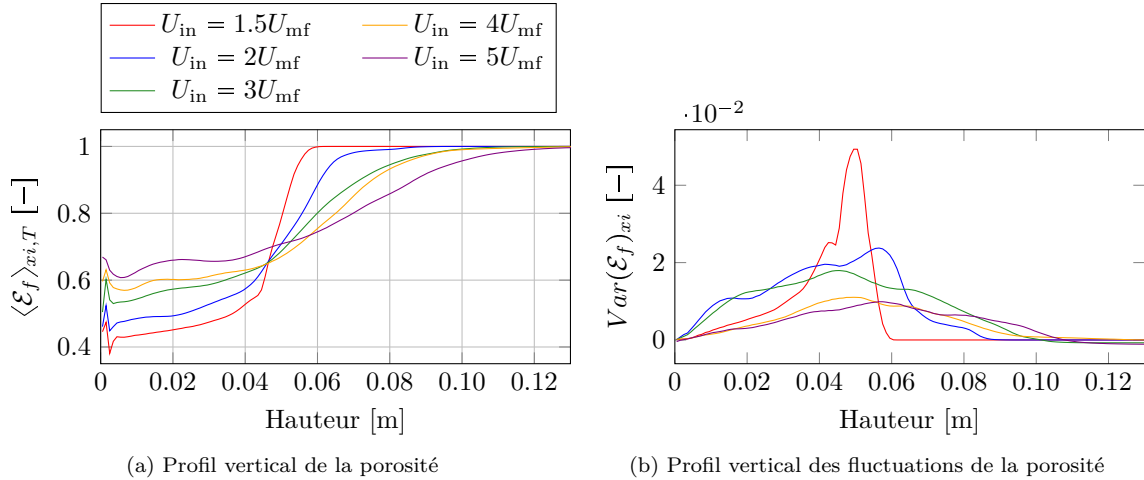


FIGURE V.10 – Influence de la vitesse d'injection sur la fraction volumique de fluide

En revanche, pour des vitesses d'injection plus élevées ($4U_{mf}$, $5U_{mf}$), la porosité du lit dans la partie basse du réacteur est plus élevée et la zone de transition entre $\mathcal{E}_{f,bulk}$ et $\mathcal{E}_f = 1$ s'élargit, les fluctuations de \mathcal{E}_f sont alors moins élevées mais plus étalées. L'augmentation de la porosité du lit s'explique par l'augmentation de la hauteur du lit en fonction de la vitesse d'injection comme nous le présentons en partie §V – 3.1.2. L'élargissement de la zone de transition entre $\mathcal{E}_{f,bulk}$ et $\mathcal{E}_f = 1$ s'explique quant à lui par l'augmentation de la présence de bulles dans le système, qui remonte plus haut dans le réacteur avant d'exploser.

V – 3.1.2 Hauteur du lit et saut de pression

Chacun s'entend sur le fait que l'augmentation de la vitesse d'injection du fluide dans un lit fluidisé engendre une augmentation de la hauteur du lit de particules. La figure V.11 illustre cette augmentation de la hauteur moyenne du lit et de ses fluctuations en fonction de la vitesse d'injection du fluide ainsi que l'augmentation des fluctuations de la pression dynamique du fluide sur la face d'entrée. Nous

remarquerons que le saut de la pression moyen à travers le lit de particules reste constant et égal au poids relatif des particules calculé à l'aide la formule (IV.7).

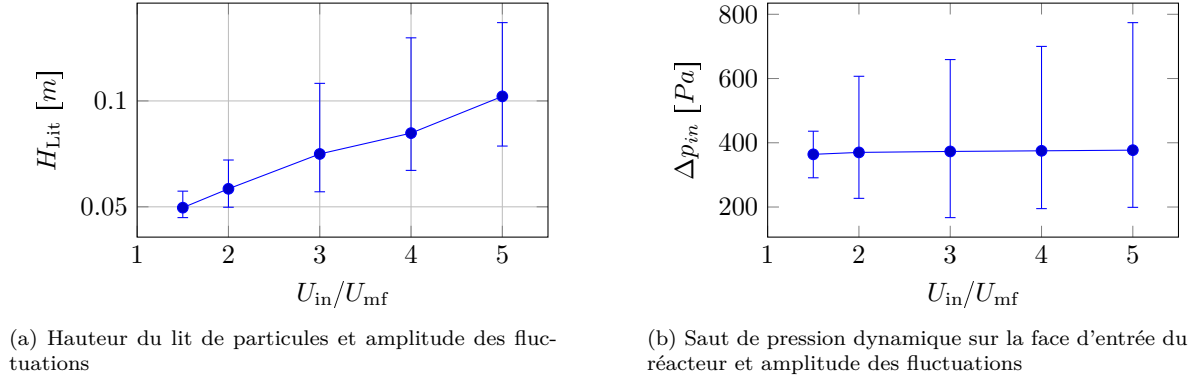


FIGURE V.11 – Influence de la vitesse d'injection sur la hauteur du lit et la pression dynamique en entrée du réacteur

Remarquons que de fortes variations de la hauteur de lit ainsi que les fluctuations de pression que cela engendre peut avoir des conséquences néfastes pour les dispositifs expérimentaux et les réacteurs de production. En effet, les forces exercées sur la face inférieure du réacteur lors de la chute d'une grande quantité de particules peut détériorer la cuve de même que l'augmentation de la pression dans la partie basse du domaine peut endommager les pompes du système d'injection de fluide.

V – 3.1.3 Collisions entre les particules

Au sein d'un lit fluidisé bouillonnant, les collisions entre les particules sont très fréquentes et doivent impérativement être prises en compte afin de simuler correctement la dynamique de l'écoulement. La figure V.12 montre la distribution verticale de la moyenne temporelle du nombre de contacts moyen par particule par volume de contrôle pour différentes vitesses d'injection. La baisse du nombre de collisions lorsque la vitesse d'injection augmente s'explique par l'augmentation de la distance entre les particules résultant de l'expansion du lit. Quelle que soit la vitesse d'injection, le nombre de contacts moyen par particule est homogène dans la partie basse du domaine, là où la densité de particules est la plus élevée. En comparant les courbes V.12-(a) et (b) aux distributions verticales de \mathcal{E}_f et $Var(\mathcal{E}_f)$, nous observons une corrélation entre la concentration de particules ($1 - \mathcal{E}_f$) et le nombre de collisions dans le lit, il en va de même pour les variances.

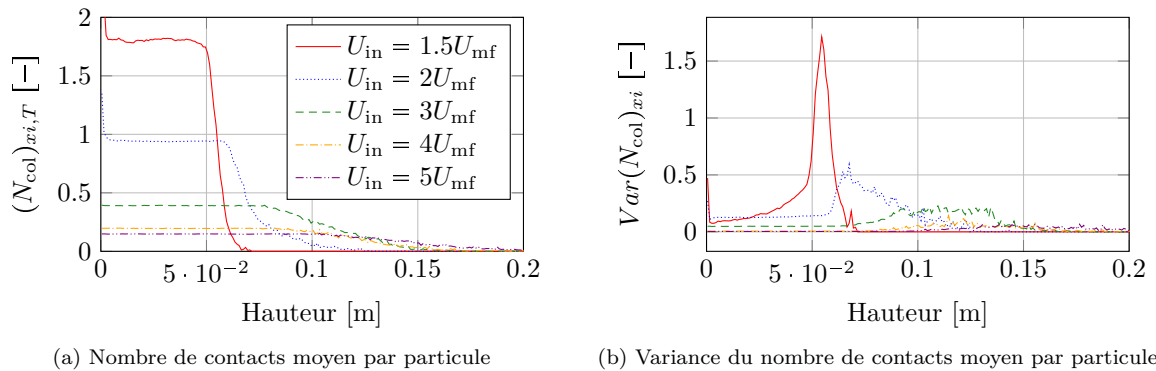


FIGURE V.12 – Influence de la vitesse d'injection sur les collisions interparticulaires au sein du réacteur

Remarque 11 Pour les vitesses d'injection $U_{in} = 1.5U_{mf}$ et $U_{in} = 2U_{mf}$, nous observons un nombre élevé de contacts dans le premier volume de contrôle. Cela est dû à la couche de particules non fluidisées dont nous avons parlé précédemment (voir §III – 5.1.1).

V – 3.1.4 Vitesse des particules

Au sein d'un lit fluidisé bouillonnant, les trajectoires des particules sont extrêmement chaotiques en raison de la multitude de contacts interparticulaires et des nombreuses bulles de fluide remontant dans le réacteur. La répartition axiale de la valeur temporellement et spatialement moyennée de la norme de vitesse des particules est représentée sur la figure V.13.

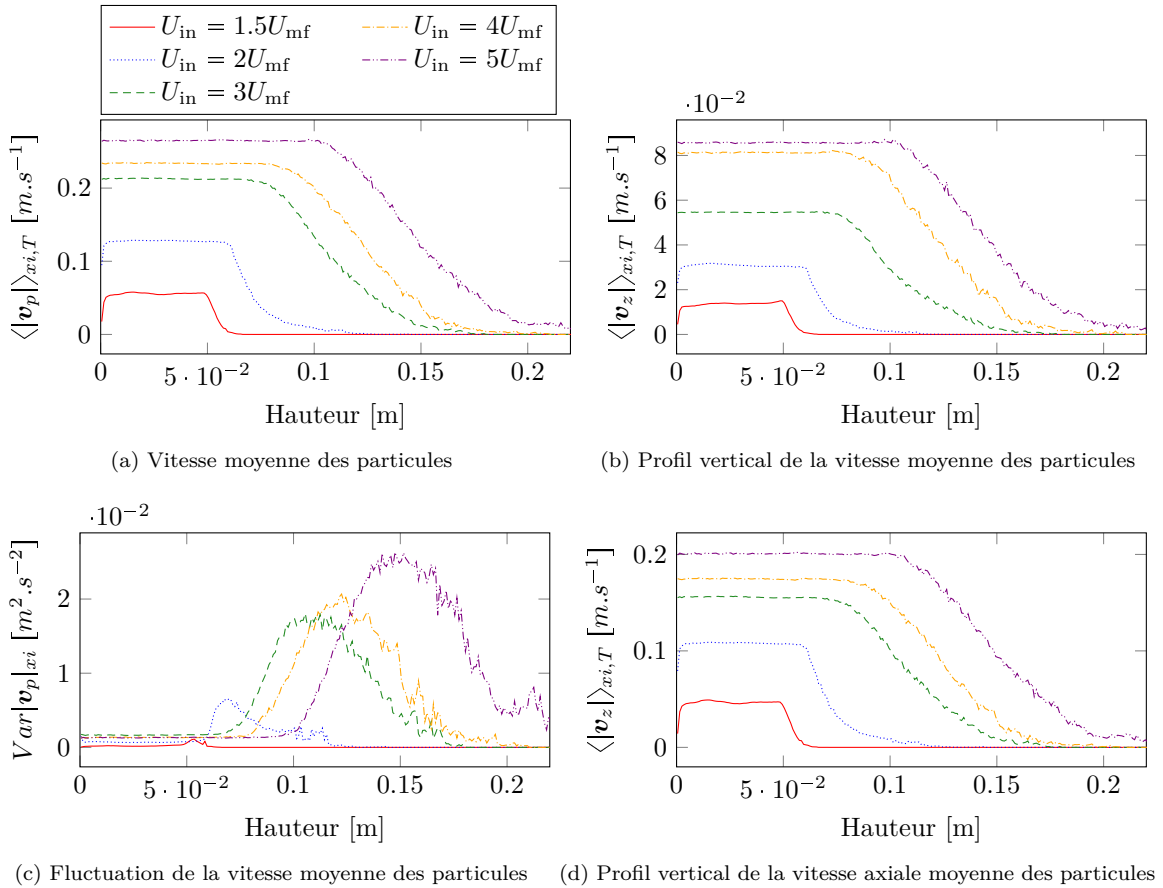


FIGURE V.13 – Influence de la vitesse d'injection sur la vitesse des particules dans le réacteur

Comme nous pouvions nous y attendre, les normes de vitesse des particules, qui renseignent directement sur le taux d'agitation du lit, sont plus élevées pour de fortes vitesses d'injection du fluide. En comparant les figures V.13-(a), (b) et (d), nous constatons que le déplacement des particules est majoritairement vertical pour de faibles vitesses d'injection, mais qu'une part non négligeable provient des déplacements transversaux pour de plus fortes vitesses d'injection. Cela est dû à l'augmentation de la taille des bulles, et du déplacement des particules lorsque les bulles éclatent, propulsant alors des particules dans les directions transverses. Afin de compléter cette étude de la vitesse des particules dans le domaine, la figure V.14 illustre la distribution de la vitesse des particules en fonction de leur valeur. Une telle distribution des valeurs de v_z peut être utilisée pour calculer le pas de temps d'échantillonnage Δt_{sample} (voir §V – 2.4.1), de même que la distribution de la norme de vitesse $|v_p|$ est utile pour l'estimation du pas de temps de simulation Δt_p .

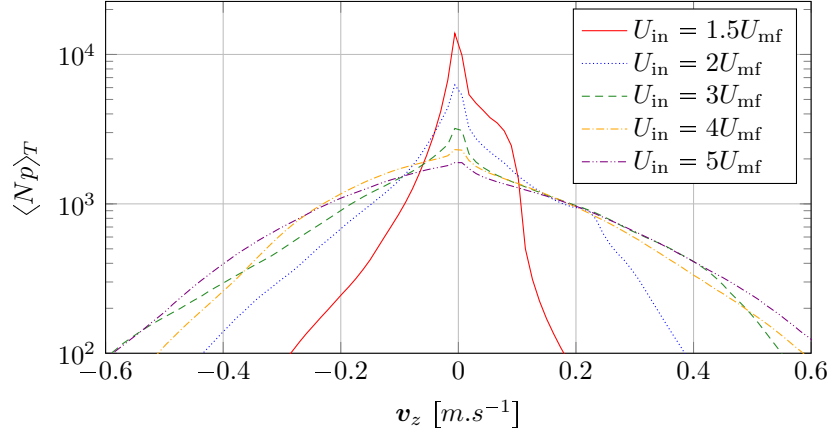


FIGURE V.14 – Influence de la vitesse d’injection sur la distribution (PDF) de vitesse des particules dans le réacteur pour le système présenté dans le tableau V.1, largeur des classes : $0,01 \text{ m.s}^{-1}$

V – 3.2 Influence de la taille du domaine

La taille du domaine d’étude est un paramètre important qu’il est intéressant d’étudier car il peut grandement influencer la dynamique de l’écoulement et donc les statistiques qui en résultent. En effet, dans un lit bouillonnant, les bulles de fluide qui apparaissent au sein de la phase dispersée peuvent atteindre des tailles très importantes. Or, si le domaine d’étude est trop étroit, la dimension de ces bulles de fluide peut aisément être du même ordre de grandeur que celle du réacteur et les structures ne peuvent alors pas se former et évoluer librement dans le domaine. Ainsi, une fluidisation bouillonnante se transforme rapidement en fluidisation en bouchons car les bulles occupent toute la section du réacteur.

Pour éviter cette configuration, l’évolution des statistiques du lit de particules a été analysée pour différentes tailles de domaine. Pour cela, nous avons fait varier la section du réacteur en conservant une hauteur de lit et de domaine fixée. Les lits de départ sont composés de particules initialement arrangées de façon cubique simple sur 50 couches de particules. Les caractéristiques des domaines étudiés sont résumées dans le tableau V.2.

TABLE V.2 – Systèmes étudiés pour la convergence des statistiques en fonction de la taille du domaine

Notation	Nombre de particules	Nombre de cellules fluides	Nombre de cœurs
20×20	20 000	18 100	1
40×40	80 000	72 400	4
60×60	180 000	162 900	9
80×80	320 000	289 600	16
100×100	500 000	452 500	25
120×120	720 000	651 600	36

Les conditions au bord sont périodiques pour les faces latérales, les faces supérieures et inférieures sont quant à elles vues comme des obstacles pour les particules mais sont tout de même traversées par le fluide (voir section III – 5.1). Les caractéristiques des particules employées pour cette partie sont les mêmes que celles des particules utilisées pour l’étude de l’influence de la vitesse d’entrée (voir tableau V.1), et le fluide est injecté à $U_{in} = 3U_{mf}$. Une sélection de statistiques décrivant le comportement du lit de particules en fonction de la taille du domaine est présentée figure V.15. Bien entendu, ces statistiques sont, ici aussi, obtenues sur un temps d’échantillonnage suffisamment long pour garantir l’indépendance des valeurs en fonction de la durée d’analyse.

Au regard de la distribution verticale des statistiques, il est clair que la dynamique du lit est grandement dépendante de la section du réacteur. En effet, l’étalement vertical de la grandeur $\langle \mathcal{E}_f \rangle_{xi,T}$ pour les cas $20d_p \times 20d_p$ et $40d_p \times 40d_p$ par exemple, illustre une hauteur de lit et une porosité plus

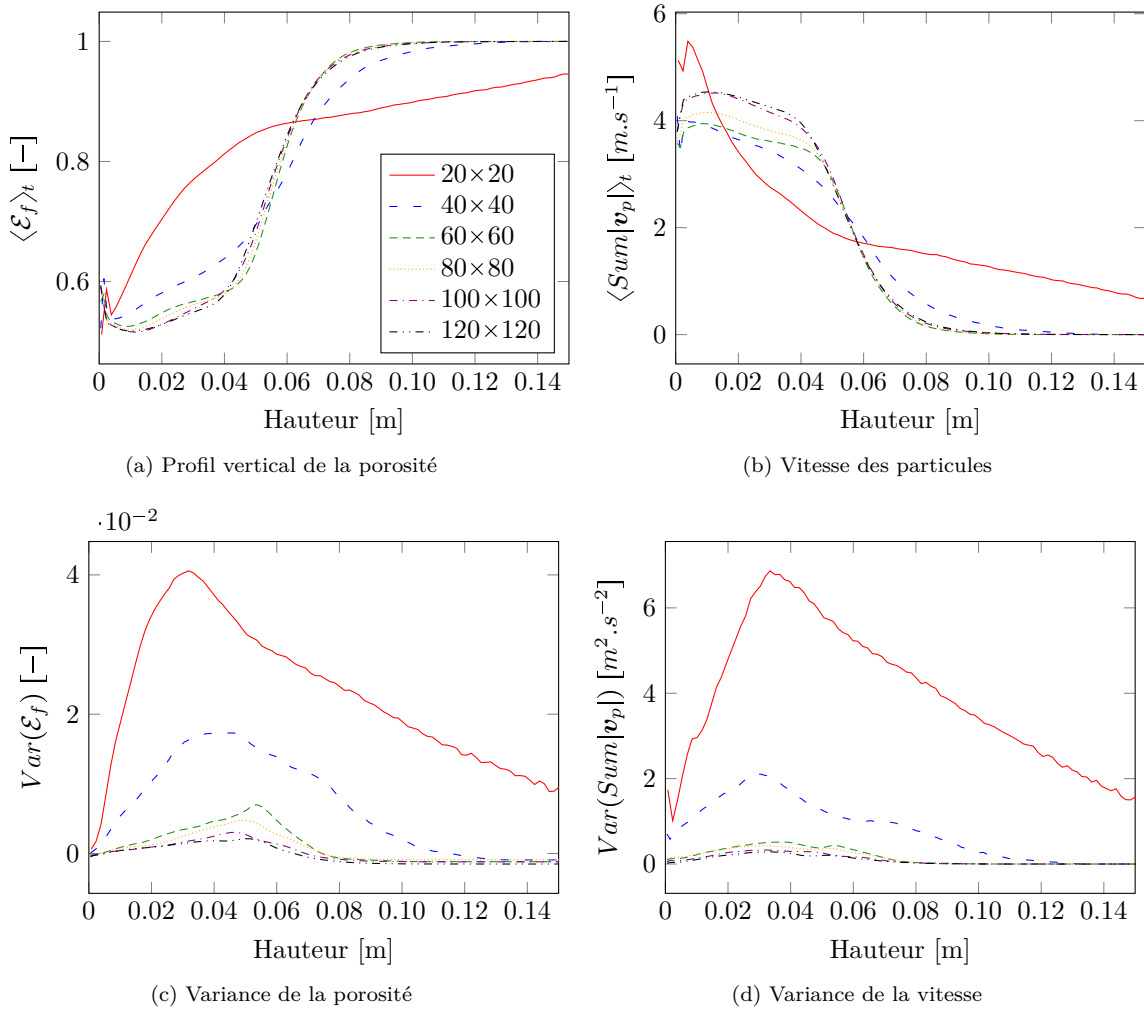


FIGURE V.15 – Evolution des statistiques du lit en fonction de la taille du domaine

élevées. Les valeurs de $\text{Var}(\mathcal{E}_f)_{xi}$, elles aussi plus élevées pour les petits systèmes, indiquent que la porosité fluctue plus que pour les domaines de section plus large.

Ces résultats traduisent une situation où des bulles de fluide occupent toute la largeur du lit et s'élèvent bien plus haut que dans le cas d'une fluidisation bouillonnante comme nous pouvons l'observer sur la figure V.16 pour laquelle, précisons le, les dimensions sont respectées.

Au terme de cette analyse portant sur l'influence de la taille du domaine sur la dynamique du lit, nous pouvons conclure que, pour la configuration étudiée, les statistiques décrivant la dynamique du lit sont identiques à partir d'une section de domaine égale à $100d_p \times 100d_p$. Ainsi, cela montre qu'il n'est pas nécessaire de réaliser d'étude sur un domaine plus large pour obtenir les statistiques décrivant le comportement d'un lit infiniment plus grand. Néanmoins, précisons que la section minimale de $100d_p \times 100d_p$ correspond au système étudié ici, et que cette étude de sensibilité à la taille de domaine réalisée sur une autre configuration de domaine mènera à une autre section minimale à partir de laquelle les statistiques convergent. Parmi les paramètres ayant certainement une influence sur la section minimale de convergence, citons par exemple :

- la quantité de particules dans le système, qui peut être exprimée comme la hauteur du lit au repos,
- le type de conditions aux limites, comme par exemple la présence de parois en lieu et place de conditions aux limites périodiques,

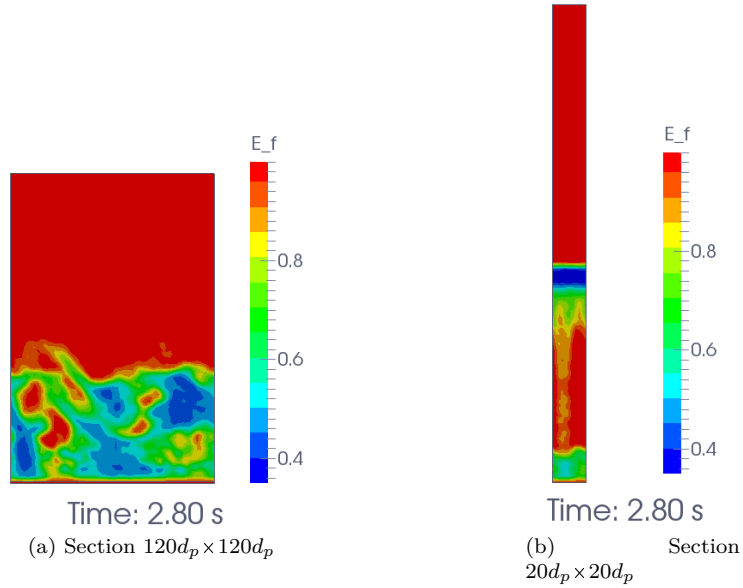


FIGURE V.16 – Distribution spatiale instantanée de la fraction volumique de fluide pour un plan de coupe passant par le milieu du domaine

- la vitesse d'injection du fluide dans le domaine, dont dépend la taille des bulles de fluide créées au sein du lit.

V – 3.3 Influence des paramètres numériques

Pour réaliser une simulation avec le modèle DEM-CFD développé au cours de cette thèse, il est nécessaire de fixer certains paramètres numériques tels que la résolution du maillage ou le pas de temps des solveurs granulaire et fluide. Aussi, pour garantir le fait que la valeur choisie pour ces paramètres n'affecte pas la qualité des simulations, une étude paramétrique de l'influence de ces paramètres sur les statistiques décrivant le comportement du lit a été réalisée. Afin de représenter les résultats de cette étude de façon concise, seuls les résultats concernant la moyenne temporelle de la somme des vitesses des particules dans le domaine sont illustrés dans ce rapport. Les résultats obtenus pour cette valeur, $\langle |U_{3D}| \rangle_{X,T}$, sont tracés sur la figure V.17.

V – 3.3.1 Influence de la taille de grille

Dans l'état actuel de l'implémentation du modèle DEM-CFD, les variables du fluide sont moyennées directement en utilisant le maillage du fluide. Ainsi, comme nous l'avons évoqué précédemment, la taille des mailles doit être suffisamment grande pour que les variables soient traitées de façon moyennée, mais les volumes de contrôle ne doivent pas être non plus trop grands pour que la dynamique de l'écoulement soit capturée et que l'interpolation des variables du fluide aux positions des particules soit représentative de l'écoulement vu par les particules.

Le principe de variables localement moyennées introduit par Anderson & Jackson [5] se base sur des volumes de contrôle dont le volume est environ un ordre de grandeur plus élevé que celui des particules. Ainsi, afin de déterminer l'influence de la taille de ces volumes de contrôle sur nos résultats, une série de simulations a été menée avec différentes résolutions de maillage. Le domaine employé possède une section de $100d_p \times 100d_p$ afin que le nombre de cellules dans les directions transverses ne soit pas trop petit et ne perturbe pas le comportement du lit, en particulier lorsque la taille des mailles est grande par rapport à celle des particules. Les maillages employés sont détaillés dans le tableau V.3 et les résultats obtenus pour la moyenne temporelle de la somme des vitesses des particules dans le domaine

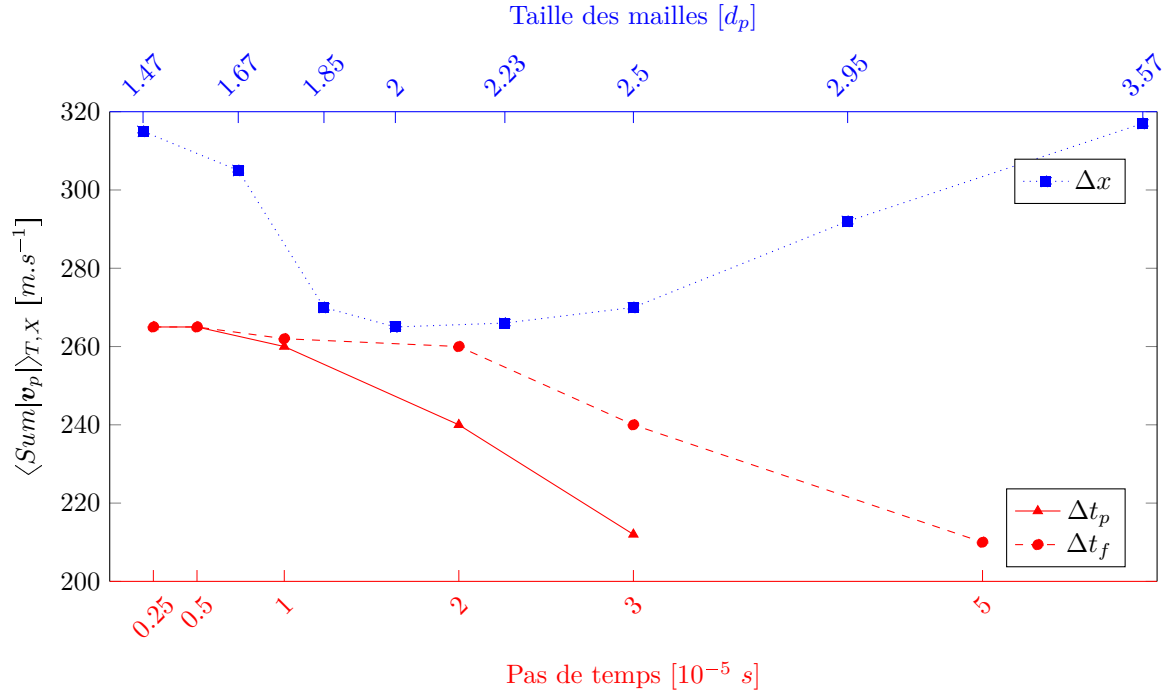


FIGURE V.17 – Influence des paramètres numériques sur la précision des résultats obtenus

sont tracés en rouge sur la figure V.17.

TABLE V.3 – Maillages employés pour l'étude de l'influence de la taille de maille pour un domaine de section $100d_p \times 100d_p$

$Nb_x \times Nb_y$	Δx [d_p]	$Nb_x \times Nb_y$	Δx [d_p]
68×68	1.47	44×44	2.23
60×60	1.67	40×40	2.5
54×54	1.85	34×34	2.95
50×50	2	28×28	3.57

Nous observons que les valeurs de $\langle |U_{3D}| \rangle_{X,T}$ obtenues pour des résolutions de maillage comprises entre $1.82 \leq \Delta x \leq 2.86$ sont quasiment identiques tandis qu'en dehors de cet intervalle, les résultats obtenus sont différents. Des résultats similaires ont été obtenus pour les autres grandeurs statistiques. Ce résultat nous indique la plage de dimensions de maille qu'il est nécessaire de respecter pour obtenir des résultats ne dépendant pas de la résolution du maillage. Ce résultat peut s'expliquer par une mauvaise prise de moyennes locales des variables du fluide en dehors de cet intervalle. En effet, une discrétisation trop grossière de l'écoulement fluide engendre une détérioration de la solution obtenue, tandis qu'un maillage trop fin ne permet pas de prendre en compte la présence des particules voisines de façon satisfaisante.

