

Table des matières

Résumé	iii
Abstract	v
Remerciements	vii
Nomenclature	xiii
Introduction	xvii
1 Modélisation Physique des Écoulements Turbulents Gaz-Particules	1
1.1 Définitions préliminaires	3
1.1.1 Moyennes de phase	3
1.1.2 Décompositions de Reynolds des variables	4
1.2 Phase fluide	4
1.2.1 Phénoménologie	4
1.2.2 Hypothèses de Kolmogorov sur la turbulence	4
1.2.3 Équations RANS décrivant le comportement de la phase fluide	5
1.2.4 Échelles de longueur	8
1.2.5 Échelles de vitesse	8
1.2.6 Échelles de temps	8
1.2.7 Nombres de Reynolds de l'écoulement fluide	11
1.3 Réaction d'une particule à la sollicitation du fluide	11
1.3.1 Bilan des forces s'exerçant sur une particule isolée	11
1.3.2 Quelles sont les forces prépondérantes ?	13
1.3.3 Nombre de Reynolds particulaire	13
1.3.4 Modélisation du coefficient de traînée	14
1.3.5 Vitesse du fluide et vitesse du "fluide vu"	14
1.3.6 Vitesse de dérive	16
1.3.7 Croisement de trajectoires	16
1.3.8 Concentration préférentielle	17
1.3.9 Échelles de temps des interactions	17
1.3.10 Nombres de Stokes	20
1.4 Mouvement d'ensemble de la phase dispersée	20
1.4.1 Vitesse moyenne des particules	20
1.4.2 Mouvement d'agitation des particules	21
1.4.3 Équilibre de Tchen-Hinze	21
1.4.4 Échelles internes à la phase dispersée	22

1.4.5	Nombre de Knudsen particulaire	24
1.4.6	Two-way coupling ?	24
1.4.7	Modélisation des interactions particule-particule	25
1.5	Influence des parois	28
1.5.1	Couche limite monophasique	28
1.5.2	Influence des parois sur les particules	29
2	Modélisation Statistique et Approche lagrangienne Stochastique	33
2.1	Approche statistique des écoulements gaz-particule	36
2.1.1	Motivations	36
2.1.2	Choix de la description contractée	37
2.1.3	Description en terme de pdf de particules	37
2.1.4	Description en terme de pdf jointe fluide-particule	38
2.2	Équation d'évolution du système	39
2.3	Transport des particules	40
2.4	Modélisation lagrangienne du fluide vu	41
2.4.1	Modèles "Eddy lifetime"	42
2.4.2	Équation de Langevin	43
2.4.3	Équation de Kolmogorov rétrograde associée	47
2.4.4	Détermination des matrices de l'équation de Langevin dans le cas monophasique	47
2.4.5	Passage aux écoulements gaz-particules	52
2.5	Opérateur de collision	53
2.5.1	Opérateur de collision	53
2.5.2	Fermetures de l'opérateur de collision	54
2.5.3	Temps caractéristique de collision	57
2.6	Equation finale d'évolution de la pdf jointe à une particule	60
2.7	Méthodes de résolution	60
2.8	Approche lagrangienne Stochastique	61
2.8.1	Principe de "dévissage" des opérateurs	61
2.8.2	Résolution du transport	61
2.8.3	Résolution stochastique des collisions	62
2.8.4	Conditions aux limites de paroi	66
2.8.5	Considérations numériques	67
3	Approche aux Moments	73
3.1	Mise en place du problème	75
3.1.1	Résolution aux moments de l'équation sur la pdf jointe	75
3.1.2	Moments représentatifs de l'écoulement	75
3.1.3	Équation générique de transport d'une variable eulérienne	77
3.2	Équations exactes de transport des moments particulaires	77
3.2.1	Bilan de densité de particules	77
3.2.2	Bilan de quantité de mouvement	77
3.2.3	Equation d'évolution des contraintes particulières	78
3.2.4	Modèles d'agitation	79
3.2.5	Hypothèses de fermeture supplémentaire du modèle eulérien	79
3.2.6	Equation de transport de la vitesse de dérive	84
3.2.7	Equation de transport des corrélations fluide-particules	85

3.3	Cas de l'écoulement canal plan infini	86
3.3.1	Notations	86
3.3.2	Equations résolues par l'approche eulérienne en canal plan	87
3.3.3	Conditions aux limites	87
3.4	Considérations numériques	88
3.4.1	Discrétisation temporelle	88
3.4.2	Discrétisation spatiale	91
3.5	Limites de validité d'un modèle eulérien	91
4	Méthode Hybride Eulérienne-Lagrangienne	93
4.1	Stratégies de couplage proposées dans la littérature	96
4.1.1	Décomposition de domaines	96
4.1.2	Méthode de couplage avec recouvrement total	97
4.1.3	Méthode de couplage avec recouvrement partiel	97
4.1.4	Méthode de couplage sans recouvrement	99
4.1.5	Extension spatiale des sous-domaines	99
4.2	Principes de la méthode hybride eulérienne lagrangienne	100
4.2.1	Notations	100
4.2.2	Généralités	101
4.2.3	Cas des situations à transport diffusif négligeable	102
4.2.4	Extension aux situations inhomogènes	104
4.3	Mise en œuvre numérique du couplage pour l'approche lagrangienne	105
4.3.1	Cellules frontières ou injection dans un plan ?	105
4.3.2	Demi-flux incidents au domaine lagrangien en situation inhomogène	107
4.3.3	Pdf d'injection présumée en situation inhomogène	108
4.3.4	Flux de particules au travers de la surface de couplage	108
4.3.5	Simulation de la pdf incidente par une méthode de réjection	109
4.4	Mise en œuvre numérique du couplage pour l'approche eulérienne	110
4.4.1	Conditions de type flux	110
4.4.2	Conditions de Dirichlet	111
4.5	Demi-flux incidents associés à la pdf de Richman	112
4.5.1	Définition des demi-flux entrants	112
4.5.2	Expression de la pdf présumée à partir des moments Eulériens	112
4.5.3	Forme générique des demi-flux	113
4.5.4	Expression théorique des demi-flux	113
4.5.5	Cas général	116
4.5.6	Cas particuliers de l'écoulement simplement cisailé et de canal plan	120
5	Ecoulements turbulents homogènes simplement cisailés	121
5.1	Description de l'écoulement test	123
5.1.1	Ecoulement test	123
5.1.2	Cas simulés	124
5.1.3	Temps caractéristiques	125
5.2	Consistance des modèles eulérien et lagrangien	125
5.2.1	Turbulence du fluide	125
5.2.2	Contraintes fluide-particule	130
5.2.3	Contraintes particulaires	132

5.2.4	Conclusions	134
5.2.5	Cas B	136
5.2.6	Prise en compte des collisions : cas Ac	136
5.3	Etude <i>a priori</i> des demi-flux	137
5.3.1	Expressions des demi-flux associés à la pdf de Richman	138
5.3.2	Comparaison des demi-flux de Richman lagrangiens au calcul lagrangien	140
5.3.3	Conclusion	142
5.4	Méthode hybride	142
5.4.1	Validation de la méthode d'injection	143
5.4.2	Couplage par demi-flux	146
5.4.3	Couplage par conditions de Dirichlet	151
5.4.4	Extension aux cas de Stokes différents et aux cas avec collisions	154
6	Ecoulement de canal plan	157
6.1	Description de l'écoulement test	159
6.1.1	Configuration géométrique	159
6.1.2	Ecoulement fluide	160
6.1.3	Caractéristiques de la phase particulaire	160
6.1.4	Temps caractéristiques	161
6.2	Consistance des deux approches	161
6.2.1	Résultats bruts des deux approches	161
6.2.2	Correction des termes de traînée	164
6.2.3	Correction des corrélations triples	166
6.2.4	Équations eulériennes décrivant le système	169
6.2.5	Résultats avec fermetures modifiées	170
6.3	Configuration spatiale et méthodologie de couplage	172
6.3.1	Configuration spatiale	173
6.3.2	Initialisation	174
6.3.3	Algorithme de couplage	174
6.3.4	Calculs des conditions aux limites	175
6.4	Résultats HELM avec correction par effet de Knudsen	177
6.4.1	Cas A2	177
6.4.2	Bilans de vitesse moyenne longitudinale	179
6.4.3	Cas B3	181
6.4.4	Discussion	183
6.5	Résultats HELM sans correction par effet de Knudsen	183
6.5.1	Cas A2	184
6.5.2	Cas B3	186
6.6	Influence du rapport de volume	187
Conclusion et perspectives	191	
Annexe : Modèles de pdf	195	
Bibliographie	199	

Nomenclature

La dimension des variables est présentée entre crochet : longueur (L), masse (M), temps (T). Les variables soulignées représentent des vecteurs. L'indice 'p' se rapporte à la phase particulaire et 'f' à la phase fluide.

Sigles

DNS	"Direct Numerical Simulation", Simulation Numérique Directe
DPS	"Discrete Particle Simulation", Simulation Déterministe des Particules
HELM	"Hybrid Eulerian-Lagrangian Method", Méthode Hybride Eulérienne-Lagrangienne
HELM-EKC	"HELM with Eulerian Knudsen Correction", HELM avec Correction de Knudsen
LES	"Large Eddy Simulation", Simulation des Grandes Structures
LIPM	"Lagrangian Isotropisation of Production Model"
NCLIPM	"Noise-Corrected LIPM", Modèle LIPM avec Correction du Bruit
NCSLM	"Noise-Corrected SLM", Modèle SLM avec Correction du Bruit
PDF	"Probability Density Function", Fonction de Densité de Probabilité
RANS	"Reynolds Averaged Navier-Stokes", Equations de Navier-Stokes moyennées
SLM	"Simplified Langevin Model", Modèle de Langevin Simplifié

Lettres latines

$\underline{\underline{A}}, \underline{\underline{G}}$	Matrice de dérive dans une équation de Langevin	$[s^{-1}]$
$\underline{\underline{B}}$	Matrice de dispersion dans une équation de Langevin	$[m.s^{-3/2}]$
C_0	Constante de Kolmogorov	$[1]$
$\mathcal{C}(\Psi)$	Taux de variation collisionnel de la variable $\langle \Psi \rangle$	$[[\Psi].m^{-3}.s^{-1}]$
C_D	Coefficient de traînée	$[1]$
C_m	Charge massique de l'écoulement	$[1]$
$\underline{\underline{D}}_f$	Tenseur de dispersion turbulente de l'écoulement fluide	$[m^{-2}.s^{-3}]$
$\underline{\underline{D}}_{fp}, \underline{\underline{D}}_p$	Dispersion par le mouvement d'agitation particulaire	$[m^{-2}.s^{-3}]$
d_p	Diamètre des particules	$[m]$
e_{pp}	Coefficient de restitution normal lors de collisions interparticulaires	$[1]$
e_{pw}	Coefficient de restitution normal lors d'un rebond sur une paroi	$[1]$
f_{fp}	Pdf jointe fluide-particule en un point	$[m^{-9}.s^9]$
f_{fpfp}	Pdf jointe fluide-particule en deux points	$[m^{-18}.s^{18}]$
f_p	Pdf de la phase particulaire en un point	$[m^{-6}.s^6]$
f_p^M	Pdf Maxwellienne	$[m^{-6}.s^6]$
f_p^G	Pdf Gaussienne ou de Richman	$[m^{-6}.s^6]$
f_{pp}	Pdf de la phase particulaire en deux points	$[m^{-12}.s^{12}]$

F_d	Force de traînée exercée sur une particule	$[m.kg.s^{-2}]$
$\mathcal{F}_\Gamma(\Psi)$	Flux de la variable Ψ à travers la surface Γ	$[[\Psi].m.s^{-1}]$
$\mathcal{F}_\Gamma^+(\Psi)$	Demi-flux sortant de la variable Ψ à travers la surface Γ	$[[\Psi].m.s^{-1}]$
$\mathcal{F}_\Gamma^-(\Psi)$	Demi-flux entrant ou incident de la variable Ψ à travers la surface Γ	$[[\Psi].m.s^{-1}]$
\underline{g}	Gravité	$[m.s^{-2}]$
k_f, q_f^2	Agitation turbulente du fluide	$m^2.s^{-2}$
Kn	Nombre de Knusen	[1]
$\underline{\underline{K}}_p^t$	Tenseur de diffusivité du mouvement d'agitation particulaire	$[m^2.s^{-1}]$
L_i	Dimension macoscopique de l'écoulement dans la direction i	[m]
m_p	Masse d'une particule	[kg]
\underline{n}	Normale à la face de couplage	[1]
n_p	Densité de particules	$[m^{-3}]$
P_f	Pression moyenne de l'écoulement fluide	$[kg.m^{-1}.s^{-2}]$
$\underline{\underline{P}}_f$	Tenseur de production d'agitation de l'écoulement fluide	$[m^{-2}.s^{-3}]$
$\underline{\underline{P}}_{fp}, \underline{\underline{P}}_p$	Production d'agitation par les gradients de vitesses moyennes	$[m^{-2}.s^{-3}]$
q_f^2	Energie d'agitation turbulente de l'écoulement fluide	$[m^{-2}.s^{-2}]$
$q_{f@p}^2$	Energie d'agitation du fluide vu	$[m^{-2}.s^{-2}]$
q_{fp}	Covariance fluide-particule	$[m^{-2}.s^{-2}]$
q_p^2	Energie d'agitation des particules	$[m^{-2}.s^{-2}]$
Re	Nombre de Reynolds de l'écoulement fluide	[1]
Re_p	Nombre de Reynolds particulaire	[1]
$\underline{\underline{R}}_{ff}$	Tenseur des contraintes de Reynolds de l'écoulement fluide	$[m^{-2}.s^{-2}]$
$\underline{\tilde{R}}_{ff}$	Tenseur des contraintes cinétiques du fluide vu	$[m^{-2}.s^{-2}]$
$\underline{\underline{R}}_{fp}$	Tenseur des corrélations fluide-particules	$[m^{-2}.s^{-2}]$
$\underline{\underline{R}}_{fp}$	Tenseur des corrélations fluide-particules	$[m^{-2}.s^{-2}]$
$\underline{\underline{\mathcal{R}}}_{fp}$	Partie symétrique du tenseur des contraintes cinétiques particulaires	$[m^{-2}.s^{-2}]$
$R_{pp,nn}$	Contrainte particulaire dans la direction normale à la face de couplage	$[m^{-2}.s^{-2}]$
$\underline{\underline{S}}$	Tenseur de corrélations triples	$[m^{-3}.s^{-3}]$
S_f	Gradient de la vitesse moyenne du fluide (chapitre 5)	$[s^{-1}]$
S_p	Gradient de la vitesse moyenne des particules (chapitre 5)	$[s^{-1}]$
St	Nombre de Stokes	[1]
T_f^e	Echelle temporelle intégrale eulérienne de l'écoulement fluide	[s]
$\underline{u}_{f@p}; \underline{c}_f$	Vitesse du fluide "vu" par une particule ; équivalent dans l'espace des phases	$[m.s^{-1}]$
\underline{U}_f	Vitesse moyenne de l'écoulement fluide	$[m.s^{-1}]$
$\underline{U}_{f@p}$	Vitesse moyenne du fluide vu par les particules	$[m.s^{-1}]$
$\underline{u}_p; \underline{c}_p$	Vitesse d'une particule ; équivalent dans l'espace des phases	$[m.s^{-1}]$
\underline{U}_p	Vitesse moyenne des particules	$[m.s^{-1}]$
\underline{u}_p''	Vitesse fluctuante de la particule	$[m.s^{-1}]$
\underline{u}_p^*	Vitesse post-collision d'une particule	$[m.s^{-1}]$
\underline{V}_d	Vitesse de dérive turbulente fluide-particule	$[m.s^{-1}]$
$\underline{x}_p; \underline{x}_p$	Position d'une particule ; équivalent dans l'espace des phases	[m]

Lettres grecques

α_φ	Fraction volumique de la phase φ	[1]
------------------	--	-----

Γ_{eul}	Frontière de couplage du domaine eulérien	
Γ_{lag}	Frontière de couplage du domaine lagrangien	
δ	Distribution de Dirac	
δ_{ij}	Symbol de Kronecker	
ε_f	Dissipation turbulente de l'écoulement fluide	$[m^2.s^{-3}]$
η	Rapport de volume des simulations hybrides	[1]
η_K	Echelle de longueur de Kolmogorov de l'écoulement fluide	[m]
κ	poids d'une particule numérique	[1]
λ_p	Pseudo libre parcours moyen des particules	[m]
μ_{pp}	Coefficient de frottement des collisions interparticulaires	[1]
μ_{pw}	Coefficient de frottement d'un rebond sur paroi	[1]
ν_f	Viscosité cinématique du fluide	$[m^2.s^{-1}]$
Π_{fp}, Π_p	Effet de la traînée sur les contraintes cinétiques	$[m^{-2}.s^{-3}]$
ρ_φ	Masse volumique de la phase φ	$[kg.m^{-3}]$
τ_f^L	Echelle temporelle intégrale lagrangienne de l'écoulement fluide (THI)	[s]
$\tau_{f@p}^t$	Echelle temporelle intégrale lagrangienne de l'écoulement fluide vu (THI)	[s]
τ_f^ε	Echelle temporelle de durée de vie des tourbillons dissipatifs	[s]
τ_{fp}^F	Echelle de temps caractéristique de traînée	[s]
τ_p	Temps de relaxation particulaire	[s]
τ_p^c	Temps caractéristique de collisions interparticulaires	[s]
τ_η	Échelle de temps de Kolmogorov de l'écoulement fluide	[s]
Υ_{fp}	Tenseur de dissipation des corrélations fluide-particules	$[m^{-2}.s^{-3}]$
$\underline{\phi}_f$	Tenseur des corrélations pression-déformations de l'écoulement fluide	$[m^2.s^{-3}]$
χ_φ	indicatrice de présence de la phase φ	[1]
Ω	Domaine global de calcul	
$\partial\Omega$	Frontière du domaine global de calcul	
Ω_{eul}	Domaine eulérien	
Ω_{lag}	Domaine lagrangien	

Autres symboles

D/Dt	Dérivée lagrangienne le long de la trajectoire d'une particule fluide
$\overline{D}/\overline{D}t$	Dérivée lagrangienne dans le champ de vitesse moyenne de l'écoulement fluide
d/dt	Dérivée lagrangienne le long de la trajectoire d'un particule (inertie)
$\overline{d}/\overline{d}t$	Dérivée lagrangienne dans le champ de vitesse moyenne des particules
$\langle \cdot \rangle$	Opérateur de moyenne sur l'ensemble des réalisation possibles de l'écoulement
$\langle \cdot \rangle_\varphi$	Opérateur de moyenne sur la phase φ
$\langle \cdot \rangle_\Gamma^-$	Opérateur de moyenne sur les particules entrantes au travers de la surface Γ
$\frac{\partial}{\partial t} _{\text{coll}}$	Opérateur de taux de variation sous l'effet des collisions
Ψ'	Fluctuation de Ψ par rapport à la moyenne sur la phase fluide $\langle \cdot \rangle_f$
Ψ''	Fluctuation de Ψ par rapport à sa moyenne sur la phase particulaire $\langle \cdot \rangle_p$
Ψ^*	Valeur de la variable Ψ après une collision
$\underline{a}.\underline{b}$	Produit scalaire
$\underline{a} \otimes \underline{b}$	produit tensoriel

Rapport-gratuit.com 
LE NUMERO 1 MONDIAL DU MÉMOIRES

Introduction

Contexte Général

La nature a de tout temps offert à nos yeux une diversité incommensurable de manifestations d'écoulements fluides. Comme rien n'y est jamais "pur", tout écoulement est par nature multiphasique. Lorsque l'intérêt est porté sur la phase fluide les "impuretés" sont généralement négligées et seul le fluide porteur est pris en considération. Il existe néanmoins de nombreux écoulements naturels où le comportement des "impuretés" devient une information importante. Les processus naturels de sédimentation (que ce soit à l'échelle humaine pour la modification d'un lit de rivière ou bien à l'échelle planétaire pour la captation de CO_2 par la sédimentation océanique) ou de dispersion (que ce soit de fumées dans l'atmosphère ou de plancton dans les océans) sont ainsi des exemples de phénomènes pour lesquels le comportement de la phase particulaire est d'importance au moins égale au comportement de la phase fluide. Le génie humain (ou industriel) a de plus engendré de nouvelles applications des écoulements multiphasiques qui sont aujourd'hui étudiées dans un but d'amélioration des rendements (par exemple concernant le transport/combustion d'hydrocarbures ou le génie chimique) et/ou de réduction de l'impact des procédés sur le milieu naturel (traitement des eaux, dispersion de polluants...).

Les échelles macroscopiques associées à ces écoulements varient donc sur plusieurs ordres de grandeurs, du centimètre de la chambre de combustion ou du tuyau extracteur de chaleur d'une centrale nucléaire aux centaines ou milliers de mètres de la formation des nuages ou du développement des avalanches. Les phénomènes physiques prépondérants dans certains écoulements multiphasiques (et *a fortiori* diphasiques) ne le sont donc pas nécessairement dans d'autres configurations. A cette multitude d'échelles macroscopiques viennent de plus se greffer les échelles propres à un écoulement diphasique. La transition vers la turbulence en ce qui concerne l'écoulement fluide entraîne ainsi l'apparition d'une cascade d'échelles qui s'étend sur plusieurs ordres de grandeurs. La réponse de la phase particulaire à cette sollicitation engendre elle aussi l'apparition de nouvelles échelles caractéristiques dans l'écoulement, tant et si bien qu'une superposition de plusieurs échelles caractéristiques est à l'origine du comportement de l'écoulement. Ces échelles évoluent de plus, dans les écoulements inhomogènes, en fonction de la zone de l'écoulement observée. Par exemple dans un canal turbulent l'écoulement évolue de très peu agité dans les zones proches des parois à très agité au centre du canal. Les échelles caractéristiques de l'écoulement peuvent donc elles-mêmes évoluer de manière significative à l'intérieur du même écoulement.

Les inhomogénéités des échelles caractéristiques posent des problèmes ardu斯 de modélisation de l'écoulement. La plupart des phénomènes physiques sont en effet modélisés très efficacement dans une gamme d'échelles caractéristiques mais ces modélisations peuvent s'avérer insuffisantes pour d'autres gammes d'échelles et donc d'autres zones de l'écoulement. Les modélisations (ou représentations) des phénomènes physiques sont en effet issues d'un compromis entre leur complexité et leur efficacité. L'évolution spatiale des échelles caractéristiques peut être telle dans les écoulements qu'un modèle adapté à une zone de l'écoulement peut échouer à rendre compte de la physique dans d'autres zones. L'évolution des caractéristiques de la turbulence dans un canal en est un bon exemple car les phénomènes physiques prépondérants au com-

portement de l'écoulement ne sont pas identiques aux parois ou au centre du canal.

La modélisation des écoulements à phase dispersée fait usuellement appel à deux principaux formalismes de modélisation. La phase fluide est pratiquement exclusivement traitée dans une approche continue, c'est-à-dire par une description macroscopique. Les descriptions microscopique (de type Boltzmann) ou méso-scopique (de type Pope) sont en effet écartées pour des raisons d'efficacité, les équations de Navier-Stokes (qui décrivent le comportement du fluide par une approche continue) présentant un accord remarquable avec les expériences. Les deux formalismes de description des écoulements diphasiques se distinguent donc par le traitement de la phase particulaire. Les approches Euler-Lagrange (ou lagrangiennes en omettant le Euler relatif à la description fluide) se proposent donc de décrire les particules au niveau discret (ou microscopique) tandis que les approches Euler-Euler (ou eulériennes) décrivent elles la phase particulaire de manière continue (ou macroscopique).

Approches lagrangiennes déterministes

Les approches lagrangiennes modélisent les interactions entre la phase particulaire et la phase fluide directement au niveau de la particule. Chaque particule est ainsi suivie le long de sa trajectoire par un bilan des forces s'exerçant sur elle. La modélisation intervient donc au niveau de la spécification des forces s'exerçant sur une particule plongée dans un écoulement fluide, et éventuellement des collisions possibles avec d'autres particules. Ces approches permettent donc d'obtenir l'information au niveau microscopique (on parle de niveau microscopique en référence à la théorie cinétique des gaz) puisque le vecteur d'état de chaque particule est connu. L'information macroscopique (comme la densité de particules, la vitesse moyenne ou l'agitation) est accessible par des processus simples de moyennes (temporelles ou spatiales) de l'état microscopique. Des paramètres plus fins tels que les corrélations spatiales en deux points sont aussi accessibles au prix de processus de moyenne plus élaborés. La mise en place de simulations lagrangiennes pose un problème théorique de modélisation des forces exercées sur les particules. Si une résolution exacte des équations de Navier-Stokes autour de chaque particule fournit théoriquement les forces exercées par le fluide sur chaque particule, ce type de simulation se heurte aux coûts démesurés à payer pour atteindre cette précision. Il est donc généralement fait dans l'obtention des forces agissant sur les particules l'hypothèse de point-masse. Cette hypothèse stipule que la particule est suffisamment petite pour considérer que les forces agissent au centre de la particule. On parle alors de simulation aux particules discrètes (ou DPS pour "Discrete Particle System"). Plusieurs forces peuvent alors être isolées (Maxey and Riley [1983]), l'expression de ces forces étant fonction de la vitesse du fluide vu par la particule. Cette vitesse est définie comme la vitesse du fluide à l'endroit de la particule si la particule n'était pas là (mais le reste du nuage bien présent). L'obtention de cette vitesse a fait l'objet de nombreuses études. La solution idéale est la résolution des équations de Navier-Stokes de manière directe sur un maillage suffisamment fin pour capturer toutes les échelles de la turbulence (on parle alors de Simulation Numérique Directe ou DNS pour "Direct Numerical Simulation"). La vitesse de fluide vu est alors simplement la projection à l'emplacement de la particule des vitesses calculées sur le maillage fluide. L'association DNS/DPS a souvent été qualifiée d'expérience numérique car elle représente la modélisation la plus précise pour laquelle des calculs sur des configurations relativement complexes peuvent être effectués (Squires and Eaton [1990, 1991], Elghobashi and Truesdell [1993], Sundaram and Collins [1997]). Ce type de technique, bien qu'aménée à se généraliser avec le développement impressionnant du calcul scientifique, est tout de même extrêmement coûteuse et se limite aujourd'hui (et pendant quelques années encore) à des écoulements peu turbulents. C'est pourquoi ce type de technique est majoritairement utilisé comme simulations de référence pour vérifier l'acuité de nouveaux modèles. Pour des écoulements plus turbulents il est nécessaire de restreindre le calcul à une partie du spectre turbulent. Les effets de la partie omise sur la partie calculée du spectre doivent alors être modélisés. Si seule une partie du spectre est omise (les plus petites échelles de longueur) on parle alors de LES (pour "Large Eddy Simulation") car seules les plus grosses structures sont calculées. Ce type de résolution peut s'avérer très efficace

si les particules présentes dans l'écoulement sont suffisamment inertielles pour ne pas être influencées par les petites échelles de la turbulence (les simulations LES/DPS peuvent être alors aussi considérées comme des expériences numériques). Pour des particules encore plus inertielles pour lesquelles la turbulence n'a que peu d'effet, le profil de vitesse moyenne peut être calculé par une approche de type RANS (pour "Reynolds Averaged Navier-Stokes") ou laminaire. Associée à une résolution DPS de la phase particulaire, cette résolution de l'écoulement peut aussi être considérée comme une expérience numérique pour des particules extrêmement inertielles. Une fois cette difficulté passée, la trajectographie des particules ne présente pas de problème particulier, hormis dans les cas où les collisions doivent être considérées. La résolution des collisions lors d'une DPS est très coûteuse car il est nécessaire à chaque pas de temps de classer les particules pour obtenir les paires de particules qui entrent en collision. Ces algorithmes de repérage proposent usuellement des coûts en $27N$, où N représente le nombre de particules réelles dans l'écoulement. La résolution des collisions pénalise donc sensiblement les codes de simulations DPS.

Méthodes à deux fluides

Les approches eulériennes traitent la phase dispersée dans le même esprit que pour la phase fluide, c'est-à-dire comme un milieu continu. La phase dispersée est représentée par un certain nombre de moments (densité, vitesse moyenne, contraintes cinétiques...) qui sont des champs eulériens et ont donc un sens en tout point de l'espace (contrairement à la description lagrangienne par un vecteur d'état uniquement valable pour chaque particule). Le comportement de la phase particulaire est décrit à l'aide de l'évolution de ses moments, évolution pilotée par des équations aux dérivées partielles écrites pour ces moments. Historiquement ces équations étaient obtenues par simple similitude avec les équations décrivant le fluide (Elghobashi and Abou-Arab [1983], Chen and Wood [1986]). Des termes de transfert étaient ajoutés pour prendre en compte les interactions entre les phases, mais les équations écrites possédaient de grandes analogies avec les équations RANS pour le fluide. C'est pourquoi ce type de modélisation a été appelé modèle à deux fluides. Une autre "école" d'obtention des équations eulériennes décrivant la phase particulaire a vu le jour avec l'application des concepts de la théorie cinétique des gaz (mais aussi de la modélisation statistique des écoulements monophasiques) à la modélisation de la phase particulaire.

Approches PDF

Une troisième voie de modélisation de la phase particulaire appelée approches PDF (pour "probability density function") fait appel à une description statistique du nuage de particules (Buyevitch [1971], Reeks [1980], Derevich and Zaichik [1988], Simonin [1996]). La description des interactions entre les deux phases est effectuée au niveau de la particule (en reprenant la modélisation des forces effectuée pour la DPS) mais les particules ne sont plus considérées dans leur mouvement individuel mais dans leur mouvement d'ensemble. On parle ici d'approche mésoscopique (entre le micro- et le macroscopique). Toutes les particules sont considérées comme indiscernables et décrites par une description dite contractée. Une fonction densité de probabilité (ou pdf), fonction des variables de la description contractée, représente l'information statistique de la phase dispersée. La modélisation des forces agissant sur les particules ainsi que des collisions permet alors d'obtenir une équation d'évolution fermée de cette pdf. Les dimensions des espaces dans lesquels est écrit cette équation ($d \sim 7 - 10$) n'ont permis que très récemment une résolution directe de cette équation (résolution Boltzmann sur réseau). D'autres méthodes, une fois l'équation d'évolution de la pdf écrite, permettent une résolution approchée de l'équation de la pdf. Les écoulements gaz-particules se différencient des écoulements monophasiques dans les possibilités de choix de la description contractée. Suivant le choix de cette description, certains paramètres statistiques ne peuvent plus être obtenus (comme les corrélations spatiales pour une pdf en un point) ou doivent être modélisé (par exemple si la vitesse du fluide vu est omise des variables contractées). Le choix de la pdf représentative de l'écoulement fait, deux principales approches de résolution approchée de l'équation de la pdf ont été développées.

Approches lagrangiennes stochastiques

Une première famille d'approche adapte les outils statistiques développés pour la résolution de l'équation de Boltzmann en théorie cinétique des gaz à la résolution de l'équation de la pdf par une discrétisation de cette dernière en "particules numériques". Ces représentants de l'ensemble des réalisations sont suivis le long de leurs trajectoires. L'analogie est donc forte avec les approches lagrangiennes décrites plus haut, mais pour des objets statistiques. C'est pourquoi ces approches sont dénommées lagrangiennes stochastiques (Gosman and Ioanides [1981], Sommerfeld and Zivkovic [1992]). Les approches lagrangiennes stochastiques héritent la plupart des avantages et inconvénients des approches lagrangiennes. Ainsi, même si le vecteur d'état microscopique n'est pas accessible, le caractère discret des particules numériques permet une très bonne prise en compte des interactions avec le fluide et tout particulièrement des collisions inter-particulaires et des rebonds sur les parois. Ces approches nécessitent assez peu d'hypothèses de modélisation puisque la résolution est effectuée directement au niveau de résolution de la pdf (elle partage donc les hypothèses émises pour la fermeture de l'équation de la pdf). Les approches lagrangiennes stochastiques visant l'efficacité, seules les composantes stationnaires sont généralement calculées (et tout le reste du spectre modélisé) par une résolution RANS. La projection du champ de vitesse calculé ne représente alors plus la vitesse instantanée du fluide à l'endroit de la particule. Il est donc nécessaire de reconstruire la partie manquante de la vitesse du fluide, par exemple par un processus de Langevin (Pope [1985, 1994a], Simonin et al. [1993]). Ces approches héritent des défauts des approches lagrangiennes car, si toutes les particules ne sont plus suivies le long de leur trajectoire mais seulement un certain nombre de "représentants", il est nécessaire pour des raisons statistiques de considérer l'évolution d'un nombre suffisant de particules numériques. Les calculs effectués à l'aide d'une approche lagrangienne stochastique sont donc des calculs coûteux pour lesquels la précision numérique des calculs n'est pas très bonne (fluctuations statistiques).

Approches eulériennes

Une deuxième famille d'approche établit les équations gouvernant les moments de la phase particulaire à partir de l'équation d'évolution de la pdf. Les moments étant des paramètres statistiques du nuage de particules, ils peuvent être obtenus par la moyenne de fonctions des variables contractées suivant la mesure qu'est la pdf (la pdf étant une densité de probabilité). Par intégration de l'équation de la pdf il est ainsi possible d'obtenir un système d'équations aux dérivées partielles décrivant le comportement des moments du système. Ce système est assez proche du système d'équations obtenues par le modèle à deux fluides. Les termes de transfert entre les deux phases sont maintenant obtenus par moyenne du transfert individuel des particules et non plus par des considérations au niveau macroscopique comme dans le cas du modèle à deux fluides. Ces équations sur des variables continues peuvent être traitées à l'aide de tous les outils numériques développés lors de la résolution des équations décrivant le comportement du fluide. La discrétisation des équations sur des maillages et l'utilisation de techniques type différences-finies ou volumes-finis permet ainsi de résoudre les écoulements les plus complexes avec un temps de calcul raisonnable et une précision très bonne. Le problème majeur dans l'utilisation de telles approches est la nécessité, pour fermer le système d'équations, d'effectuer de nombreuses hypothèses supplémentaires par rapport à la résolution lagrangienne stochastique de l'équation de la pdf. Ces hypothèses, basées sur l'existence d'équilibres caractéristiques de l'écoulement, se retrouvent être mises en défaut dans certaines zones de l'écoulement. La prédiction dans ces zones est alors fortement dégradée par rapport aux approches lagrangiennes stochastiques.

Méthodes hybrides

Le développement d'outils numériques efficaces de simulation des écoulements gaz-particules n'est donc pas chose aisée. Chaque approche présentant ses avantages et inconvénients, les outils numériques développés à partir de celles-ci se retrouvent donc à devoir effectuer un choix entre coût et précision de la simulation. Il n'existe actuellement pas d'outil numérique permettant d'obtenir une résolution à moindre coût de l'écoulement.

lement (de l'ordre du coût d'une résolution eulérienne) tout en conservant une prédition précise dans toutes les zones de l'écoulement (comme le font les approches lagrangiennes). La multitude d'échelles caractéristiques présentes dans un écoulement réel limite en effet le domaine d'application de chaque modèle. Les approches particulières sont ainsi très efficaces lorsque le nombre de particules est faible (c'est-à-dire pour des écoulements dilués) mais deviennent trop coûteuses lorsque ce nombre augmente. Les approches eulériennes au contraire trouvent toute leur justification dans la simulation d'écoulements chargés en particules, mais peinent à retranscrire la physique lorsque certaines parties de l'écoulement sont plus diluées ou plus hors-équilibre. Ce type de dualité entre les approches se retrouve dès qu'il existe un lien entre des approches micro- ou mésoscopiques et des approches continues. Tel lien peut se retrouver par exemple entre l'équation de Boltzmann et les équations d'Euler ou de Navier-Stokes en théorie cinétique (Schneider [1996], Le Tallec and Mallinger [1997], Schwartzentruber and Boyd [2006]). Lorsque l'écoulement devient très raréfié (par exemple lors de la rentrée atmosphérique de la navette spatiale) l'expérience a montré que les équations de Navier-Stokes n'étaient plus valides dans la zone proche du corps. Il est alors nécessaire de résoudre directement l'équation de Boltzmann. Loin du corps par contre une résolution de type Boltzmann serait beaucoup trop coûteuse au vu du nombre de particules numériques à considérer.

Une méthode élégante pour résoudre ce type de problème, présentant une évolution significative des échelles caractéristiques de l'écoulement, est l'utilisation de méthodes hybrides. Ces méthodes éludent le problème de l'extension des domaines de validité des différentes approches en utilisant plusieurs approches de modélisation de l'écoulement. L'ensemble des méthodes actuelles couvrent en effet une large bande de phénomènes physiques et permettent chacune de modéliser avantageusement certains régimes de l'écoulement. Une méthode hybride est donc une méthode qui fait un choix quant à l'approche à utiliser pour résoudre telle partie de l'écoulement, la problématique majeure devenant l'échange d'informations entre les différentes approches utilisées dans la résolution globale de l'écoulement. Ce type de méthode a déjà été utilisé de manière pertinente dans la résolution des écoulements de rentrée atmosphérique ou dans la résolution d'écoulements turbulent avec combustion. Dans le premier cas l'écoulement est séparé spatialement entre des zones où la résolution est effectuée par une approche particulaire et dans le reste du domaine par une approche continue. Dans le deuxième cas la séparation est effectuée entre partie dynamique et partie combustion de l'écoulement turbulent. La séparation de domaines entre les deux approches peut donc être de deux natures : séparation dans l'espace physique ou séparation dans l'espace des phases.

Les remarques précédentes sur l'utilisation de méthodes hybrides pour pallier aux inconvénients d'approches complémentaires sont pertinentes dans le cas des écoulements gaz-particules. Les approches particulières et eulériennes possèdent une complémentarité très similaire à celle existant entre l'équation de Boltzmann et les équations d'Euler ou de Navier-Stokes. Elles ont en effet été construites par les mêmes raisonnements que dans le cas monophasique. Cette constatation a amené le désir de développer des méthodes hybrides similaires pour les écoulements gaz-particules.

Une telle démarche de couplage entre deux approches de résolution d'un même problème présente trois problématiques majeures :

- le choix des deux approches de résolution à coupler. Le couplage se fait généralement entre deux approches aux niveaux de résolution différents mais se basant sur un même formalisme de description de l'écoulement. Les problèmes posés dans chacun des deux sous-domaines doivent être identiques pour que la méthode hybride soit consistante. Le couplage se fait donc entre deux approches de résolution de la même équation. C'est par exemple le cas du couplage Boltzmann/Navier-Stokes où les deux approches résolvent de manière approchée l'équation de Boltzmann chacune à sa façon (Le Tallec and Mallinger [1997]).
- la détermination de l'extension spatiale des sous-domaines. Cette détermination est donnée par la contrainte que l'écoulement, dans le domaine où l'écoulement est résolu par l'approche continue, doit

être proche des conditions d'équilibre nécessaires à la fermeture du système d'équations. La méthode hybride gagnant en efficacité lorsque les zones où l'écoulement est résolu par l'approche particulaire sont réduites, l'extension spatiale du domaine eulérien est une problématique importante dans le développement d'une méthode hybride (Tiwari [1998]).

- l'échange d'informations entre les deux approches. Le couplage est assuré par cet échange d'informations pendant lequel les résultats de chaque approche viennent influencer les résultats de l'autre. Cet échange d'informations doit être mis en place par la dérivation de conditions aux limites bien posées sur la frontière de chaque sous-domaine en fonction des résultats dans le sous-domaine adjacent.

Les premiers pas en direction de l'utilisation de telles méthodes sont abordés ici dans un cadre un peu simplifié nécessaire à la conception des outils permettant le développement d'une telle méthode hybride.

Cadre de l'étude

Les écoulements étudiés dans cette étude considèrent le comportement de particules solides identiques, inertes thermiquement, chimiquement et électriquement. Les caractéristiques de la phase particulaire, notamment en ce qui concerne la densité de particules, sont telles que l'action des particules sur le fluide porteur peut être négligée. On parle ainsi d'interactions à sens unique ("one-way coupling") puisque le mouvement de la phase fluide influence celui de la phase particulaire mais pas l'inverse. Pour ce type d'écoulements la simulation de l'écoulement fluide peut s'effectuer de manière indépendante et simultanée à la résolution de l'écoulement de la phase particulaire. Le fluide n'est donc plus une variable du problème (si on se place du point de vue des particules) et il suffit de spécifier les champs associés à l'écoulement (que ce soit le champ de vitesse d'une DNS ou bien les champs de vitesse moyenne et d'agitation d'une résolution RANS) sans se soucier de la phase particulaire. En ce qui concerne la phase particulaire, des hypothèses assez restrictives sont effectuées sur le type de particules considérées afin d'obtenir une expression allégée de la résultante des forces agissant sur une particule.

La phase particulaire est étudié dans le formalisme des approches PDF à l'aide d'une description et terme de pdf jointe fluide-particule en un point. L'équation d'évolution de la pdf représentative de l'écoulement peut alors être résolue par une approche lagrangienne stochastique ou une approche eulérienne, toutes deux basées sur la même description. La complémentarité et la consistance des deux approches est alors utilisée pour développer une méthode hybride eulérienne-lagrangienne pour les écoulements turbulents gaz-particules.

Plan de l'étude

Le premier chapitre présente une revue des phénomènes physiques apparaissant dans les écoulements gaz-solides pour des particules inertielles. La phase fluide est tout d'abord décrite dans ses aspects les plus pertinents dans le but d'une modélisation du comportement de la phase particulaire. Le diamètre des particules est considéré comme petit et la masse volumique beaucoup plus élevée que celle du fluide. Sous ces hypothèses l'action du fluide sur les particules se manifeste principalement par la force de traînée visqueuse. Associée à la gravité, la force de traînée représente le moteur principal de l'écoulement de la phase particulaire. Sous l'effet de la traînée les particules sont en effet dispersées par la turbulence ou tout simplement convectées par le mouvement moyen du fluide. Les modélisations au niveau particulaire des interactions des particules avec l'ensemble du nuage ou avec des obstacles sont aussi présentées.

Le chapitre 2 présente le formalisme probabiliste pour la modélisation de la phase particulaire. La phase particulaire est ainsi représentée à l'aide d'une fonction densité de probabilité ou pdf qui suit une équation de type Boltzmann. Deux fermetures au niveau mésoscopique sont nécessaires à la résolution de cette équation. La première fermeture est une modélisation de l'effet de la turbulence sur la phase particulaire. Il est en effet indispensable de reconstruire la vitesse du fluide vu par la particule pour prendre en compte la dispersion de particules par la turbulence. Les caractéristiques de l'écoulement fluide n'étant connues qu'au travers

certains paramètres statistiques (vitesse moyenne, agitation...), l'utilisation de techniques stochastiques est nécessaire à la reconstruction de la vitesse du fluide à l'endroit de la particule. Les processus de Langevin semblent être une possibilité intéressante de mimer l'effet de la turbulence sur le nuage de particules. Les corrélations spatiales ou temporelles de la turbulence sont ainsi modélisées à l'aide d'un tenseur de dérive tandis que le caractère aléatoire du mouvement turbulent est mimé par un processus stochastique dont les propriétés découlent des paramètres statistiques du mouvement turbulent. La deuxième fermeture essentielle d'une modélisation probabiliste de la phase particulaire concerne la prise en compte des collisions inter-particulaires. Une fois de plus les effets individuels ne sont pas modélisés car seul l'effet sur l'ensemble du nuage de particules est pertinent. L'effet des collisions est modélisé par l'action d'un opérateur (dit de collision) sur la pdf de l'écoulement. Plusieurs hypothèses peuvent être émises pour fermer cet opérateur, dont l'exemple le plus connu est l'hypothèse de chaos moléculaire de Boltzmann. La fin du chapitre est enfin consacrée aux méthodes numériques mises en œuvre pour la résolution particulaire de l'équation de la pdf, *i.e.* les approches lagrangiennes stochastiques.

Le chapitre 3 introduit la procédure de résolution eulérienne de l'équation de la pdf déterminée au chapitre précédent. Les équations génériques associées à la densité, vitesse moyenne et contraintes cinétiques particulaires sont présentées. Les hypothèses de fermeture du système sont détaillées afin de démontrer les régimes d'écoulements pour lesquels les fermetures eulériennes sont précises. La fermeture des termes de traînée fait ainsi apparaître l'influence de l'écoulement fluide sur la phase particulaire par l'intermédiaire de corrélations entre le mouvement fluide et le mouvement particulaire telles que la vitesse de dérive turbulente ou les corrélations fluide-particules. Les équations associées à ces grandeurs sont alors explicitées, puis fermées, pour obtenir le système d'équations eulériennes de l'écoulement gaz-particules.

Le chapitre 4 présente la méthodologie de couplage développée pour les écoulements gaz-particules. Les différentes stratégies de couplage associées à une décomposition du domaine spatial sont présentées et la méthodologie de couplage choisie est développée. Cette méthodologie est en partie basée sur la décomposition cinétique des flux de moments en demi-flux incidents et sortants des surfaces de couplage. Cette décomposition est utilisée afin de déduire des conditions aux limites bien posées pour l'approche lagrangienne stochastique. La condition à la limite est prise en compte dans le code lagrangien par une injection de particules numériques au niveau de la surface de couplage. Le couplage du lagrangien vers l'eulérien est quant à lui effectué par l'imposition de conditions de type Dirichlet ou de type flux à la face de couplage du domaine eulérien.

Le chapitre 5 présente la validation de la méthodologie développée au chapitre précédent dans le cas d'écoulements homogènes. Le type d'écoulements retenu est un écoulement turbulent homogène simplement cisailé. La turbulence de la phase fluide et le mouvement d'agitation particulaire sont ainsi homogènes et il est alors possible de caractériser l'écoulement à l'aide d'une pdf gaussienne de type Richman étendue aux écoulements gaz-particules. Une étude des demi-flux, de la procédure d'injection et du comportement de la méthodologie de couplage permettent la validation de la méthode hybride dans les cas d'écoulements homogènes.

Le chapitre 6 est une extension de la validation de la méthode hybride aux cas d'écoulements inhomogènes. L'inhomogénéité fait ainsi apparaître un déséquilibre dans la pdf de l'écoulement qui ne peut ainsi plus être caractérisée comme dans un écoulement homogène. Le cas étudié est un canal plan turbulent ascendant dans lequel des particules de gros diamètre sont transportées. L'inertie des particules permet de négliger l'effet de la turbulence sur le comportement de la phase dispersée, l'interaction entre le fluide et la phase particulaire se faisant uniquement par l'intermédiaire des termes de traînée de la vitesse moyenne des particules. La méthode hybride est appliquée pour différentes propriétés de la phase particulaire ce qui permet d'appréhender les réussites et les défauts de l'approche hybride eulérienne-lagrangienne développée au chapitre 4.

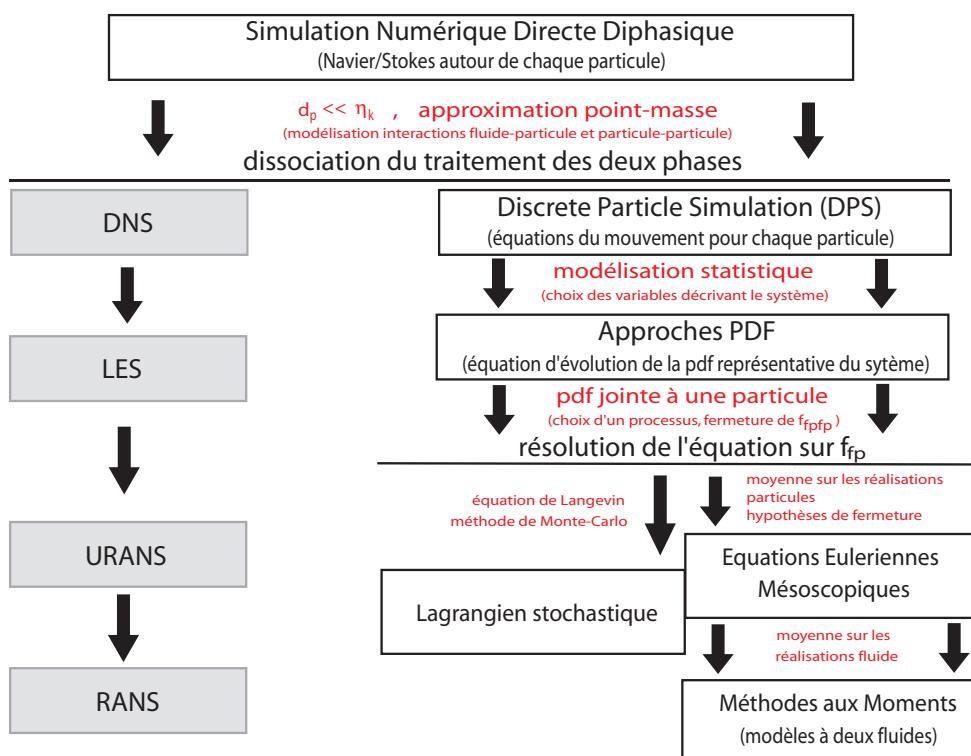


FIG. 1 – Hiérarchie des méthodes de résolutions numériques pour les écoulements turbulents gaz-solides.