V – 3.3.2 Influence du pas de temps de la phase solide

Etant donné que les collisions interparticulaires sont très fréquentes au sein d'un lit fluidisé, il n'est pas nécessaire de préciser que les contacts entre les particules doivent être correctement modélisés. Pour cela, le pas de temps employé lors de la résolution du problème granulaire Δt_p doit être correctement fixé de façon à ce que les résultats de simulation ne soient pas tributaires de Δt_p . Comme nous l'avons présenté précédemment (voir §II – 2.2.2.b), ce pas de temps peut être exprimé en fonction du temps de collision T_C (voir équation (II.28)). Pour un écoulement granulaire sec, *ie.* sans couplage avec un fluide, il a été mis en évidence [224] que, dans le cas du modèle DEM employé, la dynamique d'un ensemble

de particules est satisfaisante pour des pas de temps $\Delta t_p < T_C/20$. Dans le cas du couplage DEM-CFD étudié ici, les moyennes temporelles, par exemple le nombre total de contacts dans le domaine et la norme de vitesse de toutes les particules, convergent vers une même valeur pour $\Delta t_p < T_C/10$ comme l'illustre la courbe aux triangles rouges de la figure V.17. Le pas de temps particulaire nécessaire à une bonne description de la dynamique moyenne du lit est donc plus élevé pour le modèle Euler-Lagrange que pour une simulation granulaire sèche. Cela peut s'expliquer par le fait que, premièrement, dans un lit fluidisé bouillonnant, les particules passent plus de temps sans rencontrer d'autres particules que dans le cas pour lequel le Δt_p maximal de la simulation en granulaire sec a été déterminé, à savoir un test de tambour tournant[224]. Cette hypothèse est confortée par les résultats présentés plus loin dans ce rapport, reliant le taux de collisions interparticulaires à la vitesse d'injection du fluide.

De plus, ce pas de temps moins contraignant qu'en simulation sèche peut résulter de la prépondérance des forces hydrodynamiques, notamment la force de traînée, sur les forces de contacts. L'approximation commise par des Δt_p trop grands est alors moins visible que lorsque les particules sont soumises aux seules forces de gravité et de contact. Ainsi des simulations avec un pas de temps fluide $\Delta t_p = T_C/10$ peuvent être réalisées, *ie.* restent stables numériquement, mais la solution obtenue n'est néanmoins pas assez précise. Rappelons que le modèle DEM à sphères molles employé ici nécessite également de respecter une forme de "CFL solide" (voir §II – 2.2.2.b). Or, dans le cas des lits fluidisés bouillonnants, la vitesse maximale des particules est une grandeur difficile à prédire et dont la plage totale de distribution est large relativement à la plage représentant 90% des vitesses (voir figure V.14).

Pour la configuration étudiée ici (voir V.1), la vitesse utilisée pour calculer la CFL solide est empiriquement estimée en fonction du rapport U_{in}/U_{mf} avec un coefficient de sécurité $k = 2$ prévenant des éventuelles sur-vitesses :

$$|\widehat{\mathbf{v}}_p| = k * U_{in} * \ln \left(\frac{U_{in}}{U_{mf}} \right) \quad (\text{V.14})$$

Remarque 12 *Cette expression est propre à la configuration étudiée ici dans le sens où les caractéristiques du système ne sont pas prises en compte. Elle est obtenue à partir d'une plage de vitesse d'entrée $U_{in} \in [0 : 7U_{mf}]$.*

Ainsi le pas de temps employé pour le traitement de la phase solide est :

$$\Delta t_p = \min \left(\frac{T_C}{10}, \frac{\delta_i^{\max}}{|\widehat{\mathbf{v}}_p|} \right) \quad (\text{V.15})$$

Où δ_i^{\max} est l'épaisseur de recouvrement maximale du modèle de sphère molle (voir II – 2.2.2).

V – 3.3.3 Influence du pas de temps de la phase fluide

Le pas de temps du solveur fluide, Δt_f , est un paramètre qui lui aussi peut avoir une influence sur la dynamique de l'écoulement modélisé. En effet, ce pas de temps doit d'une part satisfaire la condition de CFL afin de garantir la stabilité numérique lors de la résolution du problème d'advection-diffusion. Néanmoins, rappelons que si cette condition n'est pas respectée, des sous-itérations du problème d'advection sont réalisées (voir §II – 2.1). D'autre part, le déplacement des particules entre deux itérations du solveur fluide peut parfois être très important et l'approximation générée par le type de couplage temporel choisi peut alors engendrer une altération notable des résultats voir des arrêts de simulation.

Afin de connaître la valeur minimale du pas de temps fluide qu'il est nécessaire d'utiliser, une nouvelle étude paramétrique a été menée. Cette fois ci, le pas de temps particulaire est gardé fixe à $\Delta t_p = 2.5 \times 10^{-6} s$ et une série de simulations a été réalisée avec différentes valeurs de Δt_f . Comme nous pouvons le voir sur la figure V.17, les statistiques observées ne sont plus identiques à partir d'un pas de temps fluide $\Delta t_f \geq 8 \Delta t_p$. Précisons que les simulations utilisant des pas de temps $\Delta t_f \geq 24 \Delta t_p$ ont rapidement divergé alors que la condition de CFL était toujours respectée et que le temps caractéristique de convection était, selon nous, toujours suffisamment bien décrit.

V – 3.4 Paramètres de contact

Les collisions interparticulaires au sein d'un lit fluidisé étant très fréquentes, il est normal de penser que les paramètres physiques de contact influent grandement sur la dynamique de l'écoulement. Or,

il s'avère que dans le cas d'un lit fluidisé bouillonnant, peu de modifications de la dynamique globale ont été observées comme nous le présentons ci-après. Nous étudions ici l'influence de deux paramètres majeurs dans le traitement des contacts entre les particules (voir §II – 2.2.2), à savoir le coefficient de restitution élastique En et le coefficient de Coulomb μ_c .

V – 3.4.1 Coefficient de restitution élastique

Comme nous l'avons vu lors de la présentation du modèle de contact employé dans cette étude (voir §II – 2.2.2), le coefficient de restitution élastique normale En informe sur le rapport des vitesses translationnelles post- et pré-collisionnelles, c'est à dire qu'il contribue à quantifier la dissipation normale d'énergie lors d'un contact entre deux objets. La figure V.18 illustre les différences observées sur la distribution verticale (a) de la moyenne temporelle du nombre de contacts moyen par volume de contrôle, $\langle N_{col} \rangle_{xi,T}$, ainsi que (b) de la variance de la somme des normes de vitesse axiale, $Var(Sum|U_z|)_x [m.s^{-1}]$. Des variations similaires à celles présentées pour $Var(Sum|U_z|)_x [m.s^{-1}]$

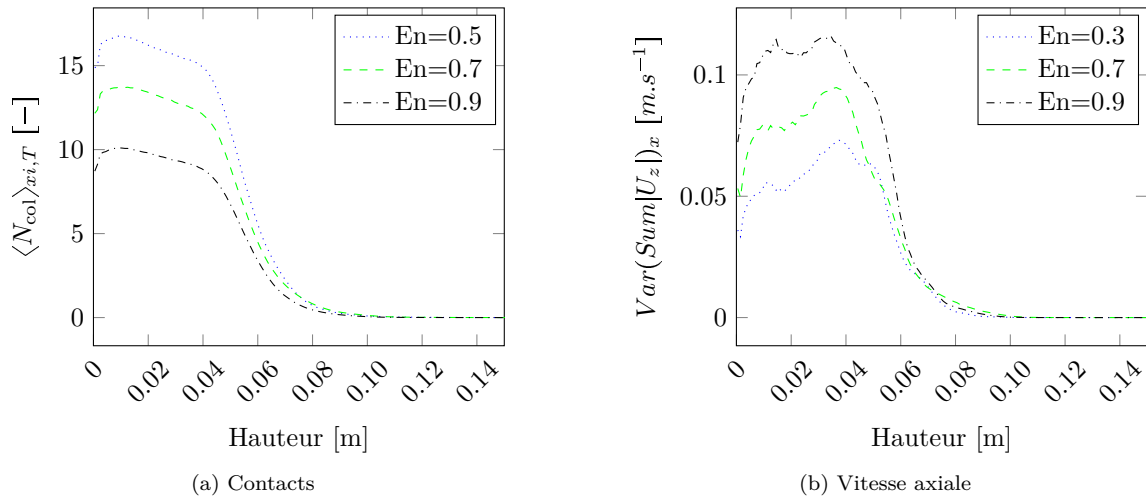


FIGURE V.18 – Evolution des statistiques en fonction du coefficient de restitution élastique En

sont observées pour les autres composantes de vitesse mais ces deux grandeurs sont celles présentant le plus de sensibilité au paramètre En . En revanche, la distribution verticale des vitesses des particules est très faiblement impactée, et la répartition de \mathcal{E}_f et $Var(\mathcal{E}_f)$ est quant à elle inchangée. Nous observons qu'une augmentation du coefficient de restitution élastique En engendre une plus grande fluctuation de la vitesse des particules et au sein du lit, et donc de la variance calculée.

Concernant la diminution du nombre de contacts mesurés lorsque le coefficient de restitution élastique augmente, cette observation est contraire aux résultats escomptés. En effet, comme les vitesses moyennes des particules augmentent légèrement et que les variations de vitesse augmentent nettement alors que la hauteur et la porosité du lit restent constantes, nous nous attendions à ce que le nombre de contacts soit plus élevé. Néanmoins, ce résultat peut s'expliquer par le fait que les temps de contact diminuent lorsque En augmente, les particules passent alors proportionnellement plus de temps à se déplacer librement pour des En élevés. Ainsi, à un pas de temps d'échantillonnage Δt_{sample} , moins de contacts entre les particules sont observés, ce qui explique le résultat présenté sur la figure V.18-(a).

V – 3.4.2 Coefficient de Coulomb

L'influence du coefficient de friction de Coulomb μ_C sur la dynamique d'un lit fluidisé bouillonnant à elle aussi été analysée. Rappelons que ce coefficient entre en compte dans le calcul de la force de friction tangentielle (voir II – 2.2.2). Aucune modification majeure de la vitesse translationnelle des particules n'a été observée, ce qui n'est pas surprenant car ce coefficient n'a pas d'influence sur les forces normales. En revanche, comme nous pouvons l'observer sur la figure V.19, la vitesse de rotation

des particules, ω_p , est quant à elle affectée. La moyenne temporelle de la somme des normes de

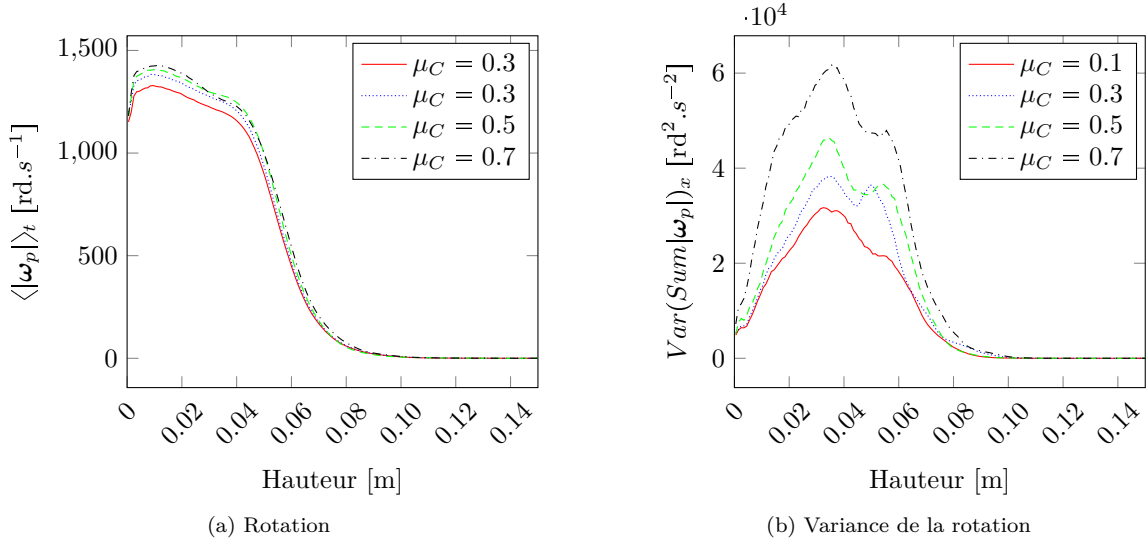


FIGURE V.19 – Evolution des statistiques en fonction du coefficient de friction μ_C

vitesse de rotation des particules au sein d'un volume de contrôle, $\langle Sum|\omega_p| \rangle_{xi,T}$, est légèrement plus faible pour des valeurs plus faibles de μ_C . Ce résultat est cohérent car la force de friction tangentielle varie linéairement en fonction du coefficient de friction (voir équation (II.17)), le couple transmis aux particules par leurs voisines est alors plus faible et la vitesse de rotation de chaque élément est ainsi moins élevée. Ce phénomène est encore mieux mis en évidence par la sous-figure V.19-(b) illustrant la variance temporelle de $Sum|\omega_p|$. En effet, l'amplitude de la vitesse de rotation des particules étant moins élevée pour de faibles valeurs de μ_C , les variations de cette grandeur autour de leur moyenne sont également plus faibles.

V – 4 Etude approfondie de lits pulsés

La dynamique de fluidisation des lits pulsés, présentée dans le chapitre de validation du code (voir §IV – 3.1), est ici étudiée plus en détail. En effet, de nombreuses autres informations peuvent être extraites de l'étude DEM-CFD par rapport à l'étude expérimentale initiale réalisée par Brown [20].

V – 4.1 Type d'analyse et représentation des résultats

Ainsi, à l'instar de l'étude menée sur les lits fluidisés bouillonnants, l'analyse du comportement des lits pulsés est basée sur l'analyse statistique des trajectoires des particules. Néanmoins, contrairement aux lits fluidisés bouillonnants pour lesquels les grandeurs temporellement moyennées sont invariantes dans les deux directions transverses⁴, et pour lesquels une représentation linéique des grandeurs en fonction de la hauteur dans le domaine est suffisante, une telle représentation des résultats n'est pas applicable aux lits pulsés. En effet, dans le cas d'une injection ne couvrant pas la totalité de la surface d'entrée, les moyennes temporelles des grandeurs caractérisant le système varient dans la direction transversale comme nous pouvons l'observer sur la figure V.20.

La représentation des variations spatiales des résultats utilisée ici est la même que celle employée par Brown, *ie.* une cartographie en deux dimensions colorée en fonction de la valeur des grandeurs observées. Pour cela, une grille similaire à celle de la simulation est utilisée pour constituer les volumes de contrôle dans lesquels les grandeurs sont localement moyennées. Les grandeurs sont, comme pour

4. dans le cas de conditions aux limites bipériodiques

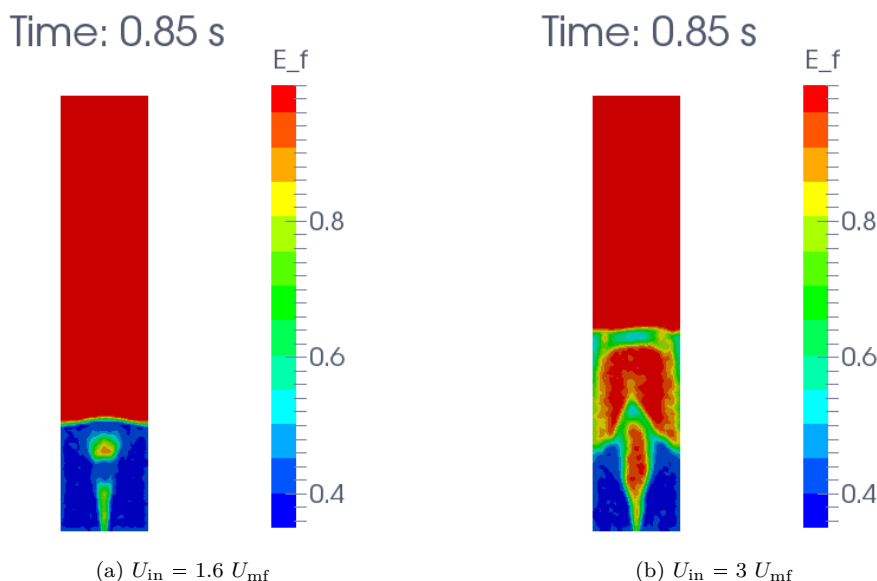


FIGURE V.20 – Exemple de lit pulsé illustrant la non-homogénéité des grandeurs statistiques dans la direction transverse

l'étude des lits bouillonnants, la position, la vitesse et le nombre de contacts des particules ainsi que les fluctuations temporelles de ces valeurs. Leurs distributions transversales pour une hauteur donnée, ou verticales pour une position transverse donnée, peuvent également être tracées afin de représenter les résultats de façon plus précise mais pour une zone plus localisée. Une autre grandeur pouvant être observée est l'évolution temporelle du saut de pression à travers le lit, que ce soit sa moyenne temporelle ou la fréquence de ses fluctuations (voir §IV – 3.2) pour plus d'information).

Notons que les critères de convergence et le choix de la fréquence d'échantillonnage sont similaires à ceux utilisés pour l'étude des lits fluidisés 3D.

V – 4.2 Résultats

De la même manière que pour les lits bouillonnants, une étude paramétrique a été menée afin d'améliorer la compréhension du comportement des lits pulsés en fonction des données physiques caractérisant le système. Ainsi, nous présentons ci-après les résultats concernant l'influence des paramètres de contact interparticulaires, qui ont cette fois-ci une incidence remarquable sur la dynamique de l'écoulement. De plus, comme le modèle DEM-CFD développé durant cette thèse a été validé dans la configuration étudiée par Brown [20, 21] puis Deb [45], il est désormais possible de faire varier les dimensions du lit, en augmentant par exemple la hauteur du lit. Mais surtout, cela ouvre également la possibilité d'augmenter la profondeur du lit et ainsi de simuler un lit pulsé 3D, de manière à étudier des systèmes dont la forme, et donc la dynamique de l'écoulement, est bien plus proche de celle des unités de production.

V – 4.2.1 Influence des paramètres de contact

Les lits pulsés constituent un type d'écoulement où l'influence des contacts inter-particulaires est particulièrement facile à visualiser. En effet, la forme spécifique de la distribution des particules (canal, fontaine, cône) est directement engendrée par les collisions entre les particules. Ainsi, la forme géométrique des structures rencontrées au sein des lits pulsés est visuellement modifiée contrairement aux lits bouillonnants pour lesquels la distribution temporellement moyennée de particules est homogène dans une section horizontale du domaine, ce qui atténue la mise en évidence de la modification de l'écoulement.

L'influence du coefficient de friction tangential étant plus notable que celle du coefficient de restitution élastique, nous ne présentons ici que cette analyse. Nous avons vu précédemment que dans le cas d'un lit bouillonnant, l'augmentation du coefficient de friction de Coulomb μ_C engendrait une augmentation de la rotation des particules dans tout le domaine, mais que la dynamique des particules en translation, de même que leur distribution axiale, n'était pas affectée (voir §V – 3.4.2). En revanche, dans le cas d'un lit pulsé, la modification du coefficient de friction tangential influe grandement sur la dynamique de l'ensemble du lit comme nous le présentons ci-après.

La figure V.21 illustre l'influence du coefficient de friction tangential de Coulomb dans le cas 1J-750-U3 présenté dans les tableaux IV.2 et IV.3, et pour lequel la valeur correspondant à l'expérience initiale est de $\mu_C = 0.1$.

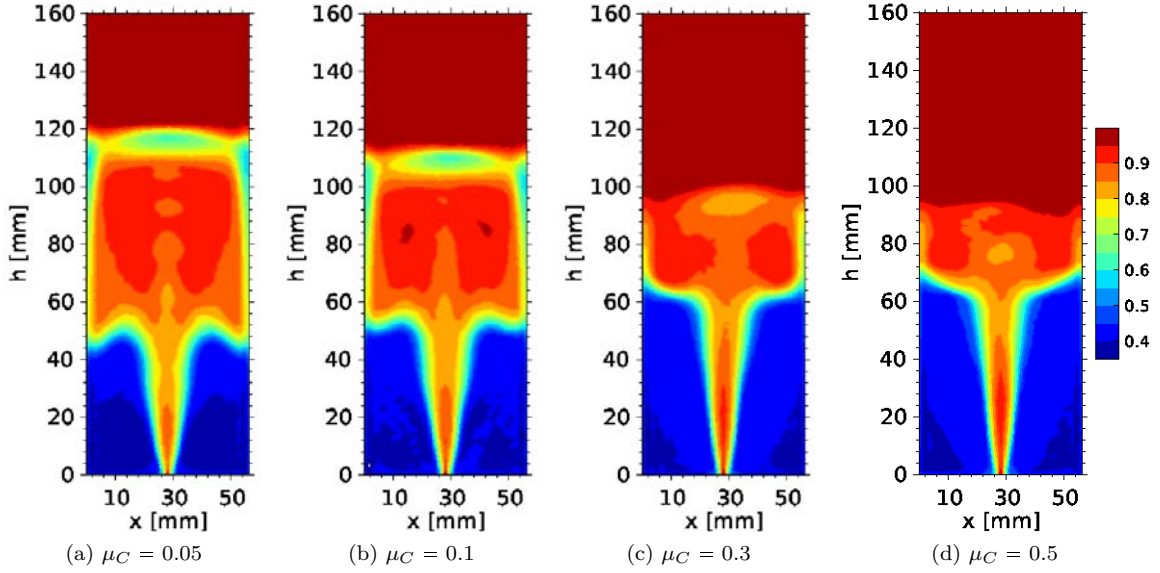


FIGURE V.21 – Influence du coefficient de friction tangentielle sur la distribution spatiale de la moyenne temporelle de la fraction volumique de fluide pour un lit pulsé à un orifice d'injection

La diminution de la hauteur du jet observée pour de plus grandes valeurs de μ_C s'explique par une augmentation de la friction entre les particules, ce qui augmente la résistance qu'elles rencontrent lors de leur progression vers le haut du domaine. Elles progressent alors plus difficilement dans le canal formé au dessus de l'orifice d'injection, et s'élèvent donc moins haut que pour de faibles coefficients de friction. La quantité de particules fluidisées étant moins importante, le saut de pression à travers le lit est lui aussi moins élevé comme nous pouvons le voir sur la figure V.22.

Seules les évolutions temporelles de Δp_{in} pour les cas $\mu_C = 0,1$ et $\mu_C = 0,5$ sont présentées pour des raisons de clarté. Précisons que ces deux valeurs peuvent correspondre à du verre avec des états de surface différents, soit poli dans le cas $\mu_C = 0.1$, soit $\mu_C = 0.5$ pour des sphères à surface rugueuse, suite à de nombreuses collisions par exemple. Nous observons que d'une part, l'amplitude des oscillations est plus faible mais également que la moyenne temporelle est elle aussi moins élevée. Cela est mis en évidence sur la figure V.23-(a), qui illustre l'évolution de ces grandeurs en fonction du coefficient de friction.

En analysant le spectre de fréquence temporelle de Δp_{in} , une diminution de la fréquence principale des harmoniques est également observée lorsque μ_C augmente, comme l'illustre la figure V.23-(b). Par ailleurs, la diminution de l'amplitude des oscillations de Δp_{in} observée sur les figures V.23-(a) et V.22 se traduit par une diminution de la puissance des harmoniques proches de f_{bulle} . Ainsi, nous pouvons dire que l'augmentation de la friction entre les particules, *ie.* du coefficient μ_C , freine le déplacement des particules, celles-ci tombent ainsi moins facilement dans la zone dépeuplée du canal formé par le jet et ralentissent le déplacement de leurs voisins. Les conséquences sont alors :

- une diminution du nombre de particules transportées de la base du domaine vers la surface du

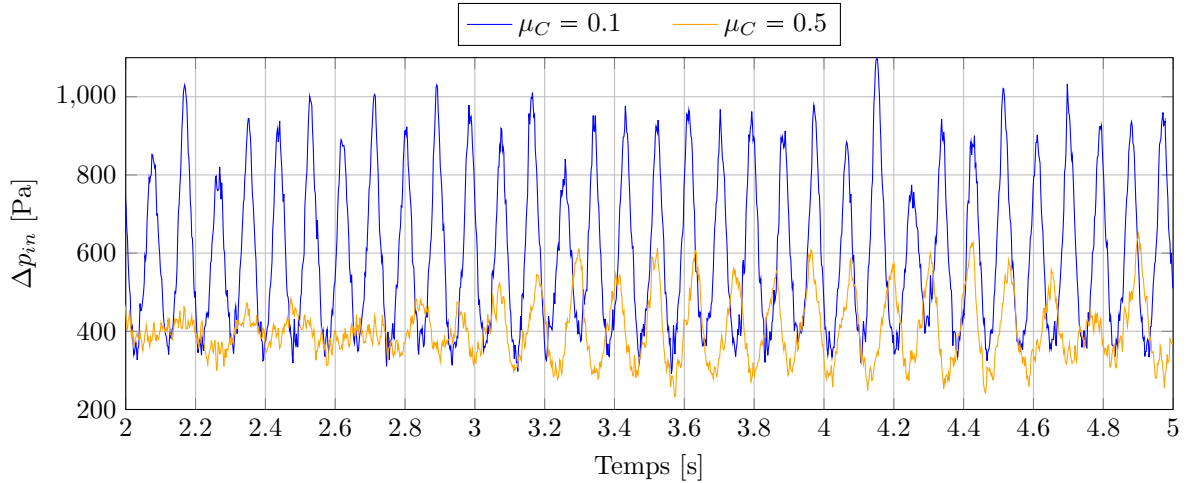


FIGURE V.22 – Evolution temporelle de la pression dynamique sur la face d'entrée du réacteur pour différents coefficients de friction

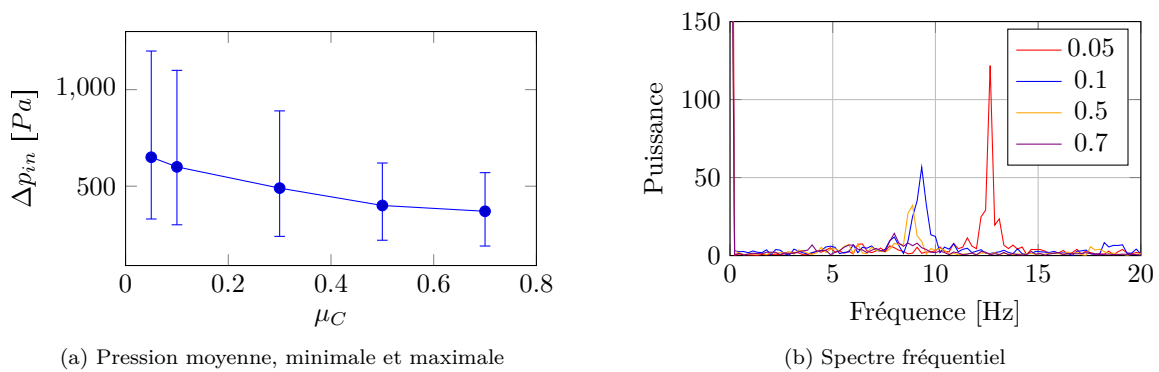


FIGURE V.23 – Influence du coefficient sur les oscillations du saut de pression dynamique sur la face d'entrée du réacteur

lit, et donc une diminution du saut de pression moyen à travers le lit, $\langle \Delta p_{in} \rangle$ et de l'amplitude de ses oscillations temporelles,

- cette diminution du nombre de particules dans le canal et l'augmentation des forces de frottement avec les particules qui forment les frontières du canal, génère une fontaine dont la hauteur est moins élevée,
- une chute moins rapide des particules dans la zone située au dessus de l'orifice d'injection, rallongeant ainsi le temps nécessaire au regroupement d'une quantité suffisante de particules pour permettre à une nouvelle bulle de fluide de se créer, et donc diminuant la valeur de f_{bulle} .

V – 4.2.2 Dynamique de bullage dans le cas d'une double injection

Les résultats moyennés temporellement permettent de quantifier et de comprendre une partie des phénomènes qui se déroulent au sein des lits pulsés. Néanmoins, l'observation de ce type d'écoulement à l'aide d'un outil de visualisation tel que Paraview par exemple, permet de mieux observer la dynamique des phénomènes se déroulant au sein des systèmes. Dans le cas du jet pulsé à deux orifices d'injection par exemple, les bulles de fluide ne remontent pas à la verticale du point d'injection mais forme un canal central comme nous pouvons l'observer sur la figure V.24.

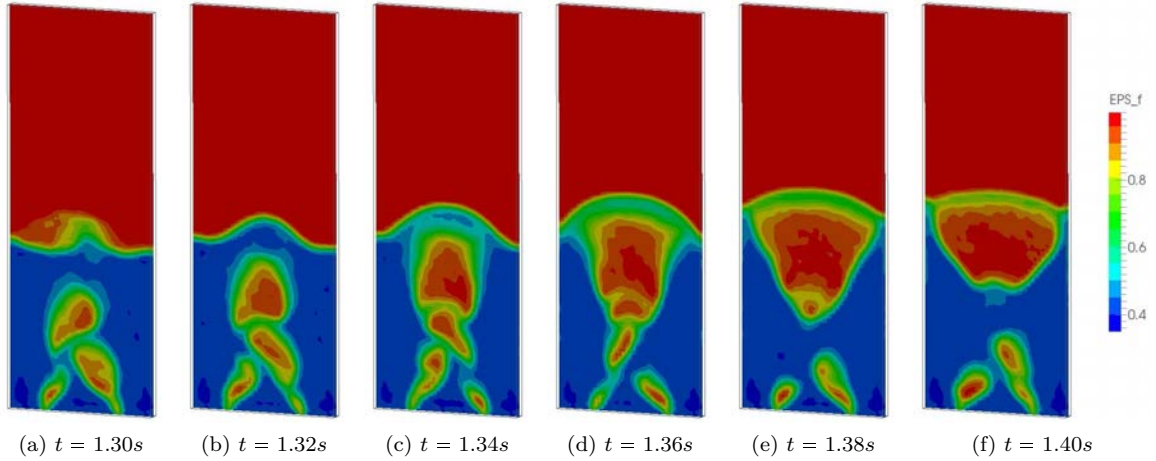


FIGURE V.24 – Dynamique de bullage dans le cas d’un lit fluidisé à deux orifices d’injection

L’apparition de ce chemin préférentiel à une faible hauteur au dessus de la face inférieure du domaine résulte d’une alternance de bulles qui sont “aspirées” vers le centre du réacteur en raison de la présence de la zone dépeuplée créée par la bulle voisine, qui favorise ainsi l’écoulement vers le centre du domaine. Ainsi, les bulles provenant de chaque jet se succèdent les unes aux autres, remontant dans la traînée des précédentes. Notons que ce genre de phénomène ne peut typiquement pas être mis en évidence par un autre outil que la visualisation dynamique 2D ou 3D.

V – 4.2.3 Modification de la géométrie

Le modèle DEM-CFD ayant précédemment été validé dans les différentes configurations d’écoulement étudiées par Brown, nous pouvons alors l’utiliser avec confiance pour simuler des systèmes dont les caractéristiques sont différentes tout en restant assez proches pour être sûr que les résultats obtenus soient corrects. Ainsi, afin de mieux mettre en évidence les mécanismes de formation et de progression des bulles au sein d’un lit pulsé, nous avons fait varier les caractéristiques du domaine. Tout d’abord, nous présentons les résultats d’une augmentation de la hauteur du lit réalisée dans un domaine dont les dimensions sont conservées égales à celles du réacteur d’origine. Puis, la profondeur du domaine, jusqu’alors égale à quelques diamètres de particule, est augmentée afin d’étudier un lit fluidisé 3D à section carrée.

V – 4.2.3.a Hauteur initiale du lit

Lorsque les dimensions du réacteur sont conservées mais que la quantité de particules dans le domaine est augmentée, par exemple doublée ou triplée, la dynamique de fluidisation est grandement modifiée. En effet, pour une même vitesse d’injection, comme le fluide se répartit dans le lit de particules au fil de sa progression vers le haut du domaine, et a plus de chemin à parcourir avant d’atteindre la surface lorsque la quantité de particules est augmentée, les bulles n’atteignent pas forcément le haut du domaine. De plus l’augmentation du poids du lit que cela engendre influe sur le saut de pression moyen à travers le lit de particules, ainsi que sur la formation et le développement des bulles dans le système. En revanche, pour de plus fortes vitesses d’injection, les bulles formées à la base du lit migrent jusqu’à la surface et l’augmentation de la hauteur du lit permet d’étudier leur évolution lorsqu’elles remontent dans le lit.

Comme nous pouvons l’observer sur la figure V.25, plus les bulles de fluide montent dans le réacteur, plus leur taille augmente, notamment en raison de la coalescence des bulles entre-elles et de leur alimentation par le fluide provenant du jet et s’écoulant à travers les particules. Cette coalescence est rendue possible par la différence de vitesse de remontée entre les bulles ayant beaucoup de particules au dessus d’elles et dont la remontée est donc difficile, et celles étant dans leur sillage qui ont peu de particules au dessus d’elles et qui peuvent donc remonter plus rapidement. De plus, comme la

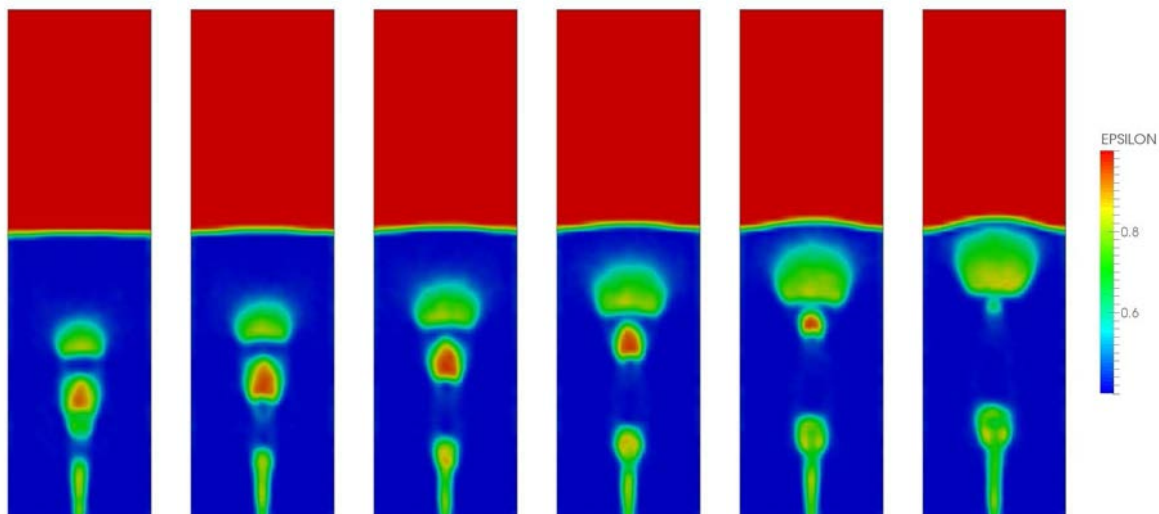


FIGURE V.25 – Coalescence de bulles dans un lit pulsé de 200 000 particules sur une durée $T \in [0.8s : 0.9s]$

progression des bulles est ralentie par les frottements des particules se trouvant au dessus d'elles, plus leur taille est grande, plus leur progression est lente, et de ce fait, les bulles leur succédant les rejoignent et augmentent encore plus leur taille.

Pour 300 000 particules dans le lit, soit trois fois plus que dans l'expérience de Brown, et pour une vitesse d'injection identique au cas 200 000 particules, la progression de la bulle est plus difficile. En effet, comme nous pouvons le voir sur la figure V.26, la dimension de la bulle croît progressivement jusqu'à atteindre la largeur du domaine, la surface d'échange entre la bulle et les particules se trouvant au dessus d'elle ne cesse donc de croître et d'entraver sa remontée. Contrairement au cas 200 000 particules vu précédemment, aucune coalescence de bulle n'est observée, mais la taille des bulles croît néanmoins grâce au fluide qui remonte plus rapidement entre les particules que la bulle ne progresse. Il arrive que des bulles semblent disparaître au cours de leur migration vers la surface, comme par exemple celles se trouvant à l'extrémité de la zone dépeuplée au dessus de l'orifice d'injection, en réalité, le fluide qui les compose s'échappe de la bulle par le haut lorsque le poids des particules au dessus de la bulle n'est pas trop élevé. En revanche, si la quantité de particules au dessus de la bulle est trop élevée, le fluide a du mal à s'écouler et la pression sur la face d'entrée augmente, alors une nouvelle bulle de fluide se forme et est progressivement alimentée par le fluide qui peut de nouveau s'écouler plus facilement. La bulle commence alors à remonter, et ainsi de suite.

V – 4.2.3.b Lit pulsé 3D

Comme nous l'avons expliqué en présentation des lits pulsés (voir §I – 2.3), les domaines employés pour l'étude expérimentale des lits pulsés sont généralement profonds de seulement quelques diamètres de particule afin de pouvoir visualiser les structures se créant et évoluant au sein du lit l'aide de moyens tels que la PIV. Mais il faut garder en tête que ces géométries de domaine contraignent grandement la dynamique de fluidisation car les bulles sont coincées entre les parois parallèles. Leur développement est donc différent de celui des bulles se formant dans les lits pulsés utilisés à des fins industrielles, qui sont en trois dimensions. De plus, le faible nombre de mailles dans la profondeur (seulement 3 dans l'étude numérique de Deb *et al.* [45]) ne permet pas de simuler précisément l'écoulement.

Ainsi, afin de se rapprocher au mieux de ces configurations 3D où les bulles de fluide ne sont pas en contact avec les parois, la profondeur du système étudié par Brown est augmentée de sorte à ce que la section du réacteur soit carrée. L'orifice d'injection, couvrant 5×5 cellules du maillage employé pour l'étude 2D, est situé au centre de la face inférieure du domaine. Les particules employées sont celles de $550\mu m$ utilisées par Brown et la vitesse d'entrée est fixée à $U_{bulk} = 2U_{mf}$. Comme nous pouvons l'observer sur la figure V.27, les bulles se formant au sein du lit évoluent librement sans toucher les

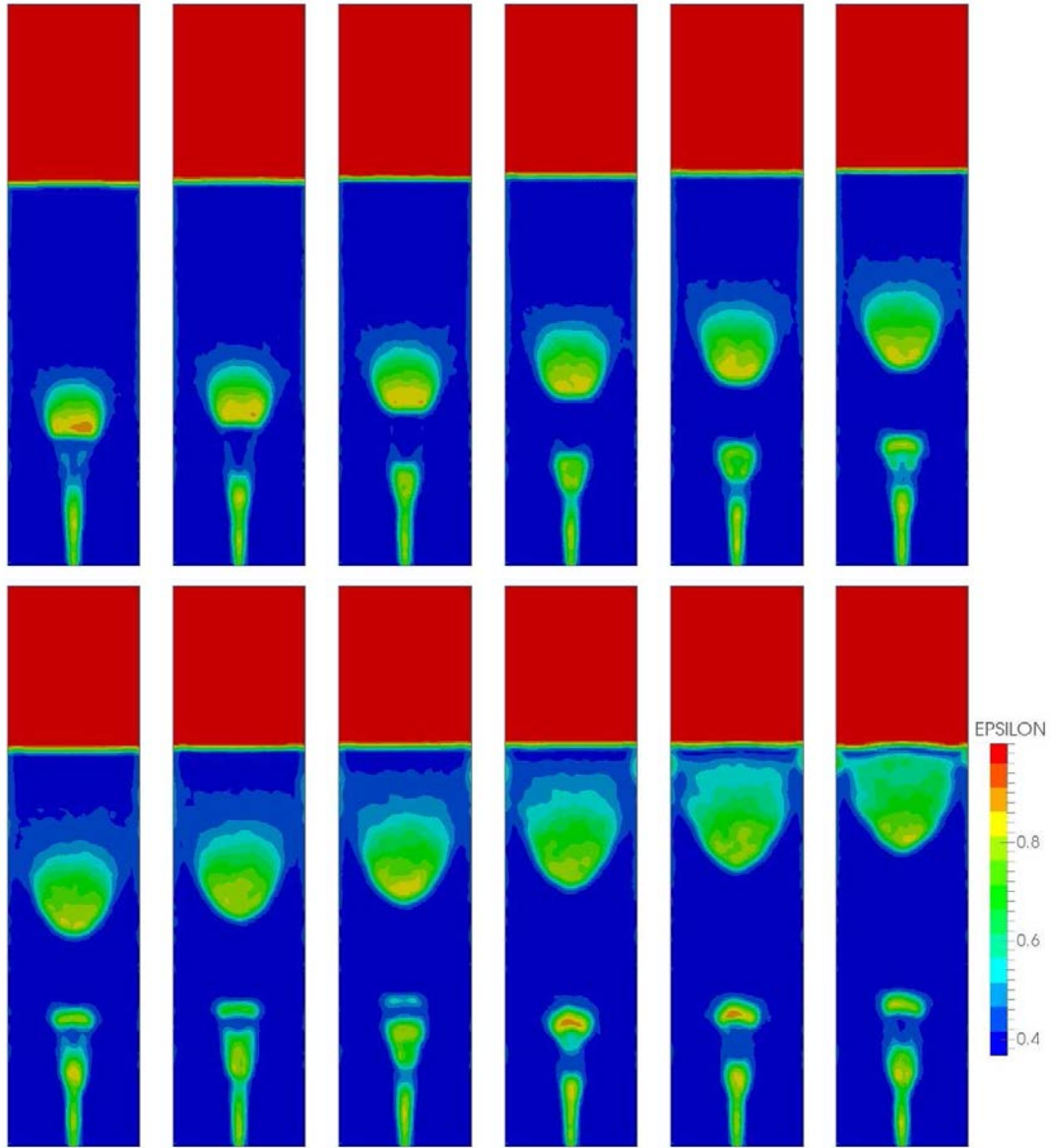


FIGURE V.26 – Remontée d’une bulle dans un lit pulsé de 300 000 particules sur une durée $T \in [0.63s : 0.85s]$

parois du système.

Cette représentation de l’évolution de structures au sein d’un lit 3D nous permet de constater que la bulle est de forme oblongue juste après s’être détachée du jet. Sa morphologie se modifie par la suite : d’une part, le bas de la bulle devient concave en raison de la remontée plus rapide d’autres particules par dessous, et d’autre part, le haut de la bulle s’aplatit en raison de la résistance générée par les particules se trouvant au dessus d’elle.

V – 5 Conclusion

Au terme de ce cinquième chapitre, un ensemble d’outils statistiques permettant d’analyser le comportement des lits fluidisés a été proposé. Une attention particulière a été portée à la détermination de la fréquence et du temps d’échantillonnage utilisés afin que les statistiques décrivant la dynamique du lit ne soit pas dépendantes de ces paramètres. Ces outils ont tout d’abord permis d’analyser en

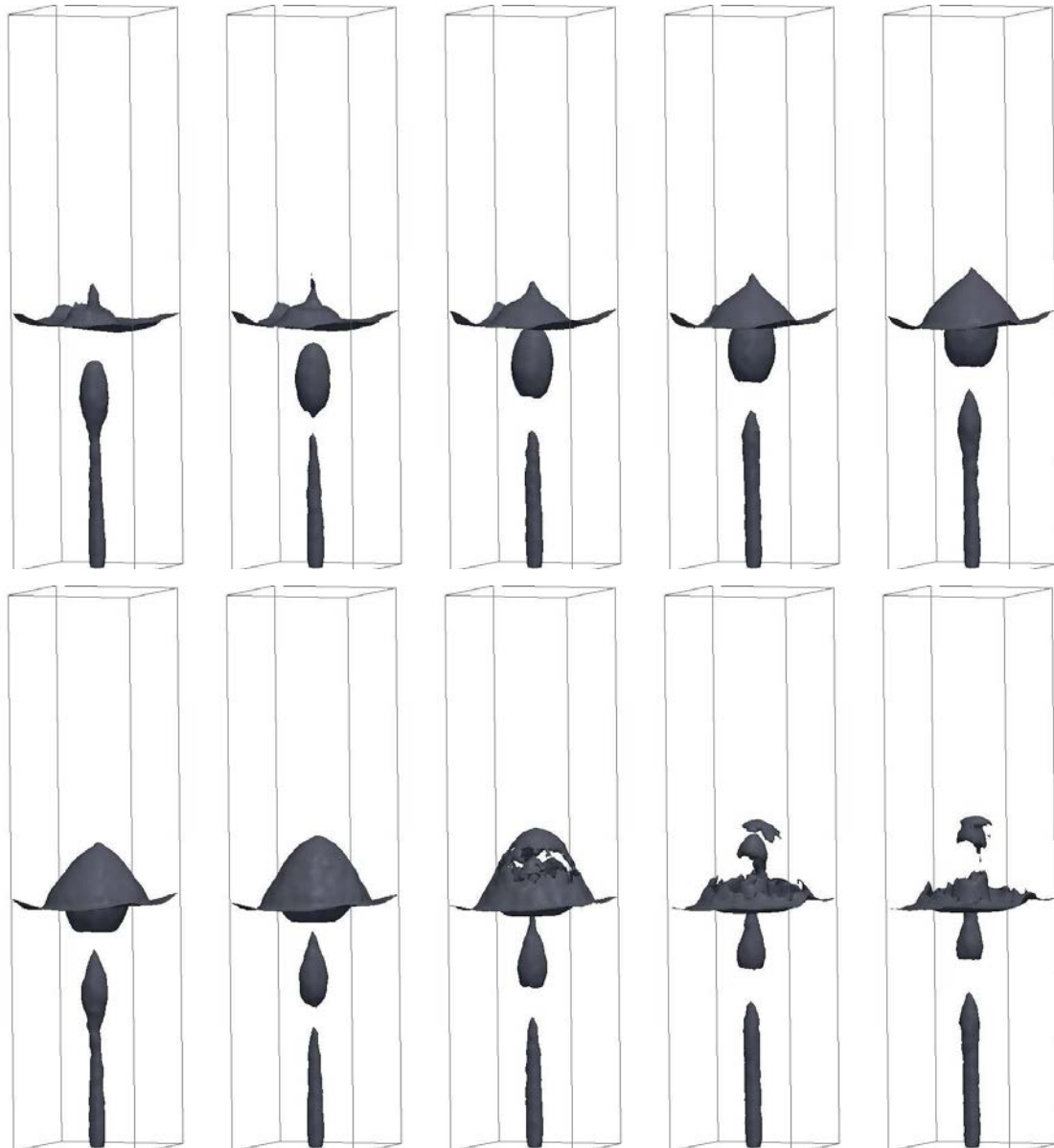


FIGURE V.27 – Iso-valeur de $\mathcal{E}_f = 0.85$ illustrant la remontée d’une bulle dans un lit pulsé 3D composé de 2 000 000 particules sur une durée $T \in [0.48s : 0.57s]$

détails la dynamique des lits fluidisés bouillonnants en fonction de la vitesse d’injection du fluide dans le domaine. Ensuite, des études paramétriques ont été menées d’une part dans le but de connaître l’influence de certains paramètres numériques tels que la résolution du maillage ou les pas de temps fluide et solide, et d’autre part afin d’étudier l’influence de certains paramètres physiques tels que le coefficient de friction de Coulomb. Dans la dernière partie de ce chapitre, la géométrie des lits pulsés utilisés pour l’étape de validation (voir chapitre précédent) a été modifiée afin d’étudier la formation et la migration de bulles de fluide au travers du lit de particules, tout d’abord dans une domaine de faible épaisseur, puis dans un lit en trois dimensions.

Les résultats présentés ci-dessus permettent de mieux comprendre le comportement des lits fluidisés denses et les phénomènes les caractérisant. Les outils présentés ici peuvent être utilisés pour une multitude d’autres analyses permettant de compléter cette étude. Parmi elles, citons par exemple : l’influence des conditions aux limites sur les faces latérales du domaine, ou l’influence de la hauteur du lit de particules sur le régime d’ébullition.

Chapitre VI

Multi-Echelle

Sommaire

VI – 1	Introduction	122
VI – 2	Modèle DLM-FD	122
VI – 2.1	Formulation mathématique	122
VI – 2.2	Discrétisation temporelle	124
VI – 2.2.1	Splitting d’opérateurs	124
VI – 2.2.2	Convergence temporelle	125
VI – 2.3	Résolution spatiale	126
VI – 2.3.1	Stencil	126
VI – 2.3.2	Validation	126
VI – 2.4	Performances informatiques	127
VI – 3	Extraction de lois de traînée	128
VI – 3.1	Dérivation des équations de Navier Stokes dans les systèmes multi-particules	128
VI – 3.2	Approche semi-empirique	129
VI – 3.3	Déduction de $f(\mathcal{E}_f)$ à partir du saut de pression	129
VI – 3.4	Approche purement empirique	130
VI – 3.4.1	Corrélations basées sur des données expérimentales	131
VI – 3.4.2	Corrélations basées sur des données de simulation numérique	131
VI – 4	Comparaison directe	132
VI – 4.1	Choix du système et dimensionnement	132
VI – 4.1.1	Paramètres physiques	133
VI – 4.1.2	Hauteur du domaine	134
VI – 4.1.3	Paramétrage de la simulation DLM-FD	134
VI – 4.1.4	Paramétrage de la simulation DEM-CFD	135
VI – 4.2	Comparaison des résultats	135
VI – 4.2.1	Hauteur de lit	135
VI – 4.2.2	Fraction volumique de fluide	136
VI – 4.2.3	Vitesse des particules	137
VI – 5	Conclusion	139

VI – 1 Introduction

Comme nous l'avons introduit au début du chapitre II, les écoulements fluide-particules peuvent être étudiés et modélisés en se plaçant à différentes échelles spatiales, à savoir micro, méso et macro. Le modèle DEM-CFD implémenté au cours de cette thèse permet d'étudier des systèmes comportant un nombre de particules compris entre quelques milliers et plusieurs dizaines de millions d'éléments. A cette échelle de modélisation, les trajectoires des particules sont connues individuellement, mais les équations décrivant le fluide sont résolues de façon moyennée en espace, *ie.* sur une grille plus large que le diamètre des particules. L'échange de quantité de mouvement entre la phase fluide et la phase solide est alors réalisé à l'aide d'une corrélation de la force hydrodynamique, souvent réduite à la seule force de traînée. La plateforme logicielle PeliGRIFF, dans laquelle le modèle méso a été implémenté, permet également de réaliser des simulations d'écoulements particuliers à l'échelle micro. Parmi les types de résolution directe présentés dans la section II – 1, la méthode implémentée dans PeliGRIFF est celle des Multiplicateurs de Lagrange Distribués utilisée sur une grille cartésienne fixe combinée à une méthode de Domaines Fictifs, dont l'acronyme est DLM-FD.

L'objectif de ce chapitre est d'étudier des simulations à l'échelle micro afin d'améliorer celles réalisées à l'échelle méso. Pour cela, dans la suite de ce chapitre, nous détaillons d'abord la méthode DLM-FD utilisée pour les simulations à l'échelle micro ainsi que ses capacités à retrouver des solutions connues pour des écoulements fluide-particules. Puis nous présentons différentes méthodes employées pour extraire des lois de traînée et les principaux résultats obtenus par la communauté scientifique dans différentes configurations d'écoulement. Enfin, nous comparons les résultats de deux simulations conjointes d'un seul et même système, l'une réalisée à l'échelle micro, l'autre à l'aide du modèle DEM-CFD implémenté au cours de cette thèse. Cela dans le but d'évaluer les différences de comportement du lit de particules lorsque celui-ci est simulé avec les deux approches.

VI – 2 Modèle DLM-FD

Nous détaillons ci-après le modèle DLM-FD employé pour nos simulations à l'échelle micro. Plus d'informations concernant ce modèle peuvent être trouvées dans [222, 223].

Soit Ω un domaine borné de \mathbb{R}^d , $d \in \langle 2, 3 \rangle$ et appelons $\partial\Omega$ la limite de Ω . Supposons que Ω soit rempli de N particules $P_i(t)$, $i = 1, \dots, N$. Pour des raisons de simplicité, nous considérons $N = 1$, l'extension à plusieurs éléments est simple. Les conditions aux limites pour la vitesse du fluide sur $\partial\Omega$ sont de type Dirichlet. Dans la suite de cette partie concernant le modèle DLM-FD, nous travaillons avec des grandeurs adimensionnelles que nous distinguons par l'ajout d'une étoile au symbole des grandeurs dimensionnelles.

VI – 2.1 Formulation mathématique

Les équations régissant le système peuvent être adimensionnées en introduisant les grandeurs suivantes : L_c pour la longueur, U_c pour la vitesse, T_c pour le temps (en considérant que nous utilisons une échelle de temps convectif), $\rho_f^* U_c^2$ pour la pression et $\rho_f^* U_c^2 / L_c$ pour le mouvement de corps-rigide des multiplicateurs de Lagrange. ρ_f^* représente la densité du fluide. La formulation variationnelle des équations de conservation combinées qui gouvernent le fluide et le déplacement des particules furent initialement dérivées par Glowinski *et al.* [88] pour des objets de flottabilité non-nulle, puis ces travaux furent étendus aux particules de flottabilité nulle et non-nulle par Patankar *et al.* [169, 167, 198].

Dans cette étude, la formulation originelle de Glowinski *et al.* [88] est employée, pour laquelle le mouvement de corps rigide est assuré en contraignant le champ de vitesse du fluide. L'écoulement est considéré incompressible et le fluide Newtonien, respectivement. Les phases fluide et solide sont décrites par les équations de conservation suivantes, écrites sous leur forme variationnelle :

- Les équations combinées de quantité de mouvement

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) \cdot \mathbf{v} d\mathbf{x} - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{v} d\mathbf{x} + \frac{1}{\mathcal{R}e_c} \int_{\Omega} \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{v} d\mathbf{x} \\ + \int_{P(t)} \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{v} d\mathbf{x} = \mathbf{0}, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}_0(\Omega) \end{aligned} \quad (\text{VI.1})$$

$$\begin{aligned} (\rho_r - 1) \left[V_P \left(\frac{d\mathbf{U}}{dt} - \mathcal{F}r \frac{\mathbf{g}^*}{g^*} \right) \cdot \mathbf{V} + \left(\mathbf{I}_P \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{I}_P \cdot \boldsymbol{\omega} \right) \cdot \boldsymbol{\xi} \right] - \sum_j \mathbf{F}_{cj} \cdot \mathbf{V} \\ - \sum_j \mathbf{F}_{cj} \cdot \boldsymbol{\xi} \times \mathbf{R}_j - \int_{P(t)} \boldsymbol{\lambda} \cdot (\mathbf{V} + \boldsymbol{\xi} \times \mathbf{r}) d\mathbf{x} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{V} \in \mathbb{R}^d, \boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^{\tilde{d}}, \end{aligned} \quad (\text{VI.2})$$

$$\int_{P(t)} \boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{u} - (\mathbf{U} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})) d\mathbf{x} = 0, \quad \forall \boldsymbol{\alpha} \in \Lambda(t), \quad (\text{VI.3})$$

- L'équation de continuité

$$- \int_{\Omega} q \nabla \cdot \mathbf{u} d\mathbf{x} = 0, \quad \forall q \in \mathcal{P}_0(\Omega). \quad (\text{VI.4})$$

Où $\mathbf{u} \in \mathcal{V}_{\partial\Omega}(\Omega)$ est le vecteur vitesse du fluide, $p \in \mathcal{P}(\Omega)$ est la pression, $\boldsymbol{\lambda} \in \Lambda(t)$ la vitesse des multiplicateurs de Lagrange distribués, $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^d$ le vecteur vitesse de translation des particules, $\boldsymbol{\omega} \in \mathbb{R}^{\tilde{d}}$ la vitesse angulaire des particules, \tilde{d} le nombre de composantes non-nulles de $\boldsymbol{\omega}$ (si $d = 2$: $\boldsymbol{\omega} = (0, 0, \omega_z)$ et $\tilde{d} = 1$; si $d = 3$: $\boldsymbol{\omega} = (\omega_x, \omega_y, \omega_z)$ et $\tilde{d} = 3 = d$), $(\mathbf{v}, q, \boldsymbol{\alpha}, \mathbf{V}, \boldsymbol{\xi})$ les fonctions tests pour $(\mathbf{u}, p, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{U}, \boldsymbol{\omega})$ respectivement, $\mathbf{F}_{cj} \in \mathbb{R}^d$ la force de contact, $\mathbf{R}_j \in \mathbb{R}^d$ les vecteurs entre les centres de gravité des particules et le point de contact, \mathbf{r} le vecteur position par rapport au centre de gravité de la particule, $V_P = M^*/(\rho_s^* L_c^d) \in \mathbb{R}$ le volume adimensionnel de la particule, M^* la masse de la particule, $\mathbf{I}_P = \mathbf{I}_P^*/(\rho_s^* L_c^{d+2}) \in \mathbb{R}^{\tilde{d} \times \tilde{d}}$ le tenseur d'inertie adimensionnel de la particule, $\rho_s^* \in \mathbb{R}$ la densité de la particule, $\mathbf{g}^* \in \mathbb{R}^d$ l'accélération de la gravité et $g^* \in \mathbb{R}$ le module de l'accélération de la gravité.

Dans les équations précédentes, les espaces fonctionnels suivants ont été introduits :

$$\mathcal{V}_0(\Omega) = \{\mathbf{v} \in \mathcal{H}^1(\Omega)^d \mid \mathbf{v} = \mathbf{0} \text{ on } \partial\Omega\}, \quad (\text{VI.5})$$

$$\mathcal{V}_{\partial\Omega}(\Omega) = \{\mathbf{v} \in \mathcal{H}^1(\Omega)^d \mid \mathbf{v} = \mathbf{u}_{\partial\Omega} \text{ on } \partial\Omega\}, \quad (\text{VI.6})$$

$$\mathcal{P}(\Omega) = \{q \in \mathcal{L}^2(\Omega) \mid \int_{\Omega} q d\mathbf{x} = 0\}, \quad (\text{VI.7})$$

$$\Lambda(t) = \mathcal{H}^1(P(t))^d, \quad (\text{VI.8})$$

$$\Lambda_T(t) = \mathcal{H}^1(P(t)). \quad (\text{VI.9})$$

Ainsi que les nombres adimensionnels :

$$\text{nombre de Reynolds} \quad \mathcal{R}e_c = \frac{\rho_f^* U_c L_c}{\eta^*}, \quad (\text{VI.10})$$

$$\text{nombre de Froude} \quad \mathcal{F}r = \frac{g^* L_c}{U_c^2}, \quad (\text{VI.11})$$

$$\text{rapport de densité} \quad \rho_r = \frac{\rho_s^*}{\rho_f^*}, \quad (\text{VI.12})$$

Où η^* est la viscosité du fluide. Le nombre de Froude peut s'exprimer en fonction de $(\rho_r, \mathcal{R}e_c)$ de deux façons différentes selon que l'échelle de vitesse introduite soit visqueuse ou inertielle [238, 235]. Le système présente donc deux paramètres adimensionnels indépendants : ρ_r et $\mathcal{R}e_c$.

VI – 2.2 Discrétisation temporelle

Les équations de conservation du fluide sont résolues à l'aide d'un schéma temporel d'ordre deux utilisant un schéma de Crank-Nicholson pour le terme de diffusion et d'Adams-Bashford pour le terme d'advection. Mais la précision temporelle de l'algorithme général est néanmoins d'ordre un en raison du splitting d'opérateur employé.