Chapitre 1

Modélisation Physique des Écoulements Turbulents Gaz-Particules

Sommaire

1.1	Définitions préliminaires	3
1.1.1	Moyennes de phase	3
1.1.2	Décompositions de Reynolds des variables	4
1.2	Phase fluide	4
1.2.1	Phénoménologie	4
1.2.2	Hypothèses de Kolmogorov sur la turbulence	4
1.2.3	Équations RANS décrivant le comportement de la phase fluide	5
1.2.4	Échelles de longueur	8
1.2.5	Échelles de vitesse	8
1.2.6	Échelles de temps	8
1.2.7	Nombres de Reynolds de l'écoulement fluide	11
1.3	Réaction d'une particule à la sollicitation du fluide	11
1.3.1	Bilan des forces s'exerçant sur une particule isolée	11
1.3.2	Quelles sont les forces prépondérantes ?	13
1.3.3	Nombre de Reynolds particulaire	13
1.3.4	Modélisation du coefficient de traînée	14
1.3.5	Vitesse du fluide et vitesse du "fluide vu"	14
1.3.6	Vitesse de dérive	16
1.3.7	Croisement de trajectoires	16
1.3.8	Concentration préférentielle	17
1.3.9	Échelles de temps des interactions	17
1.3.10	Nombres de Stokes	20
1.4	Mouvement d'ensemble de la phase dispersée	20
1.4.1	Vitesse moyenne des particules	20
1.4.2	Mouvement d'agitation des particules	21
1.4.3	Équilibre de Tchen-Hinze	21
1.4.4	Échelles internes à la phase dispersée	22
1.4.5	Nombre de Knudsen particulaire	24
1.4.6	Two-way coupling ?	24
1.4.7	Modélisation des interactions particule-particule	25

1.5 Influence des parois	28
1.5.1 Couche limite monophasique	28
1.5.2 Influence des parois sur les particules	29

Les écoulements gaz-solide font partie de la famille des écoulements à phase dispersée. Cette classe d'écoulements présente la particularité de posséder une phase au caractère discret (les particules) "entourée" d'une phase continue (le gaz). La prédiction correcte de tels écoulements nécessite de modéliser la physique de chacune des phases mais aussi leurs interactions.

Les interactions fluide-particule sont à la source d'un couplage entre les deux phases qui représente une part importante de la physique de l'écoulement. Dans sa plus grande généralité, le fluide et les particules interagissent mutuellement (selon le principe d'action-réaction), raison pour laquelle on parle de "two-way coupling". Les propriétés des phases continues et dispersées étant souvent très éloignées, les interactions peuvent être prépondérantes dans le comportement de la phase dispersée tandis que la phase fluide fait preuve de trop d'inertie pour être influencée par celles-ci. Ces écoulements sont alors classés dans la catégorie "one-way coupling", pour lequel le fluide est considéré comme indépendant de la phase particulaire. Dans notre étude les écoulements appartiennent tous à cette catégorie.

La première famille de phénomènes intervenant dans ces écoulements est due à la nature de la sollicitation (*i.e.* l'écoulement fluide). La prise en compte de la turbulence du fluide amène à considérer des phénomènes tels que le caractère aléatoire du champ de sollicitation, ainsi que la diffusion et l'agitation qui en découlent. Il est donc indispensable d'avoir une représentation *a minima* des caractéristiques de l'écoulement fluide afin de "mimer" l'influence du fluide sur la phase dispersée. Cette représentation du fluide porteur se devra d'être fidèle à la physique, mais comme l'étude des propriétés de ces écoulements n'est pas le sujet d'étude, il est préférable de trouver les représentations les plus simples permettant de prendre en compte les phénomènes qui apparaissent. C'est pourquoi la phase fluide sera toujours décrite au travers de champs de grandeurs moyennes, autrement dit en représentation eulérienne. Hormis dans des cas d'extrêmes raréfactions ou de fluide non-newtonien, le modèle de Navier-Stokes représente alors la meilleure modélisation disponible de ce point de vue. Ce modèle fait tout de même preuve d'une telle complexité (aussi bien mathématique que de mise en application) que ne seront considérés que les champs eulériens issus de modèles dérivés moins coûteux du type LES ou RANS.

Une fois donné le champ des sollicitations, une autre étape dans la compréhension des écoulements gaz-solide consiste à déterminer comment réagit le nuage de particules plongées dans ce champ. Il faut pour cela connaître la réaction d'une particule isolée pour ensuite en extraire un comportement d'ensemble. Le comportement de nos particules (dont on rappelle qu'elles sont solides et inertes) est donné par l'ensemble des forces qui s'exercent sur celle-ci. La taille caractéristique de nos particules ($\sim 100\mu\text{m}$) ainsi que le rapport de densité élevé ($\rho_p/\rho_f > 100$) place les écoulements dans un régime dominé par la traînée (plus éventuellement la gravité). L'équilibre entre inertie et traînée est alors la source d'un grand nombre de phénomènes physiques (à la fois temporels et spatiaux). La turbulence du fluide est à l'origine, via la traînée, d'un mouvement d'agitation des particules qui se superpose au mouvement d'ensemble. Ce mouvement d'agitation engendre à son tour des vitesses relatives entre deux particules pouvant donner lieu à des collisions. Ces collisions viennent modifier le comportement de la phase particulaire, redistribuant (et/ou détruisant) l'énergie du mouvement d'agitation, et ce même pour des régimes peu collisionnels.

Finalement, pour caractériser complètement nos écoulements il est nécessaire de connaître les interactions de celui-ci avec son contenant. L'écoulement est en effet spatialement limité par des obstacles qui seront toujours des parois imperméables. Ceci impose des conditions aux limites pour l'écoulement, dont la nature dépend fortement des interactions considérées. Pour le cas de particules solides, le modèle le plus communément admis est le rebond avec frottement.

1.1 Définitions préliminaires

1.1.1 Moyennes de phase

Dans les problèmes d'écoulements turbulents gaz-particules il est nécessaire de se doter d'équations prédisant le comportement de chaque phase. D'un point de vue théorique, la meilleure approche pour définir les variables pertinentes de notre écoulement est de recourir à une moyenne sur chaque phase. Pour cela, introduisons la fonction de présence de phase χ_φ définie par :

$$\chi_\varphi(\underline{x}, t) = \begin{cases} 1 & \text{si le point } (\underline{x}, t) \text{ appartient à la phase } \varphi \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Cette fonction de présence de phase permet, lorsqu'elle est moyennée sur une infinité de réalisations identiques (du point de vue des conditions initiales et limites) et indépendantes (cette opération de moyenne est notée $\langle \cdot \rangle^1$, de définir nos moyennes de phase $\langle \cdot \rangle_\varphi$ ($\varphi = f$ ou p) pour toute fonction ψ par :

$$\alpha_\varphi(\underline{x}, t) = \langle \chi_\varphi(\underline{x}, t) \rangle \quad (1.1)$$

$$\alpha_\varphi(\underline{x}, t) \langle \psi \rangle_\varphi(\underline{x}, t) = \langle (\psi \circ \chi_\varphi)(\underline{x}, t) \rangle \quad (1.2)$$

La conservation de la masse impose la relation :

$$\alpha_p + \alpha_f = 1 \quad (1.3)$$

Hypothèse : *Les écoulements considérés lors de cette étude font intervenir des fractions volumiques de la phase dispersée négligeables, permettant ainsi de considérer que $\alpha_p \ll \alpha_f$. L'approximation de phase particulaire continue sera tout de même toujours considérée comme valable.*

Concernant la phase particulaire la notation adoptée fait intervenir la densité de particules qui, dans les cas mono-disperse et mono-masse, est relié à la fraction volumique par la relation (si n_p ne varie pas trop vite à l'échelle du diamètre des particules) :

$$n_p = \frac{6\alpha_p}{\pi d_p^3} \quad (1.4)$$

où d_p est le diamètre des particules.

La moyenne de phase sur la phase particulaire se réécrit donc :

$$n_p(\underline{x}, t) \langle \psi \rangle_p(\underline{x}, t) = \langle (\psi \circ \frac{6}{\pi d_p^3} \chi_p)(\underline{x}, t) \rangle \quad (1.5)$$

Il est possible de récrire les moyennes de phase sous la forme :

$$\alpha_\varphi(\underline{x}, t) \langle \psi \rangle_\varphi(\underline{x}, t) = \langle \psi(\underline{x}, t) \mid \underline{x} = \underline{x}_\varphi(t) \rangle \quad (1.6)$$

en notant $\mid \underline{x} = \underline{x}_\varphi(t)$ le conditionnement que le point \underline{x} appartienne à la phase φ à l'instant t .

¹Depuis Gibbs il est d'usage de remplacer, en mécanique statistique, les moyennes temporelles sur les fluctuations par des moyennes d'ensemble faisant intervenir un grand nombre de systèmes identiques. On entend par systèmes identiques des systèmes dont l'évolution temporelle macroscopique est identique mais dont les évolutions microscopiques sous-jacentes sont différentes. On définit alors une sous-famille de cet ensemble : $(\mathcal{H}_j)_{j=1, \mathcal{N}}$ sur laquelle on effectue la moyenne d'ensemble $\langle \varphi \rangle = \lim_{\mathcal{N} \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{j=1, \mathcal{N}} (\varphi \mid \mathcal{H}_j) \right]$. Introduisons $\mathcal{N}(t; \underline{q}^{(N)}; \dot{\underline{q}}^{(N)})$ le nombre de réalisations \mathcal{H}_j dont l'état microscopique au temps t est $\{\underline{q}^{(N)}; \dot{\underline{q}}^{(N)}\}$. Dans la limite où \mathcal{N} tend vers l'infini, le rapport $\mathcal{N}(t; \underline{q}^{(N)}; \dot{\underline{q}}^{(N)})/\mathcal{N}$ devient la probabilité d'occupation de l'état $\{\underline{q}^{(N)}; \dot{\underline{q}}^{(N)}\}$

1.1.2 Décompositions de Reynolds des variables

Il est d'usage depuis Reynolds (Reynolds [1976]) de prendre en compte le caractère aléatoire des écoulements turbulents par une décomposition des variables suivant la somme d'une composante moyenne et d'une composante aléatoire. Il est nécessaire pour les écoulements diphasique de considérer un opérateur de moyenne par phase. La décomposition de Reynolds n'est donc pas unique et il faut en définir une par phase. Nous noterons donc ψ'' (resp. ψ') la composante aléatoire de la variable ψ par rapport à sa moyenne sur la phase particulaire $\langle \cdot \rangle_p$ (resp. sur la phase fluide $\langle \cdot \rangle_f$) :

$$\psi'' = \psi - \langle \psi \rangle_p \quad (1.7)$$

$$\psi' = \psi - \langle \psi \rangle_f \quad (1.8)$$

1.2 Phase fluide

1.2.1 Phénoménologie

La turbulence est un des problèmes majeurs (si ce n'est le plus important) de la mécanique des fluides car elle concerne une gamme très variée et étendue d'écoulements (du robinet à l'aérodynamique). Ce problème est de plus très ardu car l'état d'un fluide turbulent apparaît comme chaotique et non-prévisible. Reynolds [1976] relia son apparition à une valeur critique d'un nombre adimensionnel qui aujourd'hui porte son nom. Passé ce nombre critique, se développe un type d'écoulement pour lequel existe une hiérarchie dans laquelle les tourbillons à grande échelle alimentent les tourbillons aux échelles inférieures, et ce jusqu'à ce que la viscosité prenne le dessus et dissipe l'énergie transférée aux plus petits tourbillons.

La turbulence fait naître dans l'écoulement des mouvements chaotiques qui ont une structure complexe et qui présentent un caractère continu sur une large gamme d'échelles. C'est pourquoi il peut sembler plus habile d'adopter la démarche pragmatique de modéliser la turbulence au travers certains paramètres statistiques pour lequel existe un certain *déterminisme statistique*. On définit alors le niveau de description de la turbulence en fonction des paramètres choisis pour modéliser celle-ci.

1.2.2 Hypothèses de Kolmogorov sur la turbulence

La première tentative aboutie d'axiomatisation de la turbulence est due à Kolmogorov [1941, 1962]. Kolmogorov décrit la turbulence essentiellement comme un transfert d'énergie des grandes échelles vers les petites. Le vecteur de ce transfert sont les structures d'échelles médianes, encore appelées échelles inertielles. La turbulence de Kolmogorov est dite "en cascade" car l'énergie produite par les grandes structures de l'écoulement est transférée de proche en proche aux petites échelles de l'écoulement où celle-ci est dissipée en chaleur par effets visqueux. Le transfert de cette énergie d'agitation par les échelles inertielles se fait quasiment sans pertes ce qui implique que l'énergie dissipée ε_f aux petites échelles est égale à l'énergie produite \mathcal{P} aux grandes.

La première hypothèse faite par Kolmogorov pour obtenir cette image de cascade est une hypothèse d'isotropie locale du mouvement fluctuant. Il suppose que pour des écoulements à grand nombre de Reynolds la turbulence peut être localement vue comme isotropique, au moins pour des échelles suffisamment petites par rapport aux échelles énergétiques.

Hypothèse : *Ne seront considérés par la suite, en accord avec la première hypothèse de Kolmogorov, que des écoulements turbulents localement isotropes à petite échelle. Cette restriction permet de définir de manière univoque les paramètres statistiques représentant la turbulence. De plus, l'isotropie supposée du fluide n'impose pas l'isotropie du mouvement fluctuant des particules.*

La deuxième hypothèse de Kolmogorov stipule que la viscosité moléculaire influence seulement les échelles dissipatrices. Le comportement des échelles inertielles n'est donc pas influencé par la viscosité. Cette hypothèse implique que les incrément de vitesse $\delta u_f(\underline{r}, s) = u_f(\underline{x} + \underline{r}, t + s) - u_f(\underline{x}, t)$ ne dépendent, dans les échelles inertielles, que des variables r, s et ε_f . Il est alors possible d'établir une hiérarchie de moments (eulériens et lagrangiens) de cet incrément qui sont reliés par des analyses dimensionnelles aux trois variables précédentes. Une analyse dimensionnelle permet d'écrire pour des temps dt se situant dans la plage inertielle :

$$\langle \delta \underline{u}_f^2(\underline{u}_f dt, dt) \rangle \sim \varepsilon_f dt \quad (1.9a)$$

$$= C_0 \varepsilon_f dt \quad (1.9b)$$

où C_0 est la constante de Kolmogorov. Dans la théorie de Kolmogorov (c'est-à-dire pour des nombres de Reynolds infinis), cette constante C_0 est supposée être universelle et ne pas dépendre de l'écoulement considéré.

L'équation (1.9) quantifie la corrélation d'incrément de vitesse pour une turbulence isotropique à très grand nombre de Reynolds. Elle est donc fondamentale à la modélisation stochastique de la turbulence. La valeur prise par la constante C_0 y joue un grand rôle, mais malheureusement les résultats expérimentaux et numériques mettent en défaut l'hypothèse d'universalité faite par Kolmogorov. Celle-ci est en effet dépendante de l'écoulement, provoquant une disparité importante dans la littérature (Heinz [2002]). Sa valeur est généralement comprise entre 1,4 et 6.

1.2.3 Équations RANS décrivant le comportement de la phase fluide

Les équations décrivant le comportement de fluides Newtoniens sont les équations de Navier-Stokes, qui s'écrivent dans le cas d'écoulements incompressibles :

$$\frac{\partial u_{f,i}}{\partial x_i} = 0 \quad (1.10a)$$

$$\frac{\partial u_{f,i}}{\partial t} + u_{f,j} \frac{\partial u_{f,i}}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_f} \frac{\partial p_f}{\partial x_i} + \nu_f \frac{\partial^2 u_{f,i}}{\partial x_j \partial x_j} \quad (1.10b)$$

où $\underline{u}_f(t; \underline{x})$ et $p_f(t; \underline{x})$ sont respectivement la vitesse et la pression du fluide au point \underline{x} à l'instant t , et ρ_f et ν_f sont la masse volumique et la viscosité cinématique du fluide (propriétés physiques intrinsèques au fluide considéré).

Comme dit auparavant, il est d'usage depuis Reynolds de décomposer les écoulements en parties moyenne et fluctuante, ce processus de moyenne filtrant toutes les échelles spatiales pour ne retenir que des informations "en un point". Les paramètres statistiques décrivant l'écoulement fluide doivent donc modéliser à la fois le mouvement moyen et le mouvement d'agitation (dit turbulent dans le cas monophasique). Cette modélisation est faite pour des écoulements turbulents homogènes isotropes (THI), c'est-à-dire dont la partie turbulente est statistiquement invariante par rotation ou translation. On définit ainsi les quantités moyennes et fluctuantes de l'écoulement fluide :

$$u_{f,i} = U_{f,i} + u'_{f,i} \quad (1.11a)$$

$$p_f = P_f + p'_f \quad (1.11b)$$

Pour des écoulements gaz-particule où le couplage inverse (cf. § 1.4.6) peut être négligé l'étude des équations décrivant le comportement du fluide peut sembler inutile. En effet, seule la donnée des profils des quantités moyennes intervient dans les modèles, permettant ainsi de s'affranchir (en ce qui concerne la phase dispersée) de la simulation de l'écoulement fluide. Toutefois il existe de nombreuses connexions entre les modèles développés pour prendre en compte l'effet de la turbulence sur les particules et les équations RANS d'un écoulement, spécialement en ce qui concerne les équations des contraintes de Reynolds. C'est pourquoi une attention particulière est faite aux équations décrivant le comportement des contraintes de Reynolds. De plus, dans l'optique d'une extension à des cas présentant un couplage inverse, il est important de comprendre les différents mécanismes agissant sur l'écoulement fluide.

Concernant le mouvement moyen, étant donné l'hypothèse $\alpha_f = 1$, l'écoulement fluide sera en premier lieu décrit par son **profil de vitesse moyenne** $\underline{U}_f(\underline{x}, t)$:

$$\underline{U}_f(\underline{x}, t) = \langle \underline{u}_f(\underline{x}, t) \rangle_f \quad (1.12)$$

L'équation régissant le comportement de cette vitesse moyenne est donnée par un processus de moyenne des équations de Navier-Stokes ce qui résulte en :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + U_{f,k} \frac{\partial}{\partial x_k} \right) U_{f,i} = - \frac{1}{\rho_f} \frac{\partial P_f}{\partial x_i} + \nu_f \frac{\partial^2 U_{f,i}}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial R_{ff,ik}}{\partial x_k} \quad (1.13)$$

où le **tenseur des contraintes de Reynolds** du fluide $\underline{\underline{R}}_{ff}(\underline{x}, t)$ est défini par :

$$\underline{\underline{R}}_{ff}(\underline{x}, t) = \langle \underline{u}'_f(\underline{x}, t) \otimes \underline{u}'_f(\underline{x}, t) \rangle_f \quad (1.14a)$$

$$= \langle \underline{u}_f(\underline{x}, t) \otimes \underline{u}_f(\underline{x}, t) \rangle_f - \underline{U}_f \otimes \underline{U}_f \quad (1.14b)$$

en utilisant la notation \otimes pour le produit tensoriel ($(\underline{a} \otimes \underline{b})_{ij} = a_i b_j$).

Il apparaît ici le problème classique d'une modélisation d'un phénomène à de multiples degrés de liberté par des quantités moyennes : l'équation décrivant le comportement de cette quantité fait intervenir des termes nécessitant une modélisation. De nombreuses études ont été menées pour modéliser les tensions de Reynolds à partir de quantités connues (modèles de viscosité turbulente), mais il apparaît préférable d'établir une équation sur ces quantités dans laquelle les termes d'ordre supérieur seront cette fois fermés par certaines hypothèses (Hanjalic and Launder [1972]) :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + U_{f,k} \frac{\partial}{\partial x_k} \right) R_{ff,ij} = \mathcal{D}_{f,ij} + \mathcal{P}_{f,ij} + \phi_{f,ij} - 2\nu_f \left\langle \frac{\partial u'_{f,i}}{\partial x_k} \frac{\partial u'_{f,j}}{\partial x_k} \right\rangle_f \quad (1.15)$$

Le terme $\mathcal{D}_{f,ij}$ est le terme de diffusion ou dispersion turbulente. Il dépend pour partie du tenseur des corrélations triples qui doivent être modélisées afin de fermer le système d'équations. Pour de grands nombres de Reynolds, le terme prépondérant est le terme issu des corrélations triples. Hanjalic and Launder [1972] modélisent alors le terme de dispersion turbulente par :

$$\mathcal{D}_{f,ij} = - \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\langle u'_{f,i} u'_{f,j} u'_{f,k} \rangle_f - \nu_f \frac{\partial R_{ff,ij}}{\partial x_k} + \langle \frac{p_f}{\rho_f} (\delta_{jk} u'_{f,i} + \delta_{ik} u'_{f,j}) \rangle_f \right] \quad (1.16a)$$

$$\simeq \frac{\partial}{\partial x_k} \left[C_s \frac{k_f}{\varepsilon_f} \left(R_{ff,il} \frac{\partial R_{ff,jk}}{\partial x_l} + R_{ff,jl} \frac{\partial R_{ff,ik}}{\partial x_l} + R_{ff,kl} \frac{\partial R_{ff,ij}}{\partial x_l} \right) \right] \quad (1.16b)$$

où C_s est une constante.

Daly and Harlow [1970] dérivent une forme contractée de la fermeture précédente :

$$\mathcal{D}_{f,ij} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[C'_s \frac{k_f}{\varepsilon_f} R_{ff,kl} \frac{\partial R_{ff,ij}}{\partial x_l} \right] \quad (1.17)$$

avec C'_s une constante. Cette fermeture, bien que tensoriellement incorrecte, peut se justifier car la forme du tenseur de dispersion turbulente intégrant tous les termes (1.16a) n'est pas non plus tensoriellement correcte.

Le terme $\mathcal{P}_{f,ij}$ est un terme de production par les gradients de vitesse moyenne et s'exprime sous la forme :

$$\mathcal{P}_{f,ij} = -R_{ff,ik} \frac{\partial U_{f,j}}{\partial x_k} - R_{ff,jk} \frac{\partial U_{f,i}}{\partial x_k} \quad (1.18)$$

Enfin, le terme $\phi_{f,ij}$ est dit de corrélation pression-déformation :

$$\phi_{f,ij} = \left\langle \frac{p'}{\rho_f} \left(\frac{\partial u'_{f,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_{f,j}}{\partial x_i} \right) \right\rangle_f \quad (1.19)$$

Ce terme de pression-déformation peut être décomposé en deux contributions principales (en omettant les termes de traitement des parois, Hanjalic and Launder [1972]) : une contribution dite de redistribution $\phi_{f,1,ij} + \phi_{f,1,ji}$ qui tend à rendre le tenseur des contraintes de Reynolds isotrope, et une composante dite "terme rapide de pression" $\phi_{f,2,ij} + \phi_{f,2,ji}$. Rotta [1951] propose de modéliser la composante de redistribution suivant :

$$\phi_{f,1,ij} + \phi_{f,1,ji} = -C_{\phi 1} \frac{\varepsilon_f}{k_f} \left(R_{ff,ij} - \frac{2}{3} k_f \delta_{ij} \right) \quad (1.20)$$

où $k_f = \frac{1}{2} R_{ff,ii}$ est l'agitation turbulente et δ_{ij} est le symbole de Kronecker. En ce qui concerne le deuxième terme il est possible de l'exprimer en turbulence homogène :

$$\phi_{f,2,ij} = h_{ijkl} \frac{\partial U_{f,l}}{\partial x_k} \quad (1.21)$$

où le tenseur d'ordre 4 h est donné en fonction des tensions de Reynolds mais aussi de leurs produits (cf. Hanjalic and Launder [1972]).

Le dernier terme du membre de droite est un terme de destruction ou dissipation, qui s'exprime en fonction du taux de dissipation turbulent :

$$2\nu_f < \frac{\partial u'_{f,i}}{\partial x_k} \frac{\partial u'_{f,j}}{\partial x_k} \rangle_f = \frac{2}{3} \varepsilon_f \delta_{ij} \quad (1.22)$$

$$\varepsilon_f = \nu_f < \frac{\partial u'_{f,i}}{\partial x_k} \frac{\partial u'_{f,i}}{\partial x_k} \rangle_f \quad (1.23)$$

La dernière inconnue du système est maintenant le taux de dissipation turbulent ε_f . Cette quantité peut aussi faire l'objet d'une équation d'évolution (voir par exemple Launder and Sharma [1974] en monophasique et Vermorel [2003] en diphasique) qui n'est pas explicitée par soucis de concision.

Outre les paramètres statistiques "en un point" précédents, la description d'un écoulement turbulent nécessite la connaissance de certaines échelles définies ci-dessous. Les échelles caractéristiques (de temps, de longueur, de vitesse, d'énergie...) d'un phénomène sont très utiles pour comprendre phénoménologiquement la physique d'un problème, spécialement en mécanique des fluides. Lorsque qu'un couple d'échelles (une de longueur et une de vitesse par exemple) semble dicter la physique du problème, il est possible de reformuler le problème sous une forme adimensionnée (cf. couche limite, aérodynamique...) qui donne une plus grande généralité aux résultats. Malheureusement il existe dans les écoulements turbulents gaz-particule une grande diversité d'échelles, d'une part dues à la turbulence du fluide, et de l'autre à la présence des particules. Le diamètre des particules étant souvent très petit, il est de plus nécessaire de considérer l'ensemble des échelles turbulentes du fluide.

1.2.4 Échelles de longueur

Les échelles de longueur retenues se divisent en deux familles : turbulentes et macroscopiques. Ces échelles de longueur caractéristiques, tout les échelles de temps présentées par la suite, ne sont correctement définies que dans le cas de la Turbulence Homogène Isotrope (THI)

- Concernant les échelles turbulentes, **l'échelle de longueur intégrale eulérienne** \mathcal{L}_f^E provient du tenseur eulérien d'autocorrélations :

$$\underline{\underline{\mathcal{R}}}_{ff}^E(\underline{x}, t, \underline{r}, s) = \langle \underline{u}'_f(\underline{x}, t) \otimes \underline{u}'_f(\underline{x} + \underline{r}, t + s) \rangle_f \quad (1.24)$$

La fonction de corrélation longitudinale ainsi que l'échelle de longueur intégrale eulérienne sont définies par :

$$f(\underline{x}, t, r) = \text{trace}(\underline{\underline{\mathcal{R}}}_{ff}^E(\underline{x}, t, \underline{r}, 0)) / \sqrt{4q_f^2(\underline{x}, t)q_f^2(\underline{x} + \underline{r}, t)} \quad (1.25a)$$

$$\mathcal{L}_f^E(\underline{x}, t) = \int_0^{+\infty} f(\underline{x}, t, r) dr \quad (1.25b)$$

Cette échelle de longueur intégrale eulérienne donne les distances typiques de corrélations du champ, et est ainsi caractéristique des grandes échelles de la turbulence (aussi dites échelles énergétiques)

- On caractérise de même les échelles de longueur des plus petits tourbillons à l'aide de la théorie de Kolmogorov. **L'échelle de longueur de Kolmogorov** η_K est donnée en fonction de la viscosité cinétique ν_f et la dissipation ε_f par :

$$\eta_K = \left(\frac{\nu_f^3}{\varepsilon_f} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (1.26)$$

- Pour ce qui est des échelles macroscopiques caractéristiques de l'écoulement moyen \mathcal{L}_f^M , elles dépendent de la géométrie des écoulements considérés (par exemple la demi-largeur d'un canal plan L_c).

1.2.5 Échelles de vitesse

- **L'échelle de vitesse turbulente** u_{turb} est reliée à l'agitation turbulente :

$$u_{\text{turb}} \equiv \sqrt{2/3q_f^2} \quad (1.27)$$

En plus de l'échelle de vitesse caractéristique de la l'agitation turbulente u_{turb} , on définit comme échelles de vitesse :

- **L'échelle de vitesse du mouvement moyen** \mathcal{U}_f^M dépend de l'écoulement. Elle est la plupart du temps basée sur la vitesse moyenne \underline{U}_f .
- **La vitesse de frottement** u_τ peut aussi faire office de vitesse caractéristique dans le cas du canal. Elle est définie à partir de la force de frottement surfacique τ_w appliquée à la paroi par le fluide :

$$\tau_w = \rho_f u_\tau^2 \quad (1.28)$$

1.2.6 Échelles de temps

Les échelles de temps sont celles de première importance pour la suite de notre étude. Les particules ayant des dimensions très petites, il n'y a pas de compétition entre les effets spatiaux dus à la turbulence et ceux dûs aux particules. Par contre en ce qui concerne les phénomènes temporels les échelles sont très proches, ce qui implique une simultanéité des phénomènes.

Concernant la turbulence du fluide, les échelles de temps les plus usitées sont :

- L'échelle temporelle intégrale lagrangienne τ_f^L provient du tenseur d'autocorrelations temporelles lagrangiennes. Celui-ci a été introduit pour caractériser la décorrélation des vitesses d'éléments fluide le long de leurs trajectoires :

$$\underline{\mathcal{R}}_{ff}^L(x, t, s) = \langle \underline{u}'_f(\underline{x}_f(t), t) \otimes \underline{u}'_f(\underline{x}_f(t+s), t+s) \mid \underline{x}_f(t) = \underline{x} \rangle_f \quad (1.29)$$

On introduit alors souvent l'échelle temporelle intégrale lagrangienne τ_f^L lors de la modélisation de la fonction d'autocorrélation temporelle (trace du tenseur normalisé) :

$$\mathcal{R}_f^L(\underline{x}, t, s) = \frac{\text{trace}(\underline{\mathcal{R}}_{sf}^L(\underline{x}, t, s))}{\sqrt{4q_f^2(\underline{x}, t)q_f^2(\underline{x}^+, t+s)}} = \exp(-s/\tau_f^L(\underline{x}, t))$$

Ceci indique une relation de type intégrale entre l'échelle temporelle lagrangienne et la fonction d'autocorrélation temporelle

$$\tau_f^L(\underline{x}, t) = \int_0^{+\infty} \mathcal{R}_f^L(\underline{x}, t, s) ds \quad (1.30)$$

Cette modélisation est très intéressante car elle donne une interprétation naturelle au terme τ_f^L . Ce temps peut en effet maintenant s'interpréter comme le temps caractéristique de la "mémoire" de la turbulence le long des trajectoires des particules fluides. De plus, une modélisation sous forme d'exponentielle de la fonction d'autocorrélation est bien soutenue par l'expérience (figure 1.1), excepté pour des temps très courts. La forme exponentielle est en effet obtenue sous l'hypothèse d'un nombre de Reynolds infini (Sawford [1991], Pope [1994a]). Les formes des fonctions d'autocorrelations observées expérimentalement ne montrent donc pas une forme exponentielle pour les temps courts (figure 1.1).

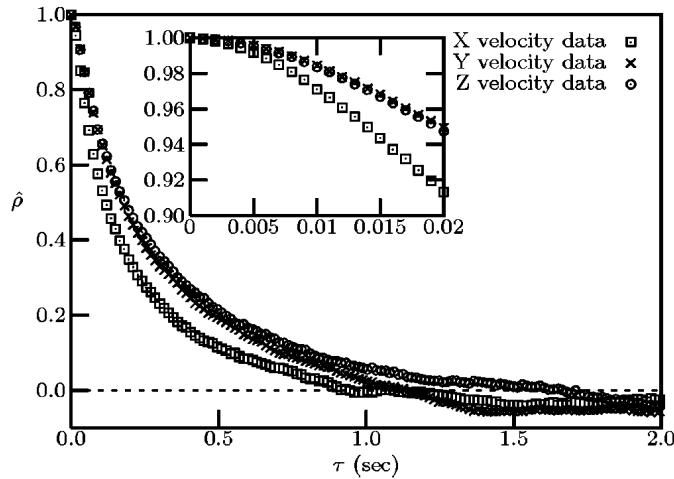


FIG. 1.1 – Fonctions d'autocorrélations des vitesses fluide en Turbulence Homogène Isotrope en condition de micro-gravité. (Tirée de Groszmann and Rogers [2004]).

- L'échelle temporelle intégrale eulérienne τ_f^E est une caractérisation issue du tenseur eulérien d'auto-corrélations. Ceux-ci s'écrivent :

$$\mathcal{R}_f^E(\underline{x}, t, s) = \frac{\text{trace}(\underline{\mathcal{R}}_{ff}^E(\underline{x}, t, \underline{0}, s))}{\sqrt{4q_f^2(\underline{x}, t)q_f^2(\underline{x}, t+s)}} \quad (1.31a)$$

$$\tau_f^E(\underline{x}, t) = \int_0^{+\infty} \mathcal{R}_f^E(\underline{x}, t, s) ds \quad (1.31b)$$

Ce tenseur caractérise la décorrélation des vitesses observée par une sonde immobile. Plus les particules seront inertielles et donc immobiles par rapport à l'écoulement fluide, plus le temps de décorrélation des vitesses du fluide se rapprochera de ce temps intégral eulérien (en absence de gravité).

- **L'échelle de temps de retournement des tourbillons** τ_f^e est définie à partir de l'échelle intégrale de longueur longitudinale \mathcal{L}_f^E . Celle-ci donne les distances typiques de corrélations du champ, et est ainsi caractéristique des grandes échelles de la turbulence (qui sont aussi les échelles dites énergétiques). L'échelle de temps eulérienne définie par :

$$\tau_f^e = \frac{\mathcal{L}_f^E}{\sqrt{2/3q_f^2}} \quad (1.32)$$

Hypothèse : *Il est d'usage en THI de faire l'hypothèse :*

$$\tau_f^E = \tau_f^e \quad (1.33)$$

Lorsque les deux temps ci-dessus sont écrits sous forme intégrale, cette formule peut être retrouvée formellement par un changement de variable $r = u_{\text{turb}} \cdot s$, ce qui tendrait à valider l'hypothèse ci-dessus pour peu que les tourbillons énergétiques soient advectés avec une vitesse u_{turb} dans l'écoulement.

- **Le temps caractéristique de durée de vie des tourbillons énergétiques** τ_f^ε s'exprime en fonction des données macroscopiques du fluide :

$$\tau_f^\varepsilon = \frac{q_f^2}{\varepsilon_f} \quad (1.34)$$

C'est aussi le taux de décroissance de l'énergie turbulente par dissipation ou encore le taux de cascade de l'énergie vers les petites échelles.

Hypothèse : *L'échelle temporelle intégrale lagrangienne introduite un peu plus haut est représentative de l'influence d'un tourbillon le long de la trajectoire des éléments fluide qui le composaient. On peut s'attendre à ce que cette influence soit fortement corrélée à la durée de vie de ce même tourbillon. On assumera donc une relation de proportionnalité entre ces deux temps caractéristiques :*

$$\tau_f^L = \frac{1}{\beta_f} \tau_f^\varepsilon \quad (1.35)$$

où le coefficient de proportionnalité β_f devra être précisé.

- **L'échelle de temps de Kolmogorov** τ_K est relative à l'échelle de longueur η_K , et caractérise ainsi l'échelle de temps des plus petits tourbillons :

$$\tau_K = \left(\frac{\nu_f}{\varepsilon_f} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.36)$$

En plus des échelles dues à la turbulence, rajoutons les macro-échelles de temps basées sur le mouvement moyen du fluide τ_f^M ou le gradient de vitesse moyenne $\nabla \cdot \underline{U}_f$.

- **L'échelle de temps du mouvement moyen** τ_f^M peut, par exemple, être basée sur une longueur caractéristique (demi-hauteur de canal) et une vitesse caractéristique (vitesse moyenne dans le canal). Dans le cas du canal on utilise aussi régulièrement l'échelle de temps "de paroi" définie par $\tau_f^M = L_c/u_\tau$
- **L'échelle de temps basée sur le gradient** τ_f^∇ est simplement donnée par l'inverse de ce gradient :

$$\tau_f^\nabla = 1/\nabla U_f \quad (1.37)$$

1.2.7 Nombres de Reynolds de l'écoulement fluide

Les nombres de Reynolds Re sont construits au départ pour avoir une idée du rapport de force entre advection et diffusion par viscosité. En partant d'une échelle de vitesse \mathcal{U} , on construit le nombre de Reynolds associé avec une échelle de longueur \mathcal{L} (associé à l'échelle de vitesse, où à une longueur caractéristique comme la demi-largeur d'un canal L_y) et la viscosité cinématique du fluide ν_f . L'échelle de temps associée à un processus de diffusion (de diffusivité ν_f) est relié à \mathcal{L} par $T_{\nu_f} = \mathcal{L}^2 / \nu_f$. L'échelle de temps associée aux échelles \mathcal{L} et \mathcal{U} est quant à elle simplement $T = \mathcal{L} / \mathcal{U}$. Le nombre de Reynolds est défini comme le rapport de ces temps, soit $Re = \mathcal{L} \mathcal{U} / \nu_f$. Suivant l'échelle de vitesse choisie (et donc l'échelle de longueur), le nombre de Reynolds est représentatif de divers phénomènes :

$\mathcal{U} \equiv U_\infty$	$, \mathcal{L} \equiv \mathcal{L}_f^M$	\rightarrow	Re_∞	représentatif de l'importance de la viscosité dans les équations de Navier-Stokes
$\mathcal{U} \equiv u_\tau$	$, \mathcal{L} \equiv L_y$	\rightarrow	Re_τ	représentatif de l'épaisseur de la couche limite par rapport à la demi-largeur du canal
$\mathcal{U} \equiv u_{\text{turb}}$	$, \mathcal{L} \equiv \mathcal{L}_f^E$	\rightarrow	Re_t	représentatif de l'importance relative de la diffusion turbulente par rapport à la diffusion moléculaire

1.3 Réaction d'une particule à la sollicitation du fluide

Pour caractériser la trajectoire (au sens de l'espace des phases : position et vitesse de translation du centre de gravité) d'une particule dans le cadre de la mécanique classique il est suffisant, selon la loi de Newton, de se donner une condition initiale ainsi que la somme des forces s'exerçant sur elle :

$$\frac{d}{dt} \underline{x}_p(t) = \underline{u}_p(t) \quad (1.38a)$$

$$\frac{d}{dt} [m_p \underline{u}_p(t)] = \underline{F}(t) \quad (1.38b)$$

Hypothèse : *L'influence de la rotation des particules est négligée.*

1.3.1 Bilan des forces s'exerçant sur une particule isolée

La force exercée par le fluide sur une particule est idéalement obtenue par une moyenne des forces de pression et des contraintes visqueuses sur la surface la particule. Ces intégrations ne sont bien sûr pas possibles dans le cadre le plus général (ce qui est dû au manque de solution explicite aux équations de Navier/Stokes), et limitées numériquement à de faibles vitesses relatives (cf § 1.3.4). D'un point la force exercée sur la particule s'écrit :

$$\underline{F} = \int_{S_p} -p_f \underline{n} dS + \int_{S_p} \underline{\underline{\sigma}}_f \cdot \underline{n} dS$$

où p_f est la pression thermodynamique du fluide et $\underline{\underline{\sigma}}_f$ le tenseur des contraintes visqueuses. Ces deux grandeurs sont affectées par le mouvement de la particule dans le fluide, ce qui entraîne l'apparition de nombreuses composantes. Ces composantes sont issues à la fois du mouvement rectiligne et de rotation de la particule. Ne considérant pas le mouvement de rotation, les composantes de la force issues de celle-ci (effet Magnus par exemple) ne seront pas prises en considération.

Pour expliciter cette composante surfacique Stokes [1851], Basset [1888], Boussinesq [1903] et Oseen [1927] entreprennent de résoudre les équations de Navier/Stokes pour une sphère en chute libre dans un fluide au repos. Ils obtiennent l'équation suivante pour l'accélération de cette sphère :

$$m_p \frac{du_p}{dt} = -3\pi d_p \mu_f u_p - \frac{1}{2} m_f \frac{du_p}{dt} - \frac{3}{2} d_p^2 \sqrt{\pi \mu_f \rho_f} \int_0^t \frac{du_p/dt}{\sqrt{t-\tau}} d\tau + (m_p - m_f)g \quad (1.39)$$

où m_f est la masse de fluide déplacée par la particule. Le premier terme est le terme de traînée de Stokes (valable pour un écoulement rampant), le deuxième le terme de masse ajoutée, le troisième le terme d'histoire (ou de Basset) et le dernier la différence entre le poids et la poussée d'Archimède.

Maxey and Riley [1983] et Gatignol [1983] re-décrivent cette équation pour des hypothèses moins restrictives. En supposant un nombre de Reynolds particulaire faible ($Re_p \ll 1$) et un diamètre de particule de l'ordre de l'échelle de longueur de Kolmogorov ($d_p = O(\eta_K)$) Gatignol [1983] obtient l'équation suivante (en omettant les termes d'ordre supérieurs dûs aux gradients de vitesse locale) :

$$m_p \frac{d\underline{u}_p}{dt} = 3\pi d_p \mu_f (\underline{u}_{f@p} - \underline{u}_p) + \frac{1}{2} m_f \frac{d(\underline{u}_{f@p} - \underline{u}_p)}{dt} + m_f \frac{D\underline{u}_{f@p}}{Dt} - \frac{3}{2} d_p^2 \sqrt{\pi \mu_f \rho_f} \int_0^t \frac{d(\underline{u}_{f@p} - \underline{u}_p)/dt}{\sqrt{t-\tau}} d\tau + (m_p - m_f)g \quad (1.40)$$

dans laquelle les dérivées lagrangiennes le long de la trajectoire des particules $\frac{d}{dt}(\cdot)$ et le long des particules fluide $\frac{D}{Dt}(\cdot)$ sont différencierées. Dans cette expression, la vitesse $\underline{u}_{f@p}$ est la vitesse du "fluide vu" (cf. § 1.3.5) qui est la vitesse du fluide localement non perturbé par la particule.

Les équations dérivées par Maxey and Riley [1983] et Gatignol [1983] ne sont pas rigoureusement identiques, une des différences concernant les hypothèses en terme de diamètre de la particule. Gatignol [1983] suppose un diamètre de l'ordre de l'échelle de longueur de Kolmogorov, tandis que Maxey and Riley [1983] le suppose très inférieur. Minier [1988] montre que cette dernière hypothèse aboutit à un paradoxe, puisque le terme de traînée devient alors prépondérant devant les autres.

Les hypothèses restrictives en terme de nombre de Reynolds particulaire dans Maxey and Riley [1983], Gatignol [1983] conduisent la plupart du temps à devoir changer le terme de traînée pour y inclure des effets de non-linéarité. L'équation (1.40) est alors réécrite en prenant en compte les observations de Magnaudet et al. [1995] concernant la force de masse ajoutée :

$$m_p \frac{d\underline{u}_p}{dt} = \frac{3m_p \rho_f}{4d_p \rho_p} C_D |\underline{u}_{f@p} - \underline{u}_p| (\underline{u}_{f@p} - \underline{u}_p) + \frac{1}{2} m_f \frac{D\underline{u}_{f@p} - du_p}{dt} + m_f \frac{D\underline{u}_{f@p}}{Dt} - \frac{3}{2} d_p^2 \sqrt{\pi \mu_f \rho_f} \int_0^t \frac{d(\underline{u}_{f@p} - \underline{u}_p)/dt}{\sqrt{t-\tau}} d\tau + (m_p - m_f)g \quad (1.41)$$

où C_D est le coefficient de traînée.

Les termes de masse ajoutée et d'histoire de Basset de l'équation (1.41) font intervenir les dérivées lagrangiennes des vitesses, ce qui rend la résolution de cette équation plus difficile en présence de ces termes. Motivé par la valeur souvent petite du rapport m_f/m_p , l'équation (1.41) est donc souvent simplifiée en négligeant les termes de masse ajoutée et de Basset. Il ne reste alors plus que la force de traînée ainsi que le poids :

$$\frac{d\underline{u}_p}{dt} = \frac{\underline{F}_d}{m_p} + \underline{g} \quad (1.42)$$

$$\underline{F}_d = \frac{\underline{u}_{f@p} - \underline{u}_p}{\tau_p} \quad (1.43)$$

où τ_p est le temps de relaxation particulaire :

$$\tau_p = \frac{4d_p \rho_p}{3\rho_f C_D |\underline{u}_{f@p} - \underline{u}_p|} \quad (1.44)$$

Ce dernier caractérise le temps que met une particule à réagir à une sollicitation du fluide, typiquement de trois à cinq temps caractéristique de traînée.

1.3.2 Quelles sont les forces prépondérantes ?

La figure 1.2 présente le coefficient de traînée global associé à toute les forces, donné par :

$$C_D^{\text{total}} = \frac{F}{\frac{1}{2}\rho_f |\underline{u}_{f@p} - \underline{u}_p|^2 \pi \frac{d_p^2}{4}}$$

où F est la résultante des forces dans une direction donnée.

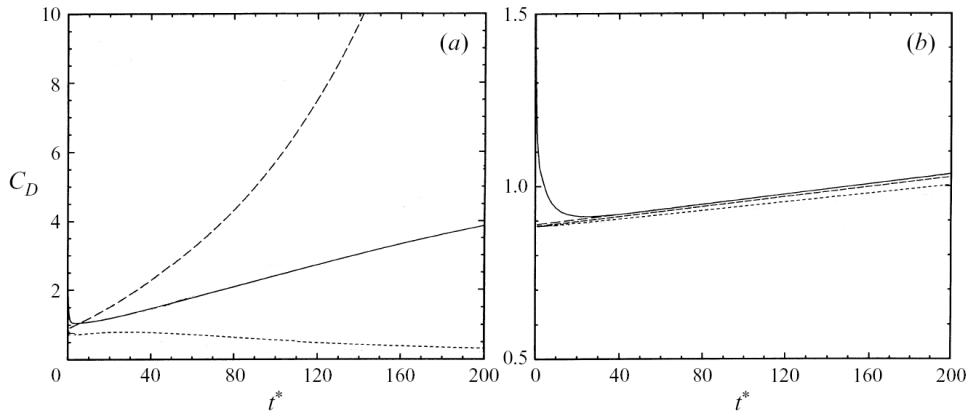


FIG. 1.2 – Évolution du coefficient de traînée total pour une particule injectée dans un fluide stagnant donné par Navier/Stokes (—), équation (1.42) (---) et équation (1.41) (· · · · ·) : rapport de densité de 5 (a) et 200 (b). (Tirée de Kim et al. [1998]).

Pour de petits rapports de masse volumique la modélisation des forces s'exerçant sur une particule sphérique demande amélioration (Kim et al. [1998]), mais dès que ce rapport devient suffisamment important, les termes inertIELS dûs à la particule deviennent prépondérants. On peut remarquer sur le graphe (b) de la figure 1.2 que l'équation la plus simple (1.42) se comporte de très bonne manière (à part en temps court pour lesquels la force de Basset joue un rôle à cause du caractère stagnant du fluide). Pour des rapports de densité ρ_p/ρ_f suffisamment grands, l'expérience montre ainsi que les forces prépondérantes sont la traînée et la gravité.

Hypothèse : *Les rapports de masse volumique ρ_p/ρ_f considérés sont suffisamment grands pour modéliser l'accélération des particules par l'équation :*

$$\frac{d\underline{u}_p}{dt} = \frac{F_d}{m_p} + \underline{g}$$

1.3.3 Nombre de Reynolds particulaire

En ce qui concerne les particules, la traînée provenant de la viscosité il n'est pas surprenant qu'un nombre de Reynolds influence le comportement des interactions entre phases. Soit $\tilde{\underline{u}}_f$ la vitesse du fluide vu par une

particule, et u_p sa vitesse. L'échelle de vitesse au niveau de la particule peut être prise comme $\mathcal{U} \equiv |\tilde{u}_f - u_p|$, ainsi que l'échelle de longueur $\mathcal{L} \equiv d_p$. Le nombre de Reynolds particulaire est alors défini par :

$$Re_p = \frac{d_p |\tilde{u}_f - u_p|}{\nu_f} \quad (1.45)$$

Ce nombre de Reynolds particulaire est représentatif de l'écoulement fluide autour de la particule. Pour de faibles Reynolds, l'écoulement autour de la sphère est totalement laminaire. Pour des nombres de Reynolds particulièrement petits ($Re_p < 1$) on parle d'écoulement rampant ou de Stokes. Avec l'augmentation du nombre de Reynolds, il y a apparition de zones de recirculations à l'arrière de la sphère, puis de lâchers tourbillonnaires (équivalents des allées de Von Karman derrière un cylindre), et ce sur une gamme assez large de nombre de Reynolds. Pour des nombres de Reynolds plus grand la couche limite devient turbulente ce qui réduit fortement l'importance des décollements à l'arrière de la sphère et fait chuter la traînée. Tous ces phénomènes se retrouvent dans la courbe du coefficient de traînée standard (fig. 1.2), mais le diamètre des particules étant très petit le nombre de Reynolds particulaire reste dans une gamme étroite (généralement $Re_p < 100$) qui permet de considérer une formulation assez simple pour le coefficient de frottement, l'équation (1.46).

1.3.4 Modélisation du coefficient de traînée

La force de traînée exercée sur une particule isolée (et l'action réciproque de la particule sur la turbulence) a fait l'objet de nombreuses études. Elles furent premièrement expérimentales (Torobin and Gauvin [1961], Clamen and Gauvin [1969], Clift and Gauvin [1970], Uhlherr and Sinclair [1970]), puis numériques avec l'émergence d'outils de simulation capables de résoudre les équations de Navier/Stokes autour d'une particule (Kim et al. [1987, 1998], Bagchi and Balachandar [2003], Burton and Eaton [2005]). Ces simulations numériques restent tout de même très limitées en terme de gammes de Reynolds particulaires, favorisant ainsi une modélisation très empirique de l'influence de la vitesse relative (et donc de Re_p) sur le coefficient de traînée C_D . Il est d'usage de considérer le comportement standard représenté par la courbe de la figure 1.3. Ce comportement standard se retrouve être en défaut par rapport à de nombreuses expériences car il ne fait apparaître que la dépendance du coefficient de traînée au seul Re_p (voir par exemple Bagchi and Balachandar [2003]). On peut tout de même le voir comme un comportement moyen assez proche de la réalité.

Le modèle retenu pour le coefficient de traînée standard est le modèle semi-empirique développé par Schiller and Nauman [1935] et étendu par Clift et al. [1978] (les très grands nombres Reynolds particulaires ne sont pas pris en compte car jamais atteints dans nos écoulements) :

$$C_D^{\text{std}} = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) & \text{si } Re_p \leq 1000 \\ 0.44 & \text{si } Re_p > 1000 \end{cases} \quad (1.46)$$

La corrélation empirique (1.46) fait l'objet d'un assez bon consensus dans la communauté scientifique du fait de sa très bonne comparaison à l'expérience. Des études récentes (Bagchi and Balachandar [2003]) ont même démontré qu'il pouvait être préférable de ne pas prendre en compte les termes de masse ajoutée et d'histoire lorsque la traînée est modélisée avec la corrélation (1.46). La modélisation du coefficient peut dans certains cas inclure implicitement l'influence de ces termes.

1.3.5 Vitesse du fluide et vitesse du "fluide vu"

Une notion essentielle à l'étude des écoulements gaz-particule est la notion de vitesse du fluide ressentie par la particule. Elle sera nommée vitesse du "fluide vu" dans la suite du mémoire. Ne pouvant prendre

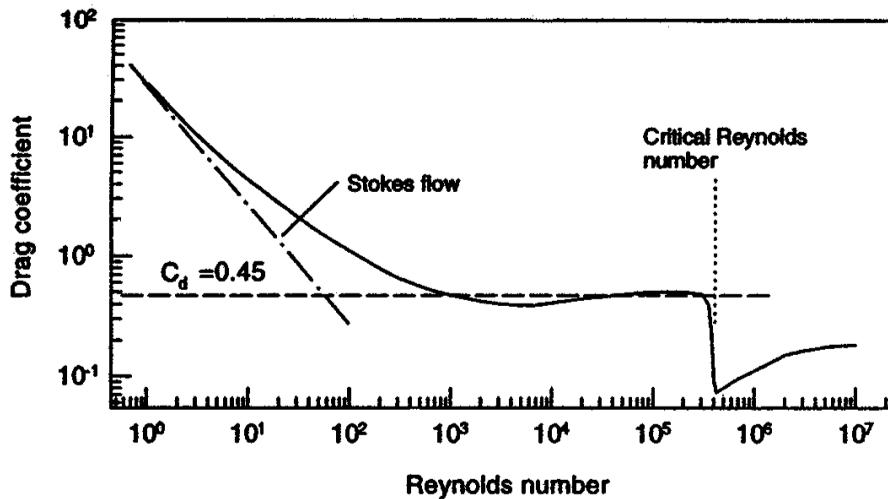


FIG. 1.3 – Courbe du coefficient de traînée standard d'une sphère. (Tirée de Crowe et al. [1998]).

en compte la modification locale (à l'échelle de la particule) du champ de vitesse due à la présence de chaque particule, on introduit donc la variable de vitesse du fluide localement non-perturbé. On crée ainsi une variable virtuelle attachée à chaque particule et sensée représenter l'effet global de l'écoulement autour de la particule. Pour chaque particule, la vitesse du fluide vu n'est pas perturbée par la présence de la particule, mais peut l'être par contre par le reste du nuage de particules. Pour des diamètres suffisamment petits ($d_p \leq \eta_K$), l'écoulement autour de chaque particule peut être considéré comme laminaire (bien que non-rampant) et l'ensemble des forces et couples s'exerçant sur la particule peuvent être modélisés par des forces et couplent agissant au centre de celle-ci (cf fig. 1.4).

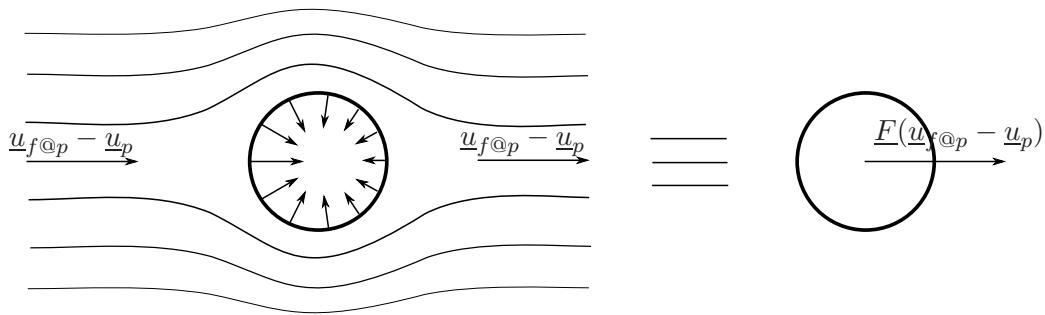


FIG. 1.4 – Principe d'équivalence de la vitesse du fluide vu.

Cette définition peut devenir épineuse si les interactions hydrodynamiques entre particules (interactions continues et de "longue" portée, de l'ordre de la dizaine de diamètres) sont non-négligeables. En effet, pour résoudre le champ fluide vu, il faudrait prendre en compte (à l'endroit de la particule) les perturbations qui proviennent des autres particules. Ces perturbations dépendent elles-mêmes de la particule considérée, rendant difficile une résolution satisfaisante du problème sous une hypothèse de type "fluide vu" (Durlofsky et al. [1987], Brady et al. [1988]). Ce type d'interaction entraîne de plus une modification du comportement du nuage de particules car les sillages des inclusions viennent modifier localement la traînée exercée sur les particules.

Hypothèse : *Les interactions hydrodynamiques entre particules seront considérées comme négligeables. La vitesse du "fluide vu" est donc simplement la vitesse du fluide localement non-perturbé par la particule. On utilisera donc de manière indifférente la notation $\underline{u}_f @ p$ ou \underline{u}_f .*

En ce qui concerne la définition du fluide vu, Gatignol [1983] définit plusieurs vitesses de fluide vu en fonction d'intégrales de la vitesse du fluide non perturbé sur la surface et le volume de la particule. Si ces considérations permettent une assise mathématique pleinement justifiée pour la théorie, des simulations numériques tendent à prouver qu'une définition sous forme intégrale donne des résultats similaires à une définition de la vitesse du fluide vu prise au centre de la particule (Bagchi and Balachandar [2003]). La définition usitée est la suivante :

Hypothèse : *Les forces s'exerçant sur la particule sont modélisées en fonction de la vitesse du fluide vu, qui n'est autre que : "la vitesse du fluide au centre de la particule si la particule n'était pas là".*

$$\underline{u}_f @ p(t) = \underline{u}_f(\underline{x}_p(t), t) \quad (1.47)$$

1.3.6 Vitesse de dérive

L'égalité entre vitesse du fluide vu et vitesse du fluide au centre de la particule ne doit pas occulter la richesse de phénomènes physiques qui peuvent tout de même résulter d'une telle modélisation. Un exemple est la valeur moyenne ressentie par les particules de la vitesse du fluide vu :

$$\langle \underline{u}_f(\underline{x}, t) \rangle_p = \langle \underline{u}_f(\underline{x}, t) \mid \underline{x} = \underline{x}_p(t) \rangle \neq \underline{U}_f(\underline{x}, t) \quad (1.48)$$

où $\underline{U}_f(\underline{x}, t)$ est la vitesse moyenne du fluide au point \underline{x} à l'instant t :

$$\underline{U}_f(\underline{x}, t) = \langle \underline{u}_f(\underline{x}, t) \rangle_f = \langle \underline{u}_f(\underline{x}, t) \mid \underline{x} = \underline{x}_f(t) \rangle \quad (1.49)$$

La non-égalité entre ces deux vitesses moyennes provient du fait que le processus de moyenne se fait sur la phase particulaire. Pour cette moyenne, la fluctuation \underline{u}'_f (par rapport à la moyenne sur la phase fluide) n'a pas de raison d'avoir une moyenne nulle :

$$\langle \underline{u}'_f \rangle_p \neq 0 \quad (1.50)$$

On appelle vitesse de dérive (ou encore vitesse de glissement entre phases) la moyenne sur la phase particulaire de la fluctuation du fluide vu $\underline{V}_d = \langle \underline{u}'_f \rangle_p$. Cette vitesse représente la dispersion turbulente de masse (et donc de densité) des particules. En ce sens elle caractérise aussi le transport de particules par les grandes échelles de la turbulence (Deutsch and Simonin [1991], Simonin et al. [1993]).

1.3.7 Croisement de trajectoires

La turbulence induit des corrélations spatio-temporelles. Une façon de décrire ces corrélations consiste à effectuer des statistiques le long des trajectoires de particules fluides afin d'obtenir les fonctions d'autocorrélations lagrangiennes. En ce qui concerne la phase dispersée, sous l'action de forces extérieures, la trajectoire moyenne des particules issues d'un même point peut être différente de la trajectoire moyenne des particules fluide qui leurs sont associées (fig. 1.5).

Ainsi la gravité peut entraîner des particules lourdes "au travers" de l'écoulement turbulent, ne permettant ainsi qu'à une partie de la turbulence de venir influencer le comportement de celles-ci. Les vitesses

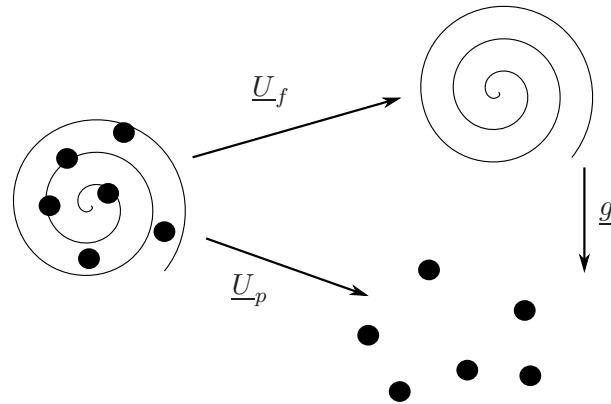


FIG. 1.5 – Schématisation du croisement de trajectoires.

moyennes des particules et du fluide ne sont plus colinéaires, les particules les plus grosses sont alors moins affectées par les fluctuations de vitesse du fluide. Ce phénomène physique porte le nom de "crossing trajectories effect" (Yudine [1959], Csanady [1963], Wells and Stock [1983]), effet de croisement de trajectoires. Ce croisement de trajectoires entraîne une modification de la turbulence ressentie, car une direction de mouvement est privilégiée par rapport aux autres. Le croisement affecte ainsi les temps caractéristiques turbulents ressentis par les particules (Simonin et al. [1993]).

1.3.8 Concentration préférentielle

Certaines particules plongées dans un écoulement turbulent ont tendance à être éjectées des tourbillons les plus énergétiques et donc à s'accumuler dans les zones de faible vorticité. Ces particules, à la fois trop lourdes pour suivre exactement l'écoulement du fluide et trop légères pour ignorer les fluctuations turbulentes, ne sont plus distribuées spatialement de manière aléatoire (Squires and Eaton [1991], Eaton and Fessler [1994]). Les concentrations locales peuvent alors devenir très importantes par rapport à la concentration moyenne de la phase dispersée, induisant une augmentation locale de la charge massique et des interactions hydrodynamiques, ainsi qu'une augmentation locale de la fréquence de collision. La non-prise en compte des interactions hydrodynamiques peut donc ne plus être justifiée dans un écoulement dilué du fait du phénomène de concentration préférentielle.

Hypothèse : *Les effets de concentration préférentielle seront considérés comme négligeables. Même si les facteurs de concentration peuvent être grands, les densités de particules observées dans les écoulements permettent de continuer à négliger les interactions hydrodynamiques.*

1.3.9 Échelles de temps des interactions

- Dans le cadre de l'hypothèse de "one-way coupling" et de particules inertes (thermiquement et chimiquement), l'échelle de temps la plus représentative des interactions entre les deux phases est le temps d'interaction de traînée τ_{fp}^F , c'est-à-dire la durée que met le nuage de particules à s'adapter à un changement de vitesse du fluide (à cause de son inertie, une particule ne réagit pas immédiatement à un changement de vitesse du fluide, contrairement à un traceur ou une particule fluide). Sous les hypothèses précédentes (cf. § 1.3.1), l'équation de mouvement d'une particule peut s'écrire en ne considérant que la force de traînée :

$$\frac{du_p}{dt} = \frac{F_d}{m_p}$$

où Re_p est le nombre de Reynolds particulaire et C_D le coefficient de traînée (cf. § 1.3.1).

On définit l'échelle de temps de Stokes τ_{fp}^{St} (Stokes [1851], Oseen [1927]) pour les écoulements rampants ($Re_p \rightarrow 0$, $C_D \rightarrow 24/Re_p$) par :

$$\tau_{fp}^{St} = \frac{\rho_p d_p^2}{18 \rho_f \nu} \quad (1.51)$$

L'échelle de temps caractéristique de traînée τ_{fp}^F est alors donné par (Simonin [1996]) :

$$\tau_{fp}^F = \langle \frac{24}{C_D Re_p} \rangle_p \tau_{fp}^{St} \quad (1.52)$$

– L'échelle temporelle intégrale lagrangienne du fluide "vu" par les particules $\tau_{f@p}^t$ est basée sur le tenseur d'autocorrélations temporelles lagrangiennes des fluctuations du fluide "vu" par les particules :

$$\mathcal{R}_{f@p}^L(\underline{x}, t, s) = \langle \underline{u}_f''(\underline{x}, t) \otimes \underline{u}_f''(\underline{x}^+, t + s) \mid \underline{x} = \underline{x}_p(t), \underline{x}^+ = \underline{x}_p(t + s) \rangle_p \quad (1.53)$$

De la même manière que pour le fluide, on peut définir un temps intégral lagrangien du fluide "vu" par une hypothèse sur la fonction d'autocorrélation temporelle du fluide vu :

$$\mathcal{R}_{f@p}(\underline{x}, t, s) = \exp(-s/\tau_{f@p}^t) \quad (1.54a)$$

$$\tau_{f@p}^t(\underline{x}, t) = \int_0^{+\infty} \mathcal{R}_{f@p}^{\text{lag}}(\underline{x}, t, s) ds \quad (1.54b)$$

L'hypothèse d'une fonction d'autocorrélation du fluide "vu" exponentielle est elle aussi bien supportée par les expériences (numériques cette fois) dans le cas d'écoulements où existe peu de concentration préférentielle (Fig. 1.6).

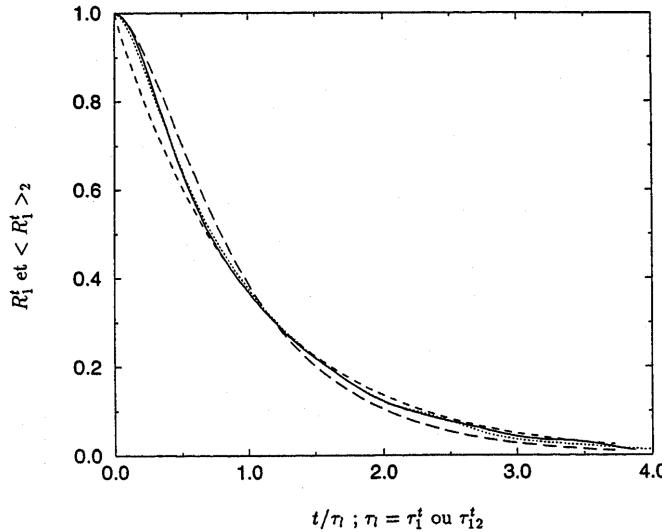


FIG. 1.6 – Fonctions d'autocorrélations temporelles lagrangiennes du fluide $R_1^t \equiv \mathcal{R}_f$ et du fluide "vu" par les particules $\langle R_1^t \rangle_2 \equiv \mathcal{R}_{f@p}$ pour $C_m = 0$ en Turbulence Homogène Isotrope. Simulations : — \mathcal{R}_f ; ··· $\mathcal{R}_{f@p}$. Modèles : - - - Reynolds infini ; - - dépendant du Reynolds. (Tirée de Boivin [1996]).

La figure 1.7 trace l'évolution des rapports entre propriétés du fluide vu et propriétés du fluide en fonction de l'inverse l'inertie des particules (ou de l'inverse du nombre de Stokes basé sur l'échelle temporelle intégrale lagrangienne).

Si l'égalité des énergies d'agitation semble ne pas être mise en défaut sur une large gamme d'inertie des particules, l'égalité des temps lagrangiens ne présente pas un aussi bon accord (à part dans le cas limite

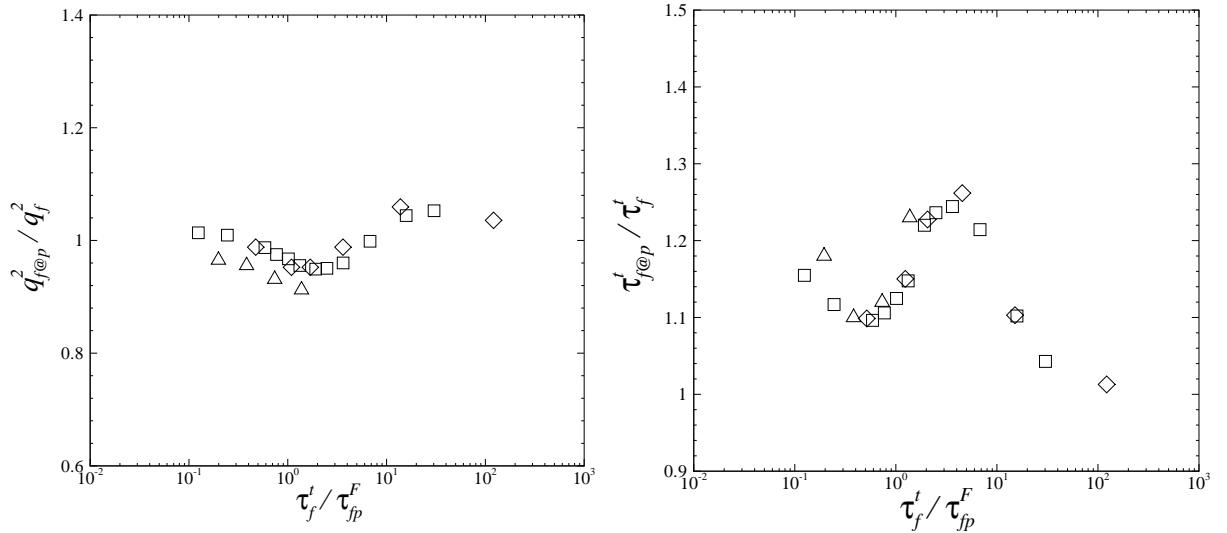


FIG. 1.7 – Évolution des propriétés du fluide vu avec l'inertie des particules. gauche : agitation turbulente du fluide vu $q_{f@p}^2$. droite : temps intégral lagrangien du fluide vu $\tau_{f@p}^t \equiv \tau_{f@p}^t$. \square : DNS ; \diamond : LES de Deutsch [1992] ; \triangle : LES de Laviéville [1997]. (Tirée de Fede [2004]).

de traceurs). L'égalité des agitations du fluide vu et de l'agitation turbulente est en fait la conséquence d'une propriété plus large des écoulements gaz-solides qui est observée dans toutes les expériences numériques :

$$\langle (u_{f@p,i} - U_{f@p,i})(u_{f@p,k} - U_{f@p,k}) \rangle_p = R_{ff,ik} \quad (1.55)$$

Dans toutes les expériences numériques réalisées avec des particules solides (ce qui n'est bien plus vrai pour des bulles par exemple) les contraintes cinétiques du fluide vu sont en effet égales aux contraintes de Reynolds de l'écoulement fluide.

L'égalité des temps intégraux lagrangiens n'est vérifiée que pour des particules ayant un faible nombre de Stokes. Pour des nombres de Stokes plus grands le rapport des temps intégraux lagrangiens passe par un maximum pour des nombres de Stokes de l'ordre de l'unité. La limite de ce rapport pour les grands nombres de Stokes ne semble pas être 1, ce qui peut s'expliquer par la différence en les échelles temporelles intégrales lagrangienne et eulérienne dans un écoulement turbulent. Plus les particules sont inertielles et moins elles sont influencées par l'écoulement fluide et donc restent immobiles. Pour de très grands nombres de Stokes, les particules ressentent ainsi la turbulence comme une sonde immobile, et "voient" donc leur échelle de temps intégrale du fluide vu se rapprocher de l'échelle temporelle intégrale eulérienne du fluide.

Hypothèse : *L'égalité des énergies d'agitation turbulente du fluide et du fluide vu ainsi que l'égalité des temps intégraux lagrangiens seront assumées dans tous les écoulements étudiés :*

$$q_{f@p}^2 = q_f^2 \quad (1.56)$$

$$\tau_{f@p}^t = \tau_f^L \quad (1.57)$$

1.3.10 Nombres de Stokes

Le nombre de Stokes est un très bon exemple de nom à multiples usages car dépendant d'une quantité qui n'est pas toujours définie de manière univoque. Ainsi la définition générale du nombre de Stokes est :

$$St = \frac{\tau_{fp}^F}{\tau_{\text{fluide}}} \quad (1.58)$$

où τ_{fluide} peut être n'importe quelle échelle de temps de la phase fluide et τ_{fp}^F est une échelle de temps représentative de l'influence du fluide sur les particules (cf § 1.3.9). Sous l'appellation "nombre de Stokes" se cache donc une grande variété de nombres adimensionnels qui sont représentatifs de différentes interactions du fluide et des particules.

De manière générale, lorsque le nombre de Stokes relatif à τ_{fluide} tend vers 0, les particules réagissent très vite aux changements de vitesse du fluide à l'échelle de temps τ_{fluide} , et donc les vitesses des particules et du fluide seront considérées comme proches à ces échelles de temps là. Par exemple, des particules ayant un Stokes relatif à l'échelle de temps de Kolmogorov très petit répondent à toutes les échelles de la turbulence, et suivent donc parfaitement le fluide (en absence de gravité) ; ce sont des traceurs passif idéaux.

De même lorsque ce nombre de Stokes tend vers l'infini, les particules réagissent très lentement aux variations de vitesse fluide ; ce qui implique qu'à cette échelle de temps τ_{fluide} la vitesse fluide sera vue par la particule comme un processus à fluctuations rapides.

Finalement, tout se passe comme si les particules filtraient les échelles de la turbulence inférieures au temps d'interaction de traînée. Les écoulements pour lequel ce filtrage n'entraîne pas de situation physique claire (au contraire du cas des traceurs ou des particules très inertielles) sont les plus durs à modéliser. En effet, pour des nombres de Stokes de l'ordre de l'unité apparaît le phénomène de concentration préférentielle (cf. § 1.3.8).

Il faut remarquer ici que la grande variété et dispersion des échelles de temps dans un écoulement turbulent engendre la même diversité de nombres de Stokes. Un nombre de Stokes très petit (resp. grand) pour un phénomène physique (mouvement moyen par exemple) n'entraîne pas obligatoirement des Stokes petits (resp. grand) pour les autres phénomènes entrants en jeu dans l'écoulement (turbulence par exemple). Il est donc très important de définir très précisément à quelle échelle de temps τ_{fluide} il est fait référence pour pouvoir discuter de l'effet de ce nombre de Stokes.

1.4 Mouvement d'ensemble de la phase dispersée

1.4.1 Vitesse moyenne des particules

Introduisons premièrement les propriétés lagrangiennes de la particule m $x_p^{(m)}(t)$ et $u_p^{(m)}(t)$ dénotant respectivement la position et la vitesse de la particule à l'instant t . Le premier moment du champ de vitesse des particules est le champ eulérien de vitesse moyenne des particules qui peut être défini comme :

$$\underline{U}_p(\underline{x}, t) = \langle \underline{u}_p^{(m)}(t) \mid \underline{x} = x_p^{(m)}(t) \rangle \quad (1.59)$$

où la moyenne $\langle \cdot \rangle$ est prise sur toutes les réalisations possibles de l'écoulement.

1.4.2 Mouvement d'agitation des particules

Comme dans le cas de la turbulence monophasique, on caractérise le mouvement d'agitation des particules par le tenseur d'autocorrélation des vitesses des particules :

$$\underline{\underline{\mathcal{R}}}_{pp}^E(\underline{x}, t, \underline{r}, s) = \langle \underline{u}_p''^{(m)}(t) \otimes \underline{u}_p''^{(n)}(t+s) \mid \underline{x} = \underline{x}_p^{(m)}(t), \underline{x} + \underline{r} = \underline{x}_p^{(n)}(t+s) \rangle \quad (1.60)$$

Ce tenseur contient beaucoup d'informations, et on se limitera donc au tenseur en un point et un instant $\underline{\underline{R}}_{pp}$:

$$\underline{\underline{R}}_{pp}(\underline{x}, t) = \underline{\underline{\mathcal{R}}}_{pp}^E(\underline{x}, t, 0, 0) = \langle \underline{u}_p'' \otimes \underline{u}_p'' \rangle_p \quad (1.61)$$

On définit alors l'énergie d'agitation des particules q_p^2 par :

$$q_p^2(\underline{x}, t) = \frac{1}{2} \text{trace}(\underline{\underline{R}}_{pp}(\underline{x}, t)) \quad (1.62)$$

1.4.3 Équilibre de Tchen-Hinze

L'existence du mouvement d'agitation des particules est à l'origine de la dispersion de celles-ci dans l'écoulement. Ce phénomène est similaire à la dispersion turbulente dans le cas monophasique. Pour exprimer cette dernière Taylor [1921] écrit le tenseur des corrélations lagrangiennes de position en fonction du tenseur des corrélations lagrangiennes de vitesse $\underline{\underline{\mathcal{R}}}_{ff}^L(\xi) = \langle \underline{u}_f(t) \otimes \underline{u}_f(t+\xi) \rangle$ pour une turbulence homogène isotrope stationnaire :

$$\langle \underline{x}_f(t) \otimes \underline{x}_f(t) \rangle = \int_0^t \int_0^\tau \frac{1}{2} [\underline{\underline{\mathcal{R}}}_{ff}^L(\xi) + {}^t \underline{\underline{\mathcal{R}}}_{ff}^L(\xi)] d\xi d\tau \quad (1.63)$$

Batchelor [1949] relie ces entités au tenseur de diffusion $\underline{\underline{D}}_{ff}$:

$$\underline{\underline{D}}_{ff} = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle \underline{x}_f(t) \otimes \underline{x}_f(t) \rangle \quad (1.64a)$$

$$= \frac{1}{2} \int_0^t [\underline{\underline{\mathcal{R}}}_{ff}^L(\tau) + {}^t \underline{\underline{\mathcal{R}}}_{ff}^L(\tau)] d\tau \quad (1.64b)$$

et introduit le tenseur spectral ou tenseur d'énergie $\underline{\underline{E}}_{ff}$ qui n'est autre que la transformée de Fourier du tenseur d'autocorrélation :

$$\underline{\underline{E}}_{ff}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \underline{\underline{\mathcal{R}}}_{ff}^L(\tau) \exp(-i\omega\tau) d\tau \quad (1.65)$$

Par analogie on définit les tenseurs de diffusion et d'énergie des particules :

$$\underline{\underline{D}}_{pp} = \frac{1}{2} \int_0^t [\underline{\underline{\mathcal{R}}}_{pp}^L(\tau) + {}^t \underline{\underline{\mathcal{R}}}_{pp}^L(\tau)] d\tau \quad (1.66)$$

$$\underline{\underline{E}}_{pp}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \underline{\underline{\mathcal{R}}}_{pp}^L(\tau) \exp(-i\omega\tau) d\tau \quad (1.67)$$

Tchen [1947] pense alors à relier ce tenseur d'énergie du fluide au tenseur d'énergie des particules en prenant la transformée de Fourier de l'équation (1.42). Tchen [1947] ne prend en compte que le terme de traînée, et sous une forme linéarisée (temps de relaxation donné par (1.51)). L'extension de cette théorie à d'autres forces est due à Hinze [1975], d'où le nom de théorie de Tchen-Hinze. Tchen [1947] ne considère

que des particules plus petites que la plus petite échelle de turbulence et pour lesquelles l'élément fluide entourant la particule reste le même. Pour une traînée de Stokes, la transformation de Fourier donne alors :

$$\underline{\underline{E}}_{pp}(\omega) = \frac{1}{1 + \omega^2 \tau_{fp}^{St^2}} \underline{\underline{E}}_{ff}(\omega) \quad (1.68)$$

Cette dernière relation impose que $\underline{\underline{E}}_{pp}(0) = \underline{\underline{E}}_{ff}(0)$, ce qui se traduit en terme de tenseur de diffusion par :

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \underline{\underline{D}}_{pp} = \lim_{t \rightarrow +\infty} \underline{\underline{D}}_{ff} \quad (1.69)$$

Quelque soient leur inertie, la dispersion en temps longs des particules est gouvernée par la dispersion turbulente du fluide.

En intégrant les temps intégraux lagrangiens dans l'analyse, il est même possible d'établir une analogie entre les mouvements fluctuants des deux phases. En sommant les termes diagonaux $\langle u''_{p,i} \cdot u''_{p,i} \rangle$, et en supposant une forme exponentielle pour le tenseur de corrélations lagrangiennes de vitesse, on obtient une relation reliant l'énergie d'agitation des particules à l'énergie d'agitation turbulente du fluide :

$$q_p^2 = \frac{\tau_f^L}{\tau_f^L + \tau_{fp}^{St}} q_f^2 \quad (1.70)$$

Desjonquieres et al. [1986] étendent l'analyse au mouvement corrélé fluide-particule :

$$q_{fp} = \frac{2\tau_f^L}{\tau_f^L + \tau_{fp}^{St}} q_f^2 \quad (1.71)$$

Finalement, Deutsch [1992] revisite la linéarisation de l'équation du mouvement en remplaçant τ_{fp}^{St} par τ_{fp}^F (équation (1.52)). Il ne pose plus l'hypothèse d'un même élément fluide accompagnant la particule dans sa trajectoire, ce qui l'amène au temps intégral $\tau_{f@p}^t$ et à l'énergie d'agitation du fluide vu $q_{f@p}^2$. Les relations de Tchen-Hinze s'écrivent alors :

$$q_p^2 = \frac{1}{2} q_{fp} = \frac{\tau_{f@p}^t}{\tau_{f@p}^t + \tau_{fp}^F} q_{f@p}^2 \quad (1.72)$$

Les hypothèses d'équilibre de Tchen-Hinze permettent ainsi une prise en compte de la corrélation forte entre les mouvements d'agitation de la phase fluide et de la phase particulaire. Elle est néanmoins seulement "en temps longs" pour un écoulement homogène ce qui ne permet pas d'utiliser directement cette relation pour la prédiction des énergies d'agitation fluide-particule et particulaire.

1.4.4 Échelles internes à la phase dispersée

1.4.4.1 Échelle de temps

La principale échelle de temps interne à la phase dispersée est le **temps caractéristique de collisions inter-particulaires** ou temps moyen entre deux collisions pour une particule τ_p^c . Elle dépend principalement de la densité, taille et énergie d'agitation des particules. L'importance des collisions sur le comportement de la phase dispersée est généralement évaluée en terme du ratio τ_{fp}^F / τ_p^c (Crowe [1981]) :

– $\tau_{fp}^F / \tau_p^c < 1$. Le mouvement des particules est principalement influencé par l'interaction avec le fluide environnant. On parle d'écoulement diphasique dilué.

- $\tau_{fp}^F/\tau_p^c > 1$. La fréquence des collisions est alors suffisamment grande pour que le comportement des particules découle principalement des interactions lors des collisions. On parle alors d'écoulement diphasique dense

Du point de vue de la théorie cinétique le caractère collisionnel (dense) ou cinétique (dilué) d'un écoulement n'est pas déterminé par le rapport τ_{fp}^F/τ_p^c mais par le rapport entre le libre parcours moyen l_c et le diamètre des particules. Si nos écoulements seront toujours considérés comme dilués du point de vue de la théorie cinétique, les collisions ne peuvent être systématiquement négligées du point de vue diphasique.

Hypothèse : *Les écoulements de cette étude peuvent être tous considérés comme dilués. Cependant, dans la plupart des cas le ratio τ_{fp}^F/τ_p^c n'est pas suffisamment petit (bien que inférieur à 1), et les collisions ont un effet faible mais non négligeable sur le comportement physique de la phase dispersée (i.e. isotropisation du mouvement d'agitation des particules principalement). C'est pourquoi les collisions seront étudiées par la suite.*

Cette hypothèse est corroborée par la figure 1.8 qui montre l'influence des collisions sur la fonction d'autocorrélation lagrangienne des particules en fonction de la fraction volumique moyenne en turbulence homogène isotrope. Même pour des fractions volumiques faibles ($\approx 10^{-3}$), les collisions ont un effet non-négligeable sur les caractéristiques de la fonction d'autocorrélation lagrangienne des particules.

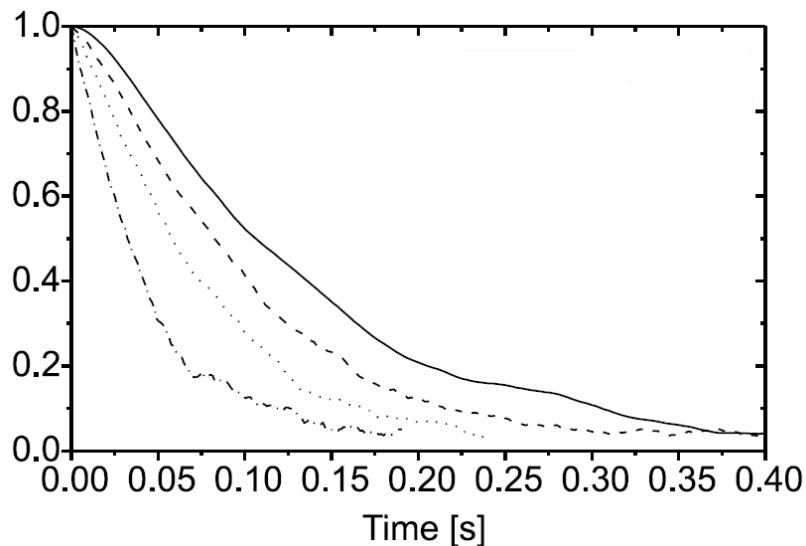


FIG. 1.8 – Fonction d'autocorrélation lagrangienne temporelle normalisée des vitesses des particules en fonction de la fraction volumique ($\rho_p/\rho_f = 171$, $St_{lag} = 5$). — : sans collisions ; - - : $\alpha_p = 2, 1.10^{-3}$; : $\alpha_p = 5, 3.10^{-3}$; - · - : $\alpha_p = 1, 41.10^{-2}$. (Tirée de Sommerfeld [2001]).

1.4.4.2 Échelles de vitesse

- **L'échelle de vitesse du mouvement d'agitation** u_p^{fluct} est, comme pour le fluide, reliée à l'agitation :

$$u_p^{\text{fluct}} \equiv \sqrt{2/3q_p^2} \quad (1.73)$$

- **L'échelle de vitesse du mouvement moyen** \mathcal{U}_p^M dépend essentiellement de l'échelle de vitesse moyenne du fluide ainsi que de l'inertie des particules.

1.4.4.3 Échelles de longueur

Les échelles de longueurs de la phase dispersée sont issues des interactions instantanées : collisions et rebonds :

- **Le libre parcours moyen** l_c d'une particule représente la distance moyenne parcourue par une particule entre deux chocs successifs.
- **La distance à la paroi** est représentative dans le sens où les conditions de rebond viennent "déséquilibrer" l'écoulement, et ce déséquilibre se répercute dans la direction normale à la paroi.

1.4.5 Nombre de Knudsen particulaire

Le nombre de Knudsen de la phase particulaire Kn est défini comme le rapport d'un équivalent, pour les particules, du libre parcours moyen à une longueur caractéristique de l'écoulement. Ce pseudo libre parcours moyen dépend des caractéristiques du mouvement d'agitation des particules. Lorsque le nombre de Knudsen particulaire Kn est très petit, la phase dispersée peut être représentée comme un continuum, la concentration de particules étant suffisamment grande au vu des échelles de l'écoulement. Par contre pour des Kn plus grands l'hypothèse de milieu continu cesse d'être valide et on doit résonner au niveau mésoscopique. Cette situation est identique au cas monophasique pour lequel il est habituel de résoudre l'équation de Boltzmann en lieu et place des équations de Navier-Stokes pour des Knudsen supérieurs à 10^{-3} (Bourgat et al. [1995]).

1.4.6 Two-way coupling ?

Le principe d'action-réaction, dans tout écoulement diphasique, entraîne un couplage mutuel d'une phase sur l'autre. Théoriquement on devrait donc toujours considérer un couplage à deux sens fluide \rightleftharpoons particules. Mais les termes de couplage ne sont pas ressentis identiquement par les deux phases car les propriétés de celles-ci sont très éloignées. Par exemple pour ce qui est de la force de traînée, elle ne peut être négligée au niveau des particules (au risque de perdre presque toute la physique associée à la phase dispersée dans nos cas), mais en est-il de même pour la phase fluide ? En occultant les problèmes liés aux échanges de masse ou chaleur, nous allons essayer de caractériser l'effet couplage inverse (fluide \leftarrow particule) sur le mouvement moyen et le mouvement d'agitation (dit aussi fluctuant ou turbulent) du fluide.

1.4.6.1 Chargement massique

Le chargement massique se définit comme le rapport des masses de la phase dispersée et continue dans le volume élémentaire :

$$C_m = \frac{n_p m_p}{\alpha_f \rho_f} = \alpha_p \times \frac{\rho_p}{\rho_f} \quad (1.74)$$

où m_p est la masse d'une particule. Le rapport des densités étant souvent de l'ordre de 10^3 , le chargement ne devient faible que pour de très petites valeurs de α_p .

Les échanges de quantité de mouvement entre les deux phases faisant appel à l'inertie de chacune, le chargement massique influe directement sur le caractère du couplage entre les deux phases. Pour de "faibles" chargements ($C_m < 0,1$), l'inertie du fluide est trop grande, et le couplage se fait uniquement du fluide vers les particules. Pour des chargements plus élevés par contre, l'influence retour des particules sur le fluide ne peut plus être négligée.

1.4.6.2 Influence des particules sur le mouvement moyen du fluide

Pour connaître l'effet du transfert de quantité de mouvement sur la phase fluide on construit le nombre représentatif (en ne prenant en compte que la force de traînée) :

$$\begin{aligned}\Pi_{mom} &\equiv \frac{\frac{d}{dt}(\text{qtté de mvt du fluide}) \Big|_{\text{dû aux particules}} \times \tau_f^M}{\text{qtté de mvt du fluide}} \\ &\equiv -\frac{C_m}{St_{\text{mvt moyen}}} \times \frac{\mathcal{U}_f - \mathcal{U}_p}{\mathcal{U}_f}\end{aligned}$$

Ce nombre évolue selon plusieurs facteurs, mais a de fortes chances de se retrouver petit dans les cas suivants : chargement massique faible, nombre de Stokes associé au mouvement moyen relativement élevé ou vitesse relative moyenne faible. Ces phénomènes sont souvent observés dans nos écoulements gaz-particules ($C_m < 1$, $St_{\text{mvt moyen}} > 10$, vitesse relative faible), et il est donc raisonnable de penser que la phase particulaire n'influence pas le mouvement moyen du fluide. On peut ici noter que le transfert de quantité de mouvement ne s'effectue pas toujours du fluide vers les particules. En effet, lorsque des particules arrivent d'une zone de grande vitesse dans une zone de faible vitesse du fluide, celui-ci les freine, et c'est alors les particules qui transmettent une partie de leur impulsion au fluide.

1.4.6.3 Influence des particules sur le mouvement fluctuant du fluide

De la même manière que précédemment, l'action de la force de traînée sur le mouvement fluctuant du fluide peut être évaluée par un nombre adimensionnel :

$$\begin{aligned}\Pi_{flu} &\equiv \frac{\frac{d}{dt}(q_f^2) \Big|_{\text{dû aux particules}} \times \tau_{f@p}^t}{q_f^2} \\ &\equiv -\frac{2C_m}{St_{\text{lag}}} \times \left(1 - \frac{q_{fp}}{2q_f^2}\right)\end{aligned}$$

Cette analyse peut être poussée plus loin dans le cadre d'un équilibre de Tchen-Hinze où le mouvement corrélé et le mouvement d'agitation du fluide sont reliés. Ceci permet d'écrire :

$$\Pi_{flu} \equiv -\frac{2C_m}{1 + St_{\text{lag}}}$$

De manière identique au cas du mouvement moyen, le paramètre de couplage dépend fortement de la charge massique ainsi que d'un nombre de Stokes (associé cette fois à la turbulence "vue" par une particule). Ce paramètre aura moins tendance à être petit que le précédent car dans certains cas le Stokes St_{lag} sera proche de l'unité, tout comme le chargement massique.

Hypothèse : *Les écoulements considérés seront toujours considérés dans le cas d'un couplage à sens unique fluide → particules. Même dans des cas où le two-way coupling ne pourrait plus être négligé au niveau de la physique, ce problème serait considéré comme secondaire vis-à-vis de cette étude.*

1.4.7 Modélisation des interactions particule-particule

Après avoir étudié le mouvement de chaque particule indépendamment des autres, il est nécessaire d'étudier leurs interactions. En l'absence d'interactions de type hydrodynamique (effet de sillage par exemple), celles-ci se résument aux collisions. Ces dernières sont très importantes pour appréhender la physique des écoulements homogènes gaz-particules, et ont donc été largement traitées. Les hypothèses permettant de choisir le modèle (qui sera détaillé par la suite) sont exposées par la suite.

1.4.7.1 Hypothèses simplificatrices

Les écoulements traités lors de cette étude sont constitués de particules solides dans de l'air (avec une fraction volumique ne dépassant jamais 10^{-2}), ce qui permet de faire des hypothèses simplificatrices sur le type des collisions rencontrées.

La principale hypothèse est de considérer les collisions comme instantanées ; ainsi les paires de particules entrant en collision n'ont pas le temps d'entrer en collision avec une troisième (la probabilité d'une collision ternaire dépend du rapport entre la durée d'une collision et le temps moyen entre deux collision). On peut, partout où cette hypothèse n'est pas mise en défaut, ne considérer que des collisions binaires.

Sont considérées comme instantanées toutes les interactions qui ne peuvent être modélisées par un champ d'énergie potentielle continu (comme il est fait par exemple en gravitation ou pour une paire de particules chargées). Dans notre cas, l'énergie potentielle de répulsion est nulle pour des distances supérieures au diamètre des particules (pas d'interactions hydrodynamiques), et infiniment répulsive pour des distances inférieures. On s'interdit ainsi toute coalescence partielle ou inter-pénétration des particules. Pour des particules sphériques, cette interaction est connue sous le nom de modèle des sphères dures. On peut alors utiliser la mécanique classique du point pour résoudre les collisions (comme pour deux boules de billard).

Lors de ce type de collision, les particules échangent une quantité de mouvement appelée impulsion. Les caractéristiques de cette impulsion \underline{J} déterminent complètement la cinématique de la collision. Dans le cadre des sphères dures, Walton [1988] propose un modèle dont le nombre de paramètres nécessaires à la caractérisation de l'impulsion est réduit à 3 donnant des résultats proches de l'expérience.

Hypothèse : *Les particules interagissent entre-elles telles des boules de billard, par des collisions instantanées et localisées. Sous ces hypothèses, le modèle le mieux adapté est le modèle de sphères dures de Walton [1988].*

1.4.7.2 Modèle de collision

On considère dans ce paragraphe la collision des deux particules A et B dont les centres respectifs sont situés en O_A et O_B , et dont les vitesses sont \underline{u}_A et \underline{u}_B . On définit alors la vitesse relative de B par rapport à A :

$$\underline{w}_r = \underline{u}_B - \underline{u}_A \quad (1.75)$$

et la vitesse de glissement de B par rapport à A :

$$\underline{w}_r^g = \underline{w}_r - (\underline{w}_r \cdot \underline{k}) \underline{k} \quad (1.76)$$

avec \underline{k} le vecteur directeur unitaire de A vers B

$$\underline{k} = \frac{\underline{O}_A \underline{O}_B}{|\underline{O}_A \underline{O}_B|} \quad (1.77)$$

On définit aussi le vecteur unitaire de glissement par

$$\underline{t} = \frac{\underline{w}_r^g}{|\underline{w}_r^g|} \quad (1.78)$$

On décompose alors l'impulsion (nos particules étant sphériques, la collision se fait dans un plan, ce qui ne serait pas le cas par exemple pour des ellipsoïdes) selon :

$$\underline{J} = J_n \underline{n} + J_t \underline{t} \quad (1.79)$$

. Le modèle est alors le suivant (\star désignant la valeur d'une variable après collision) :

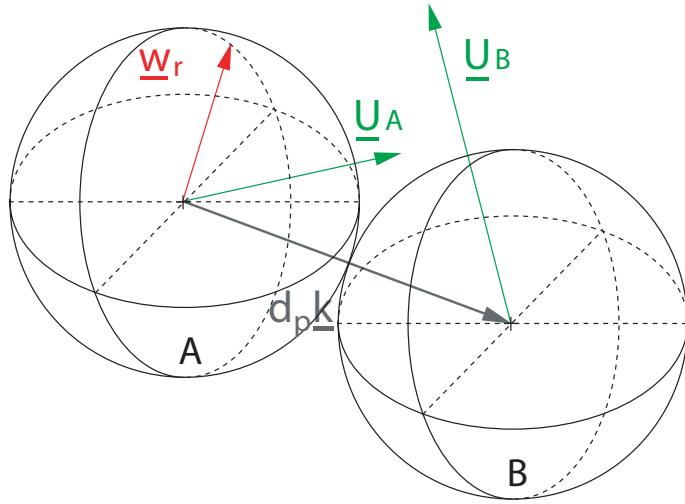


FIG. 1.9 – Particules entrant en collision binaire.

- Pour la composante normale $\underline{w}_r^* \cdot \underline{k} = -e_{pp} \underline{w}_r \cdot \underline{k}$ soit

$$J_n = m_r (1 + e_{pp}) (\underline{w}_r \cdot \underline{k}) \quad (1.80)$$

$e_{pp} \in [0, 1]$ est le coefficient de restitution normal des interactions particule-particule et m_r la masse réduite de la paire de particules (ici égale à $m_p/2$). Le coefficient de restitution normal peut être directement relié à l'énergie cinétique perdue lors de la collision ΔE_c :

$$\Delta E_c = \frac{1}{2} (m_A \Delta u_A^2 + m_B \Delta u_B^2) \quad (1.81a)$$

$$= -\frac{1}{2} m_r (1 - e_{pp}^2) (\underline{w}_r \cdot \underline{k})^2 \quad (1.81b)$$

Si les particules ont un coefficient de restitution (entre-elles) $e_{pp} = 1$, il n'y a pas de perte d'énergie cinétique. Les collisions deviennent micro-réversibles, ou encore appelées élastiques.

- En cas de non-glissement $\underline{w}_r^{g*} = \beta_{pp} \underline{w}_r^g$ soit

$$J_t = m_r (\beta_{pp} - 1) | \underline{w}_r^g | \quad (1.82)$$

$\beta_{pp} \in [0, 1]$ est le coefficient de restitution tangentiel des interactions particule-particule.

- En cas de glissement, on utilise la loi de Coulomb :

$$\text{Si } |J_t| > \mu_{pp}^s |J_n|, \text{ alors } J_t = \mu_{pp}^d |J_n| \quad (1.83)$$

μ_{pp}^s et μ_{pp}^d sont les coefficients de friction statique et dynamique des interactions particule-particule. Quatre coefficients sont donc nécessaires à la résolution de la collision, mais il est souvent fait l'hypothèse d'égalité entre les coefficients de frottement statique et dynamique μ_{pp}^s et μ_{pp}^d , réduisant le nombre de paramètres à 3.