VI – 2.2.1 Splitting d'opérateurs

Le problème (VI.1)-(VI.2)-(VI.3)-(VI.4) est résolu à l'aide d'une schéma à pas fractionnaire de Marchuk-Yanenko (MY) à l'ordre 1. Ainsi, les principales étapes du calcul réalisées à chaque itération sont les suivantes :

1. Une méthode de projection L2 pour la résolution du problème de Navier-Stokes pour calculer $\mathbf{u}^{n+1/2}$ et p^{n+1} :

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} - \frac{1}{2\mathcal{R}e_c} \nabla \mathbf{u}^* &= -\nabla p^n + \frac{1}{2\mathcal{R}e_c} \nabla \mathbf{u}^n, \\ &- \frac{1}{2} (3\mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^n - \mathbf{u}^{n-1} \cdot \nabla \mathbf{u}^{n-1}) - \alpha \boldsymbol{\lambda}^n, \end{aligned} \quad (\text{VI.13})$$

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^*, \quad \frac{\partial \psi}{\partial n} = 0 \text{ sur } \partial\Omega, \quad (\text{VI.14})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^{n+1/2} &= \mathbf{u}^* - \Delta t \nabla \psi, \\ p^{n+1} &= p^n + \psi - \frac{\Delta t}{2\mathcal{R}e_c} \nabla^2 \psi. \end{aligned} \quad (\text{VI.15})$$

2. Un problème granulaire, étape de prédiction :

- trouver $\mathbf{U}^{n+1/3}$ et $\boldsymbol{\omega}^{n+1/3}$ tels que :

$$(\rho_r - 1)V_P \frac{\mathbf{U}^{n+1/3} - \mathbf{U}^n}{\Delta t} = (\rho_r - 1)V_P Fr \frac{\mathbf{g}}{g} + \sum_j \mathbf{F}_{cj}, \quad (\text{VI.16})$$

$$(\rho_r - 1)\mathbf{I}_P \frac{\boldsymbol{\omega}^{n+1/3} - \boldsymbol{\omega}^n}{\Delta t} = \sum_j \mathbf{R}_j \times \mathbf{F}_{cj} + (\rho_r - 1)\boldsymbol{\omega}^n \times \mathbf{I}_P \cdot \boldsymbol{\omega}^n, \quad (\text{VI.17})$$

- mettre à jour la position des particules $\mathbf{X}^{n+1/3}$

3. Un problème de domaine fictif pour trouver \mathbf{u}^{n+1} , $\mathbf{U}^{n+2/3}$, $\boldsymbol{\omega}^{n+2/3}$ et $\boldsymbol{\lambda}^{n+1}$:

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^{n+1/2}}{\Delta t} + \boldsymbol{\lambda}^{n+1} = \alpha \boldsymbol{\lambda}^n, \quad (\text{VI.18})$$

$$(\rho_r - 1)V_P \frac{\mathbf{U}^{n+2/3} - \mathbf{U}^{n+1/3}}{\Delta t} - \int_{P(t)} \boldsymbol{\lambda}^{n+1} d\mathbf{x} = \mathbf{0}, \quad (\text{VI.19})$$

$$(\rho_r - 1)\mathbf{I}_P \frac{\boldsymbol{\omega}^{n+2/3} - \boldsymbol{\omega}^{n+1/3}}{\Delta t} - \int_{P(t)} \mathbf{r} \times \boldsymbol{\lambda}^{n+1} d\mathbf{x}, \quad (\text{VI.20})$$

$$\mathbf{u}^{n+1} - (\mathbf{U}^{n+2/3} + \boldsymbol{\omega}^{n+2/3} \times \mathbf{r}) = \mathbf{0} \text{ dans } P(t) \quad (\text{VI.21})$$

4. Un problème granulaire, étape de correction :

- imposer $\mathbf{X}^{n+2/3} = \mathbf{X}^n$ et trouver \mathbf{U}^{n+1} et $\boldsymbol{\omega}^{n+1}$ tels que :

$$(\rho_r - 1)V_P \frac{\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^{n+2/3}}{\Delta t} = \sum_j \mathbf{F}_{cj}, \quad (\text{VI.22})$$

$$(\rho_r - 1)\mathbf{I}_P \frac{\boldsymbol{\omega}^{n+1} - \boldsymbol{\omega}^{n+2/3}}{\Delta t} = \sum_j \mathbf{R}_j \times \mathbf{F}_{cj}, \quad (\text{VI.23})$$

- mettre à jour la position des particules \mathbf{X}^{n+1}

Précisons que ce splitting d'opérateur offre une meilleure précision en utilisant un forçage explicite, c'est à dire en prenant $\alpha = 1$ dans les équations (VI.13) et (VI.18).

VI – 2.2.2 Convergence temporelle

Le pas de temps du solveur fluide nécessite tout d'abord de respecter une condition de CFL liée au traitement explicite du terme d'advection. Qui plus est, comme mis en évidence dans [], en raison de l'utilisation d'un schéma d'Adams-Bashford, la condition de stabilité est vérifiée pour une condition de CFL qui dans notre cas doit inférieure à 0.3. Ainsi, le pas de temps fluide doit respecter :

$$\Delta t_f < \frac{0.3 \Delta x}{|\mathbf{u}_f|} \quad (\text{VI.24})$$

D'autre part, le splitting d'opérateur engendre une erreur due au couplage temporel entre les phases fluide et solide. De ce fait, pour obtenir une solution convergée, il est nécessaire de décrire suffisamment finement le temps caractéristique relatif au régime d'écoulement. Dans le cas d'un écoulement inertiel, ce temps est :

$$\tau_{\text{Conv}} = \frac{d_p}{|\mathbf{u}_f|} \quad (\text{VI.25})$$

et pour un écoulement en régime de Stokes :

$$\tau_{\text{Diff}} = \frac{\rho_f d_p^2}{\mu_f} \quad (\text{VI.26})$$

Dans cette étude nous jugeons qu'une discrétisation minimale de $100 \Delta t_f$ par temps caractéristique est nécessaire pour une reproduction fidèle de l'écoulement. Ainsi, la condition générale sur le pas de temps fluide est donnée par :

$$\Delta t_f = \min \left(\frac{0.3 \Delta x}{|\mathbf{u}_f|}, \frac{\tau_{\text{Conv}}}{100}, \frac{\tau_{\text{Diff}}}{100} \right) \quad (\text{VI.27})$$

La figure VI.1 illustre la convergence temporelle obtenue pour deux régimes d'écoulements, $\mathcal{Re} = 0.01$ et $\mathcal{Re} = 100$, à travers un arrangement cubique simple de sphères dans les cas $\alpha = 0$ et $\alpha = 1$. La solution en régime de Stokes est connue analytiquement grâce aux travaux de Zick & Homsy [246] tandis que la solution à $\mathcal{Re} = 100$ provient d'une extrapolation de Richardson à $\Delta x = 0$.

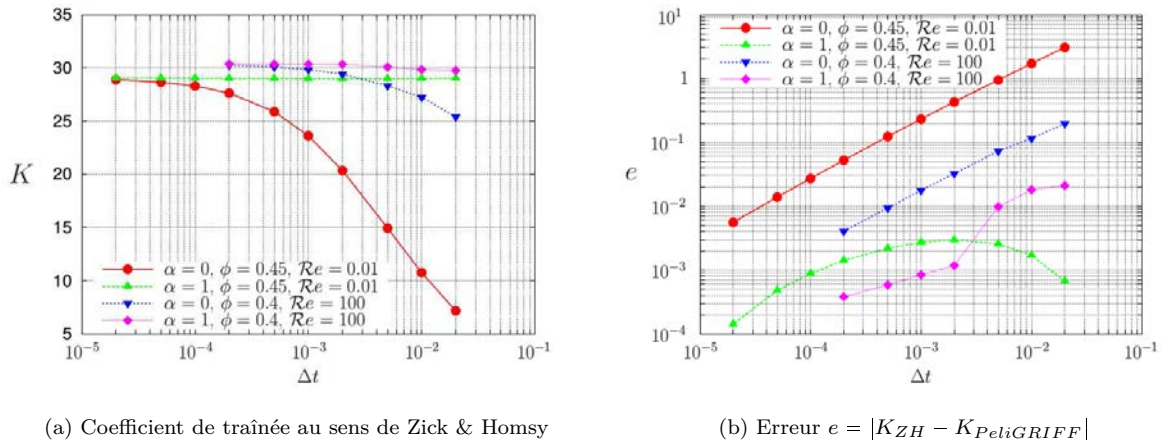


FIGURE VI.1 – Convergence temporelle pour un écoulement à travers un assemblage cubique simple de sphère en fonction du régime d'écoulement et du type de forçage

Au regard de la figure VI.1, nous observons une convergence en $\mathcal{O}(\Delta t_f)$ quelque soit le type de forçage et de régime d'écoulement. Néanmoins, l'analyse des courbes de convergence nous permet de dire que d'une part l'erreur est plus importante pour un écoulement en régime de Stokes par rapport à un régime inertiel. D'autre part, dans le cas d'un forçage explicite à l'étape de prédiction du fluide ($\alpha = 1$ dans le sous problème 1), l'amplitude de l'erreur est significativement plus faible pour $Re = 0.01$ et un ordre de grandeur plus petite pour $Re = 100$. Ainsi, pour étudier des écoulements à faible nombre de Reynolds, il est préférable d'utiliser $\alpha = 1$ pour ne pas être obligé d'utiliser des valeurs de Δt_f qui rendraient le calcul prohibitif.

VI – 2.3 Résolution spatiale

Pour une simulation à l'échelle micro, la résolution du maillage et les stencils employés influent directement sur la précision de la solution obtenue et donc sur la qualité de la modélisation.

VI – 2.3.1 Stencil

Notre modèle DLM-FD utilise un schéma volumes finis / grille décalée similaire à celui utilisé dans le modèle DEM-CFD pour résoudre les équations de conservation du fluide. Le terme d'advection est résolu à l'aide d'un schéma TVD complété d'un limiteur de pente de Superbee, tandis que le terme de diffusion est traité avec un schéma centré. La précision spatiale de l'algorithme général sans inclusion de particule est donc d'ordre deux. Comme présenté dans les précédents articles détaillant le modèle DLM-FD implémenté dans PeliGRIFF [222, 223], les points de collocation permettant d'imposer la contrainte de corps rigide au sein de la particule sont localisés aux mêmes nœuds que les variables fluides. Néanmoins, comme représenté sur la figure VI.2-(a), une série de points doit être disposée de façon aussi uniforme que possible sur la surface de la particule afin de garantir une bonne représentation numérique du diamètre de particule.

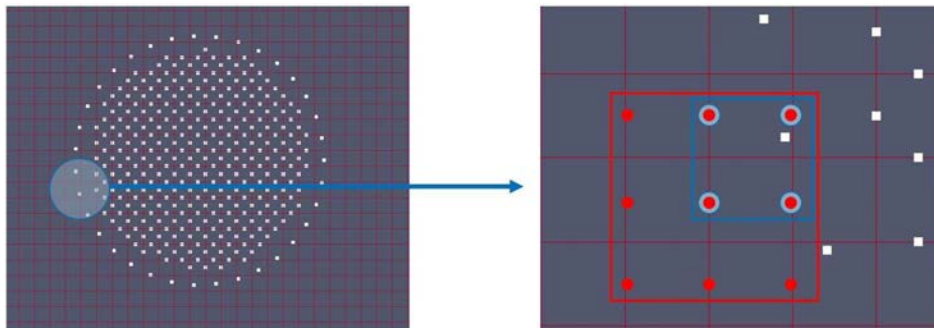


FIGURE VI.2 – (a) Répartition des points DLM-FD à l'intérieur et sur la surface d'un disque pour une grille décalée 2D. (b) Méthode d'interpolation multi-linéaire (points entourés en bleu) et quadratique (points entourés en rouge) du champ de vitesse sur un point de la surface de la particule

Afin d'améliorer la précision de la reconstruction du champ de vitesse fluide à la surface de la particule, une interpolation quadratique est utilisée au lieu d'une interpolation multi-linéaire comme présenté dans [180]. Sur la figure VI.2-(b), le stencil à 9 points en 2D (et 27 points en 3D) utilise un maximum de points du fluide, *ie.* extérieurs à la particule, pour reconstruire la solution à l'interface.

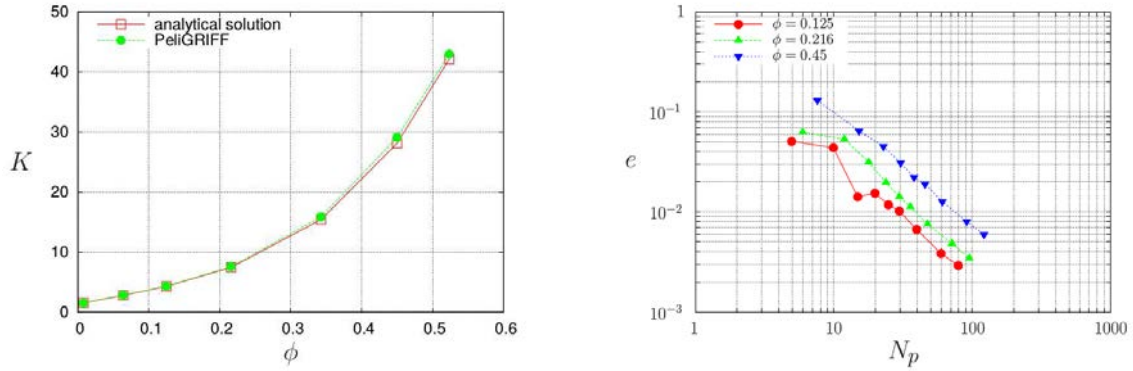
VI – 2.3.2 Validation

A l'échelle micro, il est indispensable de réaliser les simulations sur des maillages suffisamment fins pour pouvoir considérer les résultats obtenus comme une reproduction fidèle de la dynamique de l'écoulement fluide. Ainsi, afin de connaître la discrétisation spatiale requise pour l'obtention d'une description jugée convenable, il est nécessaire de réaliser des tests de convergence en maillage sur une configuration d'écoulement pour laquelle la solution exacte est connue. Or, dans le cas d'une inclusion de particules dans le fluide, très peu de problèmes peuvent être résolus de manière analytique. Nous

utilisons deux solutions exactes bien connues : (i) la vitesse de Stokes d'une particule isolée sédimentant dans un domaine infini, et (ii) l'écoulement en régime de Stokes à travers un arrangement infini cubique simple de sphères pour lequel la solution analytique fut dérivée par Zick & Homsy [246]. Cette dernière solution est particulièrement intéressante dans notre cas car elle permet de vérifier la convergence en maillage dans des configurations d'écoulements allant d'une sphère isolée dans un domaine infini ($\mathcal{E}_f = 1$), à une concentration de particules égale au packing cubique simple ($\mathcal{E}_f = 1 - \pi/6 \simeq 0.476$). Pour une telle configuration, la relation entre la vitesse superficielle, le saut de pression imposé à travers le lit et le coefficient de friction K peut s'écrire de la façon suivante pour une sphère centrée dans un boîte tri-périodique :

$$\frac{\Delta p^*}{L^*} = \frac{9}{2} \frac{\eta^*}{a^{*2}} \phi K V^* \quad (\text{VI.28})$$

Où L^* et a^* représentent la longueur de l'arête de la boîte cubique et le rayon de la sphère, respectivement. Ainsi, les résultats de Zick & Homsy [246] permettent d'obtenir analytiquement l'évolution de K en fonction de la concentration de particules $\phi = 1 - \mathcal{E}_f$. La figure VI.3 illustre d'une part les très bons résultats obtenus par le code PeliGRIFF par comparaison à la solution analytique. D'autre part, les courbes de convergence en maillage indiquent un ordre de convergence en $N_p^{-1.3}$ ainsi qu'une augmentation de l'erreur de la solution calculée lorsque la concentration en particules augmente.



(a) Coefficient de traînée K en fonction de la fraction volumique de solide ϕ pour une résolution spatiale de 40 points par diamètre

(b) Convergence de la solution calculée en fonction du nombre de point par diamètre de particule N_p

FIGURE VI.3 – Comparaison de résultats de simulation par rapport à la solution analytique pour un écoulement à travers un arrangement infini cubique simple de sphères pour $Re = 0.01$

Nous observons que pour une concentration de particules égale à $\phi = 0.45$, c'est à dire pour une porosité de lit correspondant approximativement à celle d'un lit bouillonnant, l'erreur commise vis à vis de la solution analytique n'est que de 4% pour une discrétisation spatiale de 24 points par diamètre de particule. Dans cette étude, nous considérons une telle approximation comme acceptable et décidons donc d'employer une résolution de maillage de 24 points par diamètre de particules pour les simulations présentées ci-après (voir section VI – 4).

VI – 2.4 Performances informatiques

A l'inverse du modèle DEM-CFD utilisé dans les chapitres précédents pour lequel la résolution du problème granulaire était la plus chronophage face au problème fluide en raison de la grande quantité de particules par rapport au nombre de mailles fluides, pour le modèle présenté ici, la majeure partie du temps de simulation est passée dans la résolution du problème fluide. En effet, nous avons conclu précédemment (voir §VI – 2.3) qu'une résolution minimum de 24 points par diamètre de particules était nécessaire à une bonne description de l'écoulement, tandis que la taille de maille employée dans le modèle Euler-Lagrange est environ deux fois plus grande que le diamètre des particules. Or, comme nous l'avons vu lors de l'étude des performances informatiques du code PeliGRIFF (voir §III – 6),

le comportement parallèle du solveur fluide est d'autant meilleur que le nombre de cellules fluides par cœur est important. Le choix de la charge de calcul par cœur est donc un compromis entre le temps passé, le nombre de cœurs utilisés et les performances du code. Ainsi, dans cette étude, nous optons pour un nombre de cellules fluides par cœur compris entre 250 000 et 500 000. La résolution du problème granulaire est quant à elle si peu coûteuse qu'elle est réalisée sur un seul cœur de calcul.

VI – 3 Extraction de lois de traînée

Une des principales difficultés rencontrées lors d'une démarche de changement d'échelle entre les modèles micro et les modèle Euler-Lagrange est la prise en compte de l'influence des particules voisines sur la force de traînée exercée sur un élément de la phase solide. En effet, comme nous l'avons abordé en partie II – 2.3.2, de nombreuses équipes de recherche à travers le monde proposent des lois de traînée permettant de décrire la force hydrodynamique perçue par une particule en fonction de la concentration de particules. Même si la majorité des formulations employées dans les modèles Euler-Lagrange et Euler-Euler sont une combinaison de l'équation d'Ergun [67] et de Wen & Yu [225], d'autres formulations de la force de traînée furent proposées au fil du temps, soit pour des régimes d'écoulement et des concentrations de particules donnés, soit pour de larges plages de \mathcal{Re}_p et de \mathcal{E}_f . Ces formulations peuvent être extraites de différentes façons, nous en recensons ci-après les principales, en nous basant sur différents ouvrages de référence [125, 30, 70, 38] et articles de synthèse [52, 136, 12].

Avant cela, présentons les différentes notations employées pour exprimer l'effet de la concentration de particules sur la force de traînée d'une sphère dans un système multi-particules, \mathbf{f}_d . Elle peut tout d'abord s'écrire comme le rapport des forces :

$$f(\mathcal{E}_f, \mathcal{Re}) = \frac{\mathbf{f}_d}{\mathbf{f}_{d,S}} \quad (\text{VI.29})$$

Où $\mathbf{f}_{d,S}$ est la force de traînée s'exerçant sur une particule isolée, \mathbf{f}_d et $\mathbf{f}_{d,S}$ étant calculée avec la même vitesse superficielle. La prise en compte de la présence de particules voisines sur le déplacement d'un élément peut également être exprimé comme le rapport des vitesses d'une particule isolée sédimentant dans un domaine infini et d'un ensemble de particules sédimentant d'un seul tenant :

$$g(\mathcal{E}_f, \mathcal{Re}) = \frac{|\mathbf{v}_{p,bulk}|}{|\mathbf{v}_{p,S}|} \quad (\text{VI.30})$$

Les équations (VI.29) et (VI.30) sont liées [52] par la relation :

$$f(\mathcal{E}_f) = \frac{1}{\left(g(\mathcal{E}_f)\right)^2} \frac{C_{D,S}}{C_D} \mathcal{E}_f \quad (\text{VI.31})$$

Enfin, une autre notation couramment employée, que nous avons d'ailleurs utilisée en partie II – 2.3.2, consiste à normaliser la force de traînée \mathbf{f}_d par la force exercée sur une particule isolée en régime de Stokes :

$$F(\mathcal{E}_f, \mathcal{Re}) = \frac{\mathbf{f}_d}{3\pi\mu_f d_p (|\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p|)} \quad (\text{VI.32})$$

VI – 3.1 Dérivation des équations de Navier Stokes dans les systèmes multi-particules

Comme nous l'avons dit lors de la validation du modèle DLM-FD (voir VI – 2.2.2), la solution analytique des équations de Navier-Stokes (NS) dans le cas d'une inclusion de particules n'est connue que dans le cas d'un écoulement en régime de Stokes autour d'une sphère isolée dans un domaine infini [204] ou pour un arrangement infini cubique simple de sphères monodisperses [246]. Précisons que la solution fournie par Zick & Homsy tend vers la solution de Stokes dans le cas où l'espacement entre les sphères tend vers l'infini. Néanmoins, d'autres équipes se sont attelées à la dérivation des équations

de NS à travers une suspension plus ou moins dense de particules, toujours pour de faibles nombres de Reynolds, mais ces formulations utilisent toutes des constantes faisant office de terme de fermeture. Parmi les différentes dérivations proposées au fil du temps, citons par exemple celles de Batchelor [9] pour un arrangement aléatoire de sphères et Barnea & Mizrahi [8] pour de faibles concentrations de particules. D'après Di Felice [52], la formulation de Batchelor offre de meilleurs résultats que celle de Barnea *et al.* pour $1 \leq \mathcal{E}_f \leq 0.95$. Toujours d'après Di Felice [52], pour des concentrations de particules plus élevées, la formulation proposée par Reed & Anderson [181] correspond mieux aux résultats que celle présentée 20 ans plus tôt par Happel [92]. Ces différentes formulations sont données dans le tableau VI.1. Une telle approche a également été employée pour dériver des formulations de $f(\mathcal{E}_f)$ pour des valeurs de \mathcal{Re} plus élevées [131, 58], mais les résultats obtenus restent mitigés.

TABLE VI.1 – Formulations de la fonction de porosité $f(\mathcal{E}_f)$ pour un écoulement en régime de Stokes pour de faibles concentrations de particules (Batchelor [92] et Barnea *et al.* [8]) et des concentrations de particules plus importantes (Reed *et al.* [181] et Happel [92])

Auteur	Formulation
Batchelor (1972) [9]	$f(\mathcal{E}_f) = \frac{\mathcal{E}_f}{1 - 6.55(1 - \mathcal{E}_f)}$
Barnea <i>et al.</i> (1973) [8]	$f(\mathcal{E}_f) = [1 + k(1 - \mathcal{E}_f)^{1/3}] \mathcal{E}_f \quad k \in [1 : 2]$
Reed <i>et al.</i> (1980) [181]	$f(\mathcal{E}_f) = \frac{[1 + 4.7(1 - \mathcal{E}_f)] \mathcal{E}_f}{1 + 1.83(1 - \mathcal{E}_f)}$
Happel (1958) [92]	$f(\mathcal{E}_f) = \frac{[3 + 2(1 - \mathcal{E}_f)^{5/3}] \mathcal{E}_f}{3 + 4.5(1 - \mathcal{E}_f)^{1/3} + 4.5(1 - \mathcal{E}_f)^{5/3} - 3(1 - \mathcal{E}_f)^2}$

VI – 3.2 Approche semi-empirique

La force de traînée exercée sur une particule en présence de voisines peut également être formulée en se basant sur l'idée qu'un fluide peuplé de particules est assimilable à un pseudo-fluide dont les caractéristiques (densité et viscosité) sont celles du mélange fluide-particules [188, 203]. Ainsi, sur ce principe, Hawksey [94] modifia l'expression d'une particule isolée sédimentant dans un écoulement de Stokes et proposa :

$$g(\mathcal{E}_f, \mathcal{Re}) = \frac{v}{v_S} = \mathcal{E}_f^2 \exp\left(\frac{-2.5(1 - \mathcal{E}_f)}{1 - \frac{39}{64}(1 - \mathcal{E}_f)}\right) \quad (\text{VI.33})$$

Zuber [247] montra plus tard que cette expression donne des résultats satisfaisants pour des \mathcal{Re} allant jusqu'à 58.

En utilisant le même raisonnement, Barnea *et al.* [8] proposèrent une expression de $f(\mathcal{E}_f)$ valable pour une large plage de nombres de Reynolds :

$$\left\{ \begin{array}{l} f(\mathcal{E}_f) = \frac{1 + (1 - \mathcal{E}_f)^{1/3}}{\mathcal{E}_f} \exp\left(\frac{5(1 - \mathcal{E}_f)}{3\mathcal{E}_f}\right) \quad \mathcal{Re} \text{ grand} \end{array} \right. \quad (\text{VI.34a})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} f(\mathcal{E}_f) = \frac{1 + (1 - \mathcal{E}_f)^{1/3}}{\mathcal{E}_f^2} \quad \mathcal{Re} \text{ petit} \end{array} \right. \quad (\text{VI.34b})$$

VI – 3.3 Dédution de $f(\mathcal{E}_f)$ à partir du saut de pression

Comme nous l'avons vu lors de l'explication sur l'origine du saut de pression dynamique à travers un lit, fixe ou fluidisé, de particules (voir I – 3.1) la force de traînée et le saut de pression sont intimement liés. En effet, l'écoulement à travers un lit dense de particules est fortement modifié comme l'illustre la figure VI.4. Rappelons que l'expression proposée par Blake [15] permet de décrire le saut de pression

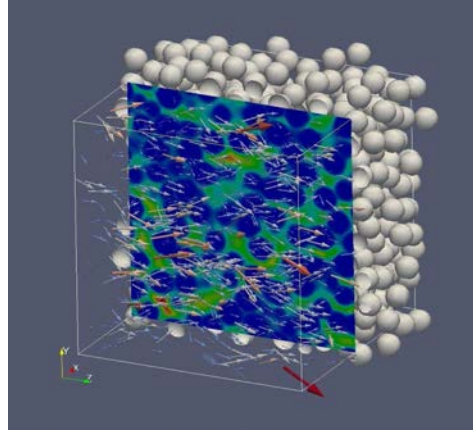


FIGURE VI.4 – Illustration d'un écoulement à travers un lit dense de particules

pour des écoulements en régime de Stokes tandis que l'expression de Burke & Plummer [25] est quant à elle valable pour de fortes valeurs de Re . Les expressions de Blake-Kozeny et de Burke-Plummer peuvent être réécrites [52] en utilisant le formalisme de la fonction de porosité, respectivement :

$$f(\mathcal{E}_f) = 8.33 \frac{(1 - \mathcal{E}_f)}{\mathcal{E}_f^2} \quad (\text{VI.35})$$

$$f(\mathcal{E}_f) = 5.33 \frac{1}{\mathcal{E}_f^2} \quad (\text{VI.36})$$

Or il est évident qu'aucune de ces deux formulations ne s'approche de la valeur désirée $f(\mathcal{E}_f) = 1$ lorsque \mathcal{E}_f tend vers 1, contrairement à l'expression semi-empirique proposée par Foscolo *et al.* [77]. Selon Gibilaro [84], la formulation du saut de pression à travers une population de particules que proposèrent Foscolo *et al.* [77] offre de bon résultats pour des porosités allant jusqu'à $\mathcal{E}_f = 0.9$. Son expression est la suivante :

$$\frac{\Delta P}{L} = \frac{\rho_f u^2 (1 - \mathcal{E}_f)}{d_p} \left(\frac{17.3}{Re} + 0.336 \right) \mathcal{E}_f^{-4.8} \quad (\text{VI.37})$$

Où les constantes 17.3 et 0.336 ont été évalués grâce à des résultats expérimentaux. Plus tard, en s'inspirant des travaux de Dallavale sur l'expression du coefficient de traînée en régime d'écoulement intermédiaire, Gibilaro [85] proposa une amélioration de l'expression de Foscolo :

$$\frac{\Delta P}{L} = \frac{\rho_f u^2 (1 - \mathcal{E}_f)}{d_p} \left[\left(\frac{17.3}{Re} \right)^\alpha + 0.336^\alpha \right] \mathcal{E}_f^{-4.8} \quad (\text{VI.38})$$

avec

$$\alpha = 2.55 - 2.1 [\tanh(20\mathcal{E}_f - 8)^{0.33}]^3 \quad (\text{VI.39})$$

Notons que les expressions (VI.37) et (VI.38) sont toutes deux de la forme

$$f(\mathcal{E}_f) \simeq \mathcal{E}_f^{-3.8} \quad (\text{VI.40})$$

VI – 3.4 Approche purement empirique

Enfin, une méthode purement empirique peut être employée pour déterminer la force de traînée sur une particule au sein d'une population. De façon générale, cette technique consiste à faire passer une courbe par un nuage de points obtenus de façon expérimentale ou par le biais de simulations à l'échelle micro. De nombreuses équipes proposèrent de telles expressions, valables soit pour de faibles plages de Re et/ou de \mathcal{E}_f mais avec de très bon résultats, soit pour de plus larges plages de Re et/ou de \mathcal{E}_f avec une approximation moins fidèle des résultats expérimentaux ou numériques.

VI – 3.4.1 Corrélations basées sur des données expérimentales

Les premières propositions faites pour prendre en compte la concentration de particules se basaient sur la vitesse terminale de chute d'un ensemble de particules par rapport à celle d'une particule isolée étaient de la forme :

$$g(\mathcal{E}_f) = \frac{|\mathbf{v}_{p,bulk}|}{|\mathbf{v}_{p,S}|} = \mathcal{E}_f^n \quad (\text{VI.41})$$

Citons par exemple les travaux de Lewis *et al.* [135] et surtout de Richardson & Zaky [185] qui proposèrent une série d'expressions de n valables pour une large plage de Re , prenant en compte ou non les effets de la proximité des parois.

D'autres équipes étudièrent le rapport des forces de traînée d'une particule dans un lit et d'une particule isolée en cherchant à obtenir une expression de la forme :

$$f(\mathcal{E}_f) = \frac{\mathbf{f}_d}{\mathbf{f}_{d,S}} = \mathcal{E}_f^{-\gamma} \quad (\text{VI.42})$$

Comme nous l'avons évoqué en partie II – 2.3.2, les premières propositions correspondant aux résultats expérimentaux [189, 184] se basaient sur une valeur constante de γ à haut et bas Reynolds, comme par exemple la proposition de Wen & Yu [225] : $\gamma = 3.7$. De façon générale les valeurs proposées [119, 120, 186] étaient comprises entre 3.6 et 3.8. Puis Di Felice [51] proposa une expression de γ prenant en compte le régime d'écoulement.

$$\gamma = 3.7 - 0.65 \exp \frac{[1.5 - \log(Re)]^2}{2} \quad (\text{VI.43})$$

VI – 3.4.2 Corrélations basées sur des données de simulation numérique

Enfin, avec l'augmentation constante des capacités de calcul et grâce aux progrès réalisés en modélisation numérique des écoulements fluide-particules, il est de nos jours possible de calculer de façon précise la force exercée par le fluide sur une particule dans une population comme l'illustre la figure VI.5.