On calcule alors les valeurs après choc à partir des équations :

$$\underline{u}_A^* = \underline{u}_A + \frac{1}{m_A} \underline{J} \quad (1.84a)$$

$$\underline{u}_B^* = \underline{u}_B - \frac{1}{m_B} \underline{J} \quad (1.84b)$$

Muni des 3 paramètres e_{pp} , β_{pp} et μ_{pp} il est possible de résoudre les collisions entre deux sphères. Ces 3 paramètres doivent donc intégrer la physique des collisions entre particules. Il faut se donner une valeur

de ses coefficients en fonction des particules considérées. De plus les valeurs de ces paramètres varient en fonction de l'angle de collision. Ces effets ne sont pas pris en compte dans les collisions pour ne pas occulter les effets principaux des collisions sur l'écoulement (cf. figure 1.8).

Dans le cas de collision sans glissement la cinématique ainsi définie possède la propriété intéressante de pourvoir être renversée. La connaissance des vitesses post-collision (notées u) permet en effet de reconstruire les vitesses des particules avant la collision (notées u^{*-}) :

$$\underline{u}_A^{*-} = \underline{u}_A + \frac{1 + e_{pp}}{2e_{pp}} (\underline{w}_r \cdot \underline{k}) \underline{k} \quad (1.85a)$$

$$\underline{u}_B^{*-} = \underline{u}_B - \frac{1 + e_{pp}}{2e_{pp}} (\underline{w}_r \cdot \underline{k}) \underline{k} \quad (1.85b)$$

1.5 Influence des parois

Les problèmes industriels relevant des écoulements gaz-particule voient, dans l'interaction entre écoulements turbulents et paroi solide, un concentré de phénomènes de transfert généralement dimensionnant, qu'il s'agisse :

- de transferts de quantité de mouvement (frottement du fluide et des particules sur la paroi)
- de transferts de chaleur (échauffement cinétique du fluide, phénomène de Leidenfrost pour des gouttelettes)
- ou encore de transferts de masse (condensation ou évaporation du fluide, dépôt des particules)

Une des spécificités de ces écoulements - inhabituelle en écoulement à grand nombre de Reynolds global - est l'importance des effets de viscosité. On introduit donc un nombre de Reynolds de turbulence (cf. § 1.2.7) permettant de mesurer l'importance relative - pour le fluide - de la diffusion turbulente par rapport à la diffusion moléculaire. Les écoulements pariétaux se classent alors dans la catégorie des écoulements à faible nombre de Reynolds turbulent.

1.5.1 Couche limite monophasique

La turbulence de canal est un phénomène qui a été longuement étudié que ce soit de manière théorique, expérimentale ou bien numérique. La condition d'adhérence du fluide à la paroi fait apparaître une zone de forts gradients entre l'écoulement extérieur (caractérisé par sa vitesse moyenne U_{ext} , pression, densité, température ...). L'adhérence engendre de plus un frottement du fluide sur la paroi souvent caractérisé par la force de frottement surfacique τ_w . Certaines conditions d'écoulement extérieur sont de plus associées à un écoulement turbulent dans le canal, notamment au niveau de la couche limite (zone des forts gradients en proche paroi), entraînant un accroissement de l'extension spatiale δ de cette dernière.

Contrairement au cas de la couche limite laminaire, où il est possible de définir un couple d'échelle caractéristiques (locales) permettant d'a-dimensionner des variables sous forme de similitude globale, la séparation d'échelles des temps basées sur les caractéristiques habituelles (U_{ext} et δ) ou le couple (ν_f, τ_w) ne permet pas de formuler le problème sous la forme d'une similitude globale dans le cas turbulent. Heureusement il est possible à grand nombre de Reynolds de séparer deux zones de l'écoulement interne à la couche limite, chacune évoluant en similitude partielle.

Sous-couche visqueuse Proche de la paroi, l'advection devenant nulle (du fait de l'adhérence du fluide à la paroi), il existe une zone de cisaillement constant où domine le frottement visqueux. La vitesse y est

linéaire, ce qui s'exprime à l'aide d'une similitude partielle basée sur un a-dimensionnement par le couple (ν_f, u_τ) :

$$\frac{U_f}{u_\tau} = U_f^+ = y^+ = \frac{yu_\tau}{\nu_f} \quad (1.86)$$

On peut aussi montrer dans cette zone que q_f^2 se comporte en y^2 (y étant la distance à la paroi), alors que ε_f garde une valeur constante non-nulle.

$$q_f^2 \xrightarrow{y \rightarrow 0} y^2 \text{ et } \varepsilon_f \xrightarrow{y \rightarrow 0} \varepsilon_f^w \quad (1.87)$$

Ces propriétés des écoulements turbulents de proche paroi engendrent aussi un raccourcissement de la durée de vie des tourbillons près de la paroi :

$$\tau_f^\varepsilon \xrightarrow{y \rightarrow 0} y^2 \quad (1.88)$$

De même la présence de la paroi induit une anisotropisation de la turbulence par effet de blocage de la composante normale v à la paroi (Kim et al. [1987]).

$$R_{ff,uu} \xrightarrow{y \rightarrow 0} y^2; R_{ff,vv} \xrightarrow{y \rightarrow 0} y^4; R_{ff,ww} \xrightarrow{y \rightarrow 0} y^2; R_{ff,uv} \xrightarrow{y \rightarrow 0} y^3 \quad (1.89)$$

Zone logarithmique La deuxième zone de similitude partielle est spécifique aux couches limites turbulentes à grand nombre de Reynolds. En effet, "loin" de la paroi (c'est-à-dire pour y^+ "grand"), on peut exprimer une nouvelle similitude théorique sous la forme :

$$U_f^+ = \frac{1}{\kappa} \log(y^+) + C \quad (1.90a)$$

$$q_f^2 = \frac{u_\tau^2}{\sqrt{C_\mu}} \quad ; \quad \varepsilon_f = \frac{u_\tau^3}{\kappa y} \quad (1.90b)$$

où $\kappa = 0.41$ est la constante de Von Karman.

A l'intérieur de cette zone, l'agitation turbulente q_f^2 varient peu, et l'anisotropie présente la remarquable particularité de peu varier elle aussi. Ces propriétés sont confirmées par l'expérience avec l'obtention des relations :

$$R_{ff,uu}/q_f^2 \approx 1; R_{ff,vv}/q_f^2 \approx 0,4; R_{ff,ww}/q_f^2 \approx 0,6; R_{ff,uv}/q_f^2 \approx -0,3 \quad (1.91)$$

La dernière équation peut se récrire de manière plus simple

$$R_{ff,uv} \approx \frac{-0,3u_\tau^2}{\sqrt{C_\mu}} \quad (1.92)$$

ce qui impose une valeur à C_μ car, par définition, la contrainte $R_{ff,uv}$ est précisément égale dans la couche logarithmique au frottement.

$$C_\mu = 0,09, R_{ff,uv} = -u_\tau^2 \quad (1.93)$$

1.5.2 Influence des parois sur les particules

L'influence des parois sur le comportement des particules est de deux types :

- Il existe premièrement une interaction de type hydrodynamique du fait que l'écoulement du fluide en proche paroi est modifié par la présence de la particule, ce qui se traduit par une modification du coefficient de traînée

- La deuxième influence est due aux rebonds éventuels des particules sur ces parois. Ces interactions ponctuelles obéissent à la même physique que les collisions, à la différence qu'une des deux entités est fixe et infiniment inertielle.

En ce qui concerne les interactions hydrodynamiques, la figure 1.10 présente l'évolution du coefficient de traînée en fonction de la distance à la paroi (Arcen et al. [2005]). Celle-ci montre que l'influence de la paroi sur l'évolution du coefficient de frottement est faible, et ce quelque soit le nombre de Reynolds particulaires.

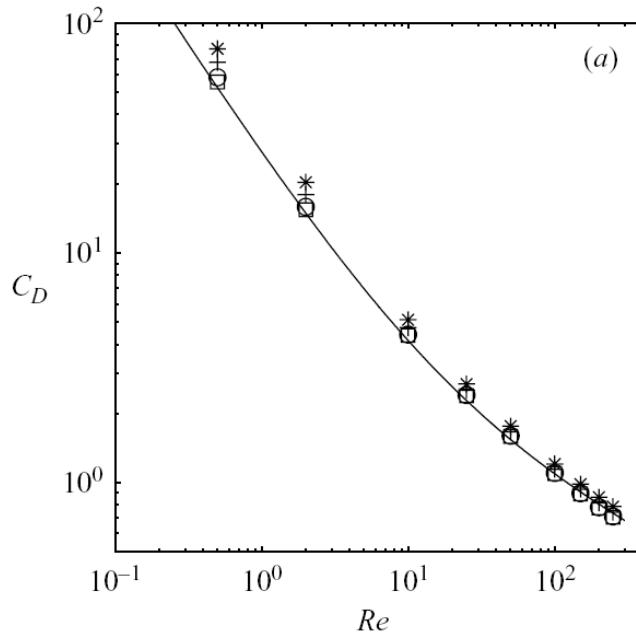


FIG. 1.10 – Influence de la distance à la paroi sur le coefficient de traînée d'une particule isolée pour différents nombres de Reynolds particulaires. \square : $y = 4d_p$; \circ : $y = 2d_p$; $+$: $y = d_p$; $*$: $y = 0.75d_p$; — : Coefficient de traînée standard (1.46). (Tirée de Arcen et al. [2005]).

Hypothèse : *Les interactions hydrodynamiques paroi-particule seront négligées (de manière identique aux interactions hydrodynamiques particule-particule)*

En ce qui concerne les interactions ponctuelles entre la paroi et les particules, les phénomènes physiques sont très nombreux dans le cas de particules liquides (rebond, splashing, création de film liquide ...).

Dans le cas de particules solides et sphériques, on ne considère que le modèle précédent de sphères dures, mais en prenant comme caractéristiques pour la paroi $m_A = +\infty$ et $\underline{u}_A = \underline{0}$. Généralement, les propriétés d'échange d'impulsion dépendent de la nature des deux entités entrant en collision. Les paramètres de rebond ne sont donc pas identiques aux paramètres de collision. Nous noterons donc les paramètres de rebond e_{pw} , β_{pw} et μ_{pw} . De même que les paramètres de collision varient en fonction de l'angle de collision, les paramètres de rebond sont influencés par l'angle d'incidence de la particule sur la paroi. Nous négligerons tout de même ces effets pour se concentrer sur les effets prépondérants des rebonds des particules sur la paroi. La vitesse d'une particule entrant en collision avec une paroi se voit donc modifiée comme suit :

$$\underline{u}_p^* = \underline{u}_p - (1 + e_{pw})(\underline{u}_p \cdot \underline{n})\underline{n} - J_t \underline{t} \quad (1.94)$$

où J_t est calculé suivant (1.82) ou (1.83) et \underline{n} est le vecteur normal à la paroi orienté vers l'écoulement.

Un de ces effets notables de la paroi est la possible dissymétrie des flux incidents et réfléchis de particules. Pour des coefficient de restitution normaux e_{pw} inférieurs à l'unité, les particules repartent de la paroi avec une vitesse normale réfléchie plus faible (en valeur absolue) que la vitesse normale incidente. Pour conserver la masse il faut ainsi qu'il y ait, dans un volume adjacent à la paroi, plus de particules repartant de la paroi qu'arrivant vers elle. Cette dissymétrie apparaît aussi due au frottement des particules sur la paroi (qui accélère les particules dans la direction longitudinale). Elle est dans tous les cas à l'origine de flux de contraintes cinétiques particulières.

La principale différence entre rebond et collision provient de la dissymétrie du problème dans le cas du rebond. La paroi étant plane, le problème présente une direction privilégiée de plus que celle alignée sur la vitesse relative. Lors de rebonds, la résolution est effectuée dans un repère privilégié lié à la paroi. Cette dissymétrie est un concept important qui permet d'aborder le problème de la rugosité de paroi.

Chapitre 2

Modélisation Statistique et Approche lagrangienne Stochastique

Sommaire

2.1	Approche statistique des écoulements gaz-particule	36
2.1.1	Motivations	36
2.1.2	Choix de la description contractée	37
2.1.3	Description en terme de pdf de particules	37
2.1.4	Description en terme de pdf jointe fluide-particule	38
2.2	Équation d'évolution du système	39
2.3	Transport des particules	40
2.4	Modélisation lagrangienne du fluide vu	41
2.4.1	Modèles "Eddy lifetime"	42
2.4.2	Équation de Langevin	43
2.4.3	Équation de Kolmogorov rétrograde associée	47
2.4.4	Détermination des matrices de l'équation de Langevin dans le cas monophasique	47
2.4.5	Passage aux écoulements gaz-particules	52
2.5	Opérateur de collision	53
2.5.1	Opérateur de collision	53
2.5.2	Fermetures de l'opérateur de collision	54
2.5.3	Temps caractéristique de collision	57
2.6	Equation finale d'évolution de la pdf jointe à une particule	60
2.7	Méthodes de résolution	60
2.8	Approche lagrangienne Stochastique	61
2.8.1	Principe de "dévissage" des opérateurs	61
2.8.2	Résolution du transport	61
2.8.3	Résolution stochastique des collisions	62
2.8.4	Conditions aux limites de paroi	66
2.8.5	Considérations numériques	67

De manière identique à la turbulence, la présence d'une phase dispersée dans certains écoulements diphasiques introduit un très grand nombre de degrés de liberté. En effet pour caractériser complètement la phase dispersée il faudrait se donner les propriétés de toutes les particules présentes au sein de l'écoulement. La variété de propriétés caractérisant une particule (position, vitesse, volume, forme,

température, composition ...) ainsi que le nombre important de particules dans l'écoulement rendent impossible une telle caractérisation de la phase particulaire.

Bien que théoriquement possible, la trajectographie de toutes les particules est limitée par les capacités des calculateurs actuels (limitations qui perdureront encore quelques décennies). Le deuxième problème rencontré par ce genre d'approches concerne la prise en compte des interactions internes à la phase particulaire. Dans notre cas celles-ci se limitent à des collisions de sphères dures. La résolution exacte des collisions au niveau numérique sous-tend un repérage de l'ensemble des particules pour déterminer quelles particules sont entrées en collision durant le pas de temps courant. Ces algorithmes de recherche se révèlent très coûteux en terme de temps de calcul (l'algorithme optimum est en $N \log(N)$ pour N particules).

Comme auparavant pour la turbulence, le nombre excessif de degrés de liberté impose alors de traiter la phase dispersée par une approche statistique. C'est donc dans le cadre de la mécanique statistique que les phénomènes physiques évoqués au chapitre précédent seront traités.

La mécanique statistique fut introduite par Maxwell et Boltzmann pour modéliser le comportement des gaz. Elle fut longtemps décriée car postulant que les propriétés macroscopiques des gaz découlaient de propriétés plus fondamentales d'entités dites microscopiques (l'existence de l'atome n'était pas communément acceptée à cette époque, pas plus que la dérivation d'un second principe, dit d'irréversibilité, à partir d'un système microscopique aux phénomènes réversibles). La preuve de l'existence de l'atome ainsi que les travaux d'Einstein sur le mouvement brownien finirent d'accréditer cette théorie qui se révélera par la suite très prédictive.

Les succès de la théorie cinétique des gaz encouragèrent alors certains scientifiques à étendre la méthodologie pour des écoulements habituellement modélisés par des équations continues du type Navier/Stokes. L'élément dit "microscopique" dans ce type d'approche n'est plus l'atome mais la particule fluide. Il est alors possible de définir des méthodes pertinentes basées sur une modélisation statistique des écoulements monophasiques turbulents (par exemple, voir Pope [1994a]).

C'est tout naturellement enfin que la modélisation de la phase dispersée dans les écoulements diphasiques intégra ce genre d'approches. L'élément microscopique est alors défini par les particules composant la phase dispersée. L'information sur la phase dispersée est alors contenue dans une fonction de densité de probabilité (ou "probability density function", pdf) qui obéit à une équation de type Boltzmann. Le choix des variables pertinentes décrivant l'état d'une particule n'est pas aisé. Dans un premier temps, comme application directe du formalisme de la théorie cinétique des gaz, les approches pdf n'ont pris en compte que des variables intrinsèques à la particule : position et vitesse de celle-ci. Cette approche, qualifiée par certains de "Kinetic Model", a été développée notamment par Buoyevitch [1971], Reeks [1980] ou encore Derevich and Zaichik [1988] et se propose d'étudier le comportement de la pdf à une particule $f_p(t; \underline{x}, \underline{c}_p)$. Pour étendre les travaux de Pope [1994a] aux écoulements gaz-particule, Simonin [1996] propose alors d'ajouter aux variables de la description contractée la vitesse du fluide vu par la particule. La phase dispersée est alors décrite la pdf jointe fluide-particule (toujours à une particule) $f_{fp}(t; \underline{x}, \underline{c}_f, \underline{c}_p)$. L'introduction de cette variable supplémentaire permet de généraliser le formalisme des modèles cinétiques au prix de la nécessité de fournir une équation d'évolution pour cette dernière.

L'approche statistique développée doit prendre en compte les phénomènes physiques présents dans l'écoulement. Les deux principaux phénomènes considérés ici sont la dispersion de particules par la turbulence et les collisions inter-particulaires.

La connaissance et la modélisation de la dispersion de particules inertielles dans un écoulement gaz-solide s'appuient sur la dispersion de particules fluides. Même si les différences de comportement entre les deux sont nombreuses (cf. § 1.3) la dispersion de particules inertielles s'appuie sur les mêmes mécanismes que la

dispersion de particules fluides. De plus les modèles développés pour des particules inertielles se doivent de retrouver, dans le cas limite de traceurs, les modèles préexistants de dispersion turbulente (§ 1.4.3).

La connaissance de la dispersion turbulente n'est tout de même pas suffisante à la modélisation de la dispersion de particules inertielles. Parce qu'elles ne suivent pas les mêmes trajectoires que les particules fluides, les particules inertielles ne suivent pas exactement les fluctuations de vitesse du fluide. Leur dispersion ne peut être aussi bien quantifiée que dans le cas de particules fluides, et donc leurs trajectoires ne peuvent être directement simulées par un processus stochastique sur leurs positions. Le meilleur moyen de calculer la trajectoire d'une particule inertielle est donc de résoudre l'équation du mouvement de celle-ci (1.42) :

$$\frac{du_p}{dt} = -\frac{u_p - u_{f@p}}{\tau_p} + g$$

Le principal problème de cette approche est d'estimer la vitesse fluide instantanée qui apparaît dans l'équation (1.42). Celle-ci peut être obtenue par une résolution directe des équations Navier-Stokes permettant la prise en compte de toutes les échelles de vitesse. Cette résolution s'avérant trop coûteuse, il est d'usage de se tourner vers des modèles dérivés de moindre précision (LES, URANS ou RANS) pour lesquels il est alors nécessaire de se doter d'un modèle pour estimer à l'endroit de la particule la partie non résolue de la vitesse du fluide (que ce soit à l'échelle de sous-maille pour la LES ou toute la partie fluctuante pour l'approche RANS). Afin de représenter le caractère aléatoire de la turbulence, des grandeurs stochastiques sont intégrées. L'amplitude et le temps caractéristique associés à ce bruit permettent alors de classifier la plupart des modèles en deux familles : les modèles "Eddy Lifetime" et les processus de Langevin. L'idée sous-jacente est de simuler la pdf de l'ensemble des vitesses du fluide vues et non pas directement la vitesse du fluide vue par une seule particule.

La résolution des collisions est un autre avantage de la modélisation statistique de la phase dispersée. A ce niveau de description il n'est pas pertinent de vouloir résoudre exactement toutes les collisions de l'écoulement mais il est suffisant de caractériser l'effet de l'ensemble des collisions sur le nuage de particules. L'effet des collisions est alors représenté par un opérateur aux propriétés très intéressantes.

Une fois les modélisations des phénomènes physiques pour l'approche statistique choisies, la résolution du problème peut se faire par une approche lagrangienne (méthode particulaire stochastique). Elle consiste à résoudre l'équation décrivant le comportement de la pdf représentative de l'écoulement en la discrétilisant en "numerical parcels" ou particules numériques. L'utilisation du terme "particules numériques" peut être trompeur car ces entités ne sont en fait que des échantillons de la pdf. Mais comme la résolution de l'équation de la pdf par cette discrétilisation revient à suivre les échantillons le long d'une trajectoire dont les équations sont identiques à celles d'une particule réelle, ces échantillons ont été dénommés particules numériques.

L'utilisation de méthodes statistiques associées à une telle modélisation permet de fournir des algorithmes de traitement stochastique des collisions très efficaces et beaucoup moins coûteux que les algorithmes de repérage nécessaires à une simulation déterministe de la phase dispersée.

2.1 Approche statistique des écoulements gaz-particule

2.1.1 Motivations

L'apparition, au cours de la dernière moitié du XX^e siècle, de l'outil numérique a entraîné de grandes avancées dans la modélisation des écoulements gaz-particules. Les méthodes furent d'abord limitées à la résolution d'équations eulériennes dont les termes étaient introduits de manière empirique. L'apparition de la Simulation Numérique Directe (DNS) du fluide porteur (permettant de résoudre toutes les échelles de la turbulence) ouvrit ensuite la porte aux simulations à l'échelle de la particule des écoulements à phase dispersée.

Une résolution numérique "exacte" du comportement du nuage de particules et du fluide est ainsi accessible par une simulation "DNS" du fluide autour de chaque particule associée à une modélisation du comportement interne des particules (par exemple en utilisant la mécanique des solides pour des particules solides, ou encore Navier/Stokes pour des particules liquides). Une résolution "DNS" du fluide dans ce cadre suppose une résolution à des échelles inférieures au plus petit diamètre de particule afin d'obtenir une bonne approximation des interactions entre la particule et le fluide. Pour des particules dont le diamètre est inférieur à l'échelle de longueur de Kolmogorov, il est aisément de voir que le nombre de points de calcul devient démesurément grand, d'autant plus que ces points de maillage devraient se déplacer avec les particules. C'est pourquoi ce genre d'approches est aujourd'hui limité à quelques centaines de particules (Randriana-rivelo [2005]), ce qui représente un nombre dérisoire comparé à des configurations classiques (par exemple 79g de charbon représentent plus d'un milliard de particules de 50 microns de diamètre, ou encore 1L de kérone 2 10^{15} gouttelettes de 10 microns).

Pour des systèmes à grand nombre de particules la résolution numérique passe alors par des hypothèses de modélisation des interactions fluide-particule. L'hypothèse de point-masse pour les particules est ainsi très souvent faite dès que $d_p \leq \eta_K$. Les interactions sont alors identifiées et quantifiées par les équations du chapitre 1. Cette approximation de point-masse permet en outre de dissocier le traitement des deux phases du système. Le fluide et la phase particulaire sont résolus séparément, même s'il subsiste les termes d'interaction entre les deux phases. Le nombre de degrés de liberté associé au fluide est ainsi considérablement réduit, même s'il peut rester très grand dans le cadre d'une résolution DNS ou même LES. Par contre la phase particulaire est toujours décrite par les vecteurs d'état de chaque particule, ce qui représente une somme d'informations importante pour un grand nombre de particules.

C'est pourquoi il est préférable de travailler avec une description contractée de la phase particulaire en travaillant avec une approche probabiliste¹. L'information sur les particules est alors exprimée en termes

¹L'avènement du formalisme de la théorie cinétique des gaz de Boltzmann [1872, 1964] et Maxwell [1867, 1995] à l'aube du XX^e siècle et ses grands succès prévisionnels ont définitivement ancré l'idée que tout phénomène observé à notre échelle est une conséquence, plus ou moins directe, de phénomènes et de réalités sous-jacents mettant en jeu les constituants microscopiques des objets considérés. Ainsi de l'interaction de millions de molécules naît un gaz dont les propriétés ne dépendent que de ces interactions. De cette représentation des phénomènes résulte obligatoirement le problème théorique du saut d'échelles entre le microscopique et le macroscopique. Au niveau microscopique un gaz peut être représenté par $6N$ nombres (6 pour le nombre de degrés de liberté, N pour le nombre de molécules). En théorie cinétique des gaz, le nombre N est de l'ordre de grandeur du nombre d'Avogadro $\mathcal{N} = 6,02 \times 10^{23}$ qui est immense. La donnée du système au niveau microscopique requiert alors une somme énorme d'information. *A contrario*, les propriétés macroscopiques de ce gaz (volume, pression, température, viscosité ...) forment un ensemble restreint de caractéristiques. Le passage d'une description à une autre n'est donc pas direct, et entraînera une perte d'information. Le nombre important d'objets au niveau microscopique incite à travailler dans un formalisme probabiliste. Il est en effet impossible (et sans intérêt) de caractériser expérimentalement une réalisation microscopique du gaz. Les mesures macroscopiques ne sont d'ailleurs pas sensibles au comportement individuel des objets microscopiques, mais seulement à des moyennes sur ces objets. Ce processus de moyenne permet de justifier l'utilisation du formalisme probabiliste au regard de la "loi des grands nombres". Celle-ci assure que, pour un nombre suffisamment grand d'événements, le processus de moyenne aboutit à des prédictions pratiquement exactes.

probabilistes sous la forme d'une densité de probabilité des états du système constitué par les N particules. Afin de représenter au mieux la physique de ces écoulements, la description contractée se doit alors d'incorporer toutes les variables décrivant l'état d'une particule (ou de plusieurs particules en plusieurs temps et plusieurs points de l'espace des phases pour une description plus détaillée de la phase particulaire).

2.1.2 Choix de la description contractée

Le choix de la description contractée varie en fonction de la physique du problème mais se limite, comme dans le cas monophasique, le plus souvent à une description en un point et un temps de la phase particulaire. La littérature considère souvent le vecteur d'état comme composé de la position et de la vitesse de la particule (de manière identique à la mécanique statistique classique²). Mais cette description ne prend pas en compte les spécificités des écoulements gaz-particule, dans lesquels existent des interactions fortes entre particules et entre fluide et particules.

Une dispersion en diamètre (coalescence, break-up) peut naître des interactions entre particules qui nécessite dans ces cas de prendre en compte la variable diamètre dans le choix de la description contractée. Ce paramètre n'apparaît pas dans notre analyse du fait que l'on considère uniquement des particules solides monodisperses (toutes les particules ont le même diamètre qui ne varie pas au cours du temps). Nos particules seront de plus supposées isothermales et chimiquement inertes, ce qui élimine des variables décrivant le système la température ainsi que la composition des particules. Pour des raisons de simplicité, on oublie de même dans notre description statistique de la phase dispersée la vitesse de rotation des particules. L'extension de l'approche pdf à des cas où la vitesse de rotation influence l'écoulement se fait de manière naturelle (Sakiz [1999]).

Ces interactions entre particules impliquent de plus *a minima* deux particules, ce qui rend nécessaire une description par une pdf en deux points pour étudier finement les phénomènes. Notre approche prend le parti d'une description en un point de la phase dispersée ce qui oblige à formuler des hypothèses sur la forme de la pdf en deux points du système f_{pp} . Ces hypothèses sont nécessaires à la fermeture de notre description en cas de prise en compte des collisions, de manière identique à l'hypothèse de chaos moléculaire formulée par Boltzmann³.

2.1.3 Description en terme de pdf de particules

La deuxième famille d'interactions, c'est-à-dire entre le fluide et les particules, n'est pas toujours prise en compte directement dans les descriptions contractées du système. Le nuage de particules est alors simplement modélisé par l'évolution de la fonction $f_p(t; \underline{x}, \underline{c}_p)$ où \underline{c}_p est la variable de l'espace des phases associées à la vitesse d'une particule \underline{u}_p . Cette fonction peut être définie comme la fonction de répartition réduite à une particule dans l'équivalent de la hiérarchie BBGKY⁴ appliquée à la phase particulaire. Elle

²En mécanique classique l'état d'une particule ponctuelle à un instant donné est caractérisé par sa position \underline{x} et sa vitesse \underline{u} (elle possède donc 6 degrés de liberté en dimension 3). Pour un système constitué de N particules, l'état instantané est donné par les $6N$ paramètres : $\{\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_N; \underline{u}_1, \dots, \underline{u}_N\}$

³Seule la fonction de répartition à deux particules intervient dans l'équation d'évolution de la pdf à une particule, mais celle-ci est a priori inconnue. Boltzmann fit alors une hypothèse sur la fonction de répartition à deux particules en se basant sur le concept physique de "chaos moléculaire". Partant du principe que les particules entrant en collision proviennent de régions différentes et ont expérimenté des collisions antérieures différentes, Boltzmann émit l'hypothèse de décorrélation de leurs vecteurs d'état. La fonction de répartition à deux particules s'exprime alors comme le produit des fonctions à une particule aux points considérés.

⁴La hiérarchie BBGKY (explicitée de manière indépendante par Bogoliubov, Born, Green, Kirkwood et Yvon) est une hiérarchie de descriptions du système. Cette hiérarchie est faite par le choix de sous-systèmes représentatifs composés non pas des N particules du système mais d'un nombre plus petit S .

représente donc la densité moyenne de particules à l'instant t au point $(\underline{x}, \underline{c}_p)$ de l'espace des phases. Dans le cadre des écoulements gaz-particules, Reeks [1991] et Zaichik and Vinberg [1991] proposent une définition équivalente mais d'origine physique, basée sur la notion moyenne des réalisations $W_p^{(n)}$ des variables position-vitesse des particules :

$$W_p^{(m)}(t; \underline{x}, \underline{c}_p) = \delta(\underline{x}_p^{(m)}(t) - \underline{x})\delta(\underline{u}_p^{(m)}(t) - \underline{c}_p) \quad (2.1a)$$

$$f_p(t; \underline{x}, \underline{c}_p) = \left\langle \sum_{m=1}^{N_p} W_p^{(m)}(t; \underline{x}, \underline{c}_p) \right\rangle \quad (2.1b)$$

où $\langle \cdot \rangle$ est l'opérateur de moyenne sur l'ensemble des réalisations de l'écoulement (cf. § 1.1.1).

Dans les approches dites à pdf de particules la variable "vitesse du fluide vu" (de même que la température du fluide vu dans des cas non isothermes) est alors considérée comme extérieure à la description du système. Vu que cette variable intervient dans l'équation du mouvement des particules au travers de la traînée (1.42), il apparaît alors un terme non fermé dans l'équation d'évolution de f_p dû à la méconnaissance de la vitesse du fluide vu par la particule :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} [c_{p,k} f_p] &= -\frac{\partial}{\partial c_{p,k}} \left[\frac{dc_{p,k}}{dt} f_p \right] + \left(\frac{\partial f_p}{\partial t} \right)_{coll} \\ &= \frac{\partial}{\partial c_{p,k}} \left[\frac{c_{p,k}}{\tau_p} f_p \right] - \frac{\partial}{\partial c_{p,k}} \left[\frac{1}{\tau_p} \langle \underline{u}_{f@p} \mid \underline{x}_p, \underline{c}_p \rangle \cdot f_p \right] + \left(\frac{\partial f_p}{\partial t} \right)_{coll} \end{aligned} \quad (2.2)$$

où l'opérateur $\frac{1}{\tau_p} \langle \underline{u}_{f@p} \mid \underline{x}_p, \underline{c}_p \rangle$ doit être modélisé pour fermer l'équation (en plus du terme de collisions). Ceci peut être fait moyennant des hypothèses assez fortes sur la forme du champ fluide vu. En particulier les travaux de Derevich and Zaichik [1988] et Reeks [1991, 1993] permettent une approche consistante de fermeture de l'équation (2.2) dans un cadre néanmoins pas tout à fait général et utilisant un formalisme coûteux à mettre en œuvre.

Les moments statistiques de la phase particulaire sont alors obtenus en effectuant une moyenne des variables microscopiques suivant la loi de probabilité f_p . Par exemple la densité de particule est donnée par :

$$n_p(\underline{x}, t) = \int f_p(t; \underline{x}, \underline{c}_p) d\underline{c}_p \quad (2.3)$$

2.1.4 Description en terme de pdf jointe fluide-particule

Afin d'éviter les problèmes de fermeture précédents, il est possible d'élargir la description du système en y incorporant les variables associées au fluide porteur, dans notre cas la variable "vitesse du fluide vu" $\underline{u}_{f@p}$ ⁵. On parle alors pour les écoulements diphasiques de pdf jointe fluide-particule f_{fp} (Simonin [1996]). La quantité $f_{fp}(t; \underline{x}, \underline{c}_f, \underline{c}_p) d\underline{x} d\underline{c}_f d\underline{c}_p$ est le nombre probable de particules dont le centre de masse au temps t est situé dans le volume $[\underline{x}, \underline{x} + d\underline{x}]$ avec une vitesse de translation $\underline{u}_p \in [\underline{c}_p, \underline{c}_p + d\underline{c}_p]$ et une vitesse du fluide le long de sa trajectoire $\underline{u}_{f@p} \in [\underline{c}_f, \underline{c}_f + d\underline{c}_f]$. Cette quantité s'interprète aussi comme le nombre probable de particules dont le vecteur d'état à l'instant t est situé dans le volume $d\underline{x} d\underline{c}_p d\underline{c}_f$ centré autour du

⁵Alors que dans la théorie cinétique des gaz, l'élément de base était la molécule, les équations déterministes gouvernant un écoulement turbulent (les équations de Navier/Stokes) portent sur le vecteur d'état de "particules fluides". Ces particules sont définies comme le plus petit élément de fluide regroupant suffisamment de molécules pour obtenir des statistiques fiables, c'est-à-dire permettant à la particule fluide d'avoir la même vitesse que celle du champ eulérien à l'endroit de la particule : $u_f(t) = u_f(x_f(t), t)$.

point $(\underline{x}, \underline{c}_p, \underline{c}_f)$ de l'espace des phases. Elle peut aussi être définie à partir de la moyenne d'ensemble :

$$W_{fp}^{(m)}(t; \underline{x}, \underline{c}_f, \underline{c}_p) = \delta(\underline{x}_p^{(m)}(t) - \underline{x})\delta(\underline{u}_{f@p}^{(m)}(t) - \underline{c}_f)\delta(\underline{u}_p^{(m)}(t) - \underline{c}_p) \quad (2.4a)$$

$$f_{fp}(t; \underline{x}, \underline{c}_f, \underline{c}_p) = \left\langle \sum_{m=1}^{N_p} W_{fp}^{(m)}(t; \underline{x}, \underline{c}_f, \underline{c}_p) \right\rangle \quad (2.4b)$$

De plus, cette fonction de distribution jointe contient aussi l'information relative à la seule phase particulière. Une intégration sur l'ensemble des réalisations fluide permet d'accéder à l'information statistique sur les positions et vitesses des particules :

$$f_p(t; \underline{x}, \underline{c}_p) = \int f_{fp}(t; \underline{x}, \underline{c}_p, \underline{c}_f) d\underline{c}_f \quad (2.5)$$

Il est alors habile d'utiliser la notion de probabilité conditionnelle ($p(B) = p(A)p(B | A)$) pour écrire notre pdf jointe sous la forme :

$$f_{fp}(t; \underline{x}, \underline{c}_f, \underline{c}_p) = f_f(t; \underline{x}, \underline{c}_f | \underline{c}_p) f_p(t; \underline{x}, \underline{c}_p) \quad (2.6)$$

où $f_f(t; \underline{x}, \underline{c}_f | \underline{c}_p)$ est la pdf conditionnelle des vitesses du fluide vu. Elle représente la probabilité qu'une particule ayant une vitesse \underline{c}_p voit une vitesse de fluide \underline{c}_f . Du fait des fortes interactions entre le fluide et les particules (notamment par la traînée) il existe une corrélation entre la vitesse d'une particule et la vitesse fluide qu'elle "voit". Les deux variables n'étant pas indépendantes, la pdf conditionnée ne s'apparente donc pas à la pdf des vitesses fluide :

$$f_f(t; \underline{x}, \underline{c}_f | \underline{c}_p) \neq f_f(t; \underline{x}, \underline{c}_f) \quad (2.7)$$

Cette propriété n'est que la transcription de la différence entre vitesse du fluide vu par la particule et vitesse intrinsèque du fluide (cf. § 1.3.6). C'est elle qui est à l'origine de la vitesse de dérive.

Comme dans le cas d'une description particulière, les moments du système sont obtenus en effectuant des moyennes comme par exemple la densité de particules :

$$n_p(\underline{x}, t) = \int f_{fp}(t; \underline{x}, \underline{c}_f, \underline{c}_p) \underline{c}_f d\underline{c}_p \quad (2.8)$$

Une intégration uniquement sur les vitesses des particules définit la pdf de vitesse du fluide conditionnée par la présence d'une particule (quelconque) :

$$f_{f|p}(t; \underline{x}, \underline{c}_f) = \frac{1}{n_p(\underline{x}, t)} \int f_{fp}(t; \underline{x}, \underline{c}_f, \underline{c}_p) d\underline{c}_p \quad (2.9)$$

Il est à noter que $f_{f|p}(t; \underline{x}, \underline{c}_f)$ coïncide avec $f_f(t; \underline{x}, \underline{c}_f | \underline{c}_p)$ uniquement s'il n'existe pas de corrélation entre vitesse de la particule et vitesse du fluide vu.

De manière générale la pdf jointe fluide-particule peut être écrite :

$$f_{fp}(t; \underline{x}, \underline{c}_f, \underline{c}_p) = f_p(t; \underline{x}, \underline{c}_p) f_{f|p}(t; \underline{x}, \underline{c}_f) \quad (2.10)$$

2.2 Équation d'évolution du système

L'évolution du système est déterminée par l'équation d'évolution de la pdf qui a été prise comme représentative du système. L'approche de cette étude est une approche à pdf jointe fluide-particule à une particule

où l'écoulement est représenté par la pdf $f_{fp}(t; \underline{x}, \underline{c}_f, \underline{c}_p)$. L'équation d'évolution de cette dernière s'obtient par une différenciation de la relation (2.4a) qui est ensuite moyennée sur l'ensemble des réalisations de l'écoulement (et procède de propriétés de conservation dans l'espace des phases) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{fp}}{\partial t} + \frac{\partial c_{p,k} f_{fp}}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial c_{p,k}} \left[\left\langle \frac{du_{p,k}}{dt} \mid \underline{c}_f, \underline{c}_p \right\rangle \cdot f_{fp} \right] \\ + \frac{\partial}{\partial c_{f,k}} \left[\left\langle \frac{du_{f@p,k}}{dt} \mid \underline{c}_f, \underline{c}_p \right\rangle \cdot f_{fp} \right] = \left(\frac{\partial f_{fp}}{\partial t} \right)_{coll} \end{aligned} \quad (2.11)$$

$\frac{d}{dt}$ représente la dérivée lagrangienne le long des trajectoires des particules de n'importe quelle propriété du fait des interactions avec le fluide ou des forces extérieures. $\langle \cdot \rangle$ représente la moyenne d'ensemble sur une infinité de réalisations identiques de l'écoulement diphasique et $\langle \psi \mid \underline{c}_f, \underline{c}_p \rangle$ est la moyenne conditionnée de ψ :

$$\langle \psi \mid \underline{c}_f, \underline{c}_p \rangle = \langle \psi(\underline{u}_{f@p}, \underline{u}_p) \mid \underline{x}_p = \underline{x}, \underline{u}_{f@p} = \underline{c}_f, \underline{u}_p = \underline{c}_p \rangle \quad (2.12)$$

Les termes apparaissant dans l'équation sous une forme non-fermée nécessitent une modélisation pour pouvoir simuler l'écoulement :

- le terme $\frac{du_{p,k}}{dt}$ est issu, via la loi du mouvement de Newton, de la modélisation des forces s'exerçant sur la particule.
- le terme $\frac{du_{f@p,k}}{dt}$ n'est pas accessible à partir d'un calcul eulérien du fluide porteur. Il faut donc se donner un modèle d'évolution de la vitesse fluide le long de la trajectoire des particules. Il est alors nécessaire de créer un champ fluide composite dont les propriétés respecteront des contraintes imposées par la physique du problème. Ce terme sera modélisé, dans la continuation des approches pdf monophasiques et dans le cadre d'une pdf jointe fluide-particule, par un processus stochastique qui devra satisfaire :

$$f_f^{L+}(t; \underline{x}, \underline{c}_f) \approx f_f^L(t; \underline{x}, \underline{c}_f \mid \underline{c}_p) \quad (2.13)$$

- le terme de collision $(\frac{\partial f_{fp}}{\partial t})_{coll}$ représente l'influence des collisions sur la pdf. Sous une hypothèse d'interaction binaire celui-ci ne fait appel qu'à la pdf jointe à deux particules f_{fpfp} . Cette pdf n'est bien sûr pas accessible dans nos simulations et requiert donc d'être modélisée à partir de grandeurs connues, *i.e.* en termes de pdf jointe à une particule.

2.3 Transport des particules

Les termes représentant le transport des particules sont :

1. le terme de déplacement des particules dans l'espace réel :

$$\frac{\partial c_{p,k} f_{fp}}{\partial x_k} \quad (2.14)$$

qui dans l'effet des vitesses des particules sur la distribution spatiale de celles-ci.

2. le terme de déplacement des particules dans le sous-espace des phases associé à la vitesse des particules :

$$\frac{\partial}{\partial c_{p,k}} \left[\left\langle \frac{du_{p,k}}{dt} \mid \underline{c}_f, \underline{c}_p \right\rangle \cdot f_{fp} \right] \quad (2.15)$$

qui représente l'effet des accélérations des particules sur la distribution des vitesses.

3. le terme de déplacement des particules dans le sous-espace des phases associé à la vitesse du fluide vu :

$$\frac{\partial}{\partial c_{f,k}} \left[\left\langle \frac{du_{f@p,k}}{dt} \mid \underline{c}_f, \underline{c}_p \right\rangle \cdot f_{fp} \right] \quad (2.16)$$

qui représente l'effet de l'accélération du fluide sur la distributions des vitesses.

Dans le cadre d'une approche pdf prenant en compte la vitesse d'une particule comme variable de la description contractée (ce qui est toujours le cas), le premier terme de transport ne nécessite pas d'hypothèse de modélisation puisque la distribution de vitesse est connue. Par contre l'accélération n'étant pas prise en compte comme variable de la description contractée, celle-ci n'est pas connue et doit être modélisée. Cette modélisation est dans ce cas précis aisée si l'on fait appel à la loi de Newton et l'approximation de point-masse pour écrire (cf. § 1.3) :

$$\frac{du_p}{dt} = \frac{\underline{F}_d}{m_p} + \underline{g} \quad (2.17)$$

Le terme de transport des vitesses des particules s'écrit donc (en l'absence de gravité) :

$$\frac{\partial}{\partial c_{p,k}} \left[\left\langle \frac{du_{p,k}}{dt} \mid \underline{c}_f, \underline{c}_p \right\rangle \cdot f_{fp} \right] = \frac{\partial}{\partial c_{p,k}} \left[\left\langle \frac{\underline{F}_{d,k}}{m_p} \mid \underline{c}_f, \underline{c}_p \right\rangle \cdot f_{fp} \right] \quad (2.18)$$

où, dans le cadre d'une approche pdf jointe fluide-particule, tous les termes sont connus (puisque les distributions des vitesses particule et du fluide vu sont connues). Tel ne serait pas le cas dans une approche pdf de particules où l'effet de la vitesse du fluide vu sur la distribution de vitesse des particules devrait être modélisé. Des hypothèses fortes sur la distribution de cette vitesse (distribution gaussienne) doivent être formulées pour obtenir des fermetures explicites Buyevitch [1971], Reeks [1980], Derevich and Zaichik [1988]. Ces hypothèses ne sont plus nécessaires dans une approche pdf jointe fluide-particule en contre-partie d'un terme supplémentaire dans l'équation d'évolution du système. Il est en effet maintenant nécessaire, pour modéliser le transport des particules, de modéliser l'accélération de la vitesse du fluide vu pour connaître l'effet de cette dernière sur la distribution de vitesse du fluide vu.

2.4 Modélisation lagrangienne du fluide vu

La présence du terme d'accélération du fluide le long de la trajectoire de la particule $\frac{du_{f@p,k}}{dt}$ dans l'équation d'évolution du système impose de se dorer d'une modélisation de l'accélération du champ fluide pour fermer le système. Les configurations d'écoulements accessibles aux simulations numériques directes (DNS) du fluide associées à un suivi lagrangien des particules se limitent actuellement et à moyen terme à des configurations académiques (Turbulence Homogène Isotrope, écoulements cisaillés ...). Pour des écoulements plus complexes, la limitation des moyens de calcul impose de résoudre des équations dérivées de Navier-Stokes où toutes les échelles de vitesse ne sont pas résolues.

L'équation de quantité de mouvement d'une particule (1.42) s'écrit :

$$\frac{du_p}{dt} = -\frac{\underline{u}_p - \underline{u}_{f@p}}{\tau_p} + \underline{g}$$

C'est une équation différentielle du premier ordre, non-homogène et non-linéaire. Pour de petits incrément de temps δt cette équation peut être résolue analytiquement en considérant la vitesse instantanée du fluide et le temps d'interaction de traînée constants sur le pas de temps. Les trajectoires des particules peuvent ainsi être construites par les équations :

$$\underline{u}_p(t + \delta t) = \underline{u}_p(t) e^{-\delta t/\tau_p} + \left[1 - e^{-\delta t/\tau_p} \right] (\underline{u}_{f@p}(t) + \tau_p \underline{g}) \quad (2.19a)$$

$$\underline{x}_p(t + \delta t) = \underline{x}_p(t) + \frac{\delta t}{2} (\underline{u}_p(t + \delta t) + \underline{u}_p(t)) \quad (2.19b)$$

Sous cette forme il est visible que le principal problème est la détermination de la vitesse instantanée du fluide vu par la particule le long de sa trajectoire et l'intervalle de temps pendant lequel elle peut être considérée comme constante.

Une première possibilité serait de n'utiliser que les échelles résolues pour calculer les trajectoires de nos particules. Si cette approche a été souvent utilisée lors de simulations fluide réalisées en LES, les limites de cette approche sont visibles dans le cas de calculs RANS où aucune échelle turbulente n'est présente dans le champ de vitesse fluide calculé. Les particules sont alors seulement convectées par le mouvement moyen du fluide et aucune interaction avec la turbulence du fluide n'est présente, inhibant les mécanismes décrits au § 1.3 (notamment la dispersion turbulente des particules).

Il apparaît donc nécessaire de simuler les parties non-résolues du champ de vitesse fluide à partir des variables connues du fluide. Ce sujet a été abondamment traité dans le cas de calculs RANS du fluide du fait de leur absolue nécessité, mais l'idée de recréer les parties non-résolues s'implante aujourd'hui aussi pour les simulations LES (Vinkovic et al. [2006], Fede and Simonin [2006]). En effet il est maintenant avéré que les échelles spatiales du mouvement particulaire (pour certaines inerties de particules engendrant de la concentration préférentielle) sont très petites (inférieures même au diamètre des particules), ce qui implique que même les échelles de sous-maille de la LES vont venir influencer le comportement des particules (notamment en terme de concentration préférentielle § 1.3.8).

L'étude sera limiterons aux écoulements où le champ fluide ne sera représenté que par les variables macroscopiques que sont la vitesse moyenne, les tensions de Reynolds et la dissipation. L'information utilisée sera donc identique à celle issue de calculs RANS, même si les données pourront être fournies par un calcul LES. C'est donc toute la partie fluctuante de la vitesse fluide le long des trajectoires des particules qu'il est nécessaire de mimer.

La transition "chaotique" entre deux instants de la vitesse du fluide dans un écoulement turbulent présente certaines similitudes avec les objets mathématiques stochastiques que sont les processus de Markov. Ceux-ci présentent tout de même le désavantage de ne pas avoir de mémoire. La transition vers l'instant suivant ne dépend en effet que de l'état au moment présent, contrairement à la turbulence qui présente de nombreuses échelles de temps (cf. § 1.2.6). La simulation de l'évolution de la vitesse du fluide le long des trajectoires des particules se doit donc d'associer au processus de Markov un terme permettant de mimer la mémoire de la turbulence.

2.4.1 Modèles "Eddy lifetime"

Le modèle stochastique dit de durée de vie des tourbillons ("Eddy lifetime") repose sur une modélisation de l'interaction entre la particule et l'écoulement. La particule est supposée interagir avec une succession de tourbillons au fur et à mesure de sa progression dans l'écoulement (Yuu et al. [1978], Gosman and Ioanides [1981]). Chaque tourbillon est caractérisé par une vitesse, une échelle de temps et une échelle de longueur. La taille et la durée de vie du tourbillon sont estimés à partir des propriétés locales de la turbulence (q_f^2 et ε_f) :

$$\tau_e = A \frac{q_f^2}{\varepsilon_f} \quad (2.20a)$$

$$l_e = B \frac{q_f^2 \sqrt{q_f^2}}{\varepsilon_f} \quad (2.20b)$$

avec les coefficients A et B variant suivant les modèles.

La vitesse du tourbillon (qui est la vitesse fluctuante à superposer à la vitesse moyenne) est quant à elle tirée aléatoirement à partir d'une pdf dont les propriétés sont encore issues des valeurs locales de turbulence. La forme généralement assumée pour cette pdf est une maxwellienne centrée ce qui permet de la caractériser uniquement à l'aide sa variance :

$$P(u_{e,i}) = \frac{1}{\sqrt{4/3\pi q_f^2}} \exp\left[-\frac{u_{e,i}^2}{4/3q_f^2}\right] \quad (2.21)$$

Cette vitesse est considérée comme constante durant tout le temps d'interaction de la particule avec ce tourbillon τ_{int} . Ce temps d'interaction est pris comme le minimum entre la durée de vie du tourbillon et la durée de transit de la particule au travers du tourbillon :

$$\tau_{int} = \min(\tau_e, \tau_c) \quad (2.22)$$

Le temps de transit peut être approximé par la formule :

$$\tau_c = -\tau_p \ln\left(1 - \frac{l_e}{\tau_p |\underline{u}_{f@p} - \underline{u}_p|}\right) \quad (2.23)$$

Le pas de temps d'intégration du système (2.19) est alors directement pris comme $\delta t = \tau_{int}$. A la fin de chaque pas de temps une nouvelle vitesse fluctuante est générée aléatoirement à partir de la pdf issue des valeurs turbulentes à la nouvelle position de la particule. Le nouveau temps d'interaction est aussi déterminé et le processus reprend place.

Les modèles "Eddy lifetime" présente tout de même le désavantage majeur de ne pas prendre en compte correctement les corrélations temporelles et spatiales de l'écoulement turbulent. En effet, la fonction d'autocorrélation lagrangienne temporelle du processus est linéaire. Le comportement est donc éloigné de la forme typique en exponentielle observée expérimentalement (cf. § 1.2.6) et le temps intégral lagrangien du fluide vu par les particules est donné par :

$$\tau_{f@p}^t = \frac{1}{2} \tau_{int} \quad (2.24)$$

2.4.2 Équation de Langevin

La prédiction de la vitesse du fluide vu par des approches de type "Eddy lifetime" se heurte donc à une modélisation trop simplifiée de la turbulence par un processus Markovien. La turbulence induit en effet des corrélations spatiales et temporelles dans l'écoulement, corrélations qui doivent être prises en compte lors de la modélisation de la vitesse du fluide vu.

En parallèle, Berlemont et al. [1990] et Burry and Bergeles [1993] développent alors l'idée de simuler le comportement de la particule fluide par un processus Markovien simultanément au suivi lagrangien de la particule inertielle. La méthode est similaire à celle de "Eddy lifetime" dans les sens où elle cherche à résoudre le système (2.19). Ces méthodes diffèrent dans la détermination de la vitesse fluctuante le long de la trajectoire de la particule.

En suivant simultanément une particule fluide située initialement à la position de la particule inertielle et la trajectoire de la particule inertielle il est possible d'évaluer la position relative de la particule fluide par rapport à la particule inertielle après la durée δt . Il est alors possible de reconstruire la vitesse fluctuante à l'endroit de la particule en se donnant l'équation d'évolution de la vitesse d'une particule fluide le long de sa trajectoire ainsi que les corrélations spatiales présentes dans l'écoulement. On peut donc ici faire appel aux études qui ont été menées sur la modélisation lagrangienne de la turbulence.

2.4.2.1 Incrément de vitesse d'une particule fluide

La modélisation stochastique de l'incrément de vitesse d'une particule fluide dans un écoulement turbulent a fait l'objet de nombreuses études. Ce domaine de la mécanique des fluides doit beaucoup à Pope [1981, 1983, 1985, 1994a] qui fut l'acteur principal de la modélisation par une équation de Langevin de la vitesse d'une particule fluide. La modélisation stochastique des écoulements monophasiques consiste à chercher une processus $x^+(t)$, $\frac{Dx^+(t)}{Dt} = U^+(t)$ pour lequel la pdf de transition est proche de la pdf de l'écoulement :

$$f_f^{L^+}(\underline{x}, \underline{c}_f, \psi; t | \underline{x}_0, \underline{c}_{f0}, \psi_0; t_0) \approx f_f^L(\underline{x}, \underline{c}_f, \psi; t | \underline{x}_0, \underline{c}_{f0}, \psi_0; t_0) \quad (2.25)$$

Afin de trouver ce processus il est d'abord nécessaire de connaître l'incrément "vrai" de vitesse d'une particule fluide $d\underline{u}_f^+$. Celle-ci est obtenue à l'aide des équations de Navier-Stokes incompressibles :

$$\frac{Du_f^{+i}}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu_f \frac{\partial^2 u_{f,i}}{\partial x_k \partial x_k} \quad (2.26a)$$

$$= -\frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} + \nu_f \frac{\partial^2 U_{f,i}}{\partial x_k \partial x_k} - \frac{\partial p'}{\partial x_i} + \nu_f \frac{\partial^2 u'_{f,i}}{\partial x_k \partial x_k} \quad (2.26b)$$

où $U_{f,i} = \langle u_{f,i} \rangle$ est la vitesse moyenne dans la direction i . Toutes les quantités du terme de droite sont évaluées à la position de la particule \underline{x}_f^+ et où la dérivée lagrangienne le long de la trajectoire de la particule fluide est définie par :

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u_{f,k} \frac{\partial}{\partial x_k} \quad (2.27)$$

Un modèle lagrangien stochastique consiste à suivre des particules dans leurs trajectoires ($dx_i^+/dt = u_{f,i}^+$) dont l'incrément de vitesse "vrai" a été modélisé par un processus prenant la forme générale :

$$\frac{Du_{f,i}^+}{Dt} = -\frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} + \nu_f \frac{\partial^2 U_{f,i}}{\partial x_k \partial x_k} + G_{ik}(u_{f,k}^+ - U_{f,k}) + B_{ik}w_{f,k} \quad (2.28)$$

où \underline{G} et \underline{B} sont des matrices dont la forme est à déterminer pour obtenir la meilleure approximation possible de la pdf f_f^L . Le vecteur \underline{w}_f est un bruit blanc isotropique, c'est-à-dire que $\underline{W}(t) = \int_0^t \underline{w}(s)ds$ un processus de Wiener isotropique (vecteur aléatoire de loi normale centrée et de variance t).

Ces modèles basés sur une équation de Langevin ont prouvé leur efficacité mais présentent deux principaux désavantages :

- Ces modèles mènent à une équation d'évolution de la pdf f_f non fermée car le taux de dissipation moyen ε_f doit être fourni à la simulation. Cette faiblesse a été en partie résolue par l'introduction d'une nouvelle équation de Langevin sur une nouvelle variable (Pope [1994a]) : la fréquence turbulente $\omega(t; \underline{x}) = \varepsilon_f(t; \underline{x})/q_f^2(t; \underline{x})$. Cette variable (et non pas directement la dissipation) fut choisie en concordance avec le modèle de Kolmogorov [1941].
- Ces modèles ne sont pleinement justifiés que sur une hypothèse de nombre de Reynolds infini. La forme de la fonction d'autocorrélation issue de ces modèles est une forme exponentielle qui est valable pour tout temps seulement pour un Reynolds infini. Pour prendre en compte l'influence du nombre de Reynolds a alors été développé des modèles basés sur une équation de Langevin sur l'accélération de la particule fluide (Sawford [1991]).

Le premier de ces défauts n'a plus cours dans une modélisation stochastique lagrangienne des écoulements gaz-particule car alors la dissipation turbulente $\varepsilon_f(t; \underline{x})$ est une donnée du problème, et non plus une inconnue à calculer. La deuxième faiblesse de ces modèles persiste au passage à des particules inertielles mais une modélisation en terme d'accélération du fluide ne serait pas pertinente dans le cas d'écoulements

gaz-particule. Le meilleur moyen de calculer la trajectoire d'une particule inertielle semble être de suivre simultanément une particule fluide puis d'utiliser des corrélations spatiales pour relier la vitesse de la particule fluide après un pas de temps à la vitesse du fluide vu par la particule. Cette démarche pourrait théoriquement être menée avec l'accélération mais les corrélations spatiales d'accélération ne sont pas du tout identifiées dans les écoulements turbulents, contrairement aux corrélations spatiales de vitesse (gradient de vitesse moyenne, tenseur de corrélations eulérien). C'est pourquoi l'équation (2.28) est utilisée comme base du modèle de vitesse de fluide vue par les particules.

Cette équation peut être réécrite pour fournir la composante fluctuante de la vitesse des particules fluides en utilisant les équations de Navier-Stokes pour la vitesse moyenne. Ces dernières s'écrivent :

$$\frac{\overline{D}U_{f,i}}{\overline{Dt}} = -\frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} + \nu_f \frac{\partial^2 U_{f,i}}{\partial x_k \partial x_k} - \frac{\partial R_{ff,ik}}{\partial x_k} \quad (2.29)$$

où $\underline{\underline{R}}_{ff} = \langle \underline{u}_f \otimes \underline{u}_f \rangle - \underline{U}_f \otimes \underline{U}_f$ est le tenseur des tensions de Reynolds et la dérivée lagrangienne dans le champ fluide est définie par :

$$\frac{\overline{D}}{\overline{Dt}} = \frac{\partial}{\partial t} + U_{f,k} \frac{\partial}{\partial x_k} \quad (2.30)$$

En soustrayant l'équation sur la vitesse moyenne à l'équation (2.28) on obtient l'équation sur la vitesse fluctuante d'une particule fluide :

$$\frac{Du_{f,i}^{+'}}{Dt} = \frac{\partial R_{ff,ik}}{\partial x_k} + A_{ik}u_{f,k}^{+'} + B_{ik}w_{f,k} \quad (2.31)$$

avec

$$A_{ik} = G_{ik} - \frac{\partial U_{f,i}}{\partial x_k} \quad (2.32)$$

Enfin cette équation est réécrite pour satisfaire au formalisme des équations différentielles stochastiques (voir la très bonne introduction aux SDE : Evans [2000]) :

$$Du_{f,i}^{+'} = \frac{\partial R_{ff,ik}}{\partial x_k} dt + A_{ik}u_{f,k}^{+'} dt + B_{ik}\delta W_{f,k} \quad (2.33)$$

où le vecteur $\underline{B} \cdot \delta \underline{W}_f$ est maintenant un vecteur aléatoire de loi gaussienne avec une matrice d'autocorrélations donnée par ${}^t \underline{\underline{B}} \cdot \underline{\underline{B}} \times dt$

2.4.2.2 Corrélations spatiales entre particules fluide et inertielle

Pour établir les corrections dues à la différence de trajectoires entre la particule inertielle et le particule fluide qui lui est associée à l'instant t écrivons l'incrément de vitesse du fluide vu le long de la trajectoire de la particule (cf. figure 2.1,Minier [1988]) :

$$du_{f@p,i} = u_{f,i}(t + \delta t; \underline{x} + \underline{u}_p \delta t) - u_{f,i}(t; \underline{x}) \quad (2.34a)$$

$$= u_{f,i}(t + \delta t; \underline{x} + \underline{u}_{f@p} \delta t) - u_{f,i}(t; \underline{x}) \quad (2.34b)$$

$$+ U_{f,i}(t + \delta t; \underline{x} + \underline{u}_p \delta t) - U_{f,i}(t + \delta t; \underline{x} + \underline{u}_{f@p} \delta t) \quad (2.34c)$$

$$+ u'_{f@p,i}(t + \delta t; \underline{x} + \underline{u}_p \delta t) - u'_{f@p,i}(t + \delta t; \underline{x} + \underline{u}_{f@p} \delta t) \quad (2.34d)$$

- Le premier terme (2.34b) est l'incrément de vitesse de la particule fluide le long de sa trajectoire et à ce titre peut être modélisé par l'équation (2.28).

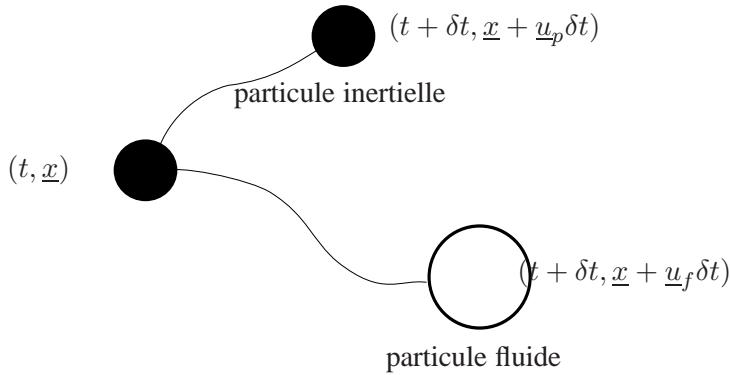


FIG. 2.1 – Différences de trajectoires entre particule inertielle et particule fluide.

- le deuxième terme (2.34c) est dû à la différence de vitesse moyenne du fluide entre les deux points d'arrivée des particules inertielle et fluide. Il s'écrit au premier ordre :

$$U_{f,i}(t + \delta t; \underline{x} + \underline{u}_p \delta t) - U_{f,i}(t + \delta t; \underline{x} + \underline{u}_{f@p} \delta t) = (u_{p,k} - u_{f@p,k}) \frac{\partial U_{f,i}}{\partial x_k}(t + \delta t) \delta t \quad (2.35)$$

- le dernier terme (2.34d) représente l'incrément de vitesse fluctuante du fluide. Cette grandeur n'est pas accessible dans les simulations fluide à moins de se donner une modélisation du tenseur des corrélations eulériennes en deux points (1.24) (Berlemont et al. [1990]). On profite des degrés de liberté fournis par \underline{A} et $\underline{\underline{B}}$ pour inclure les effets de ce terme dans ces matrices.

2.4.2.3 Équation de Langevin de la vitesse du fluide vu

Finalement l'équation mimant le champ de vitesse ressenti par la particule le long de sa trajectoire peut être prise sous la forme proposée par Simonin et al. [1993] :

$$du_{f@p,i}^+ = \left(-\frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} + \nu_f \frac{\partial^2 U_{f,i}}{\partial x_k \partial x_k} \right) \delta t + (u_{p,k} - u_{f@p,k}^+) \frac{\partial U_{f,i}}{\partial x_k} \delta t + G_{ik} (u_{f@p,k}^+ - U_{f,k}) \delta t + B_{ik} \delta W_{fp,k} \quad (2.36)$$

2.4.2.4 Équation de Langevin sur la vitesse fluctuante

Le même traitement que dans le cas monophasique peut être effectué pour obtenir l'équation de la vitesse fluctuante le long de la trajectoire de la particule. Il est à remarquer que la vitesse fluctuante est donnée par rapport à la vitesse moyenne du fluide \underline{U}_f et non de la vitesse moyenne du fluide vu :

$$u_{f@p,i}'' = u_{f@p,i} - U_{f,i} \quad (2.37)$$

En notant que l'équation de quantité de mouvement de Navier-Stokes ne doit plus s'exprimer en fonction de la dérivée lagrangienne dans le champ fluide mais le long de la trajectoire de la particule inertielle il est possible d'écrire :

$$\frac{dU_{f,i}}{dt} = \frac{\overline{DU}_{f,i}}{\overline{Dt}} + (u_{p,k} - U_{f,k}) \frac{\partial U_{f,i}}{\partial x_k} \quad (2.38)$$

L'équation (2.36) peut alors s'écrire pour la vitesse fluctuante :

$$du_{f@p,i}^{'''} = \frac{\partial R_{ff,ik}}{\partial x_k} \delta t + A_{ik} u_{f@p,k}^{'''} \delta t + B_{ik} \delta W_{fp,k} \quad (2.39)$$

avec les matrices $\underline{\underline{A}}$ et $\underline{\underline{B}}$ qui sont à déterminer pour avoir la meilleure approximation possible du champ fluide.

2.4.3 Équation de Kolmogorov rétrograde associée

L'équation sur la vitesse totale le long de la trajectoire peut s'écrire :

$$du_{f@p,i}^+ = \frac{\partial U_{f,i}}{\partial x_k} u_{p,k} \delta t + du_{f@p,i}^{+''} \quad (2.40a)$$

$$= \frac{\partial U_{f,i}}{\partial x_k} u_{p,k} \delta t + \frac{\partial R_{ff,ik}}{\partial x_k} \delta t + A_{ik} (u_{f@p,k}^k - U_{f,k}) \delta t + B_{ik} \delta W_{fp,k} \quad (2.40b)$$

L'étude des équations différentielles stochastiques Lapeyre et al. [1997], Evans [2000] permet d'associer à ce processus une équation d'évolution dite de Kolmogorov rétrograde sur la pdf f^+ . Définissons le processus stochastique $\underline{V}(t)$ par :

$$\begin{cases} d\underline{V} = \underline{b}(\underline{V}) dt + \underline{\underline{B}}(\underline{V}) d\underline{W} \\ \underline{V}(0) = \underline{v} \end{cases} \quad (2.41)$$

La moyenne du processus

$$f(t, \underline{v}) = \mathbf{E}_{\underline{v}} g(\underline{V}(t)) \quad (2.42)$$

est alors la solution unique de l'équation de Kolmogorov rétrograde

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial t}(t, \underline{v}) = (\mathcal{A}f)(t, \underline{v}) & , t > 0, \underline{v} \in \mathbb{R}^3 \\ f(0, \underline{v}) = g(\underline{v}) & , \underline{v} \in \mathbb{R}^3 \end{cases} \quad (2.43)$$

où l'opérateur \mathcal{A} est le générateur du semi-groupe du processus de Markov précédent Lapeyre et al. [1997]. Ce dernier s'exprime comme suit :

$$(\mathcal{A}f) = \frac{1}{2} a_{ij} \frac{\partial^2 f}{\partial v_i \partial v_j} + \frac{\partial f}{\partial v_i} \quad (2.44a)$$

$$a_{ij} = B_{ik} B_{jk} \quad (2.44b)$$

Cette équation de Kolmogorov rétrograde permet d'expliciter l'influence du terme stochastique $\delta \underline{W}_{fp}$ sur la pdf. En supposant que notre processus stochastique représente adéquatement le champ fluide vu par les particules ($f^+ \approx f_f(\underline{c}_f \mid \underline{c}_p)$) il est alors possible d'écrire le terme dû à l'accélération du fluide le long des trajectoires des particules comme :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial c_{f,k}} \left[\left\langle \frac{du_{f@p,k}}{dt} \mid \underline{c}_f, \underline{c}_p \right\rangle \cdot f_{fp} \right] &= \frac{\partial}{\partial c_{f,k}} \left[c_{p,l} \frac{\partial U_{f,k}}{\partial x_l} f_{fp} \right] + \frac{\partial}{\partial c_{f,k}} \left[\frac{\partial R_{ff,ik}}{\partial x_k} f_{fp} \right] \\ &+ \frac{\partial}{\partial c_{f,k}} [A_{kl} (c_{f,l} - U_{f,l}) f_{fp}] \\ &- \frac{\partial}{\partial c_{f,k}} \left[\frac{\partial}{\partial c_{f,m}} \left[\frac{1}{2} B_{kl} B_{ml} f_{fp} \right] \right] \end{aligned} \quad (2.45)$$

2.4.4 Détermination des matrices de l'équation de Langevin dans le cas monophasique

La détermination des matrices intervenant dans l'équation de Langevin se fait habituellement par des considérations physiques reliant le modèle à un comportement "connu". Ces matrices sont à priori dépendantes du processus de Langevin lui-même. Dans le cas d'écoulements gaz-particules le champ fluide est

déjà calculé et il n'est aucun besoin de recourir au champ \underline{u}_f^+ pour recomposer le champ fluide à l'endroit de la particule et on utilisera les champs eulériens du calcul fluide :

$$\begin{aligned}\underline{\underline{A}} &= \underline{\underline{A}} \left(\underline{U}_f(t; \underline{x}), \underline{\underline{R}}_{ff}(t; \underline{x}), \varepsilon_f(t; \underline{x}), \dots \right) \\ \underline{\underline{B}} &= \underline{\underline{B}} \left(\underline{U}_f(t; \underline{x}), \underline{\underline{R}}_{ff}(t; \underline{x}), \varepsilon_f(t; \underline{x}), \dots \right)\end{aligned}$$

Les composants de la matrice $\underline{\underline{A}}$ ont pour dimension l'inverse d'un temps et sont reliés à la fonction d'autocorrélation du processus de Langevin. La matrice ${}^t \underline{\underline{B}} \cdot \underline{\underline{B}}$ quant à elle a pour dimension $m^2 \cdot s^{-3}$ ce qui lui donne la dimension de la dissipation turbulente. L'équation de Langevin (2.36) possède pour une turbulence homogène les propriétés :

$$\frac{d}{ds} {}^t \mathcal{R}_{ff,ij}^{L+}(t, s) = A_{ik} {}^t \mathcal{R}_{ff,kj}^{L+}(t, s) \quad (2.46a)$$

$$\lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\delta t} \langle du_{f,i}^+ du_{f,j}^+ \rangle = B_{il} B_{jl} \quad (2.46b)$$

Dans le cas d'un écoulement statistiquement permanent (ne dépendant pas de t) la première équation permet de relier la matrice $\underline{\underline{A}}$ au tenseur des temps intégraux lagrangiens du processus de Langevin $\underline{\underline{\tau}}_f^{L+} = \int_0^{+\infty} \underline{\underline{\mathcal{R}}}_{ff}^{L+}(s) ds$ qui se doivent d'être aussi proche que possible du "vrai" tenseur des temps intégraux lagrangiens :

$$\underline{\underline{\tau}}_f^L \approx \underline{\underline{\tau}}_f^{L+} = {}^t \underline{\underline{A}}^{-1} \quad (2.47)$$

2.4.4.1 Détermination de $\underline{\underline{B}}$ conforme aux hypothèses de Kolmogorov

En monophasique, Haworth and Pope [1986] se conforment aux hypothèses de Kolmogorov sur la turbulence pour fermer l'équation de Langevin (cf. § 1.2.2). Ces hypothèses postulent une turbulence localement isotrope pour les échelles inertielles ce qui entraîne que la matrice de covariance du bruit ${}^t \underline{\underline{B}} \cdot \underline{\underline{B}}$ soit proportionnelle à la matrice identité. Le bruit stochastique n'est ainsi plus caractériser que par sa norme. Celle-ci est obtenue aussi par transcription d'une hypothèse de Kolmogorov postulant que pour un temps dt se situant dans la plage inertielle (cf. § 1.2.2) :

$$\langle (\delta \underline{u}_f^2(0, \delta t))^2 \rangle = C_0 \varepsilon_f \delta t$$

Le calcul du carré de l'incrément de vitesse dû à notre processus de Langevin doit être fait en choisissant une règle de calcul stochastique qui ici sera celle d'Ito (Evans [2000]). Ce calcul permet de fixer la norme du bruit blanc car le seul terme d'ordre δt qui apparaît est directement relié à la matrice de covariance du bruit. Les hypothèses de Kolmogorov imposent ainsi à la matrice $\underline{\underline{B}}$ de satisfaire la relation :

$${}^t \underline{\underline{B}} \cdot \underline{\underline{B}} = C_0 \varepsilon_f \underline{\underline{Id}} \quad (2.48)$$

Le bruit issu de cette modélisation est ainsi un processus agissant à une fréquence élevée, localement isotrope et dont l'amplitude est fonction de la seule dissipation ε_f .

2.4.4.2 Détermination de $\underline{\underline{A}}$

Le tenseur des temps intégraux lagrangiens $\underline{\underline{\tau}}_f^L$ n'est généralement pas accessible lors de simulation classiques du fluide. Sa relation avec le temps caractéristique de durée de vie des tourbillons n'est de plus pas

assez explicitée dans l'état de connaissance actuel de la turbulence inhomogène (la relation (1.35) n'est pas tensorielle et la constante n'a pas d'expression universelle).

La détermination de la matrice $\underline{\underline{A}}$ se fait donc à partir de l'équation de Kolmogorov rétrograde associée au processus de Langevin (2.28). En utilisant cette équation il est possible d'écrire pour une variable ψ son équation eulérienne d'évolution directement associée au processus de Langevin. Dans le cas monophasique le transport des contraintes de Reynolds $\underline{\underline{R}}_{ff}^+$ s'écrit (Pope [1994b]) :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + U_{f,k}^+ \frac{\partial}{\partial x_k} \right) R_{ff,ij}^+ = \mathcal{D}_{f,ij}^+ + \mathcal{P}_{f,ij}^+ + G_{ik} R_{ff,kj}^+ + G_{jk} R_{ff,ik}^+ + C_0 \varepsilon_f \delta_{ij} \quad (2.49)$$

où $\mathcal{D}_{f,ij}^+$ est le terme de dispersion turbulente et $\mathcal{P}_{f,ij}^+ = -R_{ff,ik}^+ \frac{\partial U_{f,j}^+}{\partial x_k} - R_{ff,kj}^+ \frac{\partial U_{f,i}^+}{\partial x_k}$ est le terme de production.

Cette dernière équation est à mettre en parallèle avec l'équation exacte d'évolution de la contrainte $R_{ff,ij}$ (1.15) :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + U_{f,k} \frac{\partial}{\partial x_k} \right) R_{ff,ij} = \mathcal{D}_{f,ij} + \mathcal{P}_{f,ij} + \phi_{f,ij} - \frac{2}{3} \varepsilon_f \delta_{ij} \quad (2.50)$$

Il est ainsi possible d'établir une correspondance entre le choix de la matrice $\underline{\underline{G}}$ et un modèle de turbulence de contraintes de Reynolds $R_{ij} - \varepsilon_f$. Cette correspondance est largement étudiée dans Pope [1994b]. Afin de représenter correctement le terme de pression-déformation dans (1.15) la matrice $\underline{\underline{G}}$ prend la forme générale :

$$G_{ij} = \frac{\varepsilon_f}{q_f^2} (\alpha_1 \delta_{ij} + \alpha_2 b_{ij} + \alpha_3 b_{ij} b_{ij}) + H_{ijkl} \frac{\partial U_{f,k}}{\partial x_l} \quad (2.51)$$

avec $\underline{\underline{b}}$ le tenseur d'anisotropie ($b_{ij} = R_{ff,ij} / (2q_f^2) - 1/3 \delta_{ij}$) et le tenseur H donné par :

$$\begin{aligned} H_{ijkl} = & \beta_1 \delta_{ij} \delta_{kl} + \beta_2 \delta_{ik} \delta_{jl} + \beta_3 \delta_{il} \delta_{jk} + \gamma_1 \delta_{ij} b_{kl} + \gamma_2 \delta_{ik} b_{jl} \\ & + \gamma_3 \delta_{il} b_{jk} + \gamma_4 \delta_{kl} b_{ij} + \gamma_5 \delta_{jl} b_{ik} + \gamma_6 \delta_{jk} b_{il} \end{aligned}$$

Le choix des coefficients α_i , β_i et γ_i peut donc se faire pour satisfaire à une fermeture connue de la turbulence. Comme le remarque Pope [1994b], ce processus de choix par consistance avec un modèle défini n'a pas toujours de solution. Par contre, le choix d'un modèle de Langevin permet de construire de manière systématique une fermeture eulérienne consistante qui ne pose pas de problème de réalisabilité. Les passages d'une description à une autre sont donc nombreux et subtils, et donneront peut-être quelques indications quant à la modélisation de la turbulence.

L'équivalence entre modèles de Langevin et fermeture eulérienne de la turbulence n'est pas toujours assurée du fait de la contrainte imposée par l'équation d'évolution de l'agitation turbulente. Celle-ci s'écrit dans l'hypothèse d'un bruit suivant l'hypothèse de Kolmogorov :

$$\langle G_{im} u'_{f,m} u'_{f,i} \rangle_f + \frac{3}{2} C_0 \varepsilon_f = -\varepsilon_f \quad (2.52)$$

Le processus de Langevin le plus usité est choisi pour être consistant avec le modèle de Rotta [1951]. Celui-ci est obtenu en assumant une forme sphérique pour le tenseur $\underline{\underline{G}}$. Ceci est équivalent à prendre tous les coefficients nuls sauf $\alpha_1 = -(1/2 + 3/4 C_0)$, ce qui a pour résultat (Pope [1994b]) :

$$G_{ij} = -\left(\frac{1}{2} + \frac{3}{4} C_0\right) \frac{\varepsilon_f}{q_f^2} \delta_{ij} \quad (2.53)$$

on retrouve ainsi la relation de proportionnalité entre le temps intégral lagrangien et le temps de durée de vie de tourbillon évoquée au § 1.2.6 :

$$\tau_f^L = \frac{1}{\beta_f} \frac{q_f^2}{\varepsilon_f} \quad (2.54)$$

La constante de proportionnalité est ainsi fixée à :

$$\beta_f = \frac{1}{2} + \frac{3}{4} C_0 \quad (2.55)$$

Ce modèle de processus de Langevin est appelé modèle de Langevin simplifié (SLM). Sa simplicité en fait un des modèles les plus utilisés dans les approches pdf. Les modèles basés sur une spécification plus élaborés du tenseur $\underline{\underline{G}}$ sont eux regroupés sous la dénomination de modèles de Langevin généralisés (GLM).

2.4.4.3 Limites et améliorations du modèle SLM

Corrélation pression-déformation Le modèle SLM correspondant à la modélisation de Rotta [1951] du terme de corrélation pression-déformation (cf § 1.2.3) et hérite donc des lacunes de ce dernier. Il ne prend donc pas en compte les termes dits "rapides" d'interaction entre déformation moyenne et turbulence. Haworth and Pope [1986] proposent deux modèles permettant de prendre en compte les termes rapides de manière consistante avec les modèles d'isotropisation de la production (IPM), ce pourquoi ces modèles sont dénommés Lagrangian isotropization of Production Models (LIPM).

La première solution consiste à ajouter un terme dépendant du gradient de vitesse moyenne :

$$G_{ij} = -\frac{1}{\beta_f} \frac{q_f^2}{\varepsilon_f} \delta_{ij} + \gamma_f \frac{\partial U_{f,i}}{\partial x_j} \quad (2.56)$$

ce qui a pour effet de modifier la condition issue de l'équation d'évolution de l'agitation turbulente (2.52) :

$$\beta_f = \frac{1}{2} + \frac{3}{4} C_0 - \frac{\gamma_f}{4} \frac{\mathcal{P}_{f,kk}}{\varepsilon_f} \quad (2.57)$$

D'un autre côté ce modèle est consistant avec un modèle d'isotropisation de production :

$$\phi_{f,ij} = -C_{\phi 1} \frac{\varepsilon_f}{q_f^2} (R_{ff,ij} - \frac{2}{3} k_f \delta_{ij}) - C_{\phi 2} (\mathcal{P}_{f,ij} - \frac{1}{3} \mathcal{P}_{f,kk} \delta_{ij}) \quad (2.58)$$

à condition que :

$$\begin{cases} \gamma_f = C_{\phi 2} \\ \beta_f = \frac{C_{\phi 1}}{2} \end{cases} \quad (2.59)$$

et on obtient donc la condition :

$$\frac{C_{\phi 1}}{2} = \frac{1}{2} + \frac{3}{4} C_0 - \frac{\gamma_f}{4} \frac{\mathcal{P}_{f,kk}}{\varepsilon_f} \quad (2.60)$$

Si la constante de Kolmogorov est considérée comme universelle (et vraiment constante), ce modèle prédit une décroissance de la valeur de la constante de Rotta $C_{\phi 1} = 2\beta_f$ avec la production, alors que Pope [1983] juge qu'elle devrait au contraire croître. Les valeurs obtenues pour la constante suivant ce modèle ($C_{\phi 1} \sim 4$) ne sont de plus pas en accord avec les valeurs communément admises pour une modélisation eulérienne IPM de la turbulence ($C_{\phi 1} \sim 2$). Pour remédier à ce problème, Pope [1983] propose de préserver β_f et γ_f en tant

que constantes consistantes avec le modèle IPM. Ceci implique de faire varier la constante de Kolmogorov C_0 (qu'on notera C_0^*) :

$$\begin{cases} \gamma_f = C_{\phi 2} = 0.6 \\ \beta_f = 0.9 \\ C_0^* = \frac{2}{3}(2\beta_f + \frac{\gamma_f}{2} \frac{\mathcal{P}_{f,kk}}{\varepsilon_f} - 1) \end{cases} \quad (2.61)$$

Il n'est donc pas très coûteux de modifier le modèle SLM afin de prendre en compte les termes rapides de la corrélation pression-déformation. Cependant, ces corrections semblent trop importantes au regard de l'isotropisation qu'ils engendrent dans les modèles. Ainsi Laviéville [1997] montrent que dans le cas d'un écoulement homogène cisaillé, les deux modèles précédents conduisent à une prédiction fortement erronée de la turbulence du fluide par suite d'une trop forte redistribution des contraintes (ces résultats sont discutés en 5.2.1). Ces termes intervenant principalement dans les zones d'écoulements secondaires induits par la turbulence, le modèle de Rotta [1951] semble approprié dans la majeure partie des écoulements (Hanjalic and Launder [1972]).

Bruit stochastique Un autre problème, concernant cette fois tous les modèles de Langevin présentés jusqu'à présent, est la relation entre le bruit du processus et les hypothèses de Kolmogorov sur la turbulence. Partant du constat que l'équation (2.49) peut se réécrire en fonction des matrices $\underline{\underline{A}}$ et $\underline{\underline{B}}$:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + U_{f,k}^+ \frac{\partial}{\partial x_k} \right) R_{ff,ij}^+ = \mathcal{D}_{f,ij}^+ + A_{ik} R_{ff,kj}^+ + A_{jk} R_{ff,ik}^+ + ({}^t \underline{\underline{B}} \cdot \underline{\underline{B}})_{ij} \quad (2.62)$$

il existe dans le cas d'un écoulement permanent, et en faisant l'hypothèse que la convection et la dispersion des contraintes de Reynolds peuvent être négligées, une relation forte entre les deux matrices :

$$\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{R}}_{ff}^+ + {}^t (\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{R}}_{ff}^+) = - {}^t \underline{\underline{B}} \cdot \underline{\underline{B}} \quad (2.63)$$

Pour des écoulements anisotropes il n'y a donc pas de raison pour que la matrice de covariance du bruit soit diagonale, et encore moins isotrope. Cette propriété de la matrice de covariance est en désaccord avec l'hypothèse d'isotropie locale formulée par Kolmogorov, comme noté par Pope [2002]. La valeur de la matrice de covariance du bruit déduite à partir de simulation DNS d'un écoulement turbulent homogène cisaillé et de l'équation (2.63) dans Pope [2002] est d'ailleurs résolument anisotrope. Ceci pourrait s'expliquer par des effets de nombre de Reynolds (l'anisotropie disparaît localement pour des écoulements à très grands nombre de Reynolds). Il se peut aussi qu'un modèle de type Langevin soit trop simple pour représenter toute la physique d'un écoulement turbulent anisotrope (qui plus est en cas d'inhomogénéité).

Constante de Kolmogorov La "constante" C_0 utilisée dans le détermination de l'amplitude du bruit stochastique $\sqrt{C_0 \varepsilon_f}$ compatible avec les hypothèses de Kolmogorov sur la turbulence devrait ainsi posséder un caractère universel. Ainsi la constante C_0 dépend en turbulence homogène isotrope du nombre de Reynolds turbulent, et semble posséder selon Pope [1994a] et Sawford [1991] une limite asymptotique pour de très grands nombre de Reynolds $C_0(\infty) = 6.2$. Malheureusement cette universalité n'est pas du tout observé lorsque des écoulements différents sont observés, *i.e.* C_0 tend bien asymptotiquement vers une constante $C_0(\infty)$, mais celle-ci dépend de l'écoulement considéré. Pour une turbulence décroissante ou une couche limite atmosphérique, les valeurs sont inférieures à la limite précédente, $1 \leq C_0(\infty) \leq 3$ (Rodean [1991]).

Heinz [2002] relie cette variation de la constante "universelle" de Kolmogorov $C_0(\infty)$ aux effets d'anisotropie et de fluctuation d'accélération. Lorsque ces deux effets font parti prenante du comportement de l'écoulement une constante proche de 2 semblent la plus appropriée. Dans les écoulements où ces effets sont

négligeables (principalement les THI à grand nombre de Reynolds) cette constante semble être plus proche de 6, en accord avec les observations précédentes. Heinz [2002] détermine à partir de résultats de DNS dans un canal la valeur de la constante la plus appropriée $C_0(\infty) = 2.1 \pm 0.04$ ce qui est exactement la valeur utilisée dans nos modèles.

2.4.5 Passage aux écoulements gaz-particules

La méthode précédente de raisonnement successifs en terme d'équation de Langevin et/ou d'équation eulériennes associées est ici réutilisée pour les écoulements gaz-particules. Lors du suivi de particules, l'équation de Langevin mimant la turbulence fluide est prise sous la forme :

$$du''_{f@p,i} = \frac{\partial R_{ff,ik}}{\partial x_k} \delta t + A_{ik} u''_{f@p,k} \delta t + B_{ik} \delta W_{fp,k} \quad (2.64)$$

A partir de l'équation de Kolmogorov rétrograde associée (2.45) et de la fermeture des termes d'accélération des particules (2.18) et des termes de collision (2.76) il est possible d'écrire les équations eulériennes gouvernant le comportement des moments du système (cf § 3.1.3). Celle-ci s'écrit pour les contraintes du fluide vu par les particules $\tilde{R}_{ff,ij}$:

$$n_p \left(\frac{\partial}{\partial t} + U_{p,k} \frac{\partial}{\partial x_k} \right) \tilde{R}_{ff,ij} = - \frac{\partial}{\partial x_k} [n_p S_{ffp,ijk}] + n_p A_{ik} \tilde{R}_{ff,kj} + n_p A_{jk} \tilde{R}_{ff,ki} + n_p B_{ik} B_{jk} - n_p R_{fp,jk} \left(\frac{\partial U_{f@p,i}}{\partial x_k} - \frac{\partial U_{f,i}}{\partial x_k} \right) \quad (2.65)$$

où $U_{f@p,i}$ est la vitesse moyenne du fluide vu par les particules et $U_{f,i}$ la vitesse moyenne du fluide.

En négligeant la différence entre les gradients de vitesse moyenne du fluide et du fluide vu cette équation se réécrit :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + U_{p,k} \frac{\partial}{\partial x_k} \right) \tilde{R}_{ff,ij} + \frac{1}{n_p} \frac{\partial}{\partial x_k} [n_p S_{ffp,ijk}] = A_{ik} \tilde{R}_{ff,kj} + A_{jk} \tilde{R}_{ff,ki} + ({}^t \underline{\underline{B}} \cdot \underline{\underline{B}})_{ij} \quad (2.66)$$

En faisant alors l'hypothèse d'un écoulement où la convection par le mouvement particulaire et la dispersion par le mouvement d'agitation des particules n'auraient pas d'influence sur les contraintes de Reynolds du fluide vu (c'est-à-dire pour tout écoulement sans couplage inverse pour lesquels $\underline{\underline{\tilde{R}}}_{ff} = \underline{\underline{R}}_{ff}$), une équation différentielle du premier ordre en temps relie $\underline{\underline{\tilde{R}}}_{ff}$, $\underline{\underline{A}}$ et $\underline{\underline{B}}$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \underline{\underline{\tilde{R}}}_{ff} - \underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{\tilde{R}}}_{ff} - {}^t (\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{\tilde{R}}}_{ff}) = \underline{\underline{B}} \cdot {}^t \underline{\underline{B}} \quad (2.67)$$

Lorsque l'écoulement est stationnaire, l'équation précédente se simplifie en une simple équation algébrique :

$$-\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{\tilde{R}}}_{ff} - {}^t (\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{\tilde{R}}}_{ff}) = \underline{\underline{B}} \cdot {}^t \underline{\underline{B}} \quad (2.68)$$

Un travail identique peut être mené concernant les corrélations fluide-particules $R_{fp,ij}$. L'équation d'évolution s'écrit :

$$n_p \left(\frac{\partial}{\partial t} + U_{p,k} \frac{\partial}{\partial x_k} \right) R_{fp,ij} = - \frac{\partial}{\partial x_k} [n_p S_{fpp,ijk}] + \frac{1}{\tau_{fp}^F} [R_{fp,ij} - R_{ff,ij}] + n_p A_{ik} R_{fp,kj} - n_p R_{fp,ik} \frac{\partial U_{p,j}}{\partial x_k} - n_p R_{pp,jk} \left(\frac{\partial U_{f@p,i}}{\partial x_k} - \frac{\partial U_{f,i}}{\partial x_k} \right) \quad (2.69)$$

L'équation d'évolution des contraintes particulières s'écrit quant à elle :

$$n_p \left(\frac{\partial}{\partial t} + U_{p,k} \frac{\partial}{\partial x_k} \right) R_{pp,ij} = - \frac{\partial}{\partial x_k} [n_p S_{ppp,ijk}] + \frac{1}{\tau_{fp}^F} [2R_{pp,ij} - R_{fp,ij} - R_{fp,ji}] \quad (2.70)$$

$$- n_p R_{pp,ik} \frac{\partial U_{p,j}}{\partial x_k} - n_p R_{pp,jk} \frac{\partial U_{p,i}}{\partial x_k} + \mathcal{C}(R_{pp,ij})$$

La première remarque que l'on peut faire sur les systèmes d'équations précédents est que le choix des coefficients de l'équation de Langevin n'influent pas directement sur l'évolution des contraintes particulières. Ceux-ci n'apparaissant pas dans l'équation (2.70), le choix doit être effectué pour obtenir une bonne prévision des moments $R_{fp,ij}$. Si ces derniers sont correctement prédis par l'équation de Langevin, alors le comportement de la phase particulaire sera lui aussi correctement prédis.

La prédition des contraintes fluide-particule par (2.69) est directement influencée par le choix de la matrice $\underline{\underline{A}}$ et la prédition des contraintes cinétiques du fluide vu $\widetilde{R}_{ff,ij}$. Si le modèle de Langevin permet d'assurer $\widetilde{R}_{ff} = \underline{\underline{R}}_{ff}$, la bonne prédition des contraintes fluide-particule (et donc de la phase particulaire) est donc dépendante de la modélisation de la matrice $\underline{\underline{A}}$.

L'équation (2.68) peut être considérée comme une équation de consistance avec l'hypothèse $\widetilde{R}_{ff} = \underline{\underline{R}}_{ff}$. Dans le cas monophasique celle-ci ne donne pas d'informations car les tensions de Reynolds de l'écoulement ne sont pas des données mais des inconnues du problème. Cette difficulté est écartée dans le cas des écoulement gaz-particules car alors les tensions de Reynolds du fluide sont connues, et l'équation (2.68) peut être utilisée pour s'assurer que le processus de Langevin respecte l'hypothèse $\widetilde{R}_{ff} = \underline{\underline{R}}_{ff}$. En effet pour chaque choix de la matrice $\underline{\underline{A}}$, il peut être trouvé une matrice de bruit $\underline{\underline{B}}$ satisfaisant à

$$\underline{\underline{B}} \cdot {}^t \underline{\underline{B}} = - \underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{R}}_{ff} - {}^t (\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{R}}_{ff}) \quad (2.71)$$

par une simple décomposition de Choleski de la matrice (symétrique) de droite. Pour peu que l'on abandonne l'idée d'une description physique du bruit stochastique intervenant dans l'équation de Langevin (cf. § 2.4.4.1), et que la matrice de bruit $\underline{\underline{B}}$ est maintenant considérée comme des degrés de libertés, il est alors possible dans les écoulements gaz-particule de s'assurer de $\widetilde{R}_{ff} = \underline{\underline{R}}_{ff}$ et ainsi de s'affranchir de la condition (2.52).

La bonne prédition des écoulements gaz-particule semble donc être particulièrement dépendante du choix de la matrice $\underline{\underline{A}}$.

2.5 Opérateur de collision

Pai [1974] eu l'idée de traiter les collisions entre particules inertielles dans le formalisme de la théorie cinétique, s'appuyant ainsi sur les nombreuses études physiques (Truesdell and Muncaster [1980]) et mathématiques (Villani [2000]) concernant l'équation de Boltzmann. Comme dans le cas de l'équation de Boltzmann pour les gaz monoatomiques, le traitement de la phase dispersée par une description statistique faisant intervenir une description contractée (en seul point) entraîne l'apparition sous forme d'intégrale des interactions internes à la phase. Les interactions étant supposées instantanées et binaires, seule la pdf à deux particules intervient dans ce terme ouvert.

2.5.1 Opérateur de collision

Le terme de collision apparaissant dans l'équation (2.11) représente l'effet des collisions sur la densité de particules dans l'espace des phases. L'obtention de la forme actuelle du terme de collision est dû à

Boltzmann⁶. Celui-ci s'obtient par un bilan du nombre de particules gagnées et perdues par un volume infinitésimal de l'espace des phases. Le terme de perte s'exprime à l'aide des formules (1.84) qui permettent de "transporter" les particules ayant les vitesses pré-collision \underline{c}_{pA} et \underline{c}_{pB} dans le nouveau volume de l'espace des phases centré autour de \underline{c}_{pA}^* et \underline{c}_{pB}^* . Le terme de gain fait appel quant à lui à la cinématique de collision inverse (1.85) qui ne peut être explicitée que dans le cas de collisions sans glissement. Il est alors possible de dénombrer les particules entrant en collision dont les vitesses après collision se retrouvent dans le volume de l'espace des phases centré autour de \underline{c}_{pA} et \underline{c}_{pB} . Laviéville [1997] écrit alors l'opérateur de collision sous la forme :

$$\left(\frac{\partial f_{fp}}{\partial t} \right)_{coll} = -d_p^2 \int_{\underline{w}_r, \underline{k} < 0} \underline{w}_r \cdot \underline{k} \Delta f_{fpfp}(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{fA}, \underline{c}_{pA}, \underline{x}_A + d_p \underline{k}, \underline{c}_{fB}, \underline{c}_{pA} + \underline{w}_r) d\underline{w}_r d\underline{k} d\underline{c}_{fB} \quad (2.72)$$

où la variation de la pdf à deux particules f_{fpfp} due à la collision entre les particules A et B s'écrit :

$$\begin{aligned} \Delta f_{fpfp}(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{fA}, \underline{c}_{pA}, \underline{x}_A + d_p \underline{k}, \underline{c}_{fB}, \underline{c}_{pA} + \underline{w}_r) &= -f_{fpfp}(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{fA}, \underline{c}_{pA}, \underline{x}_A + d_p \underline{k}, \underline{c}_{fB}, \underline{c}_{pA} + \underline{w}_r) \\ &\quad + \frac{1}{e_{pp}^2} f_{fpfp}(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{fA}, \underline{c}_{pA}^*, \underline{x}_A + d_p \underline{k}, \underline{c}_{fB}, \underline{c}_{pA}^* + \underline{w}_r^*) \end{aligned} \quad (2.73)$$

2.5.2 Fermetures de l'opérateur de collision

L'opérateur de collision (2.72) fait appel à la pdf jointe à deux particules f_{fpfp} qui n'est pas connue dans une approche pdf jointe à une particule. La complexité de l'opérateur écrit sous cette forme est à la source d'une fermeture directe du terme de collision par un opérateur plus simple ne faisant pas intervenir la pdf jointe à deux particules tel l'extension de la fermeture BGK. Ces approches ne sont néanmoins intéressantes que lorsque seule la transition vers des équations hydrodynamiques est étudiée.

Pour une prise en compte plus fine des collisions au niveau microscopique il est alors nécessaire de travailler sur la pdf jointe à deux particules. Celle-ci doit donc être modélisée afin de fermer le terme de collision. Les premières tentatives de fermeture ont fait appel au même raisonnement que la fermeture de Boltzmann par le "chaos moléculaire". Cette fermeture a dû ensuite évoluer pour prendre en compte les spécificités des écoulement gaz-particule.

2.5.2.1 fermeture BGK

Au vu de la complexité de l'opérateur de collision (2.72) il peut être intéressant de remplacer celui-ci par un opérateur plus simple. L'opérateur (2.72) assurant un certain nombre de propriété à l'équation de type Boltzmann associée, l'opérateur de remplacement se devra d'en conserver certaines. Plus le nombre de propriétés conservées sera grand, plus l'opérateur approximera le véritable opérateur de collision (2.72).