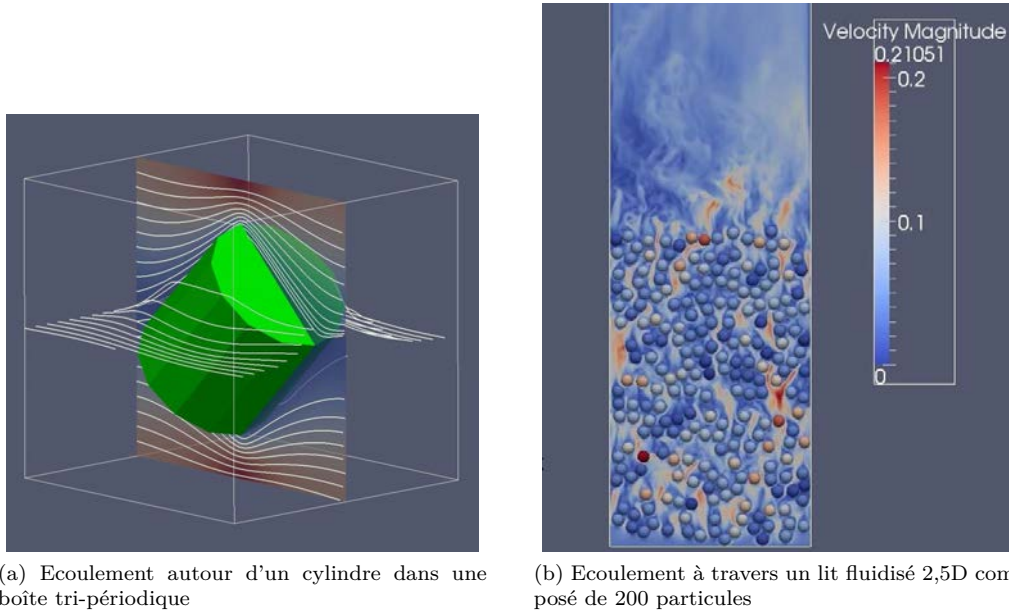


FIGURE VI.5 – Illustrations de la description du champ fluide obtenu à l'aide de simulations PeliGRIFF à l'échelle micro

Ainsi, de nombreuses équipes proposèrent des corrélations en se basant sur des simulations à l'échelle micro avec des modèles de type LBM, IBM ou DLM-FD. Relevons par exemple les travaux de Hill *et al.* [122, 121, 96, 97] qui, en se basant sur des simulations LBM, proposèrent une première formulation montrant de bons résultats pour des écoulements à travers des arrangements structurés et aléatoires de sphères pour des nombres de Reynolds faibles mais finis, $Re < \mathcal{O}(1)$, [96] et pour des Reynolds plus élevés, $\mathcal{O}(1) < Re < \mathcal{O}(100)$ [97]. Van der Hoef *et al.* [218, 12, 14, 13] utilisèrent eux aussi des simulations LBM pour proposer des corrélations valables jusqu'à $Re = 1000$ pour une suspension monodisperse et montrant de bons résultats pour des systèmes polydisperses.

Les simulations à l'échelle micro offrent également la possibilité d'extraire des lois de comportement pour d'autres contributions de force hydrodynamique que la force de traînée, où pour des particules non-sphériques. Par exemple, Zastanwy *et al.* [240] proposent des corrélations de force de traînée et de portance pour des particules non-sphériques. De même, Holzer *et al.* [99, 100] présentent des formulations de la force de traînée, de portance ainsi que du couple hydrodynamique s'exerçant sur des particules non-sphériques. Notons également le travail de Loth [141] qui, se basant sur méthode de point force, propose une expression de force de traînée pour des particules non-sphériques de formes régulières et irrégulières. Néanmoins, toutes ces relations proposées pour des particules non-sphériques ne prennent pas en compte l'effet des particules voisines.

Dans cette étude, aucune extraction de loi de traînée n'a été réalisée car les corrélations déjà existantes dans la littérature offrent des résultats satisfaisants pour les configurations étudiées comme nous le présentons dans la partie suivante.

VI – 4 Comparaison directe

Une autre méthode pouvant être employée pour transférer des informations de l'échelle micro vers l'échelle méso (ainsi que de l'échelle méso vers l'échelle macro par ailleurs), est la comparaison directe de deux systèmes identiques modélisés conjointement avec chacune des approches. D'une part, la résolution directe permet de simuler des systèmes ne comportant guère plus que quelques milliers de particules pour un temps et des ressources de calcul jugés raisonnables, *ie.* de quelques semaines sur quelques centaines de cœurs. Et d'autre part, l'approche Euler-Lagrange offre quant à elle la possibilité de simuler des systèmes composés d'un bien plus grand nombre de particules. Cela implique donc tout d'abord de choisir une configuration qu'il est possible de simuler avec les deux approches.

VI – 4.1 Choix du système et dimensionnement

Pour rester dans le même contexte que le reste de ce rapport, la comparaison entre les deux échelles est réalisée sur une simulation de lit fluidisé. Pour cela, le domaine étudié ne doit être ni trop grand afin de pouvoir être simulé à l'échelle micro, ni trop petit afin d'avoir un nombre de cellules suffisant dans chaque direction pour pouvoir réaliser une simulation DEM-CFD pertinente.

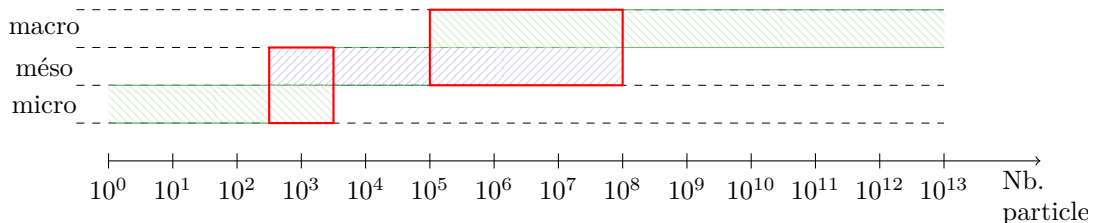


FIGURE VI.6 – Tailles de lits fluidisés possibles d'analyser avec les différentes approches

Comme illustré dans la figure VI.6 et en lien avec les contraintes de temps de calculs évoquées précédemment (voir section VI – 2.2), ce compromis se situe approximativement entre 500 et 5000 particules. Le premier système choisi pour cette étude est composé de 1000 particules, ce qui représente un lit de 10 particules dans chaque direction et le deuxième est composé de 2000 particules, soit deux

fois la hauteur du premier, ces dimensions sont résumées sur le schéma VI.7. Nous avons choisi des domaines de simulation bi-périodiques.

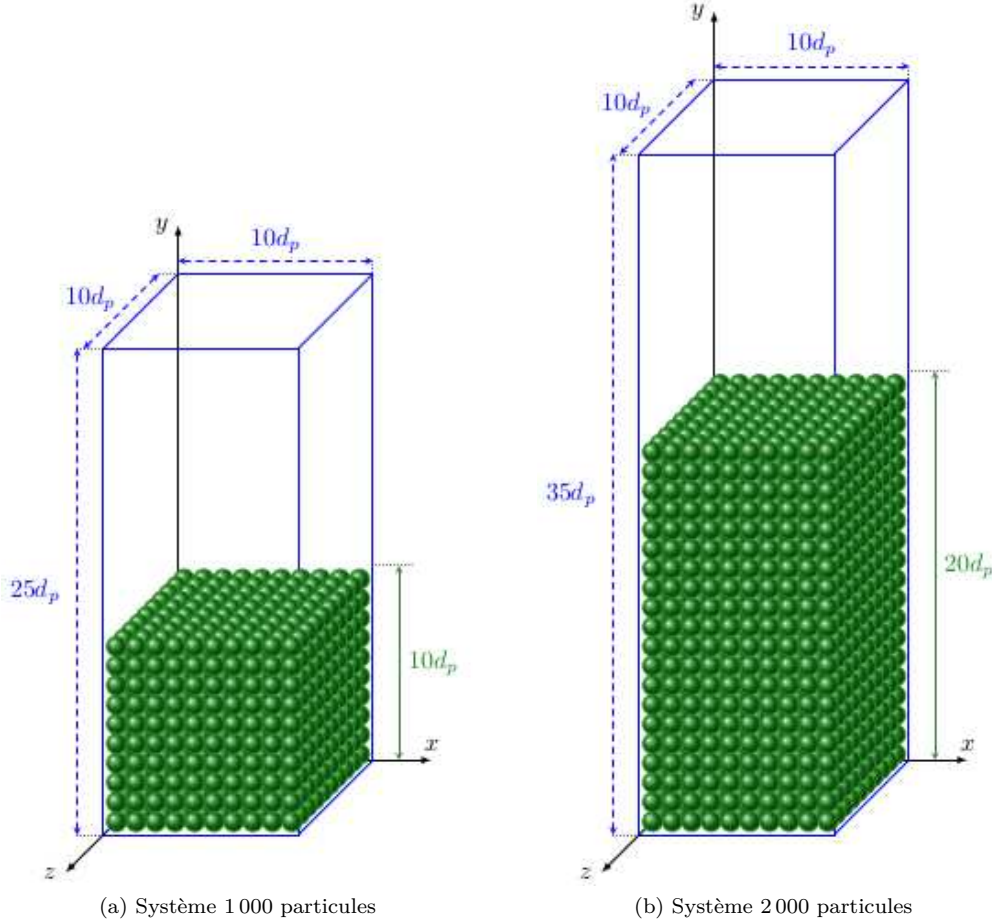


FIGURE VI.7 – Dimension des domaines étudiés

VI – 4.1.1 Paramètres physiques

Les propriétés physiques des particules et du fluide nécessitent d'être déterminées avec attention, de telle sorte que, d'une part la différence de densité entre les deux phases soit suffisamment importante pour que la force de masse ajoutée que nous avons négligée dans le modèle DEM-CFD n'ait que peu d'impact sur les résultats obtenus. D'autre part, cette différence de densité ne doit pas non plus être trop importante afin que le nombre de Reynolds particulaire ne soit pas trop grand, et qu'il ne faille donc pas utiliser des mailles trop petites. Ceci entraîne aussi des pas de temps fluide très petits (pour respecter la condition de CFL), ce qui engendrerait de longs temps de calcul. Le modèle DLM-FD implémenté dans PeliGRIFF permet de réaliser des simulations pour des systèmes dont les régimes d'écoulement vont jusqu'à $Re \sim 500$ pour des coûts de calcul modérés.

Ainsi, les propriétés des éléments employés pour cette étude correspondent à des particules de plomb fluidisées par un fluide de même densité que l'eau mais possédant une viscosité de $5 \times 10^{-4} Pa.s$. La vitesse d'injection du fluide est de $U_{in} = 3U_{mf}$ ce qui représente un régime d'écoulement faiblement bouillonnant, notamment dans le cas d'une fluidisation liquide, et un régime d'écoulement particulaire de $Re_{in} = \rho_f d_p U_{in} / \mu_f = 7$. Les caractéristiques du système sont résumées dans les tableaux VI.2.

TABLE VI.2 – Paramètres de simulation pour le lit cubique simple illustré en figure IV.2-(a)

(a) Phase solide		(b) Phase fluide	
Paramètre	Valeur	Paramètre	Valeur
d_p	1 mm	ρ_f	1000 kg.m ⁻³
ρ_p	10 000 kg.m ⁻³	μ_f	5 × 10 ⁻⁴ Pa.s
$\mathcal{E}_{f,0}^C$	0.476	U_{mf}	0.01 m.s ⁻¹
H_0^C	0.1 m	$\mathcal{R}e_{mf}$	7
μ_C	0.1	Δp_{1000}^{bed}	840 Pa
En	0.9	Δp_{2000}^{bed}	420 Pa

VI – 4.1.2 Hauteur du domaine

Le taille du système choisi étant de $10d_p \times 10d_p$ pour la section, il reste désormais à définir la hauteur du domaine. Le réacteur doit d'une part être suffisamment haut afin que le lit de particules puisse évoluer librement sans être contraint par la face haute du domaine. Mais d'autre part, cette valeur ne doit pas être trop élevée car le volume du domaine serait alors trop grand ce qui augmenterait inutilement le temps de calcul, notamment pour la simulation à l'échelle micro. Pour cela, une série de simulations DEM-CFD, peu coûteuses, a été réalisée afin d'évaluer la hauteur maximale atteinte par les particules au cours de la simulation. Rappelons que dans le cas d'un arrangement aléatoire de particules sédimentées, ou d'un arrangement initial cubique simple, cette hauteur est atteinte au cours de la première élévation du lit, lorsque sa compacité est maximale, et donc les forces de traînée les plus élevées. Suite à cette expansion initiale durant laquelle le lit atteint la hauteur H_{OS} , le lit se déstabilise et atteint son régime stationnaire de bouillonnement au cours duquel la hauteur du lit est moins élevée que H_{OS} . La hauteur du domaine pour le cas 1 000 particules a été déterminée en fonction de cette hauteur H_{OS} . Cependant, afin de limiter le nombre de mailles dans le cas de la simulation DLM-FD de 2 000 particules, la hauteur du domaine est déterminée en fonction de la hauteur maximale atteinte au cours du régime stationnaire et non durant la période transitoire. Pour que les particules n'atteignent pas le haut du domaine lors de l'expansion initiale du lit, les particules sont insérées dans le domaine de façon aléatoire dans la partie basse du réacteur, *ie.* dans la zone occupée par le lit au cours du régime stationnaire. De plus, l'état stationnaire est ainsi plus rapidement atteint comme nous le présentons en partie VI – 4.2.1. La hauteur de domaine des deux configurations étudiées est $25 \times d_p$ et $35 \times d_p$ pour les cas 1 000 et 2 000 particules, respectivement.

VI – 4.1.3 Paramétrage de la simulation DLM-FD

En accord avec les résultats présentés précédemment sur la convergence en espace (voir §VI – 2.3), la résolution du maillage choisi pour ces deux simulations est de 24 points par diamètre de particules. Donc, comme la dimension du domaine est de $10d_p \times 10d_p \times 25d_p$ (resp. $10d_p \times 10d_p \times 35d_p$), le nombre total de cellules est de $10 \times 10 \times 25 \times 24^3 = 34\,560\,000$ (resp. $10 \times 10 \times 35 \times 24^3 = 48\,384\,000$). Or nous avons vu en sous-section VI – 2.4 que, d'une part, l'optimum de performance du modèle DLM-FD utilisé se trouve aux alentours de 250 000 à 500 000 cellules par cœur de calcul. Et d'autre part, comme il est préférable de réaliser les calculs sur un nombre entier de nœuds de 16 cœurs pour utiliser au mieux les performances du cluster ENER110 comme nous l'expliquons en partie III – 6, les simulations à l'échelle micro sont réalisées sur 128 cœurs de calcul, soit 270 000 (resp. 378 000) cellules par cœur.

A partir de la résolution du maillage employé et de la vitesse du fluide dans le réacteur, il nous est possible de définir le pas de temps du solveur fluide à utiliser afin de respecter la condition de CFL de 0.3 (voir §VI – 2.2.2). Or, d'une part la vitesse vue par la particule est égale à $U_{bulk} = U_{sup}/\mathcal{E}_f$, et d'autre part, la dynamique de l'écoulement au sein du lit est loin d'être homogène comme l'illustre la figure VI.4, et des vitesses bien plus élevées que U_{bulk} sont observées localement. Pour la vitesse d'injection choisie, $U_{in} = 3U_{mf}$, des simulations préliminaires ont permis d'observer des sur-vitesses

locales 8 fois plus élevées que la vitesse d'injection, ainsi nous choisissons Δt_f tel que :

$$\Delta t_f = \frac{0.3 \Delta x}{8 U_{\text{in}}} \quad (\text{VI.44})$$

Précisons que si la condition de CFL n'est pas respectée en tout point du domaine pour certains pas de temps, des sous-itérations du problème d'advection sont réalisées. Le temps de calcul par seconde de temps physique modélisée est de 150 (resp. 210) heures, soit 19 200 (resp. 26 880) heures CPU pour le cas 1 000 (resp. 2 000) particules. Les simulations sont réalisées sur une durée de 4 secondes physiques afin d'obtenir des statistiques respectant les critères de convergence présentés en partie V – 2.

VI – 4.1.4 Paramétrage de la simulation DEM-CFD

La simulation de ces systèmes de 1000 et 2000 particules à l'aide du modèle DEM-CFD est quant à elle beaucoup moins coûteuse en ressource de calcul. En effet, en accord avec les résultats présentés en partie V – 3.3 sur la taille de maille à utiliser pour notre implémentation du modèle Euler-Lagrange, le nombre d'éléments composant le maillage doit être compris entre $5 \times 5 \times 12 = 300$ et $6 \times 6 \times 15 = 540$ pour le système 1000 particules et entre $5 \times 5 \times 17 = 425$ et $6 \times 6 \times 21 = 756$ pour le système 2000 particules. Dans les deux cas, cela représente une simulation de taille très modeste et donc réalisable sur un seul cœur de calcul. Le temps de calcul pour une seconde physique est de 50 minutes et les durées simulées sont les mêmes que pour les simulations réalisées à l'échelle micro.

VI – 4.2 Comparaison des résultats

Les résultats de simulation sont analysés à l'aide des même outils statistiques que ceux employés pour l'étude approfondie des lits fluidisés présentée dans le chapitre V. L'épaisseur des volumes de contrôle employés pour discrétiser la distribution verticale des grandeurs observées (voir §V – 2.2) est de $Dz = 1 d_p$.

VI – 4.2.1 Hauteur de lit

Commençons tout d'abord par commenter l'évolution temporelle de la hauteur de lit illustrée sur la figure VI.8 pour les cas 1000 et 2000 particules.

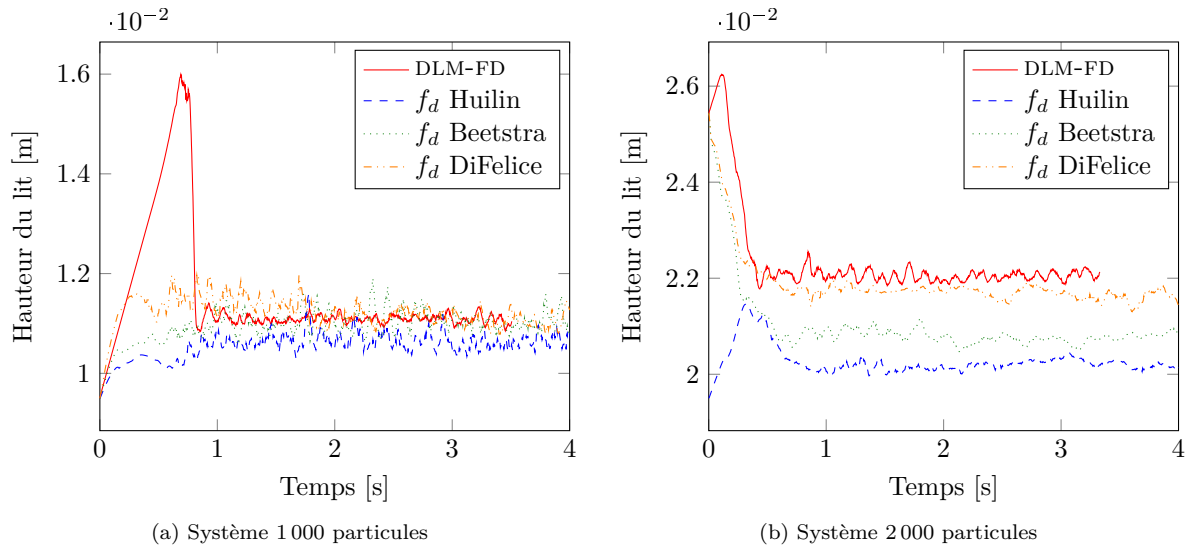


FIGURE VI.8 – Evolution temporelle de la hauteur du lit

Pour le cas 1000 particules, nous observons une forte expansion du lit durant la phase transitoire, c'est à dire entre 0 et 1 seconde. Au cours de cette période, les particules conservent longtemps leur

arrangement cubique simple sans se déstabiliser, puis lorsque survient une petite perturbation dans l'écoulement, l'arrangement se déstabilise et les particules redescendent. La fluidisation entame alors une phase transitoire durant laquelle les fluctuations de la hauteur du lit sont négligeables en comparaison à l'expansion initiale. Ce phénomène d'overshoot a précédemment été évoqué pour des simulations DEM-CFD (voir V – 2.1.2), mais il est ici accentué dans le cas d'une résolution fine de l'écoulement entre les particules. Notons que cet overshoot est ici quasiment inexistant pour les résultats obtenus avec le modèle DEM-CFD. Nous supposons que cette déstabilisation rapide de l'arrangement structuré est dû au faible nombre de mailles comportant des particules dans la direction verticale. En effet, nous avons observé que le lit se déstabilisait généralement par le bas, perdant progressivement des couches de particules qui montent moins vite que le reste du lit. Or, moins il y a de couches de particules, plus le lit se déstabilise vite. Cela se vérifie par exemple pour la corrélation de Huilin dans le cas 2 000 particules (voir courbe bleue sur la figure VI.8-(b)). Le lit initial étant alors plus haut, il met plus de temps à se déstabiliser et le phénomène d'overshoot est plus important. Comme nous l'avons introduit lors de la présentation de la géométrie des systèmes analysés, le phénomène d'overshoot est contourné dans le cas 2 000 particules pour les simulations DEM-CFD utilisant les forces de traînée de Di Felice, de Beetstra et la simulation DLM-FD en utilisant un arrangement aléatoire de particules dont la hauteur à l'état initial est quasiment égale à la hauteur en régime stationnaire. La durée de la période transitoire est alors plus courte et surtout, l'expansion du lit durant les premiers instants de fluidisation est limitée voir nulle.

Au cours du régime stationnaire bouillonnant, la hauteur du lit obtenue avec le modèle DLM-FD pour le cas 1 000 particules est bien reproduite par le modèle DEM-CFD, notamment en utilisant les formulations de force de traînée de Beetstra et de Di Felice. Pour le cas 2 000 particules en revanche, la formulation de Di Felice offre de meilleurs résultats que les formulations de Huilin et de Beetstra. Cela est probablement dû au fait que la corrélation proposée par Di Felice émane de résultats de fluidisation liquide-solide.

VI – 4.2.2 Fraction volumique de fluide

La distribution verticale de la porosité du lit $\mathcal{E}_f = f(z)$ est représentée sur la figure VI.9 pour les cas 1 000 et 2 000 particules. Pour les deux systèmes, nous observons que la porosité du lit simulé avec le modèle DLM-FD est plus grande que celle du lit obtenu avec le modèle DEM-CFD, quelque soit la formulation de force de traînée employée. Cela est lié au fait que la hauteur de lit est moins élevée en DEM-CFD qu'en DLM-FD. En effet la population de particules étant constante, si le volume occupé est moins important, la densité de particules est forcément plus grande. D'autre part, nous observons que la fraction volumique de fluide dans la partie basse du réacteur est beaucoup plus élevée pour les simulations DLM-FD que pour les simulations DEM-CFD. Cette différence est due à la condition à la limite imposée pour \mathcal{E}_f sur la face d'entrée du réacteur dans le modèle Euler-Lagrange implémenté dans cette thèse. Ce problème a déjà été abordé en partie III – 5.1.1, mais la solution proposée ne résout que partiellement le problème. En effet, la valeur de la fraction volumique interpolée au centre de gravité des particules se trouvant sur la première couche de cellules est toujours plus importante qu'elle ne devrait être, et l'intensité de la force de traînée qui s'exerce sur ces particules n'est pas suffisamment élevée pour pouvoir les fluidiser.

Ce résultat met en évidence une des améliorations qu'il est nécessaire d'apporter au modèle DEM-CFD afin d'améliorer la modélisation numérique de la dynamique du mélange fluide-particules en entrée du réacteur. Notons que l'effet de cette couche de particules non fluidisées diminue lorsque la quantité de particules dans le lit augmente pour une section de domaine donnée. En observant les fluctuations temporelles de la fraction volumique de fluide, c'est à dire la variance temporelle de \mathcal{E}_f représentée sur la figure VI.10, nous constatons d'une part que le profil obtenu pour $Var(\mathcal{E}_f) = f(z)$ avec le modèle DEM-CFD est proche de celui obtenu avec le modèle DLM-FD, quelque soit le système simulé. En effet, même si la grandeur étudiée est plus élevée dans les parties basse et centrale du lit pour la simulation DLM-FD, nous observons la même augmentation de $Var(\mathcal{E}_f)$ dans la zone haute du lit. D'autre part, nous observons que la variance de \mathcal{E}_f est plus élevée dans le cas 2 000 particules, témoignant d'une agitation plus importante des particules.

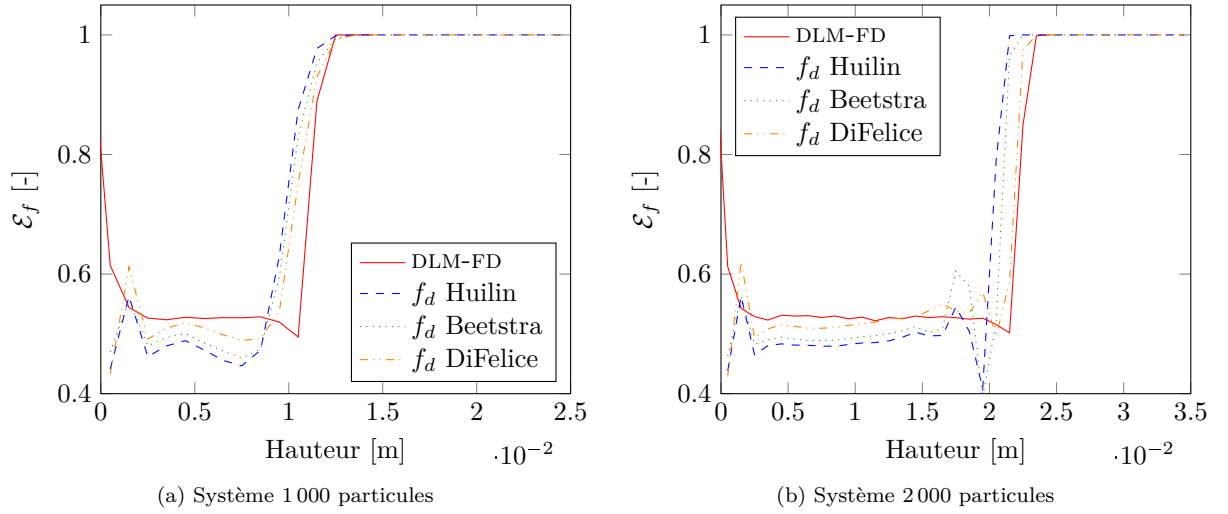


FIGURE VI.9 – Profil vertical de la porosité

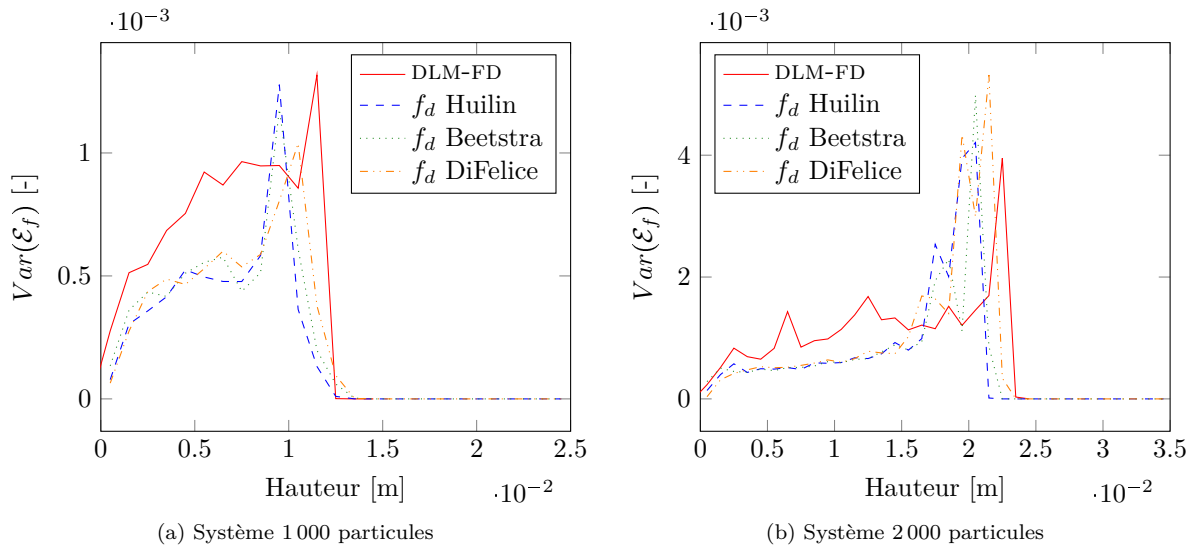


FIGURE VI.10 – Profil vertical de la variance de la porosité

VI – 4.2.3 Vitesse des particules

Pour conclure cette étude statistique de la dynamique des particules au sein du lit, nous étudions la distribution verticale de la vitesse moyenne des particules. Tout d'abord, la figure VI.11 indique que les vitesses transversales des particules, \mathbf{v}_x , obtenues avec le modèle DLM-FD et DEM-CFD sont très proches, quelque soit le système étudié.

Concernant la vitesse axiale des particules, \mathbf{v}_z , nous observons sur la figure VI.12 que sa valeur est plus élevée pour les résultats de simulation DEM-CFD, pour le système 1000 particules comme pour le 2000 particules. Cette observation est intrigante au premier abord car nous avons vu précédemment que la hauteur de lit était plus importante pour la simulation DLM-FD. Ce résultat est la conséquence de l'apparition d'un phénomène de channelling lors des simulations DEM-CFD, les particules circulent alors plus rapidement dans le système, sans pour autant s'élever plus haut dans le domaine. Ce phénomène est observé à l'aide d'un outil de post-processing (Paraview) permettant de visualiser la dynamique de l'écoulement, mais ce type de résultat est difficile à illustrer sur papier. Cela est particulièrement vrai

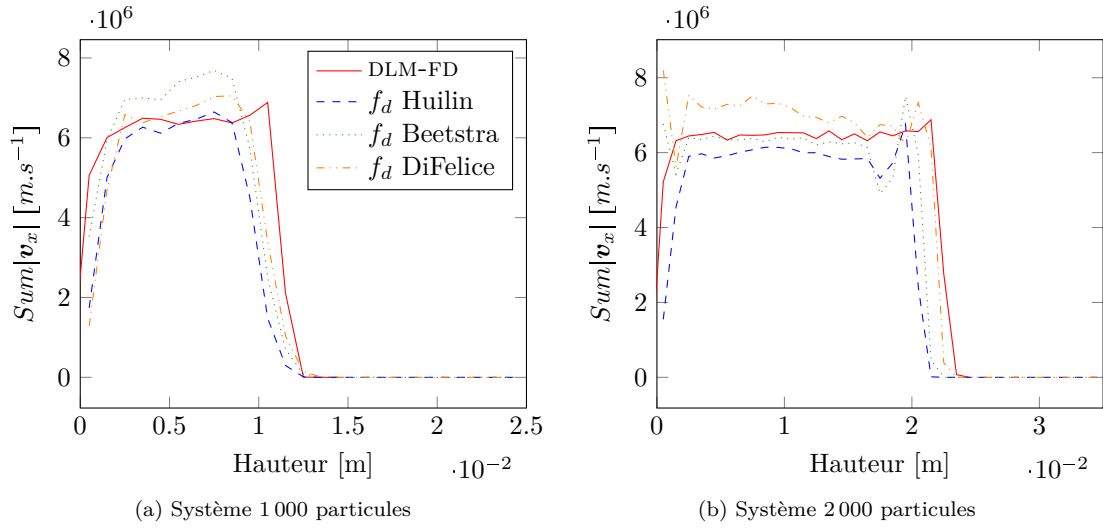


FIGURE VI.11 – Vitesse et variance de la vitesse transversale des particules

ici car le canal de remontée des particules se déplace transversalement au cours de la simulation, il n'est donc pas possible de le représenter de façon temporellement moyennée. Ensuite, nous observons que l'écart entre les formulations de force de traînée employées en DEM-CFD est assez important pour le système 1000 particules, mais quasiment nul pour le système 2000 particules. De plus, l'écart entre les variances (voir figure VI.13) obtenues avec les modèles micro et méso est bien moins important pour le système 1000 particules que pour le système 2000 particules. Ces deux dernières observations laissent penser que la dynamique de l'écoulement simulé par le modèle DEM-CFD se rapproche de celle modélisée avec le modèle DLM-FD lorsque la taille du système étudié augmente. En effet, étant donné le principe de variables localement moyennées sur lequel s'appuie le modèle Euler-Lagrange, les systèmes étudiés ne peuvent pas être trop petits.