⁶Depuis son obtention par Boltzmann [1964] l'opérateur de collision est écrit en fonction d'une propriété intrinsèque des collisions qu'est la section efficace de collision $B(\underline{k}, \underline{w}_r)$ qui dépend de la nature de l'interaction dominante entre particules (dans le cas de sphères dures $B(\underline{k}, \underline{w}_r) = \pi d_p^2 |\underline{w}_r \cdot \underline{k}|$). L'opérateur de collision s'écrit $Q(f, f) = \int_{\underline{w}_r, \underline{k}} [f_A^* f_B^* - f_A f_B] B(\underline{k}, \underline{w}_r) d\underline{k} d\underline{w}_r$, où sont utilisées les raccourcis d'écriture $f_A = f(t; \underline{x}_A, \underline{c}_A)$, $f_B = f(t; \underline{x}_B, \underline{c}_B)$, $f_A^* = f(t; \underline{x}_A, \underline{c}_A^*)$ et $f_B^* = f(t; \underline{x}_B, \underline{c}_B^*)$. La forme quadratique de cet opérateur est à l'origine de propriétés de conservation, particulièrement conservation de la masse, quantité de mouvement et énergie dans le cas de collisions élastiques. Elle permet aussi d'exprimer l'opérateur sous une forme faible due à Maxwell. Pour toute fonction φ de la variable vitesse :

$$\begin{aligned} \int Q(f, f)(\underline{c}) \varphi(\underline{c}) d\underline{c} &= \frac{1}{4} \int Q(f, f)(\underline{c}) [\varphi_A + \varphi_B + \varphi_A^* + \varphi_B^*] d\underline{c} \\ &= \frac{1}{2} \int Q(f, f)(\underline{c}) [\varphi_A + \varphi_B] d\underline{c} \end{aligned}$$

Dans le cas de collisions élastiques l'opérateur de collision conserve les trois quantités que sont la masse, la quantité de mouvement et l'énergie d'agitation. Si seules ces trois lois de conservation sont intéressantes pour la physique du problème il est possible de construire un opérateur plus simple approchant l'effet des collisions. En s'inspirant des études de Bhathager, Gross et Krook concernant la théorie cinétique des gaz, on définit l'opérateur de collision BGK selon :

$$\left(\frac{\partial f_{fp}}{\partial t} \right)_{coll} = -\frac{\beta_c}{\tau_p^c} [f_p - f_p^M] \quad (2.74)$$

où τ_p^c est le temps caractéristique de collision (β_c est une constante) et f_p^M est la pdf "d'équilibre" (Maxwellienne) des vitesses particule :

$$f_p^M(\underline{c}_p) = \frac{n_p}{[4/3\pi q_p^2]^{3/2}} \exp \left(-\frac{|\underline{c}_p - \underline{U}_p|^2}{4/3q_p^2} \right) \quad (2.75)$$

Cette méthode de simplification de l'opérateur de collision n'a pas de fondements mathématiques rigoureux mais est très utilisée car elle permet d'obtenir de manière systématique (à l'aide de l'expansion de Chapman-Enskog) des équations hydrodynamiques issues de l'équation de Boltzmann. La méthode est par ailleurs puissante car elle permet avec un développement du type (2.74) de retrouver dans le cas monophasique les équations de Navier-Stokes, permettant ainsi une interprétation cinétique de celles-ci (Bourgat et al. [1994]). Ces méthodes présentent le désavantage de pouvoir être non-réalisables (*i.e.* contraintes cinétiques et flux associés à une densité négative). Cette ambiguïté a été élégamment enlevée par Levermore en ne considérant plus la Maxwellienne comme pdf de référence mais une gaussienne (Levermore [1996]).

2.5.2.2 Fermeture de type chaos moléculaire

Par analogie avec l'hypothèse de chaos moléculaire formulée par Boltzmann [1964] il est possible de modéliser la pdf à deux particules f_{fpfp} en supposant que les variables attachées aux particules entrant en collision ne sont pas corrélées. Sous cette hypothèse de "chaos fluide-particulaire" la pdf à deux particules s'écrit alors simplement en fonction de la pdf à une particule :

$$f_{fpfp}(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{fA}, \underline{c}_{pA}, \underline{x}_B, \underline{c}_{fB}, \underline{c}_{pB}) = f_{fp}(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{fA}, \underline{c}_{pA}) f_{fp}(t; \underline{x}_B, \underline{c}_{fB}, \underline{c}_{pB}) \quad (2.76)$$

Cette hypothèse de fermeture de la pdf à deux particules est utilisée dans de nombreux travaux (parfois implicitement), notamment dans la dérivation de méthodes stochastiques de résolution des collisions (Sommerfeld [1999]). Cependant l'hypothèse d'indépendance des variables est à remettre en cause dans les écoulements gaz-particules. Il n'est pas possible par exemple d'assumer les vitesses fluide vues par les particules indépendantes. Pour des particules de rayon inférieurs à l'échelle de longueur de Kolmogorov ces deux vitesses sont d'ailleurs totalement corrélées car égales.

L'hypothèse de chaos fluide-particulaire est tout de même précieuse pour des particules très inertielles. La description contractée du système peut alors omettre la variable fluide vu et l'hypothèse est partiellement justifiée. L'hypothèse de non-corrélation des propriétés des deux particules incidentes n'est tout de même pas totalement justifiée en écoulement dense.

2.5.2.3 Fermeture aux vitesses fluide corrélées

L'hypothèse de chaos fluide-particulaire formulée au paragraphe précédent ne tient pas compte des spécificités des écoulements gaz-particule. Pour des particules en contact dont le diamètre est inférieur à l'échelle

de longueur de Kolmogorov les vitesses du fluide vues sont identiques. Il n'est alors plus possible de postuler une décorrélation des propriétés incidentes sous peine de perdre de l'information statistique. Berlemont et al. [1995] et Laviéville [1997] ont ainsi montré qu'assumer des vitesses fluide décorrélées entraîne une destruction non-physique (et donc indésirable) de la covariance fluide-particule. Le mouvement corrélé étant un moteur de l'agitation des particules (cf. § 3.2.3), la destruction de la covariance entraîne une destruction fictive du mouvement d'agitation des particules, et ce même pour des collisions élastiques.

Laviéville [1997] exprime ainsi, à l'aide de la formule de probabilité $p(A, B) = p(A)p(B | A)$, la pdf jointe à deux particules par décomposition par rapport aux vitesses du fluide vu :

$$f_{fpfp}(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{fA}, \underline{c}_{pA}, \underline{x}_B, \underline{c}_{fB}, \underline{c}_{pB}) = f_{ff}(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{fA}, \underline{x}_B, \underline{c}_{fB}) f_{pp}(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{pA}, \underline{x}_B, \underline{c}_{pB} | \underline{c}_{fA}, \underline{c}_{fB}) \quad (2.77)$$

La pdf à deux particules est de nouveau décomposée suivant :

$$f_{pp}(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{pA}, \underline{x}_B, \underline{c}_{pB} | \underline{c}_{fA}, \underline{c}_{fB}) = f_p(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{pA} | \underline{c}_{fA}, \underline{c}_{fB}) f_p(t; \underline{x}_B, \underline{c}_{pB} | \underline{x}_A, \underline{c}_{pA}, \underline{c}_{fA}, \underline{c}_{fB}) \quad (2.78)$$

Laviéville [1997] émet ensuite deux hypothèses qui permettent d'obtenir une expression en fonction de pdf connues :

- la première hypothèse stipule que la vitesse de la particule A est uniquement conditionnée par la valeur de la vitesse fluide vue au point de la particule. Cette hypothèse est équivalente à postuler une corrélation entre les vitesses fluide vues nulle ou totale. Elle peut donc se justifier pour des particules au contact (avec $d_p < \eta_K$) ou très éloignées. Elle permet d'écrire :

$$f_p(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{pA} | \underline{c}_{fA}, \underline{c}_{fB}) = f_p(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{pA} | \underline{c}_{fA}) \quad (2.79)$$

- la deuxième hypothèse est une hypothèse d'indépendance des vitesses des particules (vitesses tout de même conditionnées par la vitesse fluide), que l'on pourrait qualifier de "chaos particulaire conditionné". En conjonction avec la première hypothèse elle permet d'écrire :

$$f_p(t; \underline{x}_B, \underline{c}_{pB} | \underline{x}_A, \underline{c}_{pA}, \underline{c}_{fA}, \underline{c}_{fB}) = f_p(t; \underline{x}_B, \underline{c}_{pB} | \underline{c}_{fB}) \quad (2.80)$$

la pdf jointe à deux particules se récrit sous ces hypothèses :

$$\begin{aligned} f_{fpfp}(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{fA}, \underline{c}_{pA}, \underline{x}_B, \underline{c}_{fB}, \underline{c}_{pB}) &= f_{ff}(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{fA}, \underline{x}_B, \underline{c}_{fB}) f_p(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{pA} | \underline{c}_{fA}) f_p(t; \underline{x}_B, \underline{c}_{pB} | \underline{c}_{fB}) \\ &= f_{ff}(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{fA}, \underline{x}_B, \underline{c}_{fB}) \frac{f_{fp}(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{fA}, \underline{c}_{pA})}{f_{f|p}(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{fA})} \frac{f_{fp}(t; \underline{x}_B, \underline{c}_{fB}, \underline{c}_{pB})}{f_{f|p}(t; \underline{x}_B, \underline{c}_{fB})} \end{aligned}$$

Des particules au contact avec $d_p < \eta_K$ voient la même vitesse fluide ce qui permet d'exprimer f_{ff} en fonction de la probabilité d'avoir \underline{c}_{fB} sachant qu'il doit exister une particule en \underline{x}_B :

$$f_{ff}(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{fA}, \underline{x}_B, \underline{c}_{fB}) = f_{f|p}(\underline{x}_B, \underline{c}_{fB}) \delta(\underline{c}_{fB} - \underline{c}_{fA}) \quad (2.81)$$

La fermeture de la pdf jointe à deux particules s'écrit finalement :

$$f_{fpfp}(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{fA}, \underline{c}_{pA}, \underline{x}_B, \underline{c}_{fB}, \underline{c}_{pB}) = \frac{\delta(\underline{c}_{fB} - \underline{c}_{fA})}{f_{f|p}(\underline{x}_A, \underline{c}_{fA})} f_{fp}(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{fA}, \underline{c}_{pA}) f_{fp}(t; \underline{x}_B, \underline{c}_{fB}, \underline{c}_{pB}) \quad (2.82)$$

2.5.3 Temps caractéristique de collision

Dans une description statistique des collisions comme celle qui a été présentée aux paragraphes précédents il est important de ressortir les variables macroscopiques associées au phénomène. Dans le cas de collisions de sphères dures monodisperses, le paramètre statistique le plus important est le temps caractéristique de collision (ou son pendant la fréquence de collision $\nu_p^c = 1/\tau_p^c$).

Le temps caractéristique de collision est défini comme le temps moyen que passe une particule entre deux collisions. Il s'obtient par un comptage du nombre probable de collisions que subit une particule par unité de temps (Laviéville [1997]).

$$\tau_p^c = n_p \left[-d_p^2 \int_{\underline{w}_r \cdot \underline{k} < 0} \underline{w}_r \cdot \underline{k} f_{fp} f_p(\underline{x}_A, \underline{c}_{fA}, \underline{c}_{pA}, \underline{x}_B, \underline{c}_{fB}, \underline{c}_{pA} + \underline{w}_r) d\underline{c}_{pA} d\underline{w}_r d\underline{k} d\underline{c}_{fA} d\underline{c}_{fB} \right]^{-1} \quad (2.83a)$$

$$= n_p \left[-d_p^2 \int_{\underline{w}_r \cdot \underline{k} < 0} \underline{w}_r \cdot \underline{k} f_{pp}(\underline{x}_A, \underline{c}_{pA}, \underline{x}_A + d_p \underline{k}, \underline{c}_{pA} + \underline{w}_r) d\underline{c}_{pA} d\underline{w}_r d\underline{k} \right]^{-1} \quad (2.83b)$$

En considérant que les particules au contact lors de la collision voient le même champ fluide (considéré comme localement homogène), il est possible de calculer les temps caractéristiques de collision associés aux diverses fermetures présentées précédemment. Pour plus de simplicité la vitesse moyenne des particules est occultée car celle-ci n'influence pas les collisions.

2.5.3.1 Écoulement isotrope et chaos moléculaire

Faire de manière simultanée l'hypothèse d'isotropie de l'écoulement ainsi que celle du chaos moléculaire permet d'exprimer simplement la pdf en deux points f_{pp} à partir de la distribution Maxwellienne (cf. § 6.6) :

$$f_{pp}(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{pA}, \underline{x}_B, \underline{c}_{pB}) = f_p^M(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{pA}) f_p^M(t; \underline{x}_B, \underline{c}_{pB}) \quad (2.84a)$$

$$= \frac{n_p^2(t; \underline{x})}{(4/3\pi q_p^2(t; \underline{x}))^3} \exp \left(-\frac{1}{2} \left(\frac{\underline{c}_{pA}''^2}{2/3q_p^2(t; \underline{x})} + \frac{\underline{c}_{pB}''^2}{2/3q_p^2(t; \underline{x})} \right) \right) \quad (2.84b)$$

Cette expression de la pdf en deux points f_{pp} est alors intégrable et donne pour temps caractéristique de collision :

$$\tau_p^c = \left[n_p(t; \underline{x}) \pi d_p^2 \sqrt{\frac{16}{\pi} 2/3 q_p^2(t; \underline{x})} \right]^{-1} \quad (2.85)$$

qui est l'extension au gaz-particule du temps caractéristique de collision de la théorie cinétique des gaz. Cette expression n'est donc pas valable pour des écoulements où existe une corrélation entre les vitesses fluide et particule.

2.5.3.2 Écoulement isotrope et vitesses corrélées

Pour prendre en compte théoriquement la corrélation des vitesses des particules entrant en collision il est nécessaire d'utiliser la fermeture aux vitesses corrélées (§ 2.5.2.3). L'expression précédente est alors modifiée par un facteur dépendant du niveau de corrélation entre phase particulaire et phase fluide :

$$\tau_p^c = \left[n_p(t; \underline{x}) \pi d_p^2 \sqrt{\frac{16}{\pi} 2/3 q_p^2(t; \underline{x})} \sqrt{1 - \xi_{fp}^2 f(d_p)} \right]^{-1} \quad (2.86)$$

où f est la fonction de corrélation longitudinale du fluide ($f(d_p) \approx 1$, cf. § 1.2.4) et ξ_{fp} est un indicateur de covariance :

$$\xi_{fp} = \frac{q_{fp}}{2\sqrt{q_f^2 q_p^2}}$$

Cette expression contient l'expression issue de la théorie cinétique (2.85) pour des particules suffisamment inertielles ($\xi_{fp} \approx 0$). Il est possible de montrer qu'elle est aussi compatible avec le cas de particules très peu inertielles suivant le fluide. Un développement limité (Laviéville [1997]) de la fonction f permet de retrouver l'expression du temps caractéristique de collision quand le seul moteur des collisions est le volume des particules (Saffman and Turner [1956]).

La fermeture aux vitesses corrélées apparaît donc une fois de plus comme pertinente vis-à-vis de la modélisation des collisions. Elle permet ainsi de retrouver les expressions du temps caractéristique de collision pour les deux cas limites $St \rightarrow 0$ et $St \rightarrow \infty$. Les calculs sont cependant effectués dans le cadre d'un écoulement isotrope. Le temps caractéristique de collision étant directement donné par la pdf des vitesses relatives entre particules, l'anisotropie du mouvement fluctuant doit jouer sur les vitesses relatives.

2.5.3.3 Prise en compte de l'anisotropie

Dans le cadre d'une hypothèse de chaos moléculaire, l'anisotropie du mouvement fluctuant particulaire peut-être prise en compte en prenant la pdf de Richman (cf. § 6.6) comme pdf en un point de référence :

$$f_{pp}(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{pA}, \underline{x}_B, \underline{c}_{pB}) = f_p^G(t; \underline{x}_A, \underline{c}_{pA}) f_p^G(t; \underline{x}_B, \underline{c}_{pB}) \quad (2.87a)$$

$$= \frac{n_p^2(t; \underline{x})}{8\pi^3 \det(\underline{\underline{R}}_{pp})} \exp\left(-\frac{1}{2} \underline{\underline{c}}_{pA}^T \underline{\underline{R}}_{pp}^{-1} \underline{\underline{c}}_{pB}\right) \quad (2.87b)$$

En effectuant le changement de variables : $\underline{u} = \frac{1}{2}(\underline{c}_{pA}'' + \underline{c}_{pB}'')$; $\underline{w} = \underline{c}_{pB}'' - \underline{c}_{pA}''$ la fréquence de collision s'écrit alors :

$$\nu_p^c(t; \underline{x}) = \frac{n_p(t; \underline{x}) d_p^2}{\sqrt{8\pi^3 \det(\underline{\underline{R}}_{pp})}} \int \int_{\underline{w}, \underline{k} \geq 0} (\underline{w} \cdot \underline{k}) \exp\left(-\frac{1}{2} \underline{w} \cdot (2\underline{\underline{R}}_{pp})^{-1} \cdot \underline{w}\right) d\underline{w} d\underline{k} \quad (2.88a)$$

$$= \frac{n_p(t; \underline{x}) d_p^2}{\sqrt{\pi}} \int_{\underline{k} \in S^2} \sqrt{\underline{k} \cdot \underline{\underline{R}}_{pp} \cdot \underline{k}} d\underline{k} \quad (2.88b)$$

En appelant λ_i les valeurs propres du tenseur $\underline{\underline{R}}_{pp}$, la fréquence de collision apparaît sous forme d'intégrale elliptique :

$$\nu_p^c(t; \underline{x}) = \frac{n_p(t; \underline{x}) d_p^2}{\sqrt{\pi}} \int_{\underline{k} \in S^2} \sqrt{\lambda_i k_i^2} d\underline{k} \quad (2.89)$$

Les intégrales elliptiques n'ayant pas de formulation explicite, il peut être intéressant d'effectuer des suppositions supplémentaires sur la forme du tenseur $\underline{\underline{R}}_{pp}$. Par exemple, si le tenseur possède deux valeurs propres identiques inférieures à la troisième $\lambda_1 = \lambda_2 \leq \lambda_3$ (ce qui est souvent le cas d'écoulements plans type écoulement homogène cisaillé ou écoulements de canal), la fréquence de collision est donnée par :

$$\nu_p^c(t; \underline{x}) = \frac{n_p(t; \underline{x}) d_p^2}{\sqrt{\pi}} \int_{\varphi \in [0, 2\pi]} \int_{k_3 \in [-1, 1]} \sqrt{\lambda_1(1 - k_3^2) + \lambda_3 k_3^2} dk_3 d\varphi \quad (2.90a)$$

$$= 2\sqrt{\pi} n_p(t; \underline{x}) d_p^2 \left[\sqrt{\lambda_3} + \frac{\lambda_1}{\sqrt{\lambda_3 - \lambda_1}} \sinh^{-1} \sqrt{\frac{\lambda_3 - \lambda_1}{\lambda_1}} \right] \quad (2.90b)$$

En caractérisant l'anisotropie par le facteur $S = \lambda_3/\lambda_1$, et en remarquant que le temps caractéristique de collision isotrope est donné pour $2q_p^2 = \lambda_3 + 2\lambda_1$, il est possible d'établir le rapport des temps caractéristiques :

$$\frac{\tau_p^c(\text{anisotrope})}{\tau_p^c(\text{isotrope})} = \frac{1}{2\sqrt{\frac{S+2}{3}}} \left[\sqrt{S} + \frac{\sinh^{-1} \sqrt{S-1}}{\sqrt{S-1}} \right] \quad (2.91)$$

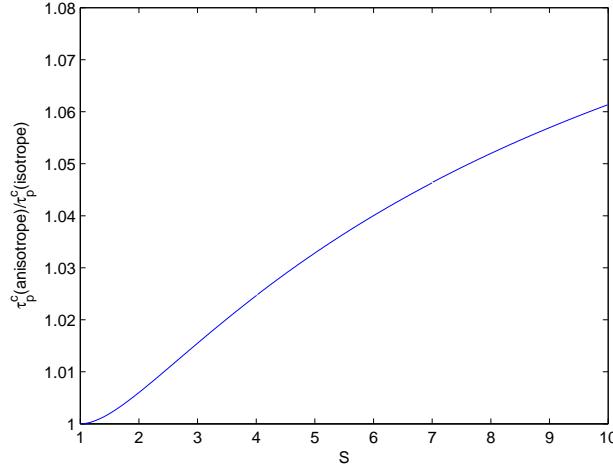


FIG. 2.2 – Influence du paramètre d'anisotropie sur le temps caractéristique de collision

La correction apportée par l'anisotropie est donc de l'ordre de quelques pourcents. Si cette correction semble faible, elle apporte néanmoins une augmentation de précision du calcul du temps caractéristique de collision qui peut se révéler significative. Les prédictions *a priori* issues des deux modèles à partir des moments calculés dans une simulation lagrangienne stochastique du canal du chapitre 6 sont données dans le figure 2.3.

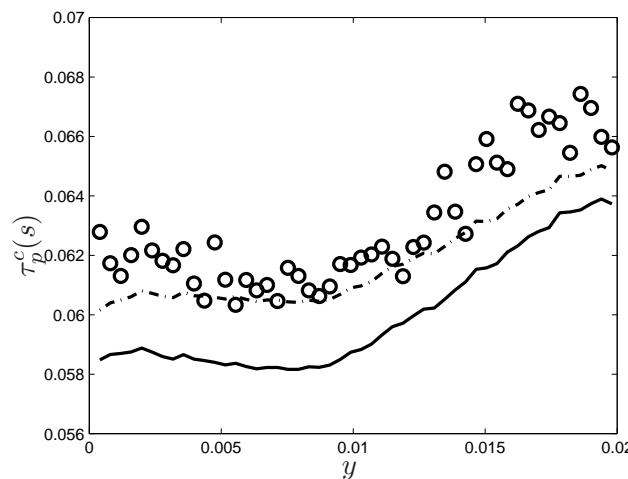


FIG. 2.3 – Comparaison des prédictions *a priori* du temps caractéristique de collision avec les temps mesuré par une simulation lagrangienne stochastique dans le cas du canal du chapitre 6. \circ : mesures dans la simulation lagrangienne stochastique ; — : modèle isotrope ; - - - : modèle anisotrope.

La figure 2.3 montre ainsi que le calcul du temps caractéristique de collision à l'aide de la formule anisotrope améliore la prédiction de celui-ci. Le calcul n'étant pas beaucoup plus coûteux que pour le calcul isotrope, cette extension paraît intéressante. Il reste cependant à la généraliser au cas de la fermeture aux vitesses corrélées car, même si l'effet est visible dans la figure 2.3, la correction due à la corrélation entre le mouvement turbulent et le mouvement d'agitation particulaire est d'ordre supérieur à la correction anisotrope dans la plupart des écoulements.

2.6 Equation finale d'évolution de la pdf jointe à une particule

En vertu des choix de fermeture effectués dans les paragraphes précédents, l'équation d'évolution modélisée de la pdf représentant notre système est la suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{fp}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} [c_{p,k} f_{fp}] + \frac{\partial}{\partial c_{p,k}} \left[\left(\frac{F_{d,k}}{m_p} + g_k \right) f_{fp} \right] - \frac{\partial}{\partial c_{f,k}} \left[\frac{\partial}{\partial x_k} [R_{ff,ik}] f_{fp} \right] \\ + \frac{\partial}{\partial c_{f,k}} [G_{kl} (c_{f,l} - U_{f,l}) f_{fp}] + \frac{\partial}{\partial c_{f,k}} \left[(c_{p,l} - c_{f,l} + U_{f,l}) \frac{\partial U_{f,k}}{\partial x_l} f_{fp} \right] (2.92) \\ - \frac{\partial}{\partial c_{f,k}} \left[\frac{\partial}{\partial c_{f,m}} \left[\frac{1}{2} B_{kl} B_{ml} f_{fp} \right] \right] = \left(\frac{\partial f_{fp}}{\partial t} \right)_{\text{coll}} \end{aligned}$$

2.7 Méthodes de résolution

Une fois une modélisation choisie pour ces différents termes, le système est fermé. Il existe diverses méthodes à disposition afin de résoudre celui-ci.

Il est par exemple possible de travailler avec des "particules numériques" dont le comportement suit exactement les lois de fermeture précédentes. On suit alors ces particules numériques le long de leur trajectoire et les valeurs des divers moments du système sont obtenues au cours d'un processus de moyenne volumique. Parce qu'elles traitent le fluide par une approche eulérienne (Navier/Stokes et équations dérivées) et la phase particulaire par une approche lagrangienne, ces méthodes sont dites Euler/Lagrange. De plus, le champ fluide (ainsi que les collisions) étant modélisé par un processus stochastique, ces méthodes sont dites Euler/Lagrange stochastique. Ces méthodes sont précieuses car elles répondent de façon approchée au problème complet, c'est-à-dire à la détermination complète de la pdf de l'écoulement.

Si une telle connaissance de l'écoulement n'est pas nécessaire, il est alors possible non pas de travailler directement sur l'équation (2.11) mais sur un problème approché qui ne tient compte que des premiers moments de f_{fp} . Une moyenne sur $\underline{\mathcal{L}}_f$ et $\underline{\mathcal{L}}_p$ de l'équation (2.11) multipliée par des variables $\psi(\underline{\mathcal{L}}_f, \underline{\mathcal{L}}_p)$ permet ainsi d'obtenir des équations aux dérivées partielles sur les grandeurs moyennes décrivant le système au niveau macroscopique. Parce qu'elles traitent à la fois le fluide et la phase dispersée dans une approche eulérienne ces méthodes sont dites Euler/Euler.

Malgré leur différence de formalisme, ces deux familles de méthodes découlent d'une approche pdf et il existe ainsi une forte cohérence entre les modèles issus de ces deux familles. Les modèles Euler/Euler sont en effet dérivés d'hypothèses faites lors de la modélisation des différents termes dans les méthodes Euler/Lagrange stochastiques.

2.8 Approche lagrangienne Stochastique

2.8.1 Principe de "dévissage" des opérateurs

La résolution numérique d'équations du type Boltzmann a engendré une littérature considérable. Toutes les méthodes utilisées à ce jour considèrent séparément les effets du transport et des collisions. Ce "dévissage" (en anglais "splitting") des opérateurs agissant sur la répartition dans l'espace des phases des particules peut être justifiée théoriquement (Desvillettes and Mischler [1996]). Les opérateurs de transport et de collision sont alors traités indépendamment l'un de l'autre et non simultanément.

L'étape de transport s'effectue en suivant les caractéristiques des particules, c'est-à-dire la trajectoire des particules dans l'espace des phases. En résolvant les équations du mouvement de particules il est alors possible de faire une simulation numérique de l'équation :

$$\frac{\partial f_{fp}}{\partial t} = -\frac{\partial c_{p,k} f_{fp}}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial c_{p,k}} \left[\left\langle \frac{du_{p,k}}{dt} \mid \underline{c}_f, \underline{c}_p \right\rangle \cdot f_{fp} \right] - \frac{\partial}{\partial c_{f,k}} \left[\left\langle \frac{du_{f@p,k}}{dt} \mid \underline{c}_f, \underline{c}_p \right\rangle \cdot f_{fp} \right] \quad (2.93)$$

De manière indépendante l'étape de collision est résolue en simulant l'effet des collisions, généralement par des méthodes de type Monte-Carlo. Ces algorithmes permettent de simuler l'équation :

$$\frac{\partial f_{fp}}{\partial t} = \left(\frac{\partial f_{fp}}{\partial t} \right)_{coll} \quad (2.94)$$

En additionnant les effets des deux étapes il est alors possible de retrancrire le comportement global du nuage de particules.

2.8.2 Résolution du transport

2.8.2.1 Discréétisation de la pdf

Les méthodes particulières sont basées sur la discréétisation de la pdf du problème par une somme de Diracs. La pdf f_{fp} est alors approximée par la somme :

$$f_{fp}(t; \underline{x}, \underline{c}_p, \underline{c}_f) = \sum_{m=1}^{\mathcal{N}_p} \kappa_m \cdot \delta[\underline{x} - \underline{x}_p^{(m)}(t)] \delta[\underline{c}_p - \underline{u}_p^{(m)}(t)] \cdot \delta[\underline{c}_f - \underline{u}_{f@p}^{(m)}(t)] \quad (2.95)$$

\mathcal{N}_p est le nombre total de particules numériques, et peut être choisi aussi petit que possible (la limite inférieure étant dictée par les erreurs statistiques acceptables).

Chaque Dirac de la somme (2.95) est usuellement interprété dans cette approche comme une "particule numérique". L'ensemble des particules de l'écoulement sont alors représentées par un échantillon de particule numériques. Chaque particule numérique représente un ensemble de κ particules réelles possédant les mêmes propriétés physiques (position, vitesse...). C'est pourquoi on utilise souvent la dénomination de poids numérique pour κ . Le nombre total de particules réelles, dans le cas où toutes les particules numériques possèdent le même poids, est simplement donné par :

$$N_p = \kappa \mathcal{N}_p$$

2.8.2.2 Résolution du transport de particules

Lorsque la pdf jointe de l'écoulement f_{fp} est discrétisée suivant (2.95), la résolution du transport des particules dans l'écoulement (2.93) est équivalent à la résolution du système d'équations lagrangiennes :

$$\frac{dx_{p,i}^{(m)}}{dt} = u_{p,i}^{(m)} \quad (2.96a)$$

$$\frac{du_{p,i}^{(m)}}{dt} = -\frac{u_{p,i}^{(m)} - U_{f,i} - u_{f@p,i}^{''(m)}}{\tau_p^{(m)}} \quad (2.96b)$$

$$du_{f@p,i}^{''(m)} = \frac{\partial R_{ff,ik}}{\partial x_k} dt + A_{ik} u_{f@p,k}^{''(m)} dt + B_{ik} \delta W_{fp,k}^{(m)} \quad (2.96c)$$

où les termes $U_{f,i}$, $\frac{\partial R_{ff,ik}}{\partial x_k}$, A_{ik} et B_{ik} représentent la projection des champs fluides associés sur la position de la particule.

Une remarque importante concernant la résolution du transport de particules, et donc la dispersion du nuage par la turbulence du fluide, est l'absence d'information locale sur l'écoulement fluide. Les termes issus du fluide intervenants dans les équations lagrangiennes des trajectoires des particules numériques sont en effet des moments statistiques de l'écoulement du fluide. Deux particules numériques très proche dans l'espace physique peuvent ainsi voir des vitesses fluide sensiblement différentes, et décorrélées spatialement. L'approche lagrangienne stochastique développée à partir d'une équation sur la pdf jointe en un point ne peut donc prendre en compte les phénomènes physiques de corrélation spatiale telle la concentration préférentielle. En contrepartie cette approche ne nécessite la connaissance que de quelques moments statistiques de l'écoulement fluide, réduisant drastiquement le nombre de degrés de liberté associés au fluide.

2.8.3 Résolution stochastique des collisions

La résolution stochastique des collisions dans les écoulements gaz-particule découlent des travaux effectués en théorie cinétique des gaz. Pour se convaincre de la forte analogie entre les deux problèmes il suffit d'écrire l'opérateur de collision (2.72) pour des particules élastiques et une fermeture de chaos fluido-particulaire :

$$\left(\frac{\partial f_{fp}}{\partial t} \right)_{coll} = \int_{\underline{w}_r, \underline{k} \leq 0} [f_{fpA}^* f_{fpB}^* - f_{fpA} f_{fpB}] B(\underline{k}, \underline{w}_r) d\underline{k} d\underline{w}_r d\underline{c}_{fp} \quad (2.97)$$

dont la forme est très similaire à l'expression de l'opérateur de Boltzmann.

Il n'est donc pas surprenant d'adapter les techniques issues de la théorie cinétique des gaz à nos écoulements. Les techniques exploitant au mieux la modélisation probabiliste du problème sont les techniques de simulation particulaire faisant appel à une discrétisation de la pdf. Une très bonne introduction aux diverses techniques développées dans le cadre de la théorie cinétique des gaz est due à Perthame [1994] et la dérivation d'un algorithme issu de ces idées peut être trouvé dans Bird [1994] et Babovsky [1986]. Les adaptations nécessaires aux spécificités des écoulements gaz-particule sont dues à Fede et al. [2002], Moreau et al. [2004] et Hylkema and Villedieu [1999].

2.8.3.1 Discrétisation de la pdf

La résolution des collisions fait aussi appel à une discrétisation de la pdf. Les collisions sont néanmoins résolues dans chaque cellule spatiale C_k en considérant l'écoulement comme homogène à cette échelle (ce

qui permet de simplifier certaines intégrales suivant le vecteur directeur \underline{k} qui n'a plus alors de direction privilégiée). La discréétisation se fait sous la forme :

$$f_{fp}(t; \underline{x}, \underline{c}_p, \underline{c}_f) = \sum_k \frac{\chi_{C_k}(\underline{x})}{V_{C_k}} \sum_{m=1}^{\mathcal{N}_k} \kappa_m \cdot \delta[\underline{c}_p - \underline{u}_p^{(m)}(t)] \cdot \delta[\underline{c}_f - \underline{u}_{f \oplus p}^{(m)}(t)] \quad (2.98)$$

Dans cette cellule considérée comme homogène, la fréquence de collision $\nu(C_k)$ est définie par :

$$\nu(C_k) = \frac{1}{\mathcal{N}_k} \sum_{i < j \leq \mathcal{N}_k} B_T(\underline{w}_r) = \frac{1}{\mathcal{N}_k} \sum_{i < j \leq \mathcal{N}_k} \int_{S^2} B(\underline{k}, \underline{w}_r) d\underline{k} \quad (2.99)$$

2.8.3.2 Méthodes basées sur l'équation de Boltzmann

Les méthodes de résolution des collisions basée sur l'équation de Boltzmann exploitent les propriétés de symétrie de l'opérateur, spécialement lorsque l'équation de Boltzmann est écrite sous sa forme faible discréétisée (Babovsky [1986]) :

$$\int f_{fp}^{(k+1)} \varphi(\underline{c}_p, \underline{c}_f) d\underline{c}_p d\underline{c}_f = \int f_{fp}^{(k)} \varphi(\underline{c}_p, \underline{c}_f) d\underline{c}_p d\underline{c}_f + \delta t \int \left(\frac{\partial f_{fp}}{\partial t} \right)_{coll}^{(k)} \varphi(\underline{c}_p, \underline{c}_f) d\underline{c}_p d\underline{c}_f \quad (2.100)$$

où les indices $^{(k)}$ font référence au pas de temps auxquels sont évaluées les expressions.

En utilisant la symétrie de l'opérateur de collision il est possible d'obtenir une autre formulation de la dernière intégrale :

$$\begin{aligned} \delta t \int \left(\frac{\partial f_{fp}}{\partial t} \right)_{coll}^{(k)} \varphi(\underline{c}_p, \underline{c}_f) d\underline{c}_p d\underline{c}_f &= -\frac{\delta t}{2} \int f_{fpA}^{(k)} f_{fpB}^{(k)} (\varphi_A + \varphi_B) B_T(\underline{w}_r) d\underline{c}_A d\underline{w}_r \\ &\quad + \frac{\delta t}{2} \int f_{fpA}^{(k)} f_{fpB}^{(k)} (\varphi_A^* + \varphi_B^*) B(\underline{k}, \underline{w}_r) d\underline{c}_A d\underline{w}_r d\underline{k} \end{aligned} \quad (2.101)$$

En utilisant l'approximation par une somme de diracs de la pdf, il est possible de montrer qu'en effectuant un appariement en $p = [\mathcal{N}_k/2]$ paires de particules numériques et un tirage aléatoire uniforme $s \in [0, 1]$ (Nanbu [1983]) la pdf en fin de pas de temps doit avoir la forme :

$$\int f_{fp}^{(k+1)} \varphi(\underline{c}_p, \underline{c}_f) d\underline{c}_p d\underline{c}_f = \frac{\kappa}{V_C} \sum_{q=1}^p \left[\delta(c - c_{qA}^{(k+1)}) + \delta(c - c_{qB}^{(k+1)}) \right] \quad (2.102)$$

Pour chaque paire de particules q :

- si $s \geq \pi d_p^2 / |\underline{w}_r| \mathcal{N}_k \delta t$ la collision n'est pas effectuée et $(c_{qA}^{(k+1)}, c_{qB}^{(k+1)}) = (c_{qA}^{(k)}, c_{qB}^{(k)})$.
- dans le cas contraire, la collision est effective. Un vecteur directeur tiré aléatoirement suivant la loi $d\mu_i$ et les nouvelles vitesses sont données par :

$$d\mu_i(\underline{k}) = \frac{B(\underline{k}, \underline{w}_r)}{B_T(\underline{w}_r)} d\underline{k} \quad (2.103)$$

$$(c_{qA}^{(k+1)}, c_{qB}^{(k+1)}) = (c_{qA}^{(k)*}, c_{qB}^{(k)*}) \quad (2.104)$$

Les principaux inconvénients de cet algorithme résident dans la nécessité de trier les particules par paires (opération de coût $O(n)$) et dans la contrainte imposée sur le pas de temps :

$$\Delta t \leq \frac{1}{\kappa(p-1) \max B_T(\underline{w}_r)} \quad (2.105)$$

Ces deux contraintes font de l'algorithme de Nanbu [1983] un algorithme coûteux de résolution de l'opérateur de collision. Il est tout de même possible de construire certains algorithmes basés sur l'équation de Boltzmann avec des conditions moins restrictives sur le pas de temps en s'inspirant des méthodes DSMC (§ 2.8.3.3).

2.8.3.3 Méthodes basées sur l'équation maîtresse

Les méthodes basées sur l'équation maîtresse ou équation de Liouville⁷ sont encore appelées méthodes de Monte-Carlo (DSMC pour Direct Simulation Monte-Carlo). Elles furent à l'origine des premiers algorithmes de résolution des collisions car, se proposant de résoudre la phase de collision de l'équation maîtresse pour N_p particules, l'opérateur est linéaire contrairement à l'opérateur de Boltzmann. La pdf de l'écoulement pouvant être obtenu par prise à la limite ($N_p \rightarrow \infty$) d'un système de N_p particules, résoudre les collisions sur le système réduit permet d'approximer l'opérateur de collision.

L'opérateur de collision intervenant dans l'équation maîtresse étant linéaire, il est possible de faire le lien avec les processus de Markov (Lapeyre et al. [1997]). Considérant le processus de Markov

$$\{(\underline{X}(t), \underline{V}(t)), t \geq 0\} \quad (2.106)$$

la fonction définie par $u(t, \underline{x}, \underline{c}) = \mathbf{E}[g(\underline{X}(t), \underline{V}(t)) \mid \underline{X}(0) = \underline{x}, \underline{V}(0) = \underline{c}]$ est solution de l'équation de Kolmogorov rétrograde :

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, \underline{x}, \underline{c}) = (\mathcal{A}_* u)(t, \underline{x}, \underline{c}) \quad (2.107a)$$

$$u(0, \underline{x}, \underline{c}) = g(\underline{x}, \underline{c}) \quad (2.107b)$$

où \mathcal{A}_* est l'adjoint du générateur du processus de Markov. Le générateur \mathcal{A} permet de connaître l'évolution du processus au cours du temps et ainsi de construire un processus dont l'espérance sera la solution à notre problème (Lapeyre et al. [1997], Graham and Méléard [1999]). Il peut exister plusieurs processus de Markov ayant un générateur identique et c'est pourquoi il existe différents algorithmes, par exemple de collision avec une particule fantôme, ou de collision entre deux particules tirées aléatoirement. Les méthodes de Monte-Carlo dans leur ensemble ne font que simuler un de ces processus et en prennent les moyennes.

L'algorithme DSMC utilisé lors de cette thèse a été développé à l'IMFT par Fede et al. [2002] comme une extension de l'algorithme de Bird [1994] aux écoulements gaz-particule. Il fait donc partie des algorithmes pour lesquels une collision affecte simultanément deux particules de la cellule.

Dans sa version originale, l'algorithme de Bird simule les instants de collision par une tirage aléatoire suivant une loi de Poisson de paramètre la fréquence de collision. Deux particules de la cellule sont alors sélectionnées au hasard à chaque instant pour entrer en collision. Le vecteur directeur est lui aussi tiré aléatoirement suivant la même loi qu'en (2.103). L'algorithme nécessite tout de même la valeur de la fréquence de collision (2.99), valeur qui ne peut être obtenue qu'avec de nombreux calculs (en n^2).

Pour remédier à ce problème, il est possible d'introduire le concept de "majorant de fréquence de collision". Cette technique fait partie des méthodes de réjection (cf. chapitre 4). Il faut premièrement connaître une fréquence λ qui majore la fréquence réelle, c'est-à-dire telle que $B_T(\underline{w}_r) = \frac{\pi d_p^2}{2} \mid \underline{w}_r \mid \leq \lambda$ pour toute paire de particules. Il est alors possible de sur-échantillonner les instants de collision et de décider pour chaque instant si la collision est effective ou fictive.

L'algorithme (dû à Bird [1994]) utilisé pour résoudre les collisions dans chaque cellule est alors le suivant :

⁷L'équation de Liouville d'un système est une équation de conservation dans l'espace des phases. Le théorème de Liouville stipule que le volume d'un domaine de l'espace des phases se conserve au cours du temps lorsqu'on suit le mouvement des divers points de ce domaine. Cette conservation le long des trajectoires dans l'espace des phases permet d'écrire pour la pdf w fonction des coordonnées $(\underline{q}_i, \dot{\underline{q}}_i)$:

$$\frac{dw}{dt} = \frac{\partial w}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial w}{\partial \underline{q}_i} \dot{\underline{q}}_i + \frac{\partial w}{\partial \dot{\underline{q}}_i} \ddot{\underline{q}}_i \right) = 0$$

1. les instants de collision probables sont calculés par incrément de durée suivant une loi de Poisson de paramètre λ :

$$t_c^{(k+1)} - t_c^{(k)} = -\frac{\ln(z)}{\lambda \frac{\mathcal{N}_k(\mathcal{N}_k-1)}{2} \frac{\kappa}{V_{C_k}}} \quad (2.108)$$

jusqu'à obtenir une durée cumulée supérieure au pas de temps $t_c^{(k+1)} - t_c^{(0)} \geq \delta t$

2. à chaque instant est sélectionné aléatoirement un couple de particules. Pour savoir si la collision entre ces deux particules peut être considérée comme effective, la procédure de réjection se fait par comparaison de la probabilité de collision de la paire avec un tirage aléatoire uniforme z sur $[0, \lambda]$.
- Si $\lambda z \leq B_T(\underline{w}_r)$ la collision est effectuée suivant les équations du § 1.4.7.
 - Dans le cas contraire les vitesses des deux particules restent inchangées.
3. lorsqu'une collision est effective, le vecteur directeur est tiré aléatoirement pour satisfaire à la loi (écrite en coordonnée sphérique) :

$$\begin{aligned} d\mu_i(\underline{k}) &= \frac{B(\underline{k}, \underline{w}_r)}{B_T(\underline{w}_r)} d\underline{k} \\ &= \frac{2\pi d_p^2 |\underline{w}_r| \sin \theta \cos \theta}{\pi d_p^2 |\underline{w}_r|} d\theta d\phi \\ &= 2 \sin \theta \cos \theta d\theta d\phi \end{aligned} \quad (2.109a)$$

Par opposition avec l'algorithme de Nanbu [1983], la résolution de l'opérateur de collision par un processus de Markov du type Bird [1994] ne demande pas de nombreuses ressources informatiques.

2.8.3.4 Prise en compte de la fermeture aux vitesses corrélées

Jusqu'à présent dans les algorithmes de résolution des collisions présentés il a été assez peu fait mention des vitesses du fluide vu par les particules entrant en collision. Ce vide, provenant de l'habitude de travailler avec une hypothèse de chaos particulaire, doit être comblé pour prendre en compte les spécificités des écoulements gaz-particule.

Berlemont et al. [1995] ont en effet montré qu'avec la dynamique de choc décrite au § 1.4.7 la covariance fluide-particule ne se conserve pas obligatoirement, et ce même pour des collisions élastiques. La variation de covariance fluide-particule lors d'une collision est donnée par :

$$\delta q_{fp} = -\frac{1 + e_{pp}}{2} (\underline{u}_{fB} - \underline{u}_{fA}) \cdot (\underline{u}_{pB} - \underline{u}_{pA}) \quad (2.110)$$

La seule fermeture de l'opérateur de collision n'entraînant pas de destruction de la covariance fluide-particule est donc la fermeture aux vitesses corrélées de Laviéville [1997]. Les algorithmes présentés dans les paragraphes précédents étant basés sur l'hypothèse de chaos fluido-particulaire, ne prennent pas en compte cette corrélation et détruisent donc la covariance fluide-particule. Cette covariance étant à l'origine, via la traînée, d'une partie du mouvement d'agitation des particules, les algorithmes précédents détruisent aussi une partie de l'énergie du mouvement d'agitation particulaire Fede [2004]. C'est pourquoi il est obligatoire de remédier à ces lacunes en forçant les algorithmes en prendre en compte la fermeture aux vitesses fluide corrélées.

L'adaptation de l'algorithme de Nanbu [1983] à ce conditionnement est naturelle. Hylkema and Villedieu [1999] proposent ainsi un premier tri des particules en fonction de la vitesse du fluide vu associée. Rangeant

les particules dans des boîtes pour lesquelles les vitesses du fluide vu sont proches (en assumant une forme Maxwellienne pour la pdf des vitesses du fluide vu), ils appliquent ensuite l'algorithme à chacune de ces boîtes. Il est à noter que la probabilité de collision dans chaque cellule est elle aussi modifiée. Les vitesses du fluide vu par les particules entrant en collision sont alors forcément proches ce qui minimise la destruction de covariance fluide-particule.

Dans le cas de l'algorithme de Bird, une adaptation possible a été réalisée à l'IMFT par Fede [2004] et Moreau et al. [2004]. Afin de préserver l'efficacité de l'algorithme initial (qui ne nécessite pas de classement de toutes les particules), le tri en fonction de la vitesse du fluide vu n'est pas envisageable. Il est donc nécessaire d'introduire le conditionnement à l'intérieur même du processus de collision. Afin de s'assurer que les vitesses du fluide sont proches un test sur les vitesses du fluide vu est réalisé avant la procédure de réjection. Le paramètre de conditionnement β dicte à quel point les vitesses doivent être proches :

$$0 \leq \frac{|\underline{u}_{fB} - \underline{u}_{fA}|}{|\underline{u}_{fB}| + |\underline{u}_{fA}|} \leq \beta \quad (2.111)$$

Le paramètre β pilote bien sûr les performances de ce nouvel algorithme baptisé M3C (Monte-Carlo Conditionned Collision) et nécessite une attention particulière (Fede [2004]). Les études récentes de Moreau et al. [2004] semblent de plus indiquer que ce conditionnement n'est pas suffisant au regard de statistiques fines telles que des moyennes conditionnées. Il est alors nécessaire d'introduire un conditionnement plus fin en assumant une forme Maxwellienne de la pdf des vitesses du fluide vu (de manière identique à Hylkema and Villedieu [1999]).

2.8.4 Conditions aux limites de paroi

La prise en compte de l'influence des parois sur l'écoulement se fait de manière naturelle dans l'approche lagrangienne stochastique. Ainsi quand une particule numérique vient à heurter une paroi, la vitesse particulière de celle-ci est modifiée suivant (1.94). Le détermination de l'instant de rebond est effectuée par résolution de l'équation de la trajectoire de la particule en considérant que l'accélération de la particule est constante sur la durée du pas de temps, *i.e.* en résolvant :

$$y_p(t_{reb}) = y_{reb} = v_p(t_n)(t_{reb} - t_n) + \frac{v_p(t_{n+1}) - v_p(t_n)}{t_{n+1} - t_n}(t_{reb}^2/2 - t_n t_{reb}) \quad (2.112)$$

où la particule rebondi sur la paroi pendant le pas de temps $[t_n, t_{n+1}]$. La vitesse pré-rebond de la particule est alors re-calculée en utilisant le schéma habituel (cf. § 2.8.5.1) mais sur un pas de temps $t_{reb} - t_n$. La vitesse post-rebond de la particule est alors calculée et la particule déplacée pendant $t_{n+1} - t_{reb}$.

Il est à noter que des conditions similaires seraient idéalement imposées à la vitesse du fluide vu par la particule. En effet, le suivi de cette vitesse du fluide par un processus de Langevin résolvant de manière implicite les équations eulériennes associées, de mauvaise conditions aux limites imposées au schéma de Langevin doivent perturber le champ fluide vu par les particules. Les effets les plus notables devraient être l'absence de frottement et un mauvais comportement des contraintes du fluide vu à la paroi. Ces effets n'ont pas été observés dans nos simulations du fait du temps de réponse assez court du schéma de Langevin (qui dégénère suffisamment vite vers une turbulence nulle en proche paroi), mais ne pourraient être négligés dans le cas de particules lourdes. Il serait alors nécessaire d'imposer des conditions sur la vitesse du fluide vu qui permettent de satisfaire les conditions aux limites sur le fluide. Dans la continuité des travaux de Sakiz [1999], des conditions de type (1.94) pourraient être imposées sur la vitesse du fluide vu. La poursuite des calculs a alors montré qu'il serait nécessaire notamment de satisfaire à $e_{fw} = e_{pw}$ et de calculer un coefficient de frottement équivalent μ_{fw} permettant d'intégrer le frottement du fluide à la paroi. Ces

développements retrouvent une forme similaire aux travaux déjà mené en monophasique (Minier and Ponzorski [1999]). Cette démarche devrait tout de même trouver des solutions quant aux conditions aux limites imposées sur les contraintes fluide-particule et qui ne suivent pour l'instant aucune contrainte physique.