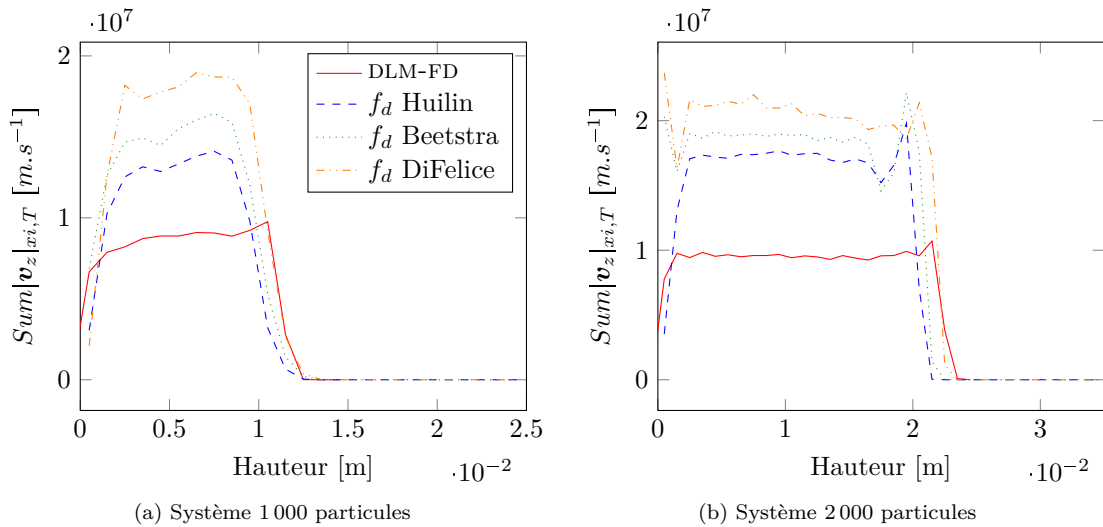


FIGURE VI.12 – Profil vertical de la vitesse axiale des particules

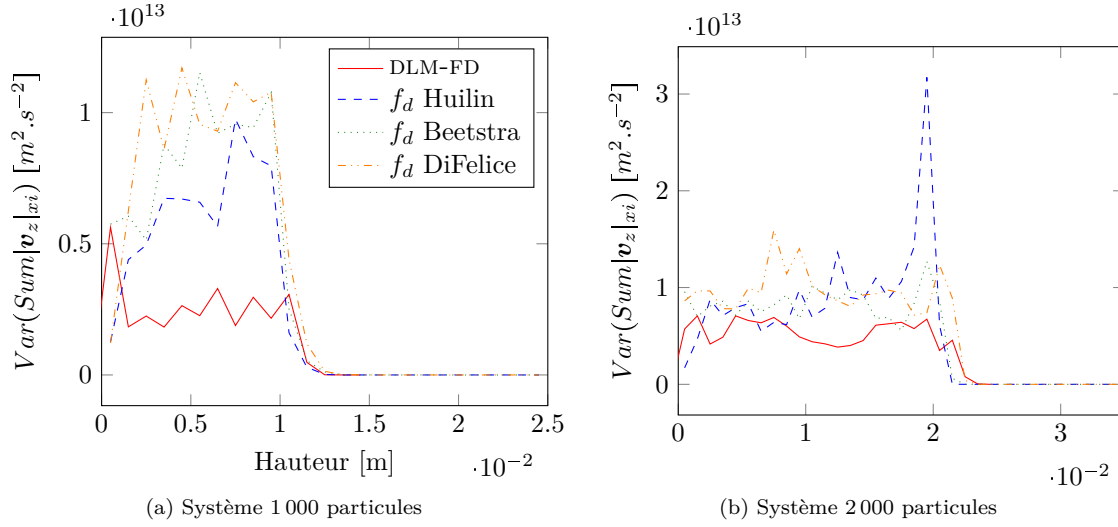


FIGURE VI.13 – Profil axial de la variance de la vitesse axiale des particules

VI – 5 Conclusion

Dans ce sixième et dernier chapitre, nous avons présenté le modèle DLM-FD employé dans cette étude pour réaliser des simulations à l'échelle micro. Les bonnes performances parallèles de son implémentation et l'ordre de précision des schémas utilisés, tant en espace qu'en temps, ainsi que son aptitude à retrouver fidèlement des solutions analytiques, même pour de fortes concentrations de particules, font de ce modèle un bon outil pour étudier les écoulements fluide-particules denses tels que les lits fluidisés. Ainsi, nous utilisons les résultats de simulations DLM-FD comme solutions de référence pour mettre en évidence les aspects du modèle DEM-CFD qu'il serait intéressant d'améliorer. Cependant, pour confirmer le fait que la résolution du maillage employé est suffisamment fine pour considérer la solution DLM-FD comme exacte, une nouvelle simulation du système 1 000 particules est actuellement en cours avec une résolution de 32 points par diamètre de particules.

Les résultats de la comparaison entre les simulations aux échelles micro et méso sont globalement bons, ce qui illustre à nouveau la justesse du modèle DEM-CFD implémenté au cours de cette thèse. Néanmoins, cette comparaison met en évidence certains points sur lesquels le modèle Euler-Lagrange implémenté dans PeliGRIFF doit être amélioré, comme par exemple le traitement de la condition aux limites sur la face d'entrée du réacteur, ou la possibilité de découpler la grille fluide des cellules de contrôle dans lesquelles les variables du fluide sont interpolées au centre de la particules. La suite de cette comparaison entre échelles de modélisation est actuellement en cours au sein de l'équipe, notamment avec la simulation prochaine d'un système plus grand ($20 \times 20 \times 20 = 8000$ particules), mais également pour des régimes de fluidisation différents, *ie.* des rapports ρ_p/ρ_f plus grands, ainsi que des vitesses d'injection plus élevées.

Enfin, une autre piste de remonter d'informations entre les modèles micro et méso a récemment commencé à être explorée avec la plateforme PeliGRIFF au sein d'IFPEN. Son but est d'extraire des lois de comportement pour des particules non-sphériques avec de forts rapports de forme en tenant compte des effets de la concentration et de l'orientation des particules et en observant la perte de charge obtenue à travers un ensemble significatif d'éléments de la phase solide.

Conclusion et perspectives

Dans ce travail de thèse portant sur une approche multi-échelle pour les écoulements fluide-particules, nous avons développé et validé un modèle numérique offrant une description du mélange diphasique à l'échelle intermédiaire entre les modèles micro et les modèles macro. Cet outil numérique a été employé pour étudier la catégorie d'écoulement des lits fluidisés denses dans lesquels il existe une très forte interaction entre les phases fluide et solide et pour lesquels il est nécessaire de bien modéliser les contacts interparticulaires pour reproduire fidèlement la dynamique de l'écoulement diphasique. Ainsi, dans la première partie de ce rapport, après avoir présenté les différents types d'écoulement fluide-particules rencontrés dans notre quotidien et dans de nombreuses applications industrielles, nous nous sommes plus particulièrement intéressés aux lits fluidisés. Nous avons présenté les caractéristiques physiques de ce type d'écoulement et notamment la notion de fluidisation d'une population de particules en détaillant l'origine du saut de pression dynamique à travers le lit, qu'il soit fixe ou fluidisé.

Un aperçu des différentes approches permettant de simuler les écoulements fluide-particules a ensuite été présenté, puis le modèle Euler-Lagrange développé au cours de cette thèse a été introduit au chapitre II et son implémentation numérique a été détaillée au chapitre III. Cet outil permet de simuler des systèmes comportant jusqu'à plusieurs dizaines de millions de particules grâce à de très bonnes performances informatiques. La taille de domaine qu'il est possible de simuler rend ainsi possible des comparaisons directes entre des simulations réalisées aux échelles méso et macro. A l'opposé, le modèle Euler-Lagrange développé permet d'étudier des systèmes ne comportant que quelques centaines ou milliers de particules en obtenant de bons résultats malgré le faible nombre de mailles utilisées pour décrire l'écoulement fluide. En témoigne la bonne concordance des descriptions statistiques obtenues pour les simulations des systèmes 1 000 et 2 000 particules conjointement réalisées à l'aide de notre modèle méso et du modèle micro DLM-FD implémenté dans PeliGRIFF et dont les résultats sont présentés au chapitre VI. Une attention particulière a été portée à la précision du couplage entre les phases, notamment en cherchant à s'approcher de la valeur exacte du volume des particules appartenant à chaque cellule fluide lorsqu'une particule recouvre plusieurs mailles. Cette technique a également été utilisée pour améliorer le calcul de la force volumique modélisant l'action des particules sur le fluide. Cela améliore la précision du calcul et évite les instabilités numériques, ce qui permet d'utiliser des grilles fluides plus petites.

Le choix du "modèle B" au sens du TFM de Gidaspow a été fait, et son implémentation a été vérifiée de plusieurs façons. Tout d'abord par l'obtention du saut de pression dynamique à travers le lit qui est bien égal au poids relatif des particules pour des vitesses d'injection égales ou supérieures à la vitesse minimale de fluidisation, que le rapport de densité soit grand ou faible. Ensuite le phénomène d'hystérésis de l'évolution du saut de pression en fonction de la vitesse d'injection pour des vitesses croissantes ou décroissantes a bien été retrouvé, de même que l'overshoot de pression au seuil de fluidisation pour des vitesses d'injection croissantes. Enfin la vitesse minimale de fluidisation est bien égale à la prédiction obtenue par l'équation de Ergun, quelque soit le système étudié. D'autre part, le modèle Euler-Lagrange développé au cours de cette thèse a été validé à l'aide de comparaisons à des résultats expérimentaux. La configuration d'écoulement utilisée pour cette seconde étape de validation est celle particulièrement contraignante des lits pulsés. Ainsi, nous avons reproduit avec succès l'expérience réalisée par Brown sur des systèmes comportant 1, 2 et 3 jets pour différentes vitesses d'injection, et surtout pour différentes tailles de particule ($550\mu\text{m}$ et $750\mu\text{m}$). Les résultats obtenus sont étonnamment bons au vu de la faible discrétisation spatiale, notamment aux abords de

l'orifice d'injection dont la largeur n'est composée que d'une seule maille. Ceci étant, les bons résultats obtenus concernant l'obtention de grandeurs théoriques ainsi que pour les comparaisons à des résultats expérimentaux nous permettent d'affirmer que le modèle Euler-Lagrange que nous avons développé est correctement implémenté et que les résultats qu'il fournit sont fiables.

Le modèle DEM-CFD ayant été validé pour différentes configurations d'écoulement, nous l'avons employé pour réaliser des études approfondies des lits fluidisés bouillonnants et pulsés dont les résultats sont exposés dans le cinquième chapitre de ce mémoire. Afin d'analyser la comportement chaotique du mélange fluide-particules au sein des lits bouillonnants, nous avons établi des critères de fréquence et de durée d'échantillonnage minimales garantissant que les résultats obtenus ne soient plus tributaires de ces deux paramètres. Nous avons également développé une série d'outils statistiques permettant de quantifier les trajectoires des particules et d'étudier les phénomènes se déroulant dans les réacteurs. Ainsi, la forte influence des paramètres de contact interparticulaire sur la dynamique des particules a été mise en évidence pour les cas de lits bouillonnants et pulsés. Cette série d'outils statistiques nous a également permis d'étudier les caractéristiques des lits fluidisés denses lorsque la vitesse d'injection augmente, entraînant ainsi des trajectoires de particule de plus en plus chaotiques.

Enfin, dans le sixième et dernier chapitre de ce rapport, nous avons d'abord introduit le modèle DLM-FD utilisé pour simuler les systèmes fluide-particules à l'échelle micro. Puis nous avons présenté les résultats d'une étude menée sur deux systèmes différents, l'un composé de 1 000 particules et l'autre de 2 000 particules, tous deux simulés à l'aide des modèles DLM-FD et DEM-CFD. Cette comparaison directe nous a permis d'une part de valider l'aptitude du modèle DEM-CFD à fournir des résultats fiables même pour de petits systèmes. En effet, les résultats obtenus avec les deux modèles sont proches, tant d'un point de vue de la hauteur du lit et de la fraction volumique moyenne, que de la vitesse des particules. D'autre part, les résultats obtenus à l'échelle micro nous permettent de mettre en évidence les aspects du modèles méso qu'il est nécessaire de travailler pour améliorer la fidélité des simulations réalisées. Enfin, ces simulations conjointes ouvrent de nombreuses pistes d'exploration permettant de faire remonter de l'information de l'échelle micro vers l'échelle méso.

Etudions maintenant les pistes de recherche potentielles sur la thématique des écoulements fluide-particules pouvant faire suite aux travaux réalisés durant ces trois années de thèse. Tout d'abord, il reste quelques améliorations à apporter au modèle Euler-Lagrange, parmi lesquelles, citons par exemple la correction de la condition à la limite en entrée pour la variable \mathcal{E}_f . En effet, nous avons vu que l'équation de conservation de la masse nécessite d'imposer une valeur $\mathcal{E}_f = 1$ en entrée mais que cela engendre une valeur de \mathcal{E}_f trop élevée pour la première couche de particules, et donc une force de traînée plus faible qu'elle ne devrait l'être en réalité. Pour résoudre ce problème, une solution simple consiste à utiliser des conditions aux limites différentes pour les phases solide et fluide, c'est à dire $\mathcal{E}_f = 1$ pour le fluide et une condition de Neumann homogène pour la phase solide, comme sur les parois du domaine. La porosité interpolée au centre de gravité des particules de la première couche serait alors correcte et cela améliorerait par exemple les résultats de la comparaison micro-méso présentés dans le chapitre VI.

Ensuite, il serait fort intéressant de découpler le maillage servant à la résolution des équations de la phase continue et les volumes de contrôle employés pour moyenner les valeurs du fluide attribuées aux particules afin de pouvoir raffiner la grille fluide et ainsi modéliser plus précisément l'écoulement fluide. Pour cela, il est par exemple possible, dans un premier temps, de s'inspirer des travaux de Link *et al.* (2006) qui proposa une méthode de "cubes poreux" permettant de répartir la contribution de la présence d'une particule sur les cellules fluides environnantes lors du calcul de la fraction volumique. Dans un second temps, une amélioration similaire peut être apportée au calcul de la vitesse du fluide au centre de gravité de la particule. En effet, comme il est nécessaire d'attribuer aux particules une valeur du champ fluide moyennée sur un volume de contrôle au moins 10 fois plus grand que le volume des particules, le champ fluide peut plus être simplement interpolé linéairement à l'aide des points voisins si la grille fluide est plus fine que dans la configuration étudiée dans ce rapport. Ainsi, il devient nécessaire d'utiliser une fonction de filtrage spatial permettant de réaliser une prise de moyenne sur un volume de contrôle de taille donnée, indépendamment du nombre de mailles fluides comprises dans ce volume de contrôle, comme par exemple la méthode proposée par Pepiot & Desjardins (2012). Cette amélioration majeure permettrait de simuler plus précisément l'écoulement fluide, ce qui est important

pour reproduire plus fidèlement certains types d'écoulement tels que les lits pulsés, même si les résultats obtenus sont déjà très satisfaisants avec l'implémentation actuelle. Notons qu'avec une telle méthode de raffinement de grille fluide, les modélisations réalisées aux échelles micro et méso devraient converger.

Un dernier exemple d'amélioration qu'il serait possible d'apporter concerne le couplage temporel. En effet, en s'inspirant de la méthode des caractéristiques, il est possible d'améliorer la précision des informations du fluide à l'emplacement de chaque particule pour chaque pas de temps solide. Cela permettrait tout d'abord de réduire l'erreur due au découplage temporel et ensuite il serait alors possible d'utiliser des pas de temps plus grands pour le solveur fluide, et donc de réduire le temps de calcul total. Une autre façon d'améliorer le couplage en temps du modèle implémenté serait d'utiliser un splitting d'opérateurs d'ordre plus élevé, comme par exemple un splitting de Strang symétrisé. Il est également toujours possible d'implémenter des schémas d'ordre plus élevé, en temps mais également en espace, pour l'advection comme pour la diffusion.

De part la structure informatique de la plateforme PeliGRIFF, il est possible d'ajouter facilement des forces d'interaction fluide-particules ou particules-particules dans le bilan de forces agissant sur les particules. Ainsi, les forces de masse ajoutée et de Basset peuvent désormais être prises en compte pour modéliser des systèmes de faible rapport de densité. Remarquons que les forces DLVO peuvent également être implémentées pour étudier des systèmes contenant des poudres plus fines, pour lesquelles les forces interparticulaires à distance, *ie.* les forces DLVO, ne sont plus négligeables. Ces forces, en particulier la force de masse ajoutée, pourraient améliorer les résultats obtenus pour les comparaisons micro-méso pour lesquels le rapport de densité employé est inférieur à 10. Une autre piste pour approfondir la comparaison entre les deux échelles de modélisation serait de comparer des systèmes plus gros, par exemple composés de 20^3 particules, afin de limiter les erreurs de modélisation dues au faible nombre de mailles. Il serait également intéressant d'investiguer d'autres configurations d'écoulement, comme par exemple avec des rapports de densité plus grands ou de plus fortes vitesses d'injection, afin d'étudier des régimes de fluidisation différents, favorisant notamment l'apparition de bulles. De telles simulations permettent ainsi de mettre en évidence les aspects du modèle DEM-CFD qu'il est nécessaire d'améliorer pour renforcer la justesse des solutions obtenues.

Une autre méthode qui peut être employée pour extraire des informations de l'échelle micro pour les injecter dans le modèle méso consiste à réaliser des simulations précises sur une ou un faible nombre de particules, et d'en extraire des corrélations, telles que des lois de traînée mais également des corrélations de force de portance ou de couple hydrodynamique. De telles corrélations ont souvent été proposées pour des mélanges denses de particules sphériques. Mais pour les particules non-sphériques, à notre connaissance, les seules propositions faites à ce jour concernent des objets isolés (voir par exemple Zhang *et al.* (2001), Mortensen *et al.* (2008), Zastawny *et al.* (2012)). Or, de nombreuses applications industrielles utilisent des granulés de forme allongée en raison du procédé d'extrusion employé pour fabriquer ces particules. Il est donc primordial d'améliorer la compréhension et la modélisation des écoulements contenant ce type d'objet afin d'améliorer les performances de ces installations.

Enfin, une remontée d'information entre les échelles méso et macro peut également être investiguée, dans un premier temps avec des comparaisons directes de systèmes, afin de vérifier la validité de la description Eulérienne des deux phases et d'améliorer les éventuels points de faiblesse. Puis, dans un second temps, des corrélations peuvent être extraites du modèle Euler-Lagrange pour être implémentées dans des modèles Euler-Euler, notamment concernant le coefficient d'échange de quantité de mouvement, *ie.* la force modélisant l'action des particules sur le fluide : \mathbf{F}_{pf} . Des corrélations peuvent également être extraites pour le tenseur des contraintes de chacune des phases en prenant en compte la présence des particules et les paramètres de contacts pour calculer une viscosité dynamique équivalente au mélange diphasique.

En conclusion, nous avons développé un modèle numérique performant et fiable permettant d'étudier les écoulements fluide-particules à une échelle de longueur intermédiaire offrant ainsi la possibilité de faire remonter des informations de l'échelle micro vers l'échelle macro. Remarquons que dans cette étude, cet outil a été utilisé pour modéliser des lits fluidisés denses mais il peut également être employé pour simuler de nombreux autres types d'écoulement (transport en pipeline, avalanches sous-marines, écoulement en tambour tournant immergé, transport sédimentaire dans les lits de rivière, etc).

Acronymes

ALE	Arbitrary Lagrangian Eulerian
BLAS	Basic Linear Algebra Subprograms
CC	Cubique Centré
CFC	Cubique à Faces Centrées
CFL	Courant-Fredrich-Levy
CLC	Chemical Looping Combustion
CCDM	Combined Continuum and Discrete Model
DEM	Discrete Element Method
DEM-CFD	Discrete Element Method / Computational Fluid Dynamics
DF-FD	Direct Forcing/Fictitious Domain
DLM-FD	Distributed Lagrange Multiplier/Fictitious Domain
DNS	Direct Numerical Simulation
EPIC	Etablissement Public à caractère Industriel et Commercial
EPST	Etablissement Public à caractère Scientifique et Technologique
FBC	Combustion en Lit Fluidisé
FBR	Fluidized Bed Reactor
FCC	Fluid Catalytic Cracking
IFPEN	IFP Energies Nouvelles
IBM	Immersed Boundary Method
IMFT	Institut de Mécanique de Fluide de Toulouse
IRM	Imagerie par Résonance Magnétique
IRSN	Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire
LAPACK	Linear Algebra PACKage
LBM	Lattice Boltzmann Method
LFC	Lit Fluidisé Circulant
MAC	Marker And Cell
MPI	Message Passing Interface

MRI Magnetic Resonance Imaging

MUMPS Multifrontal Massively Parallel sparse direct Solver

MY Marchuk-Yanenko

NS Navier-Stokes

PeliGRIFF Parallel Efficient Library for GRains In Fluid Flow

PEPT Positron Emission Particle Tracking

PETSc Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation

PFD Principe Fondamental de la Dynamique

PIV Particle Image Velocimetry

PRS Particle-Resolved Simulation

QDM quantité de mouvement

TFM Two Fluid Model

VT Variation totale

TVD Variation Totale Décroissante

UMFPACK Unsymmetric Multifrontal sparse Factorization PACKage

Annexes

A Réseaux de particules

La façon dont des particules sont positionnées les unes par rapport aux autres influent sur la compacité du lit qu'elles composent. D'une part, dans le cas d'un lit sédimenté sous l'effet de la gravité, les particules sont disposées selon un arrangement aléatoire qui peut être plus ou moins compact selon le mode et le temps de sédimentation employés.

D'autre part, les particules peuvent être positionnées de façon structurée, c'est à dire en respectant un motif bien défini. Ainsi, un inventaire des principaux réseaux de particules 3D existants est proposé ci-après, en s'inspirant du domaine de la cristallographie. Le calcul de la compacité du lit, $\mathcal{E}_p = (1 - \mathcal{E}_f)$, est réalisé dans une maille élémentaire de côté a .

1. Arrangement Cubique Simple (CS)

- 1 particule au centre de la maille
- 1 nœud propre
- $a = 2R$

→ La compacité est donc de $\mathcal{E}_p = \frac{\frac{4}{3}\pi R^3}{(2R)^3} = \frac{\pi}{6} = 0.52$

2. Arrangement Cubique Centré (CC)

- 1/8^e de particule à chacun des 8 sommets de la maille
- 1 particule au centre de la maille
- $8 \times 1/8 + 1 = 2$ nœuds propres
- Entre 2 coins opposés, il y a 4 rayons : $a\sqrt{3} = 4R \rightarrow a = 4R/\sqrt{3}$

→ La compacité est donc de $\mathcal{E}_p = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi R^3}{(4R/\sqrt{3})^3} = \frac{\pi \times \sqrt{3}}{8} = 0.68$

3. Arrangement Cubique Face Centrée (CFC)

- 1/8^e de particule à chacun des 8 sommets de la maille
- 1/2 particule sur chacune des 6 faces de la maille
- $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ nœuds propres
- La maille conventionnelle de cette structure comporte 4 atomes
- La taille de la maille est contrainte par la petite diagonale $a\sqrt{2} = 4R \rightarrow a = 2\sqrt{2}R$

→ La compacité est donc de $\mathcal{E}_p = \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi R^3}{(2\sqrt{2}R)^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0.74$

4. Arrangement en Diamant

- 1/8^e de particule à chacun des 8 sommets de la maille
- 1 particule au centre de la maille
- 1 particule dans 4 des 8 sites tétraédrique du cube
- La maille conventionnelle de cette structure comporte $8 \times 1/8 + 1 + 4 = 6$ atomes

→ La distance de contact est celle entre un atome de coin et celui d'un site tétraédrique. On observe, selon la grande diagonale que $a\sqrt{3}/4 = 2R \rightarrow a = \frac{8R}{\sqrt{3}}$

• La compacité est donc de $\mathcal{E}_p = \frac{6 \times \frac{4}{3}\pi R^3}{(8R/\sqrt{3})^3} = \frac{\pi \times \sqrt{3}}{16} = 0.34$

5. Arrangement Hexagonal Compact (en anglais "Hexagonal Closed-Packed (HCP)")

- $1/6^{\text{e}}$ de particule à chacun des 12 sommets du prisme hexagonal
- $1/2$ particule sur les 2 bases du prisme hexagonal
- 1 particules dans 3 des 6 sites interstitiels
- $12 \times 1/6 + 2 \times 1/2 + 3 = 6$ éléments
- La maille élémentaire est caractérisée par la longueur de coté de sa base “a” et par sa hauteur “c”, avec $a = 2R$ et $c = \sqrt{\frac{2}{3}}(4R)$

→ La compacité est donc de $\mathcal{E}_p = \frac{6 \times \frac{4}{3}\pi R^3}{3\sqrt{3}/2 \times (2R)^2 \times \sqrt{\frac{2}{3}}(4R)} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0.74$

B Caractéristiques du super-calculateur ENER110

La majeure partie des simulations présentées dans ce rapport ont été réalisées sur le super-calculateur ENER110 installé dans les locaux de IFP Energies Nouvelles à l'automne 2012. Les caractéristiques techniques de la machine sont détaillées dans le tableau 3 et les relations entre les différentes couches matérielles sont illustrées par le schéma 14.

TABLE 3 – Caractéristiques du calculateur ENER110

Constructeur	Bull
System d'exploitation	RedHat Entreprise Linux 6.2 + Bullx
Nom machine	ENER110
Type de processeur	Intel Sandy Bridge
Nombre de nœuds bi-processeurs	378
Nombre de processeurs octo-cœurs	756
Nombre total de cœurs	6048
Fréquence CPU	2.6 Ghz
Mémoire par nœud	64 Go
Interconnection des nœuds	Infiniband FDR
Puissance de calcul	110 TFlop/s (126 TFlop/s crête)

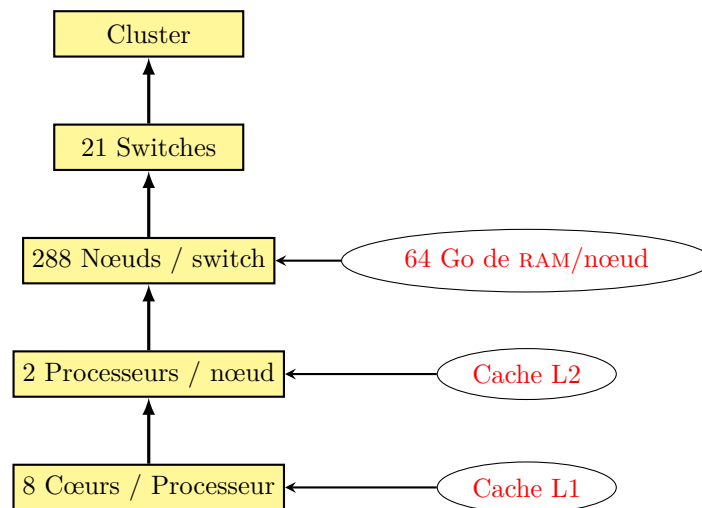


FIGURE 14 – Décomposition des couches matérielles du super-calculateur ENER110

C Algorithme

Un algorithme, plus connu sous le nom anglais de “flow chart”, est une représentation graphique de l’enchaînement des opérations et conditions qui composent un algorithme. La figure 15 représente la structure principale du modèle DEM-CFD implémenté tandis que la figure 16 détaille les différentes étapes du calcul des variables de vitesse et de pression.

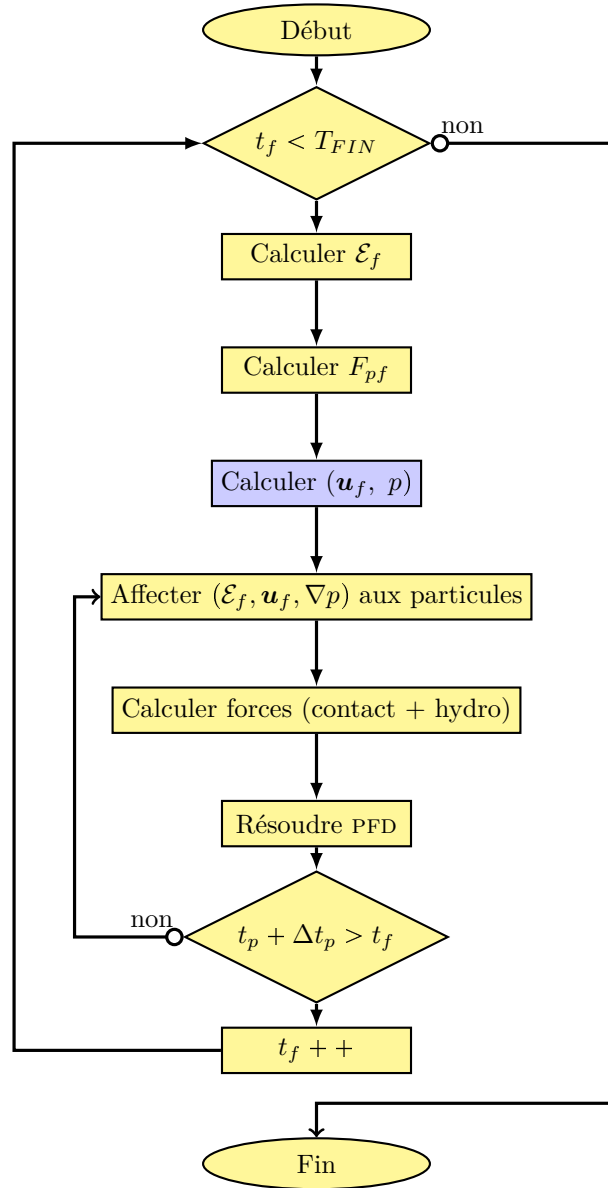


FIGURE 15 – Structure des différents modules de la plateforme PeliGRIFF

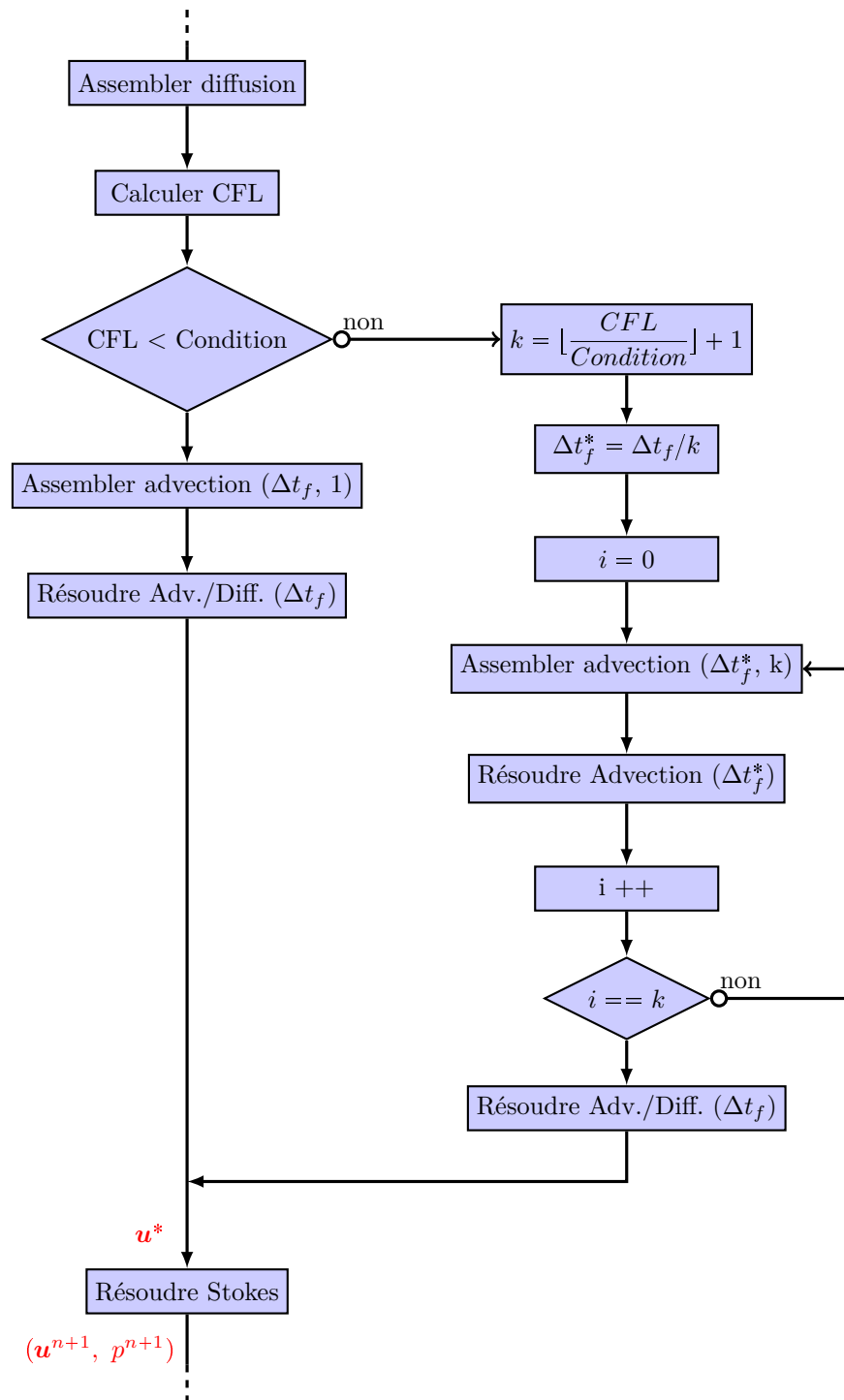


FIGURE 16 – Détail du calcul des champs \mathbf{u}_f et p

D Forces DLVO

Les forces DLVO regroupent les forces d'attraction de Van Der Waals et de répulsion électrostatique existant entre des particules, électriquement chargées ou non. Leur intensité est d'autant plus importante face aux forces hydrodynamiques que les particules sont petites. C'est pourquoi ces forces sont prédominantes pour les poudres du groupe C de la classification de Geldart et sont non négligeables pour les poudres du groupe A (voir section I – 3.3).

Concernant les forces de Van Der Waals, celles-ci prennent naissance à l'échelle moléculaire et peuvent être identifiées comme les forces de London, de Debye et de Keesom :

$$f_{\text{vdw}} = f_{\text{London}} + f_{\text{Debye}} + f_{\text{Keesom}} \quad (45)$$

1. Force de London :

Les forces de London, ou forces de dispersion de London, existent du fait que la densité électronique des molécules est probabiliste. Ainsi, à tout moment, il y a de fortes chances pour que les électrons ne soient pas équitablement répartis à travers la molécule, ce qui crée un moment dipolaire qui varie très rapidement au cours du temps. A chaque distribution hétérogène apparaît donc un moment induit qui peut interagir avec les moments dipolaires induits des molécules voisines et une force s'exerce alors entre les molécules. Dans le cas de molécules neutres, les forces de London sont prépondérantes par rapport aux autres forces intermoléculaires à grande distance.

$$f_{\text{London}} = -\frac{3}{4r^6} \cdot \frac{h\nu\alpha_1\alpha_1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \quad (46)$$

2. Forces de Debye :

Les dipôles induits décrits ci-dessus peuvent également réagir avec des dipôles permanents (molécules polarisées) mais les forces qui en résultent prennent alors le nom de forces de Debye.

$$f_{\text{Debye}} = -\frac{1}{r^6} \cdot \left[\frac{\mu_1^2\alpha_2 + \mu_2^2\alpha_1}{(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)^2} \right] \quad (47)$$

3. Forces de Keesom :

Ces forces résultent de l'interaction entre 2 dipôles permanents. Dans le cas de molécules polarisées, elles sont plus importantes que les forces de London. Elles s'expriment de la façon suivante :

$$f_{\text{Keesom}} = -\frac{1}{r^6} \cdot \frac{-\mu_1^2\mu_2^2}{3(4\pi\epsilon_0)^2k_B T} \quad (48)$$

Avec

- ϵ_0 la constante diélectrique du vide,
- h la constante de Plank
- k_B la constante de Boltzmann
- T la température absolue
- ν la fréquence électronique d'absorption [Hz]
- μ les moments dipolaires
- α les polarisabilités électroniques

Pour des particules macroscopiques, la somme des forces de Van der Waals est généralement basée sur l'intégration des forces entre les atomes ou les molécules qui les constituent, en supposant que leur volume et leur concentration molaire soient connus.

Pour 2 sphères constituées du même matériau, de rayon R_1 et R_2 et dont les centres sont situés en \mathbf{r}_a et \mathbf{r}_b respectivement, l'énergie totale d'interaction entre ces 2 corps fut évaluée par Hamaker [91, 108, 109] :

$$E(r_{ab}) = \frac{A}{6} \left[\frac{2}{\bar{r}_{ab}^2 - 4} + \frac{2}{\bar{r}_{ab}^2} + \ln \left(\frac{\bar{r}_{ab}^2 - 4}{\bar{r}_{ab}^2} \right) \right] \quad (49)$$

Avec $A = \pi^2 \rho_p^2 C_6$ la constante de Hamaker. C_6 est le coefficient qui provient de la théorie de London caractérisant l'énergie potentielle entre 2 molécules a et b à une distance r_{ab} : $\Phi(r) = -C_6 r_{ab}^{-6}$.

Nous avons également :

$$\bar{r}_{ab}^2 = \frac{r_{ab}^2 - (R_a - R_b)^2}{R_a R_b}, \quad r_{ab} = |r_b - r_a| \quad (50)$$

La force exercée sur une sphère a est alors

$$\mathbf{f}_{coh,a} = \frac{32 A}{3 R_a R_b} \frac{r_{ab} \mathbf{n}_{ab}}{\bar{r}_{ab}^4 (\bar{r}_{ab}^2 - 4)^2} \quad (51)$$

Bibliographie

- [1] A. R. Abrahamsen and D. Geldart. Behaviour of gas-fluidized beds of fine powders. Part I. homogeneous expansion. Powder technology, 26(1) :35–46, 1980. *Cité page 20*
- [2] J. Ai, J. F. Chen, J. M. Rotter, and J. Y. Ooi. Assessment of rolling resistance models in discrete element simulations. Powder Technology, 206(3) :269–282, 2011. *Cité page 34*
- [3] M.R. Al-Dibouni and J. Garside. Particle mixing and classification in liquid fluidized beds. Trans. Inst. Chem. Eng, 57(2) :94–103, 1979. *Cité page 23*
- [4] F. Alobaid, J. Ströhle, and B. Epple. Extended CFD/DEM model for the simulation of circulating fluidized bed. Advanced Powder Technology, 2012. *3 citations pages xiii, 49, et 51*
- [5] T. B. Anderson and R. Jackson. Fluid mechanical description of fluidized beds. equations of motion. Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals, 6(4) :527–539, 1967. *4 citations pages 30, 35, 51, et 109*
- [6] R. Andreux, T. Gauthier, J. Chaouki, and O. Simonin. New description of fluidization regimes. AIChE journal, 51(4) :1125–1130, 2005. *Cité page 29*
- [7] G. Balzer and O. Simonin. Extension of Eulerian gas-solid flow modelling to dense fluidized bed. EDF-DER, 1994. *Cité page 29*
- [8] E. Barnea and J. Mizrahi. A generalized approach to the fluid dynamics of particulate systems : Part I. general correlation for fluidization and sedimentation in solid multiparticle systems. The Chemical Engineering Journal, 5(2) :171–189, 1973. *2 citations pages xvii et 129*
- [9] G. K. Batchelor. Sedimentation in a dilute dispersion of spheres. Journal of fluid mechanics, 52(02) :245–268, 1972. *Cité page 129*
- [10] O. Batrak. Etudes numérique et expérimentale de l’hydrodynamique des Lits Fluidisés Circulants gaz-particules avec prise en compte de la polydispersion granulométrique. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2005. *Cité page 29*
- [11] J. Bear. Dynamics of fluids in porous media. Eisevier, New York, 764p, 1972. *Cité page 13*
- [12] R. Beetstra, M. A. Van Der Hoef, and J. A. M. Kuipers. Drag force of intermediate Reynolds number flow past mono- and bidisperse arrays of spheres. AIChE Journal, 53(2) :489–501, 2007. *6 citations pages 36, 37, 39, 41, 128, et 132*
- [13] R. Beetstra, M. A. Van Der Hoef, and J. A. M. Kuipers. Erratum. AIChE Journal, 53(11) :3020–3020, 2007. *2 citations pages 41 et 132*
- [14] R. Beetstra, M. A. Van Der Hoef, and J. A. M. Kuipers. Numerical study of segregation using a new drag force correlation for polydisperse systems derived from lattice-Boltzmann simulations. Chemical Engineering Science, 62 :246–255, 2007. Fluidized Bed Applications. *2 citations pages 41 et 132*
- [15] F. C. Blake. The resistance of packing to fluid flow. Transactions of the American Institute of Chemical Engineers, 14 :415–421, 1922. *3 citations pages 14, 39, et 129*

- [16] A. Boelle, G. Balzer, and O. Simonin. Second-order prediction of the particle-phase stress tensor of inelastic spheres in simple shear dense suspensions. ASME-PUBLICATIONS-FED, 228 :9–18, 1995. *Cité page 29*
- [17] M. Boivin, O. Simonin, and K. D. Squires. Direct numerical simulation of turbulence modulation by particles in isotropic turbulence. Journal of Fluid Mechanics, 375 :235–263, 1998. *Cité page 29*
- [18] J. X. Bouillard, R. W. Lyczkowski, and D. Gidaspow. Porosity distributions in a fluidized bed with an immersed obstacle. AIChE Journal, 35(6) :908–922, 1989. *2 citations pages 11 et 31*
- [19] G. G. Brown, A. S. Foust, D. L. V. Katz, R. Schneidewind, R. R. White, W. P. Wood, G. M. Brown, L. E. Brownell, J. J. Martin, G. B. Williams, et al. Unit operations. Wiley New York, 1950. *Cité page 22*
- [20] S. L. Brown. Hydrodynamics and Transient Heat Transfer Characteristics in Fluidized and Spouted Beds. PhD thesis, Virginia Polytechnic Institute and State University, 2012. *10 citations pages xiv, xv, xvii, 83, 84, 88, 89, 91, 113, et 114*
- [21] S. L. Brown and B. Y. Lattimer. Hydrodynamics of multiple jet systems in a 2D gas solid fluidized bed. In ASME 2012 Fluids Engineering Division Summer Meeting collocated with the ASME 2012 Heat Transfer Summer Conference and the ASME 2012 10th International Conference on Nanochannels, Microchannels, and Minichannels, pages 89–97. American Society of Mechanical Engineers, 2012. *Cité page 114*
- [22] L. E. Brownell and D. L. V. Katz. Flow of fluids through porous media. Part I. single homogeneous fluids. Chemical Engineering Progress, 43(10) :537–548, 1947. *Cité page 22*
- [23] L. E. Brownell and D. L. V. Katz. Flow of fluids through porous media. Part III. application to rotary vacuum filtration. Chemical Engineering Progress, 43(12) :703–712, 1947. *Cité page 22*
- [24] Lloyd E Brownell and Donald L Katz. Flow of fluids through porous media. Part II. simultaneous flow of 2 homogeneous phases. Chemical Engineering Progress, 43(11) :601–612, 1947. *Cité page 22*
- [25] S. P. Burke and W. B. Plummer. Gas flow through packed columns. Industrial & Engineering Chemistry, 20(11) :1196–1200, 1928. *4 citations pages 14, 15, 39, et 130*
- [26] J. Caltagirone and S. Vincent. Tensorial penalisation method for solving navier-stokes equations. Comptes Rendus de l’Academie des Sciences Series IIB Mechanics, 329(8) :607–613, 2001. *Cité page 28*
- [27] J. Capecelatro and O. Desjardins. An Euler-Lagrange strategy for simulating particle-laden flows. Journal of Computational Physics, 2012. *Cité page 51*
- [28] P. C. Carman. Fluid flow through granular beds. Transactions-Institution of Chemical Engineeres, 15 :150–166, 1937. *3 citations pages 14, 22, et 39*
- [29] F. Cello, A. Di Renzo, and F. P. Di Maio. A semi-empirical model for the drag force and fluid-particle interaction in polydisperse suspensions. Chemical Engineering Science, 65(10) :3128–3139, 2010. *Cité page 41*
- [30] R. P. Chhabra. Bubbles, drops, and particles in non-Newtonian fluids. CRC Press, 1992. *Cité page 128*
- [31] T. H. Chilton and A. P. Colburn. Pressure drop in packed tubes. Industrial & Engineering Chemistry, 23(8) :913–919, 1931. *Cité page 22*
- [32] T. H. Chilton and A. P. Colburn. Distillation and absorption in packed columns a convenient design and correlation method. Industrial & Engineering Chemistry, 27(3) :255–260, 1935. *Cité page 22*

-
- [33] E. Climent and M. R. Maxey. Numerical simulations of random suspensions at finite Reynolds numbers. International journal of multiphase flow, 29(4) :579–601, 2003. *Cité page 28*
 - [34] E. Climent and M. R. Maxey. The force coupling method : a flexible approach for the simulation of particulate flows. 2009. *Cité page 28*
 - [35] A. P. Colburn. Heat transfer and pressure drop in empty, baffled, and packed tubes. Industrial & Engineering Chemistry, 23(8) :910–913, 1931. *Cité page 22*
 - [36] R. R. Cranfield and D. Geldart. Large particle fluidisation. Chemical Engineering Science, 29(4) :935–947, 1974. *Cité page 22*
 - [37] J. Crank and P. Nicolson. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. In Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, volume 43, pages 50–67. Cambridge Univ Press, 1947. *Cité page 64*
 - [38] C. T Crowe, J. D. Schwarzkopf, M. Sommerfeld, and Y. Tsuji. Multiphase Flows with Droplets and Particles. CRC Press, 1997. *2 citations pages 44 et 128*
 - [39] P. A. Cundall and O. D. L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. Geotechnique, 29(1) :47–65, 1979. *2 citations pages 30 et 33*
 - [40] J. M. Dallavalle. Micromeritics : The technology of fine particles. New York, page 23, 1948. *2 citations pages 37 et 38*
 - [41] S. L. Dance and M. R. Maxey. Incorporation of lubrication effects into the force-coupling method for particulate two-phase flow. Journal of computational Physics, 189(1) :212–238, 2003. *Cité page 28*
 - [42] D. S. Dandy and H. A. Dwyer. A sphere in shear flow at finite Reynolds number : effect of shear on particle lift, drag, and heat transfer. J. Fluid Mech, 216 :381–410, 1990. *Cité page 44*
 - [43] H. Darcy. Les fontaines publiques de la ville de Dijon. Victor Dalmont, 1856. *Cité page 13*
 - [44] L. Davies and JF Richardson. Gas interchange between bubbles and the continuous phase in a fluidized bed. Trans Inst Chem Eng, 44 :T293–T305, 1966. *Cité page 21*
 - [45] Surya Deb and Danesh Tafti. Investigation of flat bottomed spouted bed with multiple jets using DEM-CFD framework. Powder Technology, 254 :387–402, 2014. *8 citations pages xv, 83, 84, 87, 89, 91, 114, et 118*
 - [46] J. M. Delhay. Jump conditions and entropy sources in two-phase systems. local instant formulation. International Journal of Multiphase Flow, 1(3) :395–409, 1974. *Cité page 29*
 - [47] S. C. R. Dennis, S. N. Singh, and D. B. Ingham. The steady flow due to a rotating sphere at low and moderate Reynolds numbers. Journal of Fluid Mechanics, 101(2) :257–279, 1980. *Cité page 45*
 - [48] I. V. Derevich, V. M. Yeroshenko, and L. I. Zaichik. Hydrodynamics and heat transfer of turbulent gas suspension flows in tubes - 1. hydrodynamics. International journal of heat and mass transfer, 32(12) :2329–2339, 1989. *Cité page 29*
 - [49] B. V. Derjaguin and L. Landau. The theory of stability of highly charged lyophobic sols and coalescence of highly charged particles in electrolyte solutions. Acta Physicochim. URSS, 14 :633–52, 1941. *Cité page 33*
 - [50] O. Desjardins, G. Blanquart, G. Balarac, and H Pitsch. High order conservative finite difference scheme for variable density low mach number turbulent flows. Journal of Computational Physics, 227(15) :7125–7159, 2008. *Cité page 30*

- [51] R. Di Felice. The voidage function for fluid-particle interaction systems. International Journal of Multiphase Flow, 20(1) :153–159, 1994. *3 citations pages 23, 39, et 131*
- [52] R. Di Felice. Hydrodynamics of liquid fluidisation. Chemical engineering science, 50(8) :1213–1245, 1995. *6 citations pages 23, 37, 38, 128, 129, et 130*
- [53] R. Di Felice, L.G. Gibilaro, and P.U. Foscolo. On the inversion of binary-solid liquid fluidised beds. Chemical engineering science, 43(4) :979–981, 1988. *Cité page 23*
- [54] R. Di Felice, L.G. Gibilaro, S.P. Waldram, and P. U. Foscolo. Mixing and segregation in binary-solid liquid fluidised beds. Chemical engineering science, 42(4) :639–652, 1987. *Cité page 23*
- [55] A. Di Renzo, F. Cello, and F. P. Di Maio. Simulation of the layer inversion phenomenon in binary liquid-fluidized beds by DEM-CFD with a drag law for polydisperse systems. Chemical Engineering Science, 66(13) :2945–2958, 2011. *Cité page 42*
- [56] A. Di Renzo and F. P. Di Maio. Homogeneous and bubbling fluidization regimes in DEM-CFD simulations : Hydrodynamic stability of gas and liquid fluidized beds. Chemical engineering science, 62(1-2) :116–130, 2007. *Cité page 30*
- [57] A. Džiugys and B. Peters. An approach to simulate the motion of spherical and non-spherical fuel particles in combustion chambers. Granular matter, 3(4) :231–266, 2001. *2 citations pages 34 et 35*
- [58] M. M. El-Kaissy and G. M. Homsy. A theoretical study of pressure drop and transport in packed beds at intermediate Reynolds numbers. Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals, 12(1) :82–90, 1973. *Cité page 129*
- [59] S. Elghobashi. Particle-laden turbulent flows : direct simulation and closure models. Applied scientific research, 48(3) :301–314, 1991. *2 citations pages xiii et 30*
- [60] S. E. Elghobashi and T. W. Abou-Arab. A two-equation turbulence model for two-phase flows. Physics of Fluids (1958-1988), 26(4) :931–938, 1983. *Cité page 29*
- [61] H. Enwald, E. Peirano, and A. E. Almstedt. Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization. International Journal of Multiphase Flow, 22 :21–66, 1996. *Cité page 29*
- [62] N. Epstein. Applications of liquid-solid fluidization. International Journal of Chemical Reactor Engineering, 1(1), 2003. *Cité page 23*
- [63] N. Epstein. Teetering. Powder Technology, 151(1) :2–14, 2005. *Cité page 23*
- [64] N. Epstein and B. P. LeClair. Liquid fluidization of binary particle mixtures-II. bed inversion. Chemical engineering science, 40(8) :1517–1526, 1985. *2 citations pages 23 et 42*
- [65] N. Epstein, B. P. LeClair, and B. B. Pruden. Liquid fluidization of binary particle mixtures-I : Overall bed expansion. Chemical Engineering Science, 36(11) :1803–1809, 1981. *Cité page 23*
- [66] N. Epstein and B. B. Pruden. Liquid fluidisation of binary particle mixtures-III stratification by size and related topics. Chemical engineering science, 54(3) :401–415, 1999. *Cité page 23*
- [67] S. Ergun. Fluid flow through packed columns. Chem. Eng. Prog., 48 :89–94, 1952. *5 citations pages 13, 15, 39, 78, et 128*
- [68] S. Ergun and A. A. Orning. Fluid flow through randomly packed columns and fluidized beds. Industrial & Engineering Chemistry, 41(6) :1179–1184, 1949. *2 citations pages 14 et 15*
- [69] R. Escudié, N. Epstein, J. R. Grace, and H. T. Bi. Layer inversion phenomenon in binary-solid liquid-fluidized beds : prediction of the inversion velocity. Chemical engineering science, 61(20) :6667–6690, 2006. *Cité page 23*

-
- [70] L. S. Fan and C. Zhu. Principles of gas-solid flows. Cambridge University Press, 2005.
5 citations pages xvii, 7, 14, 15, et 128
- [71] Rong Fan, Daniele L Marchisio, and Rodney O Fox. Application of the direct quadrature method of moments to polydisperse gas-solid fluidized beds. Powder technology, 139(1) :7–20, 2004.
Cité page 29
- [72] R. M. Fand, B. Y. K. Kim, A. C. C. Lam, R. T. Phan, E. Guyon, A Hansen, and S. Roux. Resistance to the flow of fluids through simple and complex porous media whose matrices are composed of randomly packed spheres. discussion. Journal of fluids engineering, 109(3) :268–274, 1987.
Cité page 39
- [73] Y. Q. Feng and A. B. Yu. Assessment of model formulations in the discrete particle simulation of gas-solid flow. Industrial & engineering chemistry research, 43(26) :8378–8390, 2004.
3 citations pages 36, 52, et 76
- [74] Y.Q. Feng and A. B. Yu. Comments on "discrete particle-continuum fluid modelling of gas-solid fluidised beds" by kafui *et al.* [chemical engineering science 57 (2002) 2395-2410]. Chemical Engineering Science, 59(3) :719–722, 2004.
Cité page 76
- [75] J. H. Ferziger and M. Perić. Computational methods for fluid dynamics, volume 3. Springer Berlin, 2002.
Cité page 51
- [76] P. Fevrier, O. Simonin, and K. D. Squires. Partitioning of particle velocities in gas-solid turbulent flows into a continuous field and a spatially uncorrelated random distribution : theoretical formalism and numerical study. Journal of Fluid Mechanics, 533 :1–46, 2005.
Cité page 29
- [77] P. U. Foscolo, L. G. Gibilaro, and S. P. Waldram. A unified model for particulate expansion of fluidised beds and flow in fixed porous media. Chemical Engineering Science, 38(8) :1251–1260, 1983.
Cité page 130
- [78] K. P. Galvin, S. J. Pratten, and S. K. Nicol. Dense medium separation using a teetered bed separator. Minerals Engineering, 12(9) :1059–1081, 1999.
Cité page 23
- [79] J. Garside and M. Al-Dibouni. Behaviour of liquid fluidized beds containing a wide size distribution of solids. Fluidization and its Applications, pages 53–62, 1973.
Cité page 23
- [80] D. Geldart. The effect of particle size and size distribution on the behaviour of gas-fluidised beds. Powder Technology, 6(4) :201–215, 1972.
Cité page 20
- [81] D. Geldart. Types of gas fluidization. Powder Technology, 7(5) :285–292, 1973.
2 citations pages xviii et 20
- [82] D. Geldart. Gas fluidization technology. John Wiley and Sons Inc., New York, NY, 1986.
Cité page 20
- [83] D. Geldart and R. R. Cranfield. The gas fluidisation of large particles. The Chemical Engineering Journal, 3 :211–231, 1972.
2 citations pages 20 et 22
- [84] L. G. Gibilaro, R. Di Felice, S. P. Waldram, and P. U. Foscolo. Generalized friction factor and drag coefficient correlations for fluid-particle interactions. Chemical engineering science, 40(10) :1817–1823, 1985.
Cité page 130
- [85] L. G. Gibilaro, R. Di Felice, S. P. Waldram, and P. U. Foscolo. A predictive model for the equilibrium composition and inversion of binary-solid liquid fluidized beds. Chemical engineering science, 41(2) :379–387, 1986.
2 citations pages 23 et 130
- [86] L. G. Gibilaro, I. Hossain, and S. P. Waldram. On the kennedy and brettton model for mixing and segregation in liquid fluidized beds. Chemical engineering science, 40(12) :2333–2338, 1985.
Cité page 23

- [87] D. Gidaspow. Multiphase flow and fluidization : continuum and kinetic theory descriptions. Academic Pr, 1994. *9 citations pages 19, 29, 30, 31, 39, 40, 41, 52, et 90*
- [88] R. Glowinski, T. W. Pan, T. I. Hesla, and D. D. Joseph. A distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows. International Journal of Multiphase Flow, 25(5) :755–794, 1999. *2 citations pages 28 et 122*
- [89] R. Glowinski, T. W. Pan, T. I. Hesla, D. D. Joseph, and J. Periaux. A fictitious domain approach to the direct numerical simulation of incompressible viscous flow past moving rigid bodies : application to particulate flow. Journal of Computational Physics, 169(2) :363–426, 2001. *Cité page 28*
- [90] R. Glowinski, T. W. Pan, and J. Periaux. Distributed Lagrange multiplier methods for incompressible viscous flow around moving rigid bodies. Computer methods in applied mechanics and engineering, 151(1) :181–194, 1998. *Cité page 28*
- [91] H. C. Hamaker. The london-van der waals attraction between spherical particles. physica, 4(10) :1058–1072, 1937. *Cité page 154*
- [92] J. Happel. Viscous flow in multiparticle systems : slow motion of fluids relative to beds of spherical particles. AIChE Journal, 4(2) :197–201, 1958. *2 citations pages xvii et 129*
- [93] F. H. Harlow, J. E. Welch, et al. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. Physics of fluids, 8(12) :2182, 1965. *Cité page 58*
- [94] P. G. W. Hawksley. The effect of concentration on the settling of suspensions and flow through porous media. Some aspects of fluid flow, pages 114–135, 1951. *Cité page 129*
- [95] Y. L. He, C. J Lim, and J. R. Grace. Spouted bed and spout-fluid bed behaviour in a column of diameter 0.91 m. The Canadian Journal of Chemical Engineering, 70(5) :848–857, 1992. *Cité page 11*
- [96] R. J. Hill, D. L. Koch, and A. J. C. Ladd. The first effects of fluid inertia on flows in ordered and random arrays of spheres. Journal of Fluid Mechanics, 448(2) :213–241, 2001. *3 citations pages 28, 39, et 132*
- [97] R. J. Hill, D. L. Koch, and A. J. C. Ladd. Moderate-Reynolds-number flows in ordered and random arrays of spheres. Journal of Fluid Mechanics, 448(2) :243–278, 2001. *3 citations pages 28, 36, et 132*
- [98] A. T. Jr. Hjelmfelt and L. F. Mockros. Motion of discrete particles in a turbulent fluid. Applied Scientific Research, 16(1) :149–161, 1966. *2 citations pages 43 et 46*
- [99] A. Hölzer and M. Sommerfeld. New simple correlation formula for the drag coefficient of non-spherical particles. Powder Technology, 184(3) :361–365, 2008. *Cité page 132*
- [100] A. Hölzer and M. Sommerfeld. Lattice Boltzmann simulations to determine drag, lift and torque acting on non-spherical particles. Computers & Fluids, 38(3) :572–589, 2009. *Cité page 132*
- [101] B. P. B. Hoomans. Comments on the paper "numerical simulation of the gas-solid flow in a fluidized bed by combining discrete particle method with computational fluid dynamics" by b. h. xu and a. b. yu. Chemical Engineering Science, 53(14) :2645–2646, 1998. *Cité page 31*
- [102] B. P. B. Hoomans, J. A. M. Kuipers, W. J. Briels, and W. P. M. Van Swaaij. Discrete particle simulation of bubble and slug formation in a two-dimensional gas-fluidised bed : a hard-sphere approach. Chemical Engineering Science, 51(1) :99–118, 1996. *4 citations pages 30, 31, 47, et 48*
- [103] B. P. B. Hoomans, J. A. M. Kuipers, and W. P. M. Van Swaaij. Granular dynamics simulation of segregation phenomena in bubbling gas-fluidised beds. Powder Technology, 109(1) :41–48, 2000. *Cité page 41*