2.8.5 Considérations numériques

2.8.5.1 Schéma de résolution du transport

Les équations du mouvement d'une particule s'écrivent :

$$\frac{dx_{p,i}^{(m)}}{dt} = u_{p,i}^{(m)} \quad (2.113a)$$

$$\frac{du_{p,i}^{(m)}}{dt} = -\frac{u_{p,i}^{(m)} - U_{f,i} - u_{f,i}''^{(m)}}{\tau_p^{(m)}} \quad (2.113b)$$

$$du_{f,i}''^{(m)} = \frac{\partial R_{ff,ik}}{\partial x_k} dt + A_{ik} u_{f,k}''^{(m)} dt + B_{ik} \delta W_{fp,k}^{(m)} \quad (2.113c)$$

En ce qui concerne les équations du mouvement de la particule (2.113a) et (2.113b) c'est un système d'équations différentielles du premier ordre, non-homogène et non-linéaire. Celui-ci possède tout de même une solution pouvant s'exprimer de manière analytique :

$$x_{p,i}^{(m)}(t) = x_{p,i}^{(m)}(t_0) + \int_{t_0}^t u_{p,i}^{(m)}(s) ds \quad (2.114a)$$

$$u_{p,i}^{(m)}(t) = u_{p,i}^{(m)}(t_0) \exp[-\alpha(t)] - \exp[-\alpha(t)] \int_{t_0}^t \exp[\alpha(s)] \beta(s) U_{f,i}(s) + u_{f,i}''^{(m)}(s) ds \quad (2.114b)$$

avec $\beta(s) = 1/\tau_{p,(m)}(s)$ et $\alpha(t) = \int_{t_0}^t \beta(s) ds$.

Il est possible à partir de la formulation précédente de construire des schémas numériques dont les propriétés, notamment en terme d'ordre du schéma, peuvent être assurées. D'autres schémas numériques tirent parti de plusieurs tirages d'un schéma de bas ordre pour, en les combinant, obtenir un schéma numérique global d'ordre plus élevé. C'est la philosophie des schémas de Runge-Kutta.

La dernière équation (2.113c), concernant la fluctuation de vitesse fluide vue par la particule, est une équation différentielle stochastique. Contrairement au système (2.113a)-(2.113b), l'obtention de schéma numériques d'ordre élevés pour cette dernière est très ardu. Le schéma d'ordre le plus élevé proposé actuellement dans le cadre de la modélisation stochastique de la turbulence est dû à Haworth and Pope [1986] et concerne un schéma d'ordre deux. Une extension de ces travaux au cas diphasique a été réalisé par Minier et al. [2003]. La difficulté réside dans la présence de deux temps caractéristiques (celui du processus et celui du bruit) qui ne permet pas de simplifier tous les termes apparaissant dans les intégrales. Il est alors nécessaire d'évaluer de nombreuses intégrales du processus de bruit afin de construire un schéma de l'ordre deux.

Comme il apparaît que l'évolution de la vitesse fluctuante vue influence le comportement de la particule, le problème se propage à tout le système.

Résolution "semi-analytique" Pour de petits incrément de temps δt la résolution analytique peut être simplifiée en considérant le temps d'interaction de traînée constants sur le pas de temps : $\beta(s) = 1/\tau_p(t_n)$

pour $s \in [t_n, t_{n+1}]$ où $t_{n+1} = t_n + \delta t$. Une approximation possible de la vitesse du fluide vu $U_{f,i}(s) + u''_{f,i}(s)$ sur l'intervalle $[t_0, t_0 + \delta t]$ peut être prise suivant :

$$U_{f,i}(s) + u''_{f,i}(s) = U_{f,i}(t_n) + (s - t_n) \frac{\partial U_{f,i}(t_n)}{\partial x_k} u_{p,k}(t_n) + (1 - \frac{s - t_n}{\delta t}) u''_{f,i}(t_n) + \frac{s - t_n}{\delta t} u''_{f,i}(t_{n+1}) \quad (2.115)$$

Comme $\tau_p = \tau_p(t_n)$, la vitesse de la particule s'exprime alors suivant :

$$u_{p,i}(t) = u_{p,i}(t_n) e^{-\delta t/\tau_p(t_n)} + e^{-\delta t/\tau_p(t_n)} \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{\frac{s-t_n}{\tau_p(t_n)}} \frac{U_{f,i}(s) + u''_{f,i}(s)}{\tau_p(t_n)} ds \quad (2.116)$$

Après calculs :

$$e^{-\delta t/\tau_p(t_n)} \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{\frac{s-t_n}{\tau_p(t_n)}} \frac{U_{f,i}(t_n)}{\tau_p(t_n)} ds = [1 - e^{-\delta t/\tau_p(t_n)}] U_{f,i}(t_n) \quad (2.117a)$$

$$\begin{aligned} e^{-\delta t/\tau_p(t_n)} \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{\frac{s-t_n}{\tau_p(t_n)}} \frac{\partial U_{f,i}(t_n)}{\partial x_k} u_{p,k}(t_n) \frac{s - t_n}{\tau_p(t_n)} ds &= \frac{\partial U_{f,i}(t_n)}{\partial x_k} u_{p,k}(t_n) [\delta t - \tau_p(t_n)(1 - e^{-\delta t/\tau_p(t_n)})] \\ &\simeq \delta t \frac{\partial U_{f,i}(t_n)}{\partial x_k} \frac{u_{p,k}(t_n) \delta t}{2\tau_p(t_n)} \end{aligned} \quad (2.117b)$$

qui est un terme négligeable dès que le gradient de vitesse moyenne du fluide est petit devant le pas de temps.

$$\begin{aligned} e^{-\delta t/\tau_p(t_n)} \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{\frac{s-t_n}{\tau_p(t_n)}} \left(1 - \frac{s - t_n}{\delta t}\right) \frac{u''_{f,i}(t_n)}{\tau_p(t_n)} ds &= \left[\frac{\tau_p(t_n)}{\delta t} (1 - e^{-\delta t/\tau_p(t_n)}) - e^{-\delta t/\tau_p(t_n)} \right] u''_{f,i}(t_n) \\ &\simeq \frac{u''_{f,i}(t_n) \delta t}{2\tau_p(t_n)} \end{aligned} \quad (2.118a)$$

$$\begin{aligned} e^{-\delta t/\tau_p(t_n)} \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{\frac{s-t_n}{\tau_p(t_n)}} \frac{s - t_n}{\delta t} \frac{u''_{f,i}(t_{n+1})}{\tau_p(t_n)} ds &= \left[1 - \frac{\tau_p(t_n)}{\delta t} (1 - e^{-\delta t/\tau_p(t_n)}) \right] u''_{f,i}(t_{n+1}) \\ &\simeq \frac{u''_{f,i}(t_{n+1}) \delta t}{2\tau_p(t_n)} \end{aligned} \quad (2.118b)$$

Pour des incrémentations suffisamment petits pour lesquels la vitesse du fluide vu pourrait être considérée comme constante sur le pas de temps, ce schéma dégénère vers un schéma plus simple. Les trajectoires des particules sont alors construites en résolvant les équations :

$$u_{p,i}(t_{n+1}) = u_{p,i}(t_n) \exp^{-\delta t/\tau_p(t_n)} + \left[1 - \exp^{-\delta t/\tau_p(t_n)} \right] (U_{f,i}(t_n) + u''_{f,i}(t_n)) \quad (2.119a)$$

$$x_{p,i}(t_{n+1}) = x_{p,i}(t_n) + \frac{\delta t}{2} (u_{p,i}(t_{n+1}) + u_{p,i}(t_n)) \quad (2.119b)$$

Cette méthode présente le désavantage de corrélérer la vitesse de la particule en fin de pas de temps avec la vitesse du fluide vu en début de pas de temps. Ceci pourrait entraîner un mauvais calcul des corrélations de vitesse fluide-particule puisque celles-ci sont calculées pour les valeurs en fin de pas de temps $u_{p,i}(t_{n+1})$ et $u_{f@p,i}(t_{n+1})$.

Le problème provient de la résolution de la vitesse du fluide vu. La partie fluctuante est résolue par une équation de Langevin (qui donne $u''_{f,i}(t_{n+1})$ en fonction de $u''_{f,i}(t_n)$), à laquelle doit s'ajouter la vitesse moyenne à la position de la particule. La vitesse du fluide vu en fin de pas de temps n'est donc connue que lorsque la position de la particule en fin de pas de temps est connue. Mais pour avoir des schémas d'ordre plus élevés, la donnée de $u_{f@p,i}(t_{n+1})$ est nécessaire pour le calcul de cette position finale $x_{p,i}(t_{n+1})$. On se mord donc la queue ...

Résolution Runge-Kutta explicite Une autre piste pour construire un schéma numérique plus précis que le simple schéma d'Euler explicite est l'utilisation de méthodes Runge-Kutta. Cette méthode à pas séparés ne possède pas de justification mathématique en ce qui concerne l'équation de Langevin (impliquant un terme évoluant en $\sqrt{\delta t}$), mais il nous a semblé qu'une extension de ces méthodes d'intégration pouvait s'appliquer au système d'équations régissant le comportement d'une particule. De manière générale, la résolution Runge-Kutta de notre système peut s'écrire :

$$\begin{cases} x_{p,i}(t + \delta t) &= x_{p,i}(t) + \sum_k \gamma_k K_{x_{p,i}}^{t_k} \\ u_{p,i}(t + \delta t) &= u_{p,i}(t) + \sum_k \gamma_k K_{u_{p,i}}^{t_k} \\ u''_{f@p,i}(t + \delta t) &= u''_{f@p,i}(t) + \sum_k \gamma_k K_{u''_{f@p,i}}^{t_k} \end{cases} \quad (2.120)$$

avec les coefficients γ_k déterminés afin que l'ordre soit le plus élevé possible. Les incrément de pas séparés K^{t_k} sont quant à eux définis pour une méthode de Runge-Kutta explicite par les formules de récurrence suivantes (la variable temps n'intervenant pas dans les accélérations) :

$$\begin{cases} K_{x_{p,i}}^{t_k} &= u_{p,i}^{t_{k-1}} \delta t \\ K_{u_{p,i}}^{t_k} &= - \left(\frac{u_{p,i}^{t_{k-1}} - u_{f@p,i}^{t_{k-1}}}{\tau_p^{t_{k-1}}} + g_i(x_{p,i}^{t_{k-1}}) \right) \delta t \\ K_{u''_{f@p,i}}^{t_k} &= \frac{\partial R_{ff,ij}}{\partial x_j}(x_{p,i}^{t_{k-1}}) \delta t + A_{ij}(x_{p,i}^{t_{k-1}}) u''_{f@p,j}^{t_{k-1}} \delta t + \sqrt{\delta t} B_{ij}(x_{p,i}^{t_{k-1}}) w_j^{t_k} \end{cases} \quad (2.121)$$

$$\begin{cases} x_{p,i}^{t_k} &= x_{p,i}(t) + \sum_{l=1}^k \alpha_{k,l} K_{x_{p,i}}^{t_l} \\ u_{p,i}^{t_k} &= u_{p,i}(t) + \sum_{l=1}^k \alpha_{k,l} K_{u_{p,i}}^{t_l} \\ u''_{f@p,i}^{t_k} &= u''_{f@p,i}(t) + \sum_{l=1}^k \alpha_{k,l} K_{u''_{f@p,i}}^{t_l} \end{cases} \quad (2.122)$$

où w^{t_k} est un bruit blanc (tirage aléatoire gaussien) qui est retiré aléatoirement pour chaque pas de temps séparé.

Les schémas de Runge-Kutta les plus usités sont les schémas explicites d'ordre 2 et 4 qui sont définis par les coefficients du tableau 2.8.5.1 :

Ordre 2	Ordre 4
$\alpha_{1,1} = \frac{1}{2}$	$\alpha_{2,1} = \alpha_{3,1} = \alpha_{3,2} = 0$ $\alpha_{1,1} = \alpha_{2,2} = \frac{1}{2}$ $\alpha_{3,3} = 1$
$\gamma_1 = 0$ $\gamma_2 = 1$	$\gamma_1 = \gamma_4 = \frac{1}{6}$ $\gamma_2 = \gamma_3 = \frac{1}{3}$

TAB. 2.1 – Coefficients des schémas Runge-Kutta explicites d'ordre 2 et 4

Le schéma utilisé sera toujours le schéma d'ordre deux car aucune différence (pour nos écoulements) entre les prédictions issues de ce dernier et celles issues d'un schéma d'ordre quatre n'a pu être observée. Des études avec des pas de temps lagrangiens très grands n'ont cependant pas été menées, en particulier lorsque les échelles de temps de la turbulence deviennent petites.

2.8.5.2 Résolution des collisions

La résolution de l'opérateur de collision est faite suivant l'algorithme présenté au paragraphe 2.8.3.3. Dans ces conditions, le tirage aléatoire du vecteur directeur doit suivre la loi de probabilité :

$$d\mu_i(\underline{k}) = 2 \sin \theta \cos \theta d\theta d\phi \quad (2.123)$$

dans un repère préférentiel de collision $\{\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3\}$. Ce repère est construit à partir de la vitesse relative des deux particules \underline{w}_r et du repère (fixe) de l'écoulement $\{\underline{e}_x, \underline{e}_y, \underline{e}_z\}$ comme suit :

1. le vecteur \underline{e}_1 est le vecteur unitaire de la direction de la vitesse relative :

$$\underline{e}_1 = \underline{w}_r / |\underline{w}_r|$$

2. le vecteur \underline{e}_2 est déterminé par :

$$\underline{e}_2 = \begin{cases} \underline{e}_x \wedge \underline{e}_1 \text{ si } |\underline{e}_x \wedge \underline{e}_1| > |\underline{e}_y \wedge \underline{e}_1| \\ \underline{e}_y \wedge \underline{e}_1 \text{ si } |\underline{e}_x \wedge \underline{e}_1| < |\underline{e}_y \wedge \underline{e}_1| \end{cases}$$

pour s'assurer que \underline{e}_2 est bien défini dans toutes les configurations (si \underline{e}_1 est colinéaire à un des vecteurs du repère fixe)

3. $\underline{e}_3 = \underline{e}_1 \wedge \underline{e}_2$

Dans cette base le vecteur \underline{k} qui suit la loi $d\mu_i$ est donc simplement calculé par :

$$\underline{k} = \cos \theta \underline{e}_1 + \sin \theta \cos \phi \underline{e}_2 + \sin \theta \sin \phi \underline{e}_3 \quad (2.124)$$

avec l'angle ϕ déterminé par un tirage aléatoire suivant la loi uniforme sur $[0, 2\pi]$ et l'angle θ par un tirage suivant la loi $2 \sin \theta \cos \theta d\theta = d \sin^2 \theta$. En remarquant que la variable $\sin^2 \theta \in [0, 1]$ il est possible de la relier à un tirage aléatoire z uniforme sur $[0, 1]$. La variable θ est alors prise comme $\theta = \arcsin(\sqrt{z})$

La collision entre les deux particules est alors résolue à l'aide des équations du § 1.4.7.

2.8.5.3 Statistiques

Lors de simulations lagrangiennes (ou particulières) le lien vers les moments (ou observables macroscopiques), comme la vitesse moyenne ou l'agitation, est effectué par des processus de moyenne sur les variables mésoscopiques (ou microscopiques) adéquates. Les résultats de telles simulations sont donc par construction des résultats statistiques soumis aux erreurs statistiques due à l'échantillonnage limité (au nombre limité de particules considérées). Il serait donc nécessaire d'établir la variance de telles moyennes pour obtenir l'intervalle de confiance des prédictions de telles simulations. L'obtention de ces variances lors de la simulation aurait un coût numérique non négligeable (de l'ordre du coût des statistiques) et il est donc préférable de disposer d'estimations de ces variances *a priori*. La loi faible des grands nombres permet d'affirmer que le processus de moyenne possède une variance, lorsque le nombre d'échantillons devient grand, inversement proportionnelle au nombre d'échantillons. Le processus de moyenne converge donc "au moins" en $1/\sqrt{N}$. Cette convergence peut être considérée comme lente mais est malheureusement celle qui est observée. Il est possible de donner des estimations de convergence plus précises (en explicitant notamment les constantes de proportionnalité dans les lois de convergence des moments, Hadjiconstantinou et al. [2003]), mais cette convergence toujours lente quelque soit le moment constitue le principal défaut des simulations particulières. Une limite basse généralement admise du nombre d'échantillons nécessaire pour établir des moyennes sur des moments d'ordre faible (≤ 2) est de l'ordre de 10 à 15 échantillons.

la précision des simulations particulières est donc directement reliée au nombre d'échantillons (ou particules) sur lesquels sont effectués les statistiques. Afin de maximiser ce nombre d'échantillons dans toutes les situations, deux processus de moyenne complémentaires peuvent être développés :

- la première approche dite "volumique" est la plus naturelle. Elle décompose l'espace en cellules à l'intérieur desquelles le processus de moyenne peut être plus moins compliqué. Le processus de moyenne

est ainsi un filtre volumique dont le représentant le plus simple est le filtre porte qui équivaut à faire une simple somme sur les particules intérieures à la cellule C_k :

$$\langle \Psi \rangle (C_k) = \frac{1}{N_{C_k}} \sum_{i \in C_k} \psi_i \quad (2.125)$$

Lorsque les statistiques ont besoin d'être plus précise, des filtres plus élaborés (comme le filtre gaussien) doivent être employés. Cette technique peut devenir très pénalisante lorsque les échelles de longueur macroscopiques de l'écoulement oblige à considérer des cellules de taille caractéristique petite.

- la deuxième approche dite de flux ne considère plus les particules présentes dans une cellule mais les particules traversant une surface sur laquelle les variables sont calculées. Les moments ne sont pas alors connus directement mais à travers leurs flux. Comme les moments d'ordre $n + 1$ sont des flux de moments d'ordre n , il est alors possible de reconstruire les moments avec cette approche (cf. § 4.3.3). Cette dernière peut être particulièrement utile lorsque le nombre de particules traversant la face de moyenne devient grand. Les calculs présentés au § 4.5 permettent d'approximer ce nombre de particules par la formule :

$$\mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul-}}(1, \underline{x}_\Gamma, t) = n_p(\underline{x}_\Gamma, t) \left[\sqrt{R_{pp,nn}} J_1\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) + (\underline{U}_p \cdot \underline{n}) J_0\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) \right] \quad (2.126)$$

où J_0 et J_1 sont des fonction explicites, $\underline{U}_p \cdot \underline{n}$ et la vitesse moyenne des particules dans la direction normale à la face, et $R_{pp,nn}$ l'agitation dans cette direction. Si dans la direction normale à la face de moyenne l'écoulement possède une vitesse moyenne ou une agitation importante le nombre de particules traversant la face devient important.

En appelant L_c la longueur caractéristique des cellules, un calcul rapide montre que dans le cas de vitesse moyenne normale particulaire nulle ($\underline{U}_p \cdot \underline{n} = 0$) le rapport des variances issus des deux approches précédentes peut s'écrire :

$$\frac{\sigma_{vol}}{\sigma_{flux}} \sim \sqrt{\frac{\sqrt{R_{pp,nn}} dt}{L_c}} \quad (2.127)$$

Les écoulements étudiés ici présentent une direction privilégiée d'évolution (la direction normale), direction dans laquelle la vitesse moyenne des particules est nulle à l'équilibre. La contrainte cinétique normale étant dictée par la physique (nous avons observé dans nos écoulements pour valeur maximum $\sqrt{R_{pp,nn}} \sim 0,2 \text{ m.s}^{-1}$) et la taille des cellules est dictée par les échelles de longueur de variation macroscopique de l'écoulement (avec pour minimum $L_c \sim 4 \cdot 10^{-4} \text{ m}$), le rapport des variances dépend donc principalement de la valeur choisie pour le pas de temps (qui prend une valeur maximum dans nos simulations $dt \sim 5 \cdot 10^{-4} \text{ s}$). Les valeurs données ne permettent pas de discriminer directement une des deux approches ($\sigma_{vol}/\sigma_{flux} \sim 0,5$), mais le calcul est fait avec les valeurs les plus favorables pour le calcul type flux. Les statistiques effectuées sur les flux seraient donc toujours plus bruitées que des statistiques volumiques dans nos cas de simulations. C'est pourquoi nous utiliserons toujours des statistiques volumiques par simple moyenne sur les particules intérieures pour le calcul des moments. Les demi-flux ou flux traversant une surface seront bien sur calculés avec une approche type flux.

Chapitre 3

Approche aux Moments

Sommaire

3.1	Mise en place du problème	75
3.1.1	Résolution aux moments de l'équation sur la pdf jointe	75
3.1.2	Moments représentatifs de l'écoulement	75
3.1.3	Équation générique de transport d'une variable eulérienne	77
3.2	Équations exactes de transport des moments particulaires	77
3.2.1	Bilan de densité de particules	77
3.2.2	Bilan de quantité de mouvement	77
3.2.3	Equation d'évolution des contraintes particulières	78
3.2.4	Modèles d'agitation	79
3.2.5	Hypothèses de fermeture supplémentaire du modèle eulérien	79
3.2.6	Equation de transport de la vitesse de dérive	84
3.2.7	Equation de transport des corrélations fluide-particules	85
3.3	Cas de l'écoulement canal plan infini	86
3.3.1	Notations	86
3.3.2	Equations résolues par l'approche eulérienne en canal plan	87
3.3.3	Conditions aux limites	87
3.4	Considérations numériques	88
3.4.1	Discrétisation temporelle	88
3.4.2	Discrétisation spatiale	91
3.5	Limites de validité d'un modèle eulérien	91

Lors de la résolution de problèmes d'ingénierie particulièrement complexes à l'échelle industrielle (que ce soit au niveau des processus physiques ou de la géométrie), les seules approches numériques raisonnables en terme de temps de calcul sont les approches eulériennes. Placées dans un repère de référence stationnaire, les particules passent alors au travers de volumes de contrôle fixes et ne sont pas suivies le long de leurs trajectoires. Les caractéristiques de la phase particulaire sont alors obtenues par la résolution d'équations aux dérivées partielles dans un système de coordonnées donné. Ces modèles traitant le nuage de particules comme un milieu continu (de manière identique au fluide porteur) sont aussi appelés "modèles à deux fluides" ou "modèles continus".

L'hypothèse de milieu continu est importante car elle permet de traiter la phase dispersée avec la même discrétisation (les maillages pour le fluide et la phase dispersée peuvent coïncider) et les mêmes méthodes numériques que pour le fluide porteur. Elle pose tout de même le problème du passage de la description

cinétique à la description hydrodynamique. Ce passage est généralement basé sur l'hypothèse que le libre parcours moyen d'une particule (la distance moyenne parcourue entre deux collisions) et/ou la distance d'interaction de traînée (distance à partir de laquelle la vitesse de la particule et du fluide se corrèlent) sont beaucoup plus petits que les échelles macroscopiques de l'écoulement. Les collisions et/ou la turbulence ont un effet de "brassage" qui tend à ramener localement la pdf de l'écoulement vers une pdf dite d'équilibre. Si les deux effets (voire un seul) sont suffisamment importants, les équations hydrodynamiques associées à la pdf d'équilibre locale permettent alors de représenter de manière efficace l'écoulement. Dans le cas contraire l'écart de la pdf à l'équilibre local peut devenir grand et faire apparaître des inconsistances (notamment des moments qui ne peuvent être associés à une densité de particules positive).

Il est possible de continuer à décrire des écoulements proche de l'équilibre par des équations de type hydrodynamique en augmentant le nombre de moments résolus (Grad [1949]). Une telle procédure nécessite néanmoins la fermeture des équations d'évolution de ces moments et des flux d'ordre encore supérieur, fermetures qui nécessite une fois de plus des hypothèses d'équilibre local. De tels systèmes d'équations aux moments présentent ainsi plusieurs problèmes majeurs :

- la complexité due aux nombres d'équations. Même si le coût de telles simulations est très faible comparé à des simulations particulières, augmenter le nombre d'équations résolues résulte en une augmentation du temps de calcul.
- les équations deviennent raides lorsqu'on s'approche de la limite fluide. Cette limitation peut toutefois être atténuée par des schémas numériques appropriés.
- la perte de réalisabilité des moments prédicts. Les moments prédicts par la simulation peuvent évoluer jusqu'au point où ceux-ci violent des inégalités qui devraient être satisfaite par toute pdf non-négative. Il peut en résulter l'apparition de densités de particules négatives, ce qui est contraire à la physique. Pour contrôler ce problème il est donc nécessaire de s'assurer que les moments prédicts satisfont bien les inégalités, voire de "clipper" les variables qui les violeraient (le terme clipper implique que certaines variables sont re-calculées pour satisfaire aux inégalités).
- mauvaise réaction des modèles lorsqu'on s'éloigne de régimes modérés. Le système peut en effet devenir elliptique au cours de la simulation pour des régimes fortement hors-équilibre et ainsi être mal posé. La solution du système n'est alors plus obligatoirement représentative de la physique.

Les approches eulériennes se heurtent de plus à des problèmes de prise en compte de phénomènes physiques complexes tels la dispersion en diamètre, en densité ou la thermique du nuage de particules. En effet, le diamètre ou la densité influent de manière trop importante sur le comportement du nuage de particules associé pour permettre de représenter un nuage polydisperse de manière rigoureuse dans une approche eulérienne classique. Il est alors nécessaire de définir plusieurs "classes" de particules ayant chacune ses caractéristiques propres (diamètre, vitesse moyenne ...). Chaque classe défini alors un nouveau continuum qui interagit non seulement avec le fluide porteur mais aussi avec les autres classes dans le cas de coalescence et fragmentation. Des avancées encourageantes ont été faites dans ce domaine, que ce soit par l'application de méthodes multi-fluides (Dufour [2005]) ou de méthodes DQMOM (Blanquart et al. [2006], Fox [2006]).

La modélisation des conditions aux limites dans les approches eulériennes présente aussi des difficultés dans le cas d'interactions non-triviales entre la phase particulaire et les parois. Le formalisme macroscopique eulérien présente ainsi des incohérences lors de la modélisation de phénomènes se passant à l'échelle microscopique, tel les rebonds sur des parois rugueuses ou la déposition/éclatement de particules liquides.

3.1 Mise en place du problème

Dans le cadre d'une approche statistique de la phase dispersée il est possible de représenter le nuage de particules par une fonction de densité de probabilité appelée pdf jointe à une particule f_{fp} . L'équation d'évolution de cette pdf jointe à une particule est une équation de type Boltzmann (cf. chapitre 2) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{fp}}{\partial t} + \frac{\partial c_{p,k} f_{fp}}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial c_{p,k}} \left[\left\langle \frac{du_{p,k}}{dt} \mid \underline{c}_f, \underline{c}_p \right\rangle f_{fp} \right] \\ + \frac{\partial}{\partial c_{f,k}} \left[\left\langle \frac{du_{f@p,k}}{dt} \mid \underline{c}_f, \underline{c}_p \right\rangle f_{fp} \right] = \left(\frac{\partial f_{fp}}{\partial t} \right)_{coll} \end{aligned} \quad (3.1)$$

La fermeture des termes dus aux accélérations est effectuée en modélisant les forces exercées par le fluide sur les particules, en mimant le champ fluide "vu" par les particules et en émettant des hypothèses sur l'opérateur de collision. En prenant en compte la physique du chapitre 1 et les modélisations du chapitre 2, l'équation à résoudre est :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{fp}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} [c_{p,k} f_{fp}] + \frac{\partial}{\partial c_{p,k}} \left[\left(\frac{F_{d,k}}{m_p} + g_k \right) f_{fp} \right] - \frac{\partial}{\partial c_{f,k}} \left[\frac{\partial}{\partial x_k} [R_{ff,ik}] f_{fp} \right] \\ + \frac{\partial}{\partial c_{f,k}} [G_{kl} (c_{f,l} - U_{f,l}) f_{fp}] + \frac{\partial}{\partial c_{f,k}} \left[(c_{p,l} - c_{f,l} + U_{f,l}) \frac{\partial U_{f,k}}{\partial x_l} f_{fp} \right] \\ - \frac{\partial}{\partial c_{f,k}} \left[\frac{\partial}{\partial c_{f,m}} \left[\frac{1}{2} B_{kl} B_{ml} f_{fp} \right] \right] = \left(\frac{\partial f_{fp}}{\partial t} \right)_{coll} \end{aligned} \quad (3.2)$$

3.1.1 Résolution aux moments de l'équation sur la pdf jointe

La résolution complète de cette équation fait appel à des méthodes particulières ou lagrangiennes (cf. chapitre 2). Celles-ci souffrent d'une faible précision pour des temps de calcul assez longs. Cette faible efficacité numérique provient de la somme d'informations trop grande que ces méthodes se proposent d'obtenir. Il est ainsi possible d'obtenir n'importe quel moment de la phase particulaire en contrepartie d'un temps de calcul toujours de plus en plus long (pour des raisons de convergence statistique). Ces méthodes ne sont d'ailleurs pleinement accessibles que depuis l'avènement du calcul parallèle et les progrès du calcul scientifique.

Pour remédier au temps de calcul trop importants, il faut alors limiter la connaissance que l'on a de l'écoulement. De manière identique à la turbulence, le mouvement d'agitation de la phase particulaire ne sera plus caractérisé par toutes ses échelles mais par certains paramètres statistiques appelés moments. Pour chacun de ces paramètres il est possible d'écrire une équation d'évolution qui est une équation aux dérivées partielles ordinaire. Les équations pour le fluide et la phase particulaire présentent alors des similitudes fortes que l'on peut exploiter pour diminuer les temps de calcul.

3.1.2 Moments représentatifs de l'écoulement

Les paramètres statistiques représentatifs de la phase dispersée ont été évoqués au § 1.4 comme des moments du champ de vitesse instantané des particules. Plus le nombre de moments décrivant le système sera grand, plus précise sera la description. Ces variables eulériennes peuvent être obtenues par un processus de moyenne sur les variables "microscopiques". Cette moyenne est celle sur toutes les réalisations possibles de l'écoulement dont nous avons vu qu'elle est équivalente à la moyenne suivant la pdf. Un moment de

l'écoulement est alors défini à partir de tout polynôme $\psi(\underline{c}_f, \underline{c}_p)$ dépendant uniquement des vitesses \underline{c}_f et \underline{c}_p :

$$\langle \psi \rangle_p(\underline{x}, t) = \frac{\int \psi(\underline{c}_f, \underline{c}_p) f_{fp}(\underline{c}_f, \underline{c}_p, \underline{x}, t) d\underline{c}_f d\underline{c}_p}{\int f_{fp}(\underline{c}_f, \underline{c}_p, \underline{x}, t) d\underline{c}_f d\underline{c}_p} \quad (3.3)$$

Le facteur de normalisation dans l'expression précédente s'interprète comme la densité de particules n_p :

$$n_p(\underline{x}, t) = \int f_{fp}(\underline{c}_f, \underline{c}_p, \underline{x}, t) d\underline{c}_f d\underline{c}_p \quad (3.4)$$

et représente la densité probable de particules dans un voisinage de \underline{x} à l'instant t .

On associe généralement au terme moment les monômes à puissances entières des variables \underline{c}_f et \underline{c}_p . Par exemple les moments d'ordre 1 de l'écoulement sont la vitesse moyenne des particules \underline{U}_p et la vitesse moyenne du fluide vu $\underline{U}_{f@p}$:

$$n_p \underline{U}_p(\underline{x}, t) = \int \underline{c}_p f_{fp}(\underline{c}_f, \underline{c}_p, \underline{x}, t) d\underline{c}_f d\underline{c}_p \quad (3.5)$$

$$n_p \underline{U}_{f@p}(\underline{x}, t) = \int \underline{c}_f f_{fp}(\underline{c}_f, \underline{c}_p, \underline{x}, t) d\underline{c}_f d\underline{c}_p \quad (3.6)$$

Les moments d'ordre 2 sont généralement exprimés en fonction des vitesses fluctuantes \underline{c}_f'' et \underline{c}_p'' qui sont les équivalents dans l'espace des phases des vitesses fluctuantes \underline{u}_p'' et $\underline{u}_{f@p}''$ (formellement $\underline{c}_f'' = \underline{c}_f - \underline{U}_{f@p}$ et $\underline{c}_p'' = \underline{c}_p - \underline{U}_p$). Cette décomposition présente le désavantage de donner des systèmes d'équations sous formes non-conservatives mais permet de caractériser plus directement le mouvement fluctuant de chaque phase. C'est l'approche qui est adoptée ici. On définit ainsi le tenseur des contraintes particule-particule (ou contraintes particulières) $\underline{\underline{R}}_{pp}$, le tenseur des contraintes fluide-particule $\underline{\underline{R}}_{fp}$ ainsi que le tenseur des contraintes du fluide vu $\widetilde{\underline{\underline{R}}}_{ff}$:

$$n_p \underline{\underline{R}}_{pp}(\underline{x}, t) = \int \underline{c}_p'' \otimes \underline{c}_p'' f_{fp}(\underline{c}_f, \underline{c}_p, \underline{x}, t) d\underline{c}_f d\underline{c}_p \quad (3.7)$$

$$n_p \underline{\underline{R}}_{fp}(\underline{x}, t) = \int \underline{c}_f'' \otimes \underline{c}_p'' f_{fp}(\underline{c}_f, \underline{c}_p, \underline{x}, t) d\underline{c}_f d\underline{c}_p \quad (3.8)$$

$$n_p \widetilde{\underline{\underline{R}}}_{ff}(\underline{x}, t) = \int \underline{c}_f'' \otimes \underline{c}_f'' f_{fp}(\underline{c}_f, \underline{c}_p, \underline{x}, t) d\underline{c}_f d\underline{c}_p \quad (3.9)$$

On définit aussi le tenseur symétrique des contraintes fluide-particule par :

$$\mathcal{R}_{fp,ij} = \frac{1}{2} (R_{fp,ij} + R_{fp,ji}) \quad (3.10)$$

De manière générale les moments d'ordre supérieurs peuvent être définis comme les composantes des tenseurs :

$$n_p \mathbf{M}_{mfp} = \int \left(\bigotimes_m \underline{c}_f'' \right) \otimes \left(\bigotimes_n \underline{c}_p'' \right) f_{fp}(\underline{c}_f, \underline{c}_p, \underline{x}, t) d\underline{c}_f d\underline{c}_p \quad (3.11)$$

où \mathbf{M}_{mfp} est un tenseur d'ordre $m + n$.

3.1.3 Équation générique de transport d'une variable eulérienne

Les équations de transport des moments de la pdf sont obtenues en intégrant (3.2) $\times \psi(\underline{c}_f, \underline{c}_p)$ pour les fonctions ψ décrivant l'écoulement. Ces équations peuvent être écrites sous la forme générique :

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_p \langle \psi \rangle_p}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial x_k} [n_p \langle c_{p,k} \psi \rangle_p] - n_p \langle \left(\frac{F_{d,k}}{m_p} + g^k \right) \frac{\partial \psi}{\partial c_{p,k}} \rangle_p \\ &- n_p \frac{\partial}{\partial x_l} [R_{ff,kl}] \langle \frac{\partial \psi}{\partial c_{f,k}} \rangle_p + n_p \frac{\partial U_{f,k}}{\partial x_l} \langle (c_{p,l} - c_{f,l} + U_{f,l}) \frac{\partial \psi}{\partial c_{f,k}} \rangle_p \quad (3.12) \\ &+ n_p G^{kl} \langle (c_{f,l} - U_{f,l}) \frac{\partial \psi}{\partial c_{f,k}} \rangle_p + \frac{1}{2} n_p B^{kl} B^{ml} \langle \frac{\partial}{\partial c_{f,k}} \left[\frac{\partial \psi}{\partial c_{f,m}} \right] \rangle_p \\ &+ n_p \langle \frac{\partial \psi}{\partial t} + c_{p,k} \frac{\partial \psi}{\partial x_k} \rangle_p + n_p \mathcal{C}(\langle \psi \rangle_p) \end{aligned}$$

où $\mathcal{C}(\langle \psi \rangle_p)$ est le terme collisionnel et représente la modification du moment par les collisions :

$$n_p \mathcal{C}(\langle \psi \rangle_p) = \int \psi(\underline{c}_f, \underline{c}_p) \left(\frac{\partial f_{fp}}{\partial t} \right)_{\text{coll}} d\underline{c}_f d\underline{c}_p \quad (3.13)$$

Ce terme s'écrit (après un changement de variables) suivant le "splitting" de l'opérateur de collision (2.94) en fonction des valeurs post-collisionnelles $\psi^* = \psi(\underline{c}_f, \underline{c}_p^*)$:

$$n_p \mathcal{C}(\langle \psi \rangle_p) = -d_p^2 \int_{\underline{w}_r, \underline{k} < 0} (\psi^* - \psi) f_{fp} f_p (t; \underline{x}_A, \underline{c}_{fA}, \underline{c}_{pA}, \underline{x}_A + d_p \underline{k}, \underline{c}_{fB}, \underline{c}_{pA} + \underline{w}_r) d\underline{w}_r d\underline{k} d\underline{c}_{fB} \quad (3.14)$$

3.2 Équations exactes de transport des moments particulaires

3.2.1 Bilan de densité de particules

L'équation d'évolution de la densité de particules est obtenue en prenant $\psi(\underline{c}_f, \underline{c}_p) = 1$:

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (n_p U_{p,k}) = n_p \mathcal{C}(1) \quad (3.15)$$

Dans le cas de collisions élastiques, le nombre de particules étant un invariant de collision (pas de coalescence), le terme de collision est nul : $\mathcal{C}(1) = 0$.

L'équation de continuité s'écrit donc :

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (n_p U_{p,k}) = 0 \quad (3.16)$$

3.2.2 Bilan de quantité de mouvement

On prend cette fois $\psi(\underline{c}_f, \underline{c}_p) = c_{p,i}$:

$$\frac{\partial n_p U_{p,i}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (n_p R_{pp,ik} + n_p U_{p,i} U_{p,k}) = n_p \langle \frac{F_{d,i}}{m_p} \rangle_p + n_p g_i + n_p \mathcal{C}(U_{p,i}) \quad (3.17)$$

En utilisant (3.16) le premier terme de la partie gauche peut être écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} (n_p U_{p,i}) = n_p \frac{\partial U_{p,i}}{\partial t} + U_{p,i} \frac{\partial n_p}{\partial t} = n_p \frac{\partial U_{p,i}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_k} (n_p U_{p,i} U_{p,k}) + n_p U_{p,k} \frac{\partial U_{p,i}}{\partial x_k} \quad (3.18)$$

L'équation précédente se met alors sous la forme :

$$n_p \frac{\bar{d}U_{p,i}}{dt} = - \frac{\partial}{\partial x_k} (n_p R_{pp,ik}) + n_p < \frac{F_{d,i}}{m_p} >_p + n_p g_i + n_p \mathcal{C}(U_{p,i}) \quad (3.19)$$

où $\frac{\bar{d}}{dt}$ représente l'opérateur de dérivée lagrangienne dans le champ de vitesse moyenne des particules, *i.e.* :

$$\frac{\bar{d}\phi}{dt} = \frac{\partial\phi}{\partial t} + U_{p,k} \frac{\partial\phi}{\partial x_k} \quad (3.20)$$

La partie droite est constituée des termes dûs aux forces agissant sur les particules (traînée et gravité) et du terme collisionnel.

Le terme découlant de la gravité ne présente pas de difficulté de calcul contrairement au terme dû à la traînée. En effet la traînée présente une dépendance non-linéaire à la vitesse relative entre la particule et le fluide vu, et ne peut donc s'intégrer de manière directe. Il est nécessaire d'utiliser une approximation qui est détaillée au § 3.2.5.1.

Lorsque la densité de particules n'est pas trop importante (dans les écoulements dilués), le terme de collision est nul pour des collisions élastiques, la quantité de mouvement étant alors conservée pour la paire de particules lors d'une collision.

3.2.3 Equation d'évolution des contraintes particulières

En prenant $\psi(\underline{c}_f, \underline{c}_p) = (c_{p,i} - U_{p,i})(c_{p,j} - U_{p,j})$ on obtient l'équation d'évolution de la contrainte cinétique particulaire $R_{pp,ij}$:

$$\frac{\bar{d}R_{pp,ij}}{dt} = \mathcal{D}_{p,ij} + \mathcal{P}_{p,ij} + \Pi_{p,ij} + \mathcal{C}(R_{pp,ij}) \quad (3.21)$$

Le premier terme du membre de droite représente la dispersion pour le mouvement d'agitation :

$$\mathcal{D}_{p,ij} = - \frac{1}{n_p} \frac{\partial}{\partial x_k} [n_p S_{ppp,ijk}] \quad (3.22)$$

Le deuxième terme représente la production d'agitation par le gradient de vitesse moyenne des particules :

$$\mathcal{P}_{p,ij} = - R_{pp,kj} \frac{\partial U_{p,i}}{\partial x_k} - R_{pp,ki} \frac{\partial U_{p,j}}{\partial x_k} \quad (3.23)$$

Le troisième terme représente l'action du fluide sur le mouvement d'agitation des particules par l'intermédiaire de la traînée :

$$\Pi_{p,ij} = - < \frac{F_{d,i}}{m_p} u''_{p,j} + \frac{F_{d,j}}{m_p} u''_{p,i} >_p \quad (3.24)$$

Le dernier terme $\mathcal{C}(R_{pp,ij})$ représente l'influence des collisions sur le mouvement d'agitation de la phase particulaire. Ce dernier peut être explicitement calculé à l'aide d'hypothèses sur la pdf à deux particules (cf. § 2.5). Lorsque les collisions sont élastiques, la trace du tenseur des termes collisionnels est alors nulle car l'énergie cinétique de la paire de particules est conservée lors d'une collision.

3.2.4 Modèles d'agitation

D'une manière similaire aux équations turbulentes apparaît dans les équations décrivant la phase dispersée des termes d'ordres supérieurs à l'ordre du moment pour lequel est écrit l'équation. La dispersion par le mouvement d'agitation fait en effet apparaître dans les équations pour les moments d'ordre n les dérivées spatiales des moments d'ordre $n + 1$. Une description eulérienne de la phase dispersée sera donc toujours une description tronquée à un certain ordre ; et nécessitant la fermeture des termes d'ordre supérieur par des hypothèses sur le comportement du nuage de particules.

La fermeture des équations (3.19) nécessite la connaissance des corrélations de vitesse particule d'ordre deux $R_{pp,ij}$. Ces corrélations peuvent être approximées par une hypothèse de type Boussinesq ou par des hypothèses d'équilibre locaux donnant lieu à une expression de corrélations $R_{pp,ij}$ en fonction des gradients de vitesse locale (Hinze [1972]).

Une hypothèse de type Boussinesq suppose que les contraintes cinétiques particulières $R_{pp,ij}$ peuvent s'écrire en fonction du gradient de vitesse moyenne et de l'agitation particulaire q_p^2 :

$$R_{pp,ij} = -\nu_p^t \left[\frac{\partial U_{p,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial U_{p,j}}{\partial x_i} \right] + \frac{2}{3} \left[q_p^2 + \nu_p^t \frac{\partial U_{p,k}}{\partial x_k} \right] \delta_{ij} \quad (3.25)$$

où la viscosité particulaire ν_p^t est obtenue à partir des équations sur les contraintes extra-diagonales écrites pour un écoulement cisaillé homogène en équilibre :

$$\nu_p^t = \left[1 + \frac{\tau_{fp}^F}{2} \frac{\sigma_c}{\tau_p^c} \right]^{-1} \left[\frac{1}{3} q_{fp} \tau_{f@p}^t + \frac{\tau_{fp}^F}{2} q_p^2 \right] \quad (3.26)$$

La description du mouvement d'agitation des particules est alors réduite à la variable q_p^2 pour laquelle il est nécessaire d'écrire une équation d'évolution. Celle-ci s'obtient par sommation des équations sur les contraintes diagonales :

$$\frac{\bar{d}q_p^2}{dt} = \mathcal{D}_{q_p^2} + \mathcal{P}_{q_p^2} + \Pi_{q_p^2} \quad (3.27)$$

Ces approximations se révèlent être assez différentes des valeurs observées dans les écoulements gaz-particules dès qu'existe de la production par les gradients de vitesse moyenne qui entraîne une forte anisotropie du mouvement fluctuant de la phase dispersée. Il est alors nécessaire de travailler avec des équations de transport séparées pour chaque composante (Simonin [1991a], He and Simonin [1993], Wang et al. [1998]) et ainsi travailler sur les six équations (3.21) (pour des raisons de symétrie seules six composantes du tenseur R_{pp} sont indépendantes). Dans ces équations apparaissent de nouveau des termes non fermés. Par exemple, la dispersion du mouvement d'agitation par lui-même fait intervenir les corrélations triples du mouvement fluctuant, corrélations qu'il faudra modéliser s'il s'agit de tronquer la description aux moments à l'ordre deux (cet ordre est d'ailleurs l'ordre le plus élevé généralement admis pour une résolution eulérienne, la plupart des codes industriels faisant toujours la part belle aux modèles d'agitation cités plus haut).

3.2.5 Hypothèses de fermeture supplémentaire du modèle eulérien

Les équations ci-dessus comprennent un certain nombre de termes inconnus :

- Les termes dus à la traînée dont la moyenne n'est pas calculable de manière exacte à cause de la non-linéarité de l'expression de la force de traînée. Du fait de l'interaction entre phases fluide et particulaire, ces termes font apparaître des contraintes fluide-particule.

- Les termes collisionnels intervenants dans les équations de transport des corrélations $R_{pp,ij}$ se calculent à partir d'hypothèses sur la forme de la pdf de paires de particules, leurs actions entraînant essentiellement destruction et isotropisation du mouvement d'agitation des particules.
- Les corrélations d'ordre 3 intervenant dans les équations (3.21) ne peuvent être déduites de la résolution des équations les gouvernantes sous peine d'augmenter encore le nombre d'équations à résoudre. Il faut donc se donner un modèle les exprimant en fonction des moments calculés jusqu'à présent, c'est-à-dire les moments d'ordre inférieur à 2.

3.2.5.1 Approximation des termes dûs à la traînée

Pour fermer les termes dûs à la traînée il faut moyenner l'influence de la traînée sur l'ensemble des particules. Pour une particule isolée, la force de traînée est donnée par (1.42) :

$$\frac{F_{d,k}}{m_p} = -\frac{v_{r,k}}{\tau_p(|\underline{v}_r|)} \quad (3.28)$$

L'influence de la traînée sur la variable ψ s'exprime donc selon :

$$n_p \langle \frac{F_{d,k}}{m_p} \psi \rangle_p = -n_p \int \frac{v_{r,k}}{\tau_p(|\underline{v}_r|)} \psi f_{fp}(\underline{c}_f, \underline{c}_p) d\underline{c}_f d\underline{c}_p \quad (3.29)$$

Du fait de la dépendance non-linéaire de la force de traînée à la vitesse relative \underline{v}_r , cette intégrale ne possède pas d'expression analytique pour tous les moments $\langle \psi \rangle_p$. Simonin [1991a] propose alors la fermeture suivante :

$$\langle -\frac{v_{r,k}}{\tau_p} \psi \rangle_p = -\frac{1}{\tau_{fp}^F} \langle v_{r,k} \psi \rangle_p \quad (3.30)$$

où τ_{fp}^F est donné par :

$$\tau_{fp}^F = \tau_p(\bar{v}_r) \quad (3.31a)$$

$$\bar{v}_r^2 = \langle |\underline{u}_p - \underline{u}_{f@p}|^2 \rangle_p \quad (3.31b)$$

$$= |\underline{U}_p - \underline{U}_{f@p}|^2 + 2(q_p^2 + q_f^2 - q_{fp}) \quad (3.31c)$$

Cette simplification est équivalente à remplacer la fermeture du terme d'accélération particulaire (2.18) de l'équation de la pdf par :

$$\frac{\partial}{\partial c_{p,i}} \left[\langle \frac{du_{p,i}}{dt} | \underline{c}_f, \underline{c}_p, \underline{x} \rangle f_{fp} \right] = -\frac{1}{\tau_{fp}^F} \frac{\partial}{\partial c_{p,i}} [(c_{p,i} - c_{f,i}) f_{fp}], \quad (3.32)$$

L'équation (3.32) est exacte pour de faibles nombres de Reynolds particulaires $Re_p \ll 1$ car alors τ_p est indépendant de la vitesse relative. L'effet de la non-linéarité est aussi limité pour des nombres de Reynolds particulaires intermédiaires $Re_p \leq 10$ (Simonin et al. [1995], Wang et al. [1998]). Pour des nombres de Reynolds particulaires plus grands un développement limité en terme de vitesse relative permet d'obtenir des expressions de l'influence de la force de traînée préservant la consistance entre les approches eulérienne et lagrangienne quant au traitement des termes de traînée. Ce type de développement limité sera exposé au chapitre 6.