-
- [104] Herbert Hoover, Lou Henry Hoover, et al. Georgius Agricola, De Re Metallica (translated from the first latin edition from 1556 by Hoover *et al.*). Dover Publications, 1950. *Cité page 23*
 - [105] H. H. Hu. Direct simulation of flows of solid-liquid mixtures. International Journal of Multiphase Flow, 22(2) :335–352, 1996. *Cité page 27*
 - [106] H. H. Hu, N. A. Patankar, and M. Y. Zhu. Direct numerical simulations of fluid-solid systems using the arbitrary lagrangian-eulerian technique. Journal of Computational Physics, 169(2) :427–462, 2001. *Cité page 27*
 - [107] L. Huilin and D. Gidaspow. Hydrodynamics of binary fluidization in a riser : CFD simulation using two granular temperatures. Chemical Engineering Science, 58(16) :3777–3792, 2003. *3 citations pages xiv, 41, et 81*
 - [108] R. J. Hunter. Foundations of colloid science, vol. 1, clarendon, 1987. *Cité page 154*
 - [109] J. N. Israelachvili. Intermolecular and surface forces : revised third edition. Academic press, 2011. *Cité page 154*
 - [110] J. T. Jenkins and M. W. Richman. Grad's 13-moment system for a dense gas of inelastic spheres. In The Breadth and Depth of Continuum Mechanics, pages 647–669. Springer, 1986. *Cité page 29*
 - [111] D. K. Kafui, S. Johnson, C. Thornton, and J. P. K. Seville. Parallelization of a lagrangian-eulerian DEM/CFD code for application to fluidised beds. Powder Technology, 2010. *Cité page 30*
 - [112] K. D. Kafui, C. Thornton, and M. J. Adams. Discrete particle-continuum fluid modelling of gas-solid fluidised beds. Chemical Engineering Science, 57 :2395–2410, 2002. *Cité page 76*
 - [113] K. D. Kafui, C. Thornton, and M. J. Adams. Reply to comments by Feng and Yu on "discrete particle-continuum fluid modelling of gas-solid fluidised beds" by Kafui *et al.* Chemical Engineering Science, 59(3) :723–725, 2004. *Cité page 76*
 - [114] T. Kawaguchi, M. Sakamoto, T. Tanaka, and Y. Tsuji. Quasi-three-dimensional numerical simulation of spouted beds in cylinder. Powder Technology, 109(1) :3–12, 2000. *Cité page 11*
 - [115] T. Kawaguchi, T. Tanaka, and Y. Tsuji. Numerical simulation of two-dimensional fluidized beds using the discrete element method (comparison between the two-and three-dimensional models). Powder Technology, 96(2) :129–138, 1998. *3 citations pages 11, 30, et 47*
 - [116] P. W. K. Kehoe and J. F. Davidson. Chemeca'70. In Inst. Chem. Eng. Symp. Ser, volume 33, page 97, 1970. *Cité page 21*
 - [117] S. C. Kennedy and R. H. Bretton. Axial dispersion of spheres fluidized with liquids. AIChE Journal, 12(1) :24–30, 1966. *Cité page 23*
 - [118] A. R. Khan and J. F. Richardson. Pressure gradient and friction factor for sedimentation and fluidisation of uniform spheres in liquids. Chemical Engineering Science, 45(1) :255–265, 1990. *Cité page 38*
 - [119] A. Kmiec. Some remarks on the Richardson-Zaki equation. The Chemical Engineering Journal, 11(3) :237–238, 1976. *2 citations pages 38 et 131*
 - [120] A. Kmiec. Equilibrium of forces in fluidized bed - experimental verification. The Chemical Engineering Journal, 23(2) :133–136, 1982. *2 citations pages 38 et 131*
 - [121] D. L. Koch and R. J. Hill. Inertial effects in suspension and porous-media flows. Annual Review of Fluid Mechanics, 33(1) :619–647, 2001. *Cité page 132*
 - [122] D. L. Koch and A. S. Sangani. Particle pressure and marginal stability limits for a homogeneous monodisperse gas-fluidized bed : kinetic theory and numerical simulations. Journal of Fluid Mechanics, 400(1) :229–263, 1999. *Cité page 132*

- [123] J. Kozeny. Soil permeability. Sitzungsber. Oesterr. Akad. Wiss. Wien. Math.-Naturwiss. Kl. Abt., 136 :271, 1927. *2 citations pages 14 et 39*
- [124] J. A. M. Kuipers, W. Prins, and W. P. M. Van Swaaij. Theoretical and experimental bubble formation at a single orifice in a two-dimensional gas-fluidized bed. Chemical engineering science, 46(11) :2881–2894, 1991. *Cité page 11*
- [125] D. Kunii and O. Levenspiel. Fluidization engineering, volume 2. Butterworth-Heinemann Boston, 1991. *4 citations pages 12, 16, 22, et 128*
- [126] A. J. C. Ladd. Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. part 1. theoretical foundation. Journal of Fluid Mechanics, 271 :285–309, 1994. *Cité page 28*
- [127] A. J. C. Ladd. Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. part 2. numerical results. Journal of Fluid Mechanics, 271 :311–339, 1994. *Cité page 28*
- [128] A. J. C. Ladd and R. Verberg. Lattice-Boltzmann simulations of particle-fluid suspensions. Journal of Statistical Physics, 104(5-6) :1191–1251, 2001. *Cité page 28*
- [129] H. Lamb. Hydrodynamics, 1945, 1999. *Cité page 45*
- [130] P. A. Langston, U. Tüzün, and D. M. Heyes. Continuous potential discrete particle simulations of stress and velocity fields in hoppers : transition from fluid to granular flow. Chemical Engineering Science, 49(8) :1259–1275, 1994. *Cité page 35*
- [131] B. P. LeClair and A. E. Hamielec. Viscous flow through particle assemblages at intermediate Reynolds numbers. steady-state solutions for flow through assemblages of spheres. Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals, 7(4) :542–549, 1968. *Cité page 129*
- [132] A. Lefebvre and B. Maury. Apparent viscosity of a mixture of a newtonian fluid and interacting particles. Comptes rendus mécanique, 333(12) :923–933, 2005. *Cité page 27*
- [133] R. J. LeVeque and Z. Li. The immersed interface method for elliptic equations with discontinuous coefficients and singular sources. SIAM Journal on Numerical Analysis, 31(4) :1019–1044, 1994. *Cité page 28*
- [134] R. J. LeVeque and Z. Li. Immersed interface methods for stokes flow with elastic boundaries or surface tension. SIAM Journal on Scientific Computing, 18(3) :709–735, 1997. *Cité page 28*
- [135] E. W. Lewis and E. W. Bowerman. Fluidization of solid particles in liquids. Chemical Engineering Progress, 48(12) :603–610, 1952. *Cité page 131*
- [136] J. Li and J. A. M. Kuipers. Gas-particle interactions in dense gas-fluidized beds. Chemical Engineering Science, 58(3) :711–718, 2003. *Cité page 128*
- [137] Z. Li and M. C. Lai. The immersed interface method for the Navier-Stokes equations with singular forces. Journal of Computational Physics, 171(2) :822–842, 2001. *Cité page 28*
- [138] J. M. Link, L. A. Cuypers, N. G. Deen, and J. A. M. Kuipers. Flow regimes in a spout-fluid bed : A combined experimental and simulation study. Chemical Engineering Science, 60(13) :3425–3442, 2005. *3 citations pages xiii, 12, et 51*
- [139] J. M. Link, C. Zeilstra, N. Deen, and J. A. M. Kuipers. Validation of a discrete particle model in a 2D spout-fluid bed using non-intrusive optical measuring techniques. The Canadian Journal of Chemical Engineering, 82(1) :30–36, 2004. *Cité page 12*
- [140] H. Littman, M. H. Morgan, P. V. Narayanan, S. J. Kim, J. Y. Day, and G. M. Lazarek. An axisymmetric model of flow in the annulus of a spouted bed of coarse particles. Model, experimental verification and residence time distribution. The Canadian Journal of Chemical Engineering, 63(2) :188–194, 1985. *Cité page 11*

-
- [141] E. Loth. Drag of non-spherical solid particles of regular and irregular shape. Powder Technology, 182(3) :342–353, 2008. *Cité page 132*
 - [142] C. K. K. Lun and H. S. Liu. Numerical simulation of dilute turbulent gas-solid flows in horizontal channels. International Journal of Multiphase Flow, 23(3) :575–605, 1997. *Cité page 45*
 - [143] G. Magnus. Ueber die abweichung der geschosse, und : Ueber eine auffallende erscheinung bei rotirenden körpern. Annalen der physik, 164(1) :1–29, 1853. *Cité page 44*
 - [144] R. S. Maier, D. M. Kroll, H. T. Davis, and R. S. Bernard. Simulation of flow in bidisperse sphere packings. Journal of colloid and interface science, 217(2) :341–347, 1999. *Cité page 39*
 - [145] D. L. Marchisio and R. O. Fox. Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments. Journal of Aerosol Science, 36(1) :43–73, 2005. *Cité page 29*
 - [146] D. L. Marchisio, J. T. Pikturna, R. O. Fox, R. D. Vigil, and A. A. Barresi. Quadrature method of moments for population-balance equations. AIChE Journal, 49(5) :1266–1276, 2003. *Cité page 29*
 - [147] G. I. Marchuk. Splitting and alternating direction methods. Handbook of numerical analysis, 1 :197–462, 1990. *Cité page 62*
 - [148] G. I. Marchuk and J. Ruzicka. Methods of numerical mathematics, volume 2. Springer-Verlag New York, 1975. *Cité page 62*
 - [149] A. Matsuura and T. Akehata. Distribution of solid particles and bed expansion in a liquid fluidized bed containing a binary mixture of particles. In 50th Annual Meeting of Soc. of Chem. Eng. of Japan, Yokohama, 1985. *Cité page 42*
 - [150] B. Maury. Direct simulations of 2D fluid-particle flows in bi-periodic domains. Journal of computational physics, 156(2) :325–351, 1999. *2 citations pages xiii et 27*
 - [151] J. B. McLaughlin. Inertial migration of a small sphere in linear shear flows. J. Fluid Mech, 224 :261–274, 1991. *Cité page 44*
 - [152] R. Mei. An approximate expression for the shear lift force on a spherical particle at finite Reynolds number. International Journal of Multiphase Flow, 18(1) :145–147, 1992. *Cité page 44*
 - [153] R. Mei, R. J. Adrian, and T. J. Hanratty. Particle dispersion in isotropic turbulence under stokes drag and basset force with gravitational settling. Journal of Fluid Mechanics, 225(1) :481–495, 1991. *Cité page 43*
 - [154] E. E. Michaelides and A. Roig. A reinterpretation of the Odar and Hamilton data on the unsteady equation of motion of particles. AIChE Journal, 57(11) :2997–3002, 2011. *Cité page 43*
 - [155] M. Moreau. Modélisation numérique directe et des grandes échelles des écoulements turbulents gaz-particules dans le formalisme eulérien mésoscopique. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2006. *Cité page 29*
 - [156] S. Morioka and T. Nakajima. Modeling of gas and solid particles 2-phase flow and application to fluidized-bed. Journal de Mécanique Théorique et Appliquée, 6(1) :77–88, 1987. *Cité page 29*
 - [157] H. Moritomi and T. *et al.* Iwase. A comprehensive interpretation of solid layer inversion in liquid fluidised beds. Chemical Engineering Science, 37(12) :1751–1757, 1982. *2 citations pages 23 et 42*
 - [158] H. Moritomi, T. Yamagishi, and T. Chiba. Prediction of complete mixing of liquid-fluidized binary solid particles. Chemical Engineering Science, 41(2) :297–305, 1986. *Cité page 23*
 - [159] A. Nagarkatti and A. Chatterjee. Pressure and flow characteristics of a gas phase spout-fluid bed and the minimum spout-fluid condition. The Canadian Journal of Chemical Engineering, 52(2) :185–195, 1974. *Cité page 11*

- [160] F. Odar. Verification of the proposed equation for calculation of the forces on a sphere accelerating in a viscous fluid. Journal of Fluid Mechanics, 25(03) :591–592, 1966. *Cité page 42*
- [161] F. Odar and W. S. Hamilton. Forces on a sphere accelerating in a viscous fluid. Journal of Fluid Mechanics, 18(02) :302–314, 1964. *Cité page 42*
- [162] B. Oesterle and T. B. Dinh. Experiments on the lift of a spinning sphere in a range of intermediate Reynolds numbers. Experiments in Fluids, 25(1) :16–22, 1998. *Cité page 44*
- [163] B. Oesterle, B. Dinh Tri, and J. L. Vial. Measurements of lift and torque on a rotating sphere at intermediate Reynolds numbers. Mechanics Research Communications, 18(2) :145–150, 1991. *Cité page 44*
- [164] Y. Okayama, A. Doi, T. Kawaguchi, T. Tanaka, and Y. Tsuji. Drag force model for fluidized bed of binary mixture of particles. In Proceedings of the 5th World Congress on Particle Technology, 2006. *Cité page 41*
- [165] C. J. Ong and E. G. Gilbert. The Gilbert-Johnson-Keerthi distance algorithm : A fast version for incremental motions. In Robotics and Automation, 1997. Proceedings., 1997 IEEE International Conference on, volume 2, pages 1183–1189. IEEE, 1997. *Cité page 35*
- [166] J. Ouyang and J. Li. Particle-motion-resolved discrete model for simulating gas-solid fluidization. Chemical Engineering Science, 54(13) :2077–2083, 1999. *Cité page 47*
- [167] N. A. Patankar. A formulation for fast computations of rigid particulate flows. Center for Turbulence Research Annual Research Briefs, 2001 :185–196, 2001. *Cité page 122*
- [168] N. A. Patankar and D. D. Joseph. Modeling and numerical simulation of particulate flows by the Eulerian-Lagrangian approach. International Journal of Multiphase Flow, 27(10) :1659–1684, 2001. *Cité page 30*
- [169] N. A. Patankar, P. Singh, D. D. Joseph, R. Glowinski, and T. W. Pan. A new formulation of the distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows. International Journal of Multiphase Flow, 26(9) :1509–1524, 2000. *2 citations pages 28 et 122*
- [170] V. S. Patwardhan and C. Tien. Sedimentation and liquid fluidization of solid particles of different sizes and densities. Chemical Engineering Science, 40(7) :1051–1060, 1985. *Cité page 41*
- [171] E. Peirano, V. Delloume, and B. Leckner. Two-or three-dimensional simulations of turbulent gas-solid flows applied to fluidization. Chemical Engineering Science, 56(16) :4787–4799, 2001. *Cité page 29*
- [172] P. Pepiot and O. Desjardins. Numerical analysis of the dynamics of two- and three-dimensional fluidized bed reactors using an Euler-Lagrange approach. Powder Technology, 220(0) :104–121, 2012. *2 citations pages 51 et 96*
- [173] J. H. Perry. Chemical engineers' handbook. Journal of Chemical Education, 27(9) :533, 1950. *Cité page 22*
- [174] C. S. Peskin. Flow patterns around heart valves : a numerical method. Journal of computational physics, 10(2) :252–271, 1972. *Cité page 28*
- [175] C. S. Peskin. Numerical analysis of blood flow in the heart. Journal of computational physics, 25(3) :220–252, 1977. *Cité page 28*
- [176] F. Pourahmadi and J. A. C. Humphrey. Modeling solid-fluid turbulent flows with application to predicting erosive wear. PhysicoChemical Hydrodynamics, 4 :191–219, 1983. *Cité page 29*
- [177] J. W. Pritchett, T. R. Blake, and S. K. Garg. A numerical model of gas fluidized beds. In AIChE Symp. Ser., volume 74, page 134, 1978. *Cité page 11*

-
- [178] A. Prosperetti and H. N. Oguz. Physalis : A new $O(N)$ method for the numerical simulation of disperse systems : Potential flow of spheres. Journal of Computational Physics, 167(1) :196–216, 2001. *Cité page 28*
 - [179] B. B. Pruden and N. Epstein. Stratification by size in particulate fluidization and in hindered settling. Chemical Engineering Science, 19(9) :696–700, 1964. *Cité page 23*
 - [180] M. Rahmani and A. Wachs. Free falling and rising of spherical and angular particles. In Workshop on Numerical Modelling of Grains/Fluid Flows, page 25, 2013. *Cité page 126*
 - [181] C. C. Reed and J. L. Anderson. Hindered settling of a suspension at low Reynolds number. AIChE Journal, 26(5) :816–827, 1980. *2 citations pages xvii et 129*
 - [182] M. W. Reeks and S. McKee. The dispersive effects of basset history forces on particle motion in a turbulent flow. Physics of Fluids, 27(7) :1573–1582, 1984. *Cité page 43*
 - [183] O. Reynolds, A. W. Brightmore, and W. H. Moorby. Papers on Mechanical and Physical Subjects : 1881-1900, volume 2. The University Press, 1901. *Cité page 14*
 - [184] J. F. Richardson and R. A. Meikle. Sedimentation and fluidization - Part IV : drag force on individual particles in an assemblage. Trans. Inst. Chem. Eng., 39 :357–362, 1961. *Cité page 131*
 - [185] J. F. Richardson and W. N. Zaki. The sedimentation of a suspension of uniform spheres under conditions of viscous flow. Chemical Engineering Science, 3(2) :65–73, 1954. *Cité page 131*
 - [186] JF Richardson and MA da S Jerónimo. Velocity-voidage relations for sedimentation and fluidisation. Chemical Engineering Science, 34(12) :1419–1422, 1979. *2 citations pages 38 et 131*
 - [187] G. H. Ristow. Dynamics of granular materials in a rotating drum. EPL (Europhysics Letters), 34(4) :263, 1996. *Cité page 35*
 - [188] C. D. Robinson. Some factors influencing sedimentation. Industrial & Engineering Chemistry, 18(8) :869–871, 1926. *Cité page 129*
 - [189] P. N. Rowe and G. A. Henwood. Drag forces in a hydraulic model of a fluidised bed. UKAEA, 1960. *Cité page 131*
 - [190] S. I. Rubinow and J. B. Keller. The transverse force on a spinning sphere moving in a viscous fluid. J. Fluid Mech., 11(3) :447–459, 1961. *2 citations pages 44 et 45*
 - [191] P. G. T. Saffman. The lift on a small sphere in a slow shear flow. Journal of Fluid Mechanics, 22(02) :385–400, 1965. *Cité page 43*
 - [192] P. G. T. Saffman. Corrigendum to "the lift on a small sphere in a slow shear flow". Journal of Fluid Mechanics, 31 :624, 1968. *Cité page 43*
 - [193] O. Sawatzki. Das strömungsfeld um eine rotierende kugel. Acta Mechanica, 9(3-4) :159–214, 1970. *Cité page 45*
 - [194] S. C. Saxena and G. J. Vogel. The measurement of incipient fluidization velocities in a bed of coarse dolomite at temperature and pressure. Trans. Inst. Chem. Eng., 55(3) :184–189, 1977. *Cité page 22*
 - [195] A. E. Scheidegger. Statistical hydrodynamics in porous media. Journal of Applied Physics, 25(8) :994–1001, 1954. *Cité page 13*
 - [196] A. E. Scheidegger. Physics of flow through porous media. In Physics of flow through porous media. University of Toronto, 1963. *2 citations pages 13 et 14*
 - [197] L. Schiller and A. Naumann. A drag coefficient correlation. Vdi Zeitung, 77 :318–320, 1935. *Cité page 38*

- [198] N. Sharma and N. A. Patankar. A fast computation technique for the direct numerical simulation of rigid particulate flows. Journal of Computational Physics, 205(2) :439–457, 2005. *Cité page 122*
- [199] O. Simonin. Modélisation numérique des écoulements turbulents diphasiques à inclusions dispersées. École de Printemps de Mécanique des Fluides numériques, 1991. *Cité page 29*
- [200] O. Simonin. Second-moment prediction of dispersed phase turbulence in particle-laden flows. In 8th Symposium on Turbulent Shear Flows, Volume 1, volume 1, page 74, 1991. *Cité page 29*
- [201] O. Simonin, E. Deutsch, and M. Boivin. Large eddy simulation and second-moment closure model of particle fluctuating motion in two-phase turbulent shear flows. In Turbulent Shear Flows 9, pages 85–115. Springer, 1995. *Cité page 29*
- [202] O. Simonin, E. Deutsch, and J. P. Minier. Eulerian prediction of the fluid/particle correlated motion in turbulent two-phase flows. Springer, 1993. *Cité page 29*
- [203] H. H. Steinour. Rate of sedimentation. nonflocculated suspensions of uniform spheres. Industrial & Engineering Chemistry, 36(7) :618–624, 1944. *Cité page 129*
- [204] G. G. Stokes. On the effect of the internal friction of fluids on the motion of pendulums. Pitt Press, 1851. *2 citations pages 36 et 128*
- [205] G. Strang. On the construction and comparison of difference schemes. SIAM Journal on Numerical Analysis, 5(3) :506–517, 1968. *Cité page 64*
- [206] S. Sundaram and L. R. Collins. Numerical considerations in simulating a turbulent suspension of finite-volume particles. Journal of Computational Physics, 124(2) :337–350, 1996. *Cité page 35*
- [207] S. Takagi, H. N. Oguz, Z. Zhang, and A. Prosperetti. PHYSALIS : a new method for particle simulation : Part II : two-dimensional navier-stokes flow around cylinders. Journal of Computational Physics, 187(2) :371–390, 2003. *Cité page 28*
- [208] P. A. Thompson and G. S. Grest. Granular flow : friction and the dilatancy transition. Physical review letters, 67(13) :1751, 1991. *Cité page 35*
- [209] T. Tsuji, A. Ito, and T. Tanaka. Multi-scale structure of clustering particles. Powder Technology, 179(3) :115–125, 2008. *Cité page 48*
- [210] T. Tsuji, K. Yabumoto, and T. Tanaka. Spontaneous structures in three-dimensional bubbling gas-fluidized bed by parallel DEM-CFD coupling simulation. Powder Technology, 184(2) :132–140, 2008. *Cité page 48*
- [211] Y. Tsuji, T. Kawaguchi, and T. Tanaka. Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed. Powder technology, 77(1) :79–87, 1993. *4 citations pages 11, 30, 47, et 48*
- [212] Y. Tsuji, Y. Morikawa, and O. Mizuno. Experimental measurement of the magnus force on a rotating sphere at low Reynolds numbers. Journal of fluids engineering, 107(4) :484–488, 1985. *Cité page 45*
- [213] Y. Tsuji, T. Tanaka, and T. Ishida. Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe. Powder Technology, 71(3) :239–250, 1992. *Cité page 11*
- [214] R. Turton and O. Levenspiel. A short note on the drag correlation for spheres. Powder Technology, 47(1) :83–86, 1986. *2 citations pages 38 et 39*
- [215] M. Uhlmann. An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows. Journal of Computational Physics, 209(2) :448–476, 2005. *Cité page 28*
- [216] M. Uhlmann. An improved fluid-solid coupling method for DNS of particulate flow on a fixed mesh. In Proc. 11th Workshop Two-Phase Flow Predictions, Merseburg, Germany, 2005. *Cité page 28*

-
- [217] M. Uhlmann. Experience with DNS of particulate flow using a variant of the immersed boundary method. In Proc. ECCOMAS CFD, 2006. *Cité page 28*
 - [218] M. A. Van Der Hoef, R. Beetstra, and J. A. M. Kuipers. Lattice-Boltzmann simulations of low-Reynolds-number flow past mono- and bi-disperse arrays of spheres : results for the permeability and drag force. J. Fluid Mech, 528 :233–254, 2005. *4 citations pages 39, 41, 42, et 132*
 - [219] E. J. W. Verwey, J. T. G. Overbeek, and K. Van Nes. Theory of the stability of lyophobic colloids : the interaction of sol particles having an electric double layer. Elsevier New York, 1948. *Cité page 33*
 - [220] S. Vincent, J. C. Brändle de Motta, A. Sarthou, J-L. Estivalezes, O. Simonin, and E. Climent. A lagrangian vof tensorial penalty method for the dns of resolved particle-laden flows. Journal of Computational Physics, 256 :582–614, 2014. *Cité page 28*
 - [221] S. Vincent, T. N. Randrianarivelo, G. Pianet, and J-P. Caltagirone. Local penalty methods for flows interacting with moving solids at high Reynolds numbers. Computers & fluids, 36(5) :902–913, 2007. *Cité page 28*
 - [222] A. Wachs. A DEM-DLM/FD method for direct numerical simulation of particulate flows : Sedimentation of polygonal isometric particles in a newtonian fluid with collisions. Computers & Fluids, 38(8) :1608–1628, 2009. *4 citations pages 28, 58, 122, et 126*
 - [223] A. Wachs. PeliGRIFF, a parallel DEM-DLM/FD direct numerical simulation tool for 3D particulate flows. Journal of Engineering Mathematics, 71(1) :131–155, 2011. *4 citations pages 28, 58, 122, et 126*
 - [224] A. Wachs, L. Girolami, G. Vinay, and G. Ferrer. Grains3D, a flexible DEM approach for particles of arbitrary convex shape-Part I : Numerical model and validations. Powder Technology, 2012. *6 citations pages 33, 34, 58, 71, 110, et 111*
 - [225] C. Wen and Y. H. Yu. Mechanics of fluidization. Chem. Eng. Prog. Symp. Ser., 62(62) :100, 1966. *4 citations pages 18, 38, 128, et 131*
 - [226] F. M. White. Viscous fluid flow. McGraw - Hill, New York, page 123, 1974. *Cité page 38*
 - [227] B. H. Xu and A. B. Yu. Numerical simulation of the gas-solid flow in a fluidized bed by combining discrete particle method with computational fluid dynamics. Chemical Engineering Science, 52(16) :2785–2809, 1997. *5 citations pages 11, 30, 31, 47, et 53*
 - [228] B. H. Xu and A. B. Yu. Authors reply to the comments of BPB Hoomans, JAM Kuipers, WJ Briels, and WPM van Swaaij. Chemical Engineering Science, 53(14) :2646–2647, 1998. *Cité page 31*
 - [229] S. Xu and Z. J. Wang. An immersed interface method for simulating the interaction of a fluid with moving boundaries. Journal of Computational Physics, 216(2) :454–493, 2006. *Cité page 28*
 - [230] W. C. Yang. Handbook of fluidization and fluid-particle systems. CRC Press, 2003. *Cité page 23*
 - [231] W. C. Yang. Modification and re-interpretation of Geldart’s classification of powders. Powder Technology, 171(2) :69–74, 2007. *Cité page 20*
 - [232] A. Yokogawa. Velocity profile in the spout. Bulletin of the JSME., page 885, 1958. *Cité page 11*
 - [233] A. Yokogawa, E. Ogino, and N. Yoshii. Fluid velocity profile in the spout of the spouted bed. Trans. Japan Soc. Mech. Eng., 37 :2135, 1971. *Cité page 11*
 - [234] Z. Yu. A DLM/FD method for fluid/flexible-body interactions. Journal of computational physics, 207(1) :1–27, 2005. *Cité page 28*

- [235] Z. Yu, N. Phan-Thien, and R. I. Tanner. Dynamic simulation of sphere motion in a vertical tube. Journal of Fluid Mechanics, 518 :61–93, 2004. *Cité page 123*
- [236] Z. Yu, X. Shao, and A. Wachs. A fictitious domain method for particulate flows with heat transfer. Journal of Computational Physics, 217(2) :424–452, 2006. *Cité page 58*
- [237] Z. Yu and A. Wachs. A fictitious domain method for dynamic simulation of particle sedimentation in Bingham fluids. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 145(2-3) :78–91, 2007. *Cité page 58*
- [238] Z. Yu, A. Wachs, and Y. Peysson. Numerical simulation of particle sedimentation in shear-thinning fluids with a fictitious domain method. Journal of non-newtonian fluid mechanics, 136(2) :126–139, 2006. *Cité page 123*
- [239] L. I. Zaichik. Models of turbulent momentum and heat transfer in a dispersed phase based on equations for the second and third moments of particle velocity and temperature pulsations. Journal of engineering physics and thermophysics, 63(4) :976–984, 1992. *Cité page 29*
- [240] M. Zastawny, G. Mallouppas, F. Zhao, and B. Van Wachem. Derivation of drag and lift force and torque coefficients for non-spherical particles in flows. International Journal of Multiphase Flow, 39 :227–239, 2012. *Cité page 132*
- [241] D. Z. Zhang and A. Prosperetti. Averaged equations for inviscid disperse two-phase flow. Journal of Fluid Mechanics, 267 :185–220, 1994. *Cité page 51*
- [242] D. Z. Zhang and A. Prosperetti. Ensemble phase-averaged equations for bubbly flows. Physics of Fluids (1994-present), 6(9) :2956–2970, 1994. *Cité page 51*
- [243] D. Z. Zhang and A. Prosperetti. Momentum and energy equations for disperse two-phase flows and their closure for dilute suspensions. International Journal of Multiphase Flow, 23(3) :425–453, 1997. *Cité page 51*
- [244] Z. Zhang and A. Prosperetti. A method for particle simulation. Journal of applied mechanics, 70(1) :64–74, 2003. *Cité page 28*
- [245] H. P. Zhu, Z. Y. Zhou, R. Y. Yang, and A. B. Yu. Discrete particle simulation of particulate systems : Theoretical developments. Chemical Engineering Science, 62(13) :3378–3396, 2007. *Cité page 43*
- [246] A. A. Zick and G. M. Homsy. Stokes flow through periodic arrays of spheres. Journal of fluid mechanics, 115 :13–26, 1982. *3 citations pages 125, 127, et 128*
- [247] N. Zuber. On the dispersed two-phase flow in the laminar flow regime. Chemical Engineering Science, 19(11) :897–917, 1964. *Cité page 129*