Force de traînée ressentie par les particules : On approxime l'influence de la traînée sur le mouvement moyen des particules par la formule (Simonin [1996]) :

$$n_p \langle \frac{F_{d,k}}{m_p} \rangle_p = -n_p \frac{\langle v_{r,k} \rangle_p}{\tau_{fp}^F} \quad (3.33)$$

où la vitesse relative moyenne est donnée en fonction des vitesses moyennes des particules et du fluide vu par ces particules :

$$\langle v_{r,k} \rangle_p = \frac{1}{n_p} \int (c_{p,k} - c_{f,k}) f_{fp}(\underline{c}_f, \underline{c}_p, \underline{x}, t) d\underline{c}_f d\underline{c}_p \quad (3.34a)$$

$$= U_{p,k} - U_{f@p,k} \quad (3.34b)$$

La vitesse moyenne du fluide vu $U_{f@p}$ n'est pas accessible directement à partir du calcul de la phase fluide. C'est pourquoi il est préférable de travailler avec la vitesse moyenne du fluide U_f comme référence de vitesse moyenne. Il est alors nécessaire d'introduire une nouvelle variable traduisant la différence entre ces deux vitesses. Cette variable est appelée "vitesse de dérive turbulente fluide-particule", ou plus simplement vitesse de dérive V_d . Elle est définie par :

$$V_{d,k} = U_{f@p,k} - U_{f,k} \quad (3.35a)$$

$$= \frac{1}{n_p} \int (c_{f,k} - U_{f,k}) f_{fp}(\underline{c}_f, \underline{c}_p, \underline{x}, t) d\underline{c}_f d\underline{c}_p \quad (3.35b)$$

$$= \langle \underline{c}'_f \rangle_p \quad (3.35c)$$

Finalement l'expression retenue pour la force de traînée exercée par le fluide sur le nuage de particules sans correction de Reynolds particulaire est :

$$n_p \langle \frac{F_{d,k}}{m_p} \rangle_p = -n_p \frac{U_{p,k} - U_{f,k} - V_{d,k}}{\tau_{fp}^F} \quad (3.36)$$

Terme d'interaction avec la turbulence du fluide : Le terme $\Pi_{p,ij}$ d'interaction du mouvement d'agitation particulaire avec la turbulence du fluide est approximé avec les mêmes hypothèses que pour le mouvement moyen :

$$\Pi_{p,ij} = - \langle \frac{F_{d,i}}{m_p} u''_{p,j} + \frac{F_{d,j}}{m_p} u''_{p,i} \rangle_p \quad (3.37a)$$

$$= -\frac{2}{\tau_{fp}^F} [R_{pp,ij} - \mathcal{R}_{fp,ij}] \quad (3.37b)$$

qui fait aussi intervenir les contraintes fluide-particule $\mathcal{R}_{fp,ij}$, cette fois-ci caractérisant l'interaction des mouvements fluctuants.

3.2.5.2 Fermeture des termes de collisions

La fermeture des termes collisionnels par intégration directe de l'opérateur de Boltzmann (moyennant des hypothèses sur les formes de f_p , f_{pp} ou bien encore $f_{fp}f_p$) a fait l'objet de nombreuses études. Par exemple dans le cadre de la théorie de Grad [1949] avec des sphères dures élastiques les termes sont nuls pour les équations de continuité et de quantité de mouvement (ce qui reste le cas au premier ordre en d_p pour des

collisions inélastiques). Il est possible de montrer que le terme de collision intervenant dans les équations des contraintes cinétiques est dans ce cadre un terme de retour à l'isotropie :

$$\mathcal{C}(R_{pp,ij}) = -\frac{\sigma_c}{\tau_p^c} \left[R_{pp,ij} - \frac{2}{3} q_p^2 \delta_{ij} \right] \quad (3.38a)$$

$$\sigma_c = \frac{4}{5} \quad (3.38b)$$

Ce terme est responsable de la destruction des contraintes extra-diagonales et de la redistribution de l'énergie d'agitation q_p^2 vers les composantes diagonales, tendant à isotropiser le mouvement d'agitation particulaire.

Jenkins and Richman [1985] étendent les calculs de Grad [1949] au cas de collisions inélastiques. Il apparaît alors un terme de destruction du mouvement d'agitation des particules. Au premier ordre en d_p les termes de collision s'écrivent :

$$\mathcal{C}(R_{pp,ij}) = \left[-\frac{\sigma_c}{\tau_p^c} R_{pp,ij} + \left(\frac{\sigma_c}{\tau_p^c} - \frac{1 - e_{pp}^2}{3\tau_p^c} \right) \times \frac{2}{3} q_p^2 \delta_{ij} + \Theta(d_p) \right] \quad (3.39a)$$

$$\sigma_c = \frac{(1 + e_{pp})(3 - e_{pp})}{5} \quad (3.39b)$$

Laviéville [1997] étend le calcul des termes de collision dans le cas d'une hypothèse de collisions élastiques corrélées et obtient alors une expression faisant intervenir les contraintes fluide-particule et les contraintes de Reynolds :

$$\begin{aligned} \mathcal{C}(R_{pp,ij}) = & -\frac{4}{5\tau_p^c} \left[(R_{pp,ij} - \frac{2}{3} q_p^2 \delta_{ij}) + \left(\frac{q_{fp}}{2q_f^2} \right)^2 (R_{ff,ij} - \frac{2}{3} q_f^2 \delta_{ij}) \right. \\ & \left. - \frac{q_{fp}}{2q_f^2} (\mathcal{R}_{fp,ij} - \frac{2}{3} q_{fp} \delta_{ij}) \right] \end{aligned} \quad (3.40)$$

3.2.5.3 Fermeture des corrélations triples

L'idée directrice de la fermeture des corrélations triples est d'exprimer que pour un ordre suffisamment élevé (ici 3), le caractère non-stationnaire du mouvement d'agitation n'influe pas sur l'équilibre des moments d'ordre élevé. Cela se traduit dans notre cas par une dérivée lagrangienne nulle des corrélations triples dans le champ de vitesse moyenne des particules. Or l'équation sur les corrélations triples s'écrit (Simonin [1991b]) :

$$\begin{aligned} n_p \frac{\overline{dS}_{ppp,ijk}}{dt} = & -\frac{\partial}{\partial x_l} (n_p Q_{pppp,ijkl}) - n_p S_{ppp,l\bar{i}\bar{j}} \frac{\partial U_{p,\mathbf{k}}}{\partial x_l} + R_{pp,\bar{i}\bar{j}} \frac{\partial}{\partial x_l} (n_p R_{pp,\mathbf{k}l}) \\ & - \frac{n_p}{\tau_{fp}^F} [R_{pp,\bar{i}\bar{j}} V_{d,\mathbf{k}} + 3S_{ppp,ijk} - S_{fpp,\bar{i}\bar{j}\bar{k}}] \\ & - n_p \left[\frac{3\sigma_c}{2\tau_p^c} S_{ppp,ijk} - \frac{(1 + e_c)(3e_c + 1)}{60\tau_p^c} S_{ppp,l\bar{i}\bar{l}} \delta_{jk} \right] \end{aligned} \quad (3.41)$$

Dans cette équation les familles d'indices en gras sont à moyenner sur toutes les permutations ($a_{ijk} = \frac{1}{3!}(a_{ijk} + a_{jik} + a_{ikj} + a_{jki} + a_{kij} + a_{kji})$).

Pour modéliser les corrélations triples il est nécessaire de faire une série d'hypothèses. La première stipule que les moments d'ordre supérieurs ont des temps caractéristiques d'évolution temporelle très petits comparés aux temps caractéristique des ordres inférieurs. L'équation précédente peut alors être considérée à tout instant comme à l'équilibre et ainsi le terme de gauche est pris nul. Il en va de même pour tout les

termes incluant des gradients de vitesse moyenne (temps caractéristiques plus grands). La vitesse de dérive est prise nulle en première approximation.

On utilise une hypothèse de pdf gaussienne pour modéliser les corrélations quadruples selon une formule de Milan-Tchekov (cf. § 6.6) :

$$Q_{pppp,ijkl} = 3R_{pp,ij}R_{pp,kl} \quad (3.42)$$

Le terme de collision peut s'exprimer plus simplement à l'aide de l'hypothèse aux 13 moments de Grad qui relient les corrélations triples suivant la formule :

$$S_{ppp,lli}\delta_{jk} = 5S_{ppp,ijk} \quad (3.43)$$

L'équation (3.41) se récrit donc sous ces hypothèses :

$$n_p \left[\frac{3}{\tau_{fp}^F} + \frac{\xi_c}{\tau_p^c} \right] S_{ppp,ijk} = -n_p R_{pp,lk} \frac{\partial}{\partial x_l} [R_{pp,ij}] + \frac{n_p}{\tau_{fp}^F} S_{fpp,ijk} \quad (3.44)$$

où $\xi_c = \frac{2}{3}\sigma_c$.

La modélisation des corrélations triples particulaires demande donc aussi la modélisation des corrélations triples fluide-particule. Il serait souhaitable d'appliquer la même méthodologie à ces corrélations fluide-particule. On obtiendrait ainsi des corrélations $S_{fpp,ijk}$ qu'il faudrait à leur tour expliciter. Cette étape ferait apparaître les corrélations triple fluide ce qui permettrait de fermer le système. Mais il est facile de s'apercevoir de la lourdeur de cette méthode (on rappelle que les astérisques sont une écriture condensée d'une moyenne sur des permutations), raison pour laquelle on raisonne par analogie avec le cas monophasique dès les corrélations $S_{fpp,ijk}$.

Simonin [1991b] écrit les corrélations triples jointes sous une forme qui redonne, dans la limite où nos particules deviennent des particules fluides, l'expression de Hanjalic and Launder [1972] pour les corrélations triples turbulentes :

$$S_{fpp,ijk} = -\frac{2}{3} \frac{C_s}{C_\mu} \tau_{f@p}^t \times \frac{1}{2} (R_{fp,lk} + R_{fp,kl}) \frac{\partial}{\partial x_l} R_{pp,ij} \quad (3.45)$$

et en prenant la forme contractée de Daly and Harlow [1970] :

$$\frac{\partial}{\partial x_k} S_{fpp,ijk} = -\frac{\partial}{\partial x_k} K_{fp,kl}^t \frac{\partial R_{pp,ij}}{\partial x_l} \quad (3.46a)$$

$$K_{fp,mn}^t = \frac{2}{3} \frac{C'_s}{C_\mu} \tau_{f@p}^t \times \mathcal{R}_{fp,mn} \quad (3.46b)$$

où $C_s = 0,11$ et $C'_s = 0,22$.

Dans le cas d'une fermeture type Hanjalic and Launder [1972] des corrélations fluide-particule, on peut finalement écrire les corrélations triples sous la forme :

$$S_{ppp,ijk} = -K_{p,kl}^t \frac{\partial}{\partial x_l} R_{pp,ij} \quad (3.47)$$

avec le tenseur de diffusivité donné par :

$$K_{p,mn}^t = \left[1 + \frac{\tau_{fp}^F \xi_p^c}{\xi_{fp}^F \tau_p^c} \right]^{-1} \times \left[\frac{\tau_{fp}^F}{\xi_{fp}^F} R_{pp,mn} + \frac{\xi_p^c}{\tau_p^c} \mathcal{R}_{fp,mn} \right] \quad (3.48)$$

avec $\xi_{fp}^F = 3$ et $\xi_p^c = (1 + e_{pp})(49 - 33e_{pp})/60$

La forme contractée similaire aux fermetures type Daly and Harlow [1970] s'écrit quant à elle :

$$\frac{\partial}{\partial x_k} [S_{ppp,ijk}] = -\frac{\partial}{\partial x_k} \left[K_{p,kl}^t \frac{\partial}{\partial x_l} R_{pp,ij} \right] \quad (3.49)$$

avec $\xi_{fp}^F = 9/5$ et $\xi_p^c = 2/5\sigma_c$

3.2.5.4 Fermeture des moments covariants fluide-particule ?

Des tentatives de fermetures théoriques de ces termes ont été initiées par Derevich and Zaichik [1988] et Reeks [1993] pour modéliser les moments fluide-particule à partir des moments particulaires et fluides. Ces tentatives, nécessaires dans le formalisme d'approches pdf type "Kinetic Model" (cf. introduction du chapitre § 2), s'appuient sur les équations du mouvement d'une particule pour calculer ces termes par intégrations. Il est alors nécessaire de supposer une forme particulière (ici gaussienne) de la force de sollicitation (ici la partie fluctuante de la traînée) pour pouvoir établir des relations analytiques reliant les moments fluide-particule à des moments connus. Ces relations, qui peuvent se révéler très précises en écoulements homogènes isotropes ou cisaillés, n'ont cependant pas d'équivalents pour des écoulements inhomogènes. Il semble alors plus judicieux d'établir des équations de transport pour ces grandeurs afin de représenter correctement le système, ce qui implique de travailler avec une description de l'écoulement en terme de pdf jointe fluide-particule.

3.2.6 Equation de transport de la vitesse de dérive

La vitesse de glissement ou de dérive est définie par $\underline{V}_d = \langle \underline{c}_f - \underline{U}_f \rangle_p$. En prenant $\psi(\underline{c}_f, \underline{c}_p) = c_{f,i} - U_{f,i}$ on obtient donc l'équation de transport de $V_{d,i}$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (n_p V_{d,i}) + \frac{\partial}{\partial x_k} [n_p (U_{p,k} V_{d,i} + R_{fp,ik})] &= -n_p U_{p,k} \frac{\partial U_{f,i}}{\partial x_k} \\ &+ n_p \left(-\frac{1}{\rho_f} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \nu_f \nabla^2 U_{f,i} \right) \\ &+ n_p \frac{\partial U_{f,i}}{\partial x_k} (U_{p,k} - U_{f,k} - V_{d,k}) \\ &+ n_p G_{fp,ik} V_{d,k} \\ &+ \mathcal{C} (m_p V_{d,i}) \end{aligned} \quad (3.50)$$

Pour simplifier cette équation il est intéressant de remarquer que :

– Navier-Stokes donne pour la composante $U_{f,i}$:

$$-\frac{1}{\rho_f} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \nu_f \nabla^2 U_{f,i} = U_{f,k} \frac{\partial U_{f,i}}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial x_k} (R_{ff,ik})$$

– Par hypothèse la turbulence du fluide "vu" le long des trajectoires est égale à la turbulence du fluide :

$$\langle (u_{f@p,i} - U_{f@p,i})(u_{f@p,k} - U_{f@p,k}) \rangle_p = R_{ff,ik}$$

– Il est peu probable que les collisions influent sur la vitesse de dérive ce qui implique :

$$\mathcal{C} (m_p (c_{f,i} - U_{f,i})) = 0$$

En utilisant l'équation de continuité on peut alors écrire :

$$\begin{aligned} n_p \frac{\overline{d}V_{d,i}}{\overline{dt}} &= -n_p \frac{\partial}{\partial x_k} [R_{fp,ik} - R_{ff,ik}] - R_{fp,ik} \frac{\partial n_p}{\partial x_k} \\ &- n_p \frac{\partial U_{f,i}}{\partial x_k} V_{d,k} + n_p G_{fp,ik} V_{d,k} \end{aligned} \quad (3.51)$$

Il est alors souvent effectué l'hypothèse que la vitesse de dérive est une variable rapide du système, *i.e.* le vitesse de dérive est considérée à l'équilibre. En rappelant l'expression de la matrice $\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{G}}_{fp} - \nabla \cdot \underline{U}_f$, il est alors possible d'exprimer la vitesse de dérive par la relation (tensorielle) :

$$A_{ik} V_{d,k} = \frac{\partial}{\partial x_k} [R_{fp,ik} - R_{ff,ik}] - \frac{R_{fp,ik}}{n_p} \frac{\partial n_p}{\partial x_k} \quad (3.52)$$

3.2.7 Equation de transport des corrélations fluide-particules

En prenant $\psi(\underline{c}_f, \underline{c}_p) = [c_{f,i} - U_{f@p,i}][c_{p,j} - U_{p,j}]$ on obtient, l'équation d'évolution de la corrélation fluide-particule $R_{fp,ij}$:

$$\frac{\bar{d}R_{fp,ij}}{\bar{dt}} = \mathcal{D}_{fp,ij} + \mathcal{P}_{fp,ij} + \Pi_{fp,ij} + \Upsilon_{fp,ij} + \mathcal{C}(R_{fp,ij}) \quad (3.53)$$

Le premier terme $\mathcal{D}_{fp,ij}$ représente la dispersion par le mouvement d'agitation particulaire :

$$\mathcal{D}_{fp,ij} = -\frac{1}{n_p} \frac{\partial}{\partial x_k} [n_p S_{fpp,ijk}] \quad (3.54)$$

$\mathcal{P}_{fp,ij}$ représente la production de corrélations fluide-particule par les gradients de vitesses moyennes des particules et du fluide :

$$\mathcal{P}_{fp,ij} = -R_{fp,kj} \frac{\partial U_{f,i}}{\partial x_k} - R_{pp,kj} \frac{\partial V_{d,i}}{\partial x_k} - R_{fp,ik} \frac{\partial U_{p,j}}{\partial x_k} \quad (3.55)$$

Le terme $\Pi_{fp,ij}$ représente le taux de transfert du mouvement turbulent vers les corrélations fluide-particule :

$$\Pi_{fp,ij} = - \left\langle \frac{F_{d,i}}{m_p} u''_{p,j} + \frac{F_{d,j}}{m_p} u''_{f,i} \right\rangle_p \quad (3.56)$$

Le terme $\Upsilon_{fp,ij}$ représente la dissipation des contraintes fluide-particules et s'écrit en fonction du tenseur $\underline{\underline{G}}_{fp}$ du schéma de Langevin choisi pour mimer la turbulence :

$$\Upsilon_{fp,ij} = G_{fp,ik} R_{fp,kj} \quad (3.57)$$

Le dernier terme $\mathcal{C}(R_{fp,ij})$ représente l'influence des collisions sur les contraintes fluide-particule.

3.2.7.1 Modèles basés sur la covariance fluide-particule

De manière identique au mouvement d'agitation de la phase particulaire, la modélisation des corrélations fluide-particule peut s'effectuer à partir de la covariance fluide-particule $q_{fp} = R_{fp,ii}$. L'équation de transport de la covariance fluide-particule s'écrit à partir de (3.53) :

$$\frac{\bar{d}q_{fp}}{\bar{dt}} = \mathcal{D}_{q_{fp}} + \mathcal{P}_{q_{fp}} + \Pi_{q_{fp}} + \Upsilon_{q_{fp}} + \mathcal{C}(q_{fp}) \quad (3.58)$$

Le terme de production nécessite la connaissance des corrélations $R_{fp,ij}$. Celles-ci sont évaluées à l'aide du modèle aux contraintes algébriques (ASM) développé par Février and Simonin [1998] qui est dérivé à partir d'une hypothèse d'équilibre sur le tenseur d'anisotropie des corrélations fluide-particule :

$$\begin{aligned} R_{fp,ij} &= \frac{\delta_{ij}}{3} q_{fp} + \frac{q_{fp}}{2q_f^2} \left[R_{ff,ij} - \frac{2}{3} q_p^2 \delta_{ij} \right] \\ &\quad + \frac{\tau_{fp}^F}{2q_f^2} [q_{fp} \mathcal{P}_{fp,ij} - \mathcal{P}_{fp,kk} R_{fp,ij}] \end{aligned} \quad (3.59)$$

Ce modèle, basé sur une hypothèse d'équilibre, prédit de bonnes valeurs pour les corrélations fluide-particule dans les écoulements cisaillés (Singh et al. [2004]).

3.2.7.2 Relations de fermeture pour les corrélations fluide-particule

Les relations de fermeture pour les corrélations fluide-particule sont identiques au fermeture pour le mouvement d'agitation particulaire. Ainsi les corrélations triples sont modélisées afin d'obtenir une expression identique à Launder and Sharma [1974] dans le cas de particules fluide :

$$S_{fpp,ijk} = -\frac{2}{3} \frac{C_s}{C_\mu} \tau_{f@p}^t \times \frac{1}{2} (R_{fp,lk} + R_{fp,kl}) \frac{\partial}{\partial x_l} R_{pp,ij} \quad (3.60)$$

et pour la forme contractée de Daly and Harlow [1970] :

$$\frac{\partial}{\partial x_k} S_{fpp,ijk} = -\frac{\partial}{\partial x_k} K_{fp,kl}^t \frac{\partial R_{pp,ij}}{\partial x_l} \quad (3.61a)$$

$$K_{fp,mn}^t = \frac{2}{3} \frac{C'_s}{C_\mu} \tau_{f@p}^t \times \mathcal{R}_{fp,mn} \quad (3.61b)$$

Le terme de transfert par action de la traînée s'écrit sous les hypothèses de (3.30) :

$$\Pi_{fp,ij} = -\frac{1}{\tau_{fp}^F} \left[R_{fp,ij} - \tilde{R}_{ff,ij} \right] \quad (3.62)$$

Le terme de collision dépend de la fermeture de l'opérateur de collision. Ainsi, si dans une fermeture de type vitesses corrélées (cf. § 2.5.2.3) la physique est respectée et les collisions n'ont pas d'effet sur les contraintes fluide-particule, tel n'est pas le cas dans le cadre de l'hypothèse de chaos particulaire (cf § 2.8.3.4). Ainsi le terme de collision s'écrit pour un chaos particulaire :

$$\mathcal{C}(R_{fp,ij}) = -\frac{2}{3\tau_p^c} R_{fp,ij} \delta_{ij} \quad (3.63)$$

3.3 Cas de l'écoulement canal plan infini

3.3.1 Notations

La direction privilégiée du cisaillement dans l'espace physique est appelée \underline{y} . La direction longitudinale de l'écoulement dans l'espace des vitesses (*i.e.* la direction de la vitesse moyenne) est notée \underline{u} , la direction normale (*i.e.* la direction du gradient de la vitesse moyenne longitudinale) \underline{v} , et la direction transversale \underline{w} . Ainsi dans l'espace physique les vecteurs \underline{v} et \underline{y} sont confondus. Par notations, u_p , v_p et w_p désignent respectivement les composantes longitudinale, normale et transversale de la vitesse \underline{u}_p . Nous utiliserons de même pour notation des moments, par exemple, $R_{pp,vv}$ ou $\langle v_p'' v_p'' \rangle_p$ (et non pas $R_{pp,yy}$) pour représenter la contrainte cinétique particulaire dans la direction normale de l'écoulement cisaillé. R_{uu} , R_{vv} , R_{ww} , R_{uv} et R_{vu} seront respectivement appelées contraintes longitudinale, normale, transversale et de cisaillement (pour les deux dernières).

La terminologie d'écoulement homogène simplement cisaillé désigne un écoulement homogène pour la partie fluctuante (la vitesse moyenne n'est en effet pas homogène, mais les propriétés du mouvement fluctuant le sont), et simplement cisaillé pour la partie moyenne, c'est-à-dire qu'une composante de la vitesse moyenne présente un gradient homogène. La symétrie de l'écoulement réduit ainsi le nombre de moments non-nuls. Ainsi seule la composante longitudinale des vitesses moyennes (U_p et U_f) est non-nulle. De même les tenseurs de corrélations doubles ne présentent que 5 valeurs pertinentes (R_{uu} , R_{uv} , R_{vu} , R_{vv} , R_{ww}), et se réduit à 4 valeurs en cas de tenseur symétrique ($R_{uv} = R_{vu}$).

3.3.2 Equations résolues par l'approche eulérienne en canal plan

Du fait de la symétrie de l'écoulement, le nombre d'équations à résoudre dans l'approche eulérienne est réduit. Une autre simplification est effectuée en résolvant les équations sans considérer la convection. Dans le cas du canal plan la convection par le mouvement moyen est en effet assurée par la composante V_p qui est nulle à l'équilibre. Afin de ne pas déstabiliser le code, il a alors été pris le parti d'"éteindre" la convection pour tous les moments excepté la densité de particule (pour laquelle la convection est le seul terme de l'équation). Les équations résolues dans le cas du canal plan sont donc les suivantes :

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} = \frac{\partial n_p V_p}{\partial y} \quad (3.64a)$$

$$\frac{\partial V_p}{\partial t} = \frac{1}{n_p} \frac{\partial n_p R_{pp,vv}}{\partial y} - \frac{1}{\tau_{fp}^F} [V_p - V_d] \quad (3.64b)$$

$$\frac{\partial U_p}{\partial t} = \frac{1}{n_p} \frac{\partial n_p R_{pp,uv}}{\partial y} - \frac{1}{\tau_{fp}^F} [U_p - U_f - U_d] \quad (3.64c)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_{pp,ij}}{\partial t} = & \frac{1}{n_p} \frac{\partial}{\partial y} \left[n_p K_{p,vv}^t \frac{\partial}{\partial y} [R_{pp,ij}] \right] - \frac{1}{\tau_{fp}^F} [2R_{pp,ij} - R_{fp,ij} - R_{fp,ji}] \\ & - R_{pp,iv} \frac{\partial U_{p,j}}{\partial y} - R_{pp,jv} \frac{\partial U_{p,i}}{\partial y} + \frac{\sigma_c}{\tau_p^c} (R_{pp,ij} - \frac{2}{3} q_p^2 \delta_{ij}) - \frac{2 - 2e_{pw}^2}{9\tau_p^c} q_p^2 \delta_{ij} \end{aligned} \quad (3.64d)$$

$$A_{ik} V_{d,k} = \frac{\partial}{\partial y} [R_{fp,iv} - R_{ff,iv}] - \frac{R_{fp,iv}}{n_p} \frac{\partial n_p}{\partial y} \quad (3.64e)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_{fp,ij}}{\partial t} = & \frac{1}{n_p} \frac{\partial}{\partial y} \left[n_p K_{fp,vv}^t \frac{\partial}{\partial y} [R_{fp,ij}] \right] - \frac{1}{\tau_{fp}^F} [R_{fp,ij} - R_{ff,ij}] \\ & - R_{fp,iv} \frac{\partial U_{p,j}}{\partial y} - R_{fp,jv} \left[\frac{\partial U_{f,i}}{\partial y} + \frac{\partial V_{d,i}}{\partial y} \right] + G_{fp,ik} R_{fp,kj} - \frac{2}{3\tau_p^c} R_{fp,ij} \delta_{ij} \end{aligned} \quad (3.64f)$$

3.3.3 Conditions aux limites

3.3.3.1 Présence d'une paroi

Dans l'optique d'une méthode hybride l'approche eulérienne ne serait pas utilisée jusqu'en paroi puisqu'alors l'approche lagrangienne prendrait le relais. Il est néanmoins intéressant d'effectuer une initialisation du calcul de couplage par un calcul eulérien afin de réduire les temps de calcul. La prise en compte des conditions aux limites de paroi s'avère donc nécessaire pour ce calcul préliminaire. L'obtention de conditions de paroi compatible avec les hypothèses de rebonds inélastiques (cf. § 1.5.2) s'effectue par une étude fine des relations entre les pdfs des particules incidentes et réfléchies. Sakiz [1999] en déduit des conditions dans le cas où toutes les particules subissent des rebonds avec glissement sur une paroi lisse (ce qui est toujours le cas dans nos simulations). Les conditions à la limite en paroi sont exprimées en terme de flux (de masse, de quantité de mouvement et de contraintes cinétiques) excepté pour la vitesse moyenne normale V_p et la contrainte de cisaillement $R_{pp,uv}$ dont les valeurs sont contraintes par la physique. Ces conditions

s'écrivent :

$$n_p V_p = 0 \quad (3.65a)$$

$$R_{pp,uv} = -\mu_{pw} R_{pp,vv} \quad (3.65b)$$

$$V_p = 0 \quad (3.65c)$$

$$R_{pp,wv} = 0 \quad (3.65d)$$

$$S_{ppp,uuv} = -2\mu_{pw} S_{ppp,uvv} - \mu_{pw}^2 S_{ppp,vvv} \quad (3.65e)$$

$$S_{ppp,vvv} = -\frac{4}{\sqrt{2\pi}} \frac{1-e_{pw}}{\sqrt{e_{pw}}} [R_{pp,vv}]^{3/2} \quad (3.65f)$$

$$S_{ppp,wwv} = 0 \quad (3.65g)$$

L'extension de ces conditions aux limites eulériennes dans le cadre d'interactions particule-paroi faisant intervenir la rugosité est actuellement étudié dans le groupe EEC et a permis d'obtenir des résultats satisfaisants (Konan et al. [2006], Konan [2007]). La prédiction d'écoulement en présence de paroi rugueuse par une approche eulérienne reste tout de même moins précise qu'avec l'utilisation d'approche lagrangienne.

3.3.3.2 Conditions de symétrie

Dans le cas du canal plan du chapitre 6 il est possible de réduire le domaine de calcul en utilisant les symétries de l'écoulement. Il existe ainsi au centre du canal un plan de symétrie qui permet d'imposer des conditions aux limites sur la valeur ou la dérivée des moments :

1. Les moments n_p , U_p , $R_{pp,uu}$, $R_{pp,vv}$ et $R_{pp,ww}$ sont symétriques par rapport au plan médian ce qui permet d'imposer que leur dérivée soit nulle au centre du canal,
2. Les moments V_p et $R_{pp,vv}$ sont anti-symétriques par rapport au plan médian et donc leur valeur au centre du canal est nulle.

3.4 Considérations numériques

3.4.1 Discrétisation temporelle

L'avancement dans le temps du système constitué des équations eulériennes d'évolution des moments représentatifs du système $(n_p, \underline{U}, \underline{R})$ est effectué par une résolution successive des équations. La méthodologie de résolution du système d'équations eulériennes est basée sur l'algorithme du code MELODIF développé par Electricité De France pour des problèmes de dimensionnement des extracteurs de chaleur dans les centrales nucléaires. Les contraintes de Reynolds du fluide y sont données par une simulation fluide effectuée en parallèle de la simulation de la phase particulaire.

3.4.1.1 Résolution des équations de transport des contraintes fluide-particule

Les premières équations résolues sont celles des contraintes fluide-particule. Cette résolution est effectuée de manière implicite excepté pour les termes de production. La discrétisation en temps de ces équations se

fait selon le schéma :

$$\begin{aligned} \frac{R_{fp,ij}^{(n+1)} - R_{fp,ij}^{(n)}}{\delta t} &= \frac{1}{n_p^{(n)}} \frac{\partial}{\partial y} \left[n_p^{(n)} K_{fp,vl}^t \frac{\partial R_{fp,ij}}{\partial y} \right] - \frac{1}{\tau_{fp}^F} \left[R_{fp,ij}^{(n+1)} - R_{fp,ij}^{(n+1)} \right] \\ &\quad - \left[R_{fp,iv}^{(n)} \frac{\partial U_{p,j}^{(n)}}{\partial y} + R_{fp,vj}^{(n)} \frac{\partial U_{f,i}^{(n)}}{\partial y} \right] + G_{fp,ik} R_{fp,kj}^{(n+1)} \end{aligned} \quad (3.66)$$

3.4.1.2 Calcul d'un estimateur des contraintes particulières

Le problème des termes de production se posent aussi pour ces équations, et on choisit donc de calculer un estimateur en explicitant ces termes. Cet estimateur sera ensuite corrigé en fonction des valeurs calculées en fin de pas de temps pour les vitesses. L'estimateur $\hat{R}_{pp,ij}$ est calculé par :

$$\begin{aligned} \frac{\hat{R}_{pp,ij} - R_{pp,ij}^{(n)}}{\delta t} &= \frac{1}{n_p^{(n)}} \frac{\partial}{\partial y} \left[n_p^{(n)} K_{p,vl}^t \frac{\partial \hat{R}_{pp,ij}}{\partial y} \right] - \frac{1}{\tau_{fp}^F} \left[2\hat{R}_{pp,ij} - R_{fp,ij}^{(n+1)} - R_{fp,ji}^{(n+1)} \right] \\ &\quad - R_{pp,iv}^{(n)} \frac{\partial U_{p,j}^{(n)}}{\partial y} - R_{pp,vj}^{(n)} \frac{\partial U_{p,i}^{(n)}}{\partial y} - \frac{\sigma_c}{\tau_p^c} \hat{R}_{pp,ij} + \left(\frac{\sigma_c}{\tau_p^c} - \frac{1 - e_{pp}^2}{3\tau_p^c} \right) \frac{2}{3} q_p^2 \end{aligned} \quad (3.67)$$

3.4.1.3 Résolution des équations de transport des vitesses moyennes

Les trois composantes de la vitesse moyenne ne peuvent être traitées de manière identique du fait que la vitesse U_p^v intervient dans l'équation de continuité (3.16). La discréétisation en temps suivante concerne donc les variables U_p et W_p . Le terme de dispersion turbulente est traitée semi-implicitement, en ce sens que les corrélations $R_{pp,ij}$ sont décomposées en deux termes : l'estimateur et la partie implicite du terme de production qui n'avait pas été prise en compte lors du calcul de celui-ci. Cela donne :

$$\begin{aligned} \frac{U_{p,i}^{(n+1)} - U_{p,i}^{(n)}}{\delta t} &= - \frac{1}{n_p^{(n)}} \frac{\partial}{\partial y} \left[n_p^{(n)} \hat{R}_{pp,iy} - n_p^{(n)} \nu_p^{t,(n)} \right] \frac{\partial}{\partial y} \left[U_{p,i}^{(n+1)} - U_{p,i}^{(n)} \right] \\ &\quad - \frac{1}{\tau_{fp}^F} \left[U_{p,i}^{(n+1)} - U_{f,i}^{(n+1)} - V_{d,i}^{(n)} \right] \end{aligned} \quad (3.68)$$

avec ν_p^t qui est déduit de la différence entre estimateur et valeur réelle en fin de pas de temps pour \underline{R}_{pp} (voir le paragraphe "correction des estimateurs"),

$$\nu_p^t = \frac{R_{pp,vv}}{\frac{1}{\delta t} + \frac{2}{\tau_{fp}^F} \left(+ \frac{\sigma_c}{\tau_p^c} \right)}$$

3.4.1.4 Résolution couplée de la densité et de la vitesse normale

Comme dit au paragraphe précédent, les équations gouvernant α_p et V_p font apparaître un couplage entre ces deux grandeurs. Ceci devient évident lorsque les deux équations sont écrites sous la forme :

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial y} [n_p V_p] \quad (3.69a)$$

$$\frac{\partial V_p}{\partial t} = - \frac{1}{n_p} \frac{\partial}{\partial y} [n_p R_{pp,vv}] - \frac{1}{\tau_{fp}^F} \left(V_p + \tau_{f@p}^t (R_{fp,vv} \frac{1}{n_p} \frac{\partial n_p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} [R_{fp,vv} - R_{ff,vv}]) \right) \quad (3.69b)$$

Ces équations sont résolues en faisant une estimation de V_p qui est réinjectée dans l'équation de continuité avec des termes implicites qui rendent compte de la dépendance suivant n_p de l'équation sur V_p . Si on implicitise totalement l'équation de continuité on obtient :

$$\frac{n_p^{(n+1)} - n_p^{(n)}}{\delta t} = -\frac{\partial}{\partial y} \left[n_p^{(n+1)} V_p^{(n+1)} \right]$$

On décompose alors le terme de droite selon :

$$n_p^{(n+1)} V_p^{(n+1)} = (n_p^{(n+1)} - n_p^{(n)} + n_p^{(n)}) (V_p^{(n+1)} - V_p^{(n)} + V_p^{(n)}) \quad (3.70a)$$

$$= n_p^{(n+1)} V_p^{(n)} + n_p^{(n)} (V_p^{(n+1)} - V_p^{(n)}) + (n_p^{(n+1)} - n_p^{(n)}) (V_p^{(n+1)} - V_p^{(n)}) \quad (3.70b)$$

Du fait des deux incrémentations le dernier terme est négligeable à l'ordre 1 en temps. On a donc décomposé le terme de flux en une convection s'effectuant à la vitesse $U_p^{(n)}$ (premier terme) plus un terme de dérive rendant compte de l'instationnarité du système couplé (deuxième terme). Ce dernier terme est évalué de manière semi-implicite en n_p en utilisant (3.69) :

$$\begin{aligned} \left[\frac{1}{\delta t} + \frac{1}{\tau_{fp}^F} \right] (V_p^{(n+1)} - V_p^{(n)}) &= -\frac{1}{n_p^{(n)}} \frac{\partial}{\partial y} \left[n_p^{(n+1)} \hat{R}_{pp,vv} \right] \\ &\quad - \frac{1}{\tau_{fp}^F} \left(V_p^{(n)} + \tau_{f@p}^t R_{fp,vv}^{(n+1)} \frac{1}{n_p^{(n)}} \frac{\partial n_p^{(n+1)}}{\partial y} + \tau_{f@p}^t \frac{\partial}{\partial y} \left[R_{fp,vv}^{(n+1)} - R_{fp,vv}^{(n)} \right] \right) \end{aligned} \quad (3.71)$$

On introduit alors dt^* comme pas de temps fictif (qui dépend de plus de l'endroit du calcul via τ_{fp}^F)

$$dt^* = \left[\frac{1}{\delta t} + \frac{1}{\tau_{fp}^F} \right]^{-1}$$

L'équation devient donc pour n_p :

$$\begin{aligned} \frac{n_p^{(n+1)} - n_p^{(n)}}{\delta t} &= -\frac{\partial}{\partial y} \left[n_p^{(n+1)} V_p^{(n)} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[dt^* \frac{n_p^{(n)}}{\tau_{fp}^F} \left(V_p^{(n)} + \tau_{f@p}^t \frac{\partial}{\partial y} \left[R_{fp,vv}^{(n+1)} - R_{fp,vv}^{(n)} \right] \right) \right] \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial y} \left[dt^* \frac{\partial}{\partial y} \left[n_p^{(n+1)} \hat{R}_{pp,vv} \right] - dt^* \frac{\tau_{f@p}^t}{\tau_{fp}^F} R_{fp,vv}^{(n+1)} \frac{\partial n_p^{(n+1)}}{\partial y} \right] \end{aligned} \quad (3.72)$$

On calcule ensuite la vitesse en fin de pas de temps avec (3.71).

3.4.1.5 Correction des estimateurs des contraintes cinétiques

Une idée de la correction à apporter aux estimateurs est donnée en soustrayant l'équation (3.67) à la même équation prise en implicite. On obtient alors :

$$\begin{aligned} \frac{R_{pp,ij}^{(n+1)} - \hat{R}_{pp,ij}}{\delta t} &= -\frac{2}{\tau_{fp}^F} \left(R_{pp,ij}^{(n+1)} - \hat{R}_{pp,ij} \right) \\ &\quad - R_{pp,jv}^{(n)} \frac{\partial U_{p,i}^{(n+1)} - U_{p,i}^{(n)}}{\partial y} - R_{pp,iv}^{(n)} \frac{\partial U_{p,j}^{(n+1)} - U_{p,j}^{(n)}}{\partial y} \\ &\quad - \frac{\sigma_c}{\tau_p^c} \left(R_{pp,ij}^{(n+1)} - \hat{R}_{pp,ij} \right) \end{aligned} \quad (3.73)$$

3.4.2 Discrétisation spatiale

La discrétisation spatiale des équations est effectuée à l'aide de schémas de type volumes-finis centrés d'ordre 2 pour lequel une décomposition LU permet de résoudre le système par double pivot de Gauss. Ces schémas, bien que d'ordre peu élevé, sont néanmoins très robustes et donnent des résultats très satisfaisants. L'utilisation conjointe de schémas d'ordre 2 sur deux maillages décalés (cf. chapitres 5 et 6) permettant une approximation précise des termes de flux s'avère être la méthode la plus robuste de résolution du système d'équations eulériennes (résolution assez raide par ailleurs).

3.5 Limites de validité d'un modèle eulérien

La validité d'un modèle eulérien dépend de la précision des fermetures supplémentaires effectuées pour fermer le système d'équations eulériennes découlant de l'équation de la pdf. Les inconsistances peuvent donc provenir de plusieurs termes :

- En ce qui concerne la prédiction des moments de la phase particulaire les fermetures concernent :
 1. l'approximation des termes de traînée. L'approximation linéaire présentée ici n'est valable que pour des nombres de Reynolds particulaires faibles. Des fermetures précises de ces termes peuvent aussi être fournies dans le cas d'un fort glissement entre les deux phases (cf. chapitre 6), mais de légères inconsistances peuvent apparaître dans un écoulement où la différence des vitesses moyennes est importante dans une grande partie de l'écoulement mais faible (voire nulle) sur une zone localisée, notamment dans la prédiction du temps caractéristique de traînée τ_{fp}^F associé à la vitesse moyenne (cf. chapitre 6). Cette inconsistance ne fait pas partie des défauts majeurs des fermetures eulériennes.
 2. la fermeture des termes de collision. Les formes obtenues avec les fermetures de type chaos fluido-particulaire ou aux vitesses corrélées ont prouvé leur efficacité. Le point difficile réside alors dans la prédiction à partir des moments du système du temps caractéristique de collision τ_p^c . Une petite étude au § 2.5.3 fait un pas dans le sens d'une meilleure prédiction, mais cette étude reste à étendre aux écoulements où les corrélations fluide-particules jouent un rôle important. La fermeture des termes de collision reste néanmoins très précise dans la majorité des écoulements gaz-solides.
 3. la fermeture des corrélations triples. Cette fermeture est la principale cause d'inconsistance des modèles eulériens. De nombreuses hypothèses sont émises afin d'obtenir une forme exploitable des corrélations triples. Les prédictions de ces modèles peuvent d'ailleurs être considérées comme bonnes (cf. chapitre 6) au vu de la complexité du problème posé. Il semblerait (Sakiz [1999]) que la principale source d'inconsistance est la modélisation des corrélations quadruples en utilisant une formule de Milan-Tchekov valable pour des pdfs gaussiennes. L'inconsistance des modèles eulériens se trouve donc être la conséquence d'une mauvaise modélisation des corrélations quadruples ! Malheureusement actuellement aucun modèle simple de pdf ne permet une meilleure approximation que la formule de Milan-Tchekov. Cette limitation apparaît donc aujourd'hui comme une limitation intrinsèque des modèles eulériens.
 4. enfin, les inconsistances au niveau de la prédiction des moments particulaires peuvent être la conséquence, par l'intermédiaire des termes de traînée, d'une mauvaise prédiction des corrélations entre le mouvement turbulent et le mouvement d'agitation particulaire.
- La prédiction des corrélations entre les mouvements fluctuants des deux phases est donc aussi d'une grande importance. Les sources possibles d'inconsistances sont encore nombreuses :

1. la modélisation du terme de dispersion turbulente est effectuée afin d'obtenir une expression identique à la fermeture de Launder and Sharma [1974] dans le cas limite des particules fluides,
2. Les termes de traînée sont modélisés à l'aide des mêmes hypothèses que précédemment,
3. les termes provenant de modélisation par une équation de Langevin de la vitesse du fluide vu sont *a priori* les termes présentant le plus de risques d'inconsistance. le tenseur $\underline{\underline{A}}$ notamment, qui a été introduit pour prendre en compte une partie des corrélations temporelles et spatiales induites par la turbulence, apparaît dans les équations de transport de la vitesse de dérive et des corrélations fluide-particules. Une modélisation unique du tenseur $\underline{\underline{A}}$ sera-t-elle suffisante pour obtenir une bonne prédiction simultanée de la vitesse de dérive et des corrélations fluide-particule ?

Les limites de validité pour un modèle eulérien sont donc les conséquences de multiples limitations d'une multitude de fermetures. Il serait dès lors déraisonnable de fixer une limite précise au domaine de validité de tel ou tel modèle eulérien. En l'absence de turbulence néanmoins, les sources possibles d'inconsistances sont moins nombreuses et il ressort des travaux de Sakiz [1999] que l'hypothèse la plus rapidement mise en défaut est l'hypothèse d'une pdf gaussienne permettant la fermeture des corrélations triples à l'aide d'une formule de Milan-Tchekov pour la modélisation des corrélations quadruples.

Chapitre 4

Méthode Hybride Eulérienne-Lagrangienne

Sommaire

4.1 Stratégies de couplage proposées dans la littérature	96
4.1.1 Décomposition de domaines	96
4.1.2 Méthode de couplage avec recouvrement total	97
4.1.3 Méthode de couplage avec recouvrement partiel	97
4.1.4 Méthode de couplage sans recouvrement	99
4.1.5 Extension spatiale des sous-domaines	99
4.2 Principes de la méthode hybride eulérienne lagrangienne	100
4.2.1 Notations	100
4.2.2 Généralités	101
4.2.3 Cas des situations à transport diffusif négligeable	102
4.2.4 Extension aux situations inhomogènes	104
4.3 Mise en œuvre numérique du couplage pour l'approche lagrangienne	105
4.3.1 Cellules frontières ou injection dans un plan ?	105
4.3.2 Demi-flux incidents au domaine lagrangien en situation inhomogène	107
4.3.3 Pdf d'injection présumée en situation inhomogène	108
4.3.4 Flux de particules au travers de la surface de couplage	108
4.3.5 Simulation de la pdf incidente par une méthode de réjection	109
4.4 Mise en œuvre numérique du couplage pour l'approche eulérienne	110
4.4.1 Conditions de type flux	110
4.4.2 Conditions de Dirichlet	111
4.5 Demi-flux incidents associés à la pdf de Richman	112
4.5.1 Définition des demi-flux entrants	112
4.5.2 Expression de la pdf présumée à partir des moments Eulériens	112
4.5.3 Forme générique des demi-flux	113
4.5.4 Expression théorique des demi-flux	113
4.5.5 Cas général	116
4.5.6 Cas particuliers de l'écoulement simplement cisaillé et de canal plan	120

La comparaison des mises en œuvre numériques des approches lagrangienne stochastique et eulérienne peut être menée sur plusieurs points qui sont récapitulés dans le tableau suivant. Chacune de ces deux approches présente ainsi un certain nombre d'avantages et d'inconvénients inhérents au formalisme adopté.

Si l'approche lagrangienne stochastique permet une meilleure prise en compte de phénomènes physiques complexes tels que les rebonds sur paroi "réalistes" (avec des modélisations incluant par exemple le frottement, la rugosité ou le dépôt) ou les effets de polydispersion, celle-ci se fait au dépend du coût de la simulation numérique. Les statistiques réalisées afin d'obtenir les moments de l'écoulement demandent en effet un nombre important de particules numériques, spécialement dans les écoulements fortement inhomogènes ou instationnaires (c'est-à-dire pour la plupart des écoulements réels).

L'approche eulérienne quant à elle bénéficie de la présence d'outils numériques performants pour la résolution du système d'équations gouvernant l'évolution des premiers moments du système. L'utilisation de méthodes de différences finies, volume finis ou éléments finis permet une résolution précise et peu coûteuse du système eulérien. Le défaut majeur de telles approches réside donc dans les approximations et hypothèses qu'il est nécessaire d'effectuer pour obtenir un système eulérien fermé. Ces hypothèses, qui reposent soit sur des concepts d'équilibre soit sur des comportements de référence, peuvent être mises en défaut dans certaines parties de l'écoulement (voire dans tout l'écoulement pour les cas les plus extrêmes). Toutes les inconnues (les premiers moments de l'écoulement) étant reliées aux autres par les équations du système, une erreur dans la prédiction d'un des moments peut se répercuter sur les autres moments. Les phénomènes de dispersion par la turbulence ou par le mouvement d'agitation particulaire peuvent de plus "transporter" cette erreur dans d'autres zones de l'écoulement, éventuellement les zones où les hypothèses de fermeture eulériennes sont en théorie correctes. Le système d'équations eulériennes peut donc, dans certains cas, ne pas permettre une prédiction fidèle de l'écoulement.

	approche lagrangienne stochastique	approche eulérienne
principe de résolution	résolution approchée de l'équation exacte de la pdf	résolution exacte d'équations approchées dérivées de l'équation de la pdf
prise en compte des phénomènes physiques	aisée , au niveau de la particule	complexe , nécessite des hypothèses de fermeture et des approximations
qualité de la prédiction de l'écoulement	très bonne dans l'ensemble de l'écoulement	bonne dans les zones "en équilibre" et dégradée dans les zones "hors-équilibre"
précision de la résolution	mauvaise à cause des fluctuations statistiques	très bonne (schémas numériques classiques)

Les deux approches apparaissent donc comme complémentaires dans leurs avantages et inconvénients. Alors qu'une approche est plus fidèle à la physique, l'autre est moins coûteuse en temps de calcul et plus simple à discréteriser. Une méthode hybride couplant ces deux approches pourrait donc profiter :

- de l'acuité des prédictions de l'approche particulaire dans les zones où les phénomènes physiques les plus complexes ont lieu,
- du coût numérique réduit de l'approche eulérienne dans les zones de l'écoulement où les fermetures sont justifiées.

Le coût numérique global serait donc abaissé d'un facteur dépendant du rapport de volume simulé en lagrangien sur le volume global de l'écoulement et du coût de la procédure de couplage. La résolution du système d'équations eulériennes, même sur des maillages très raffinés, est en effet négligeable en comparaison du coût numérique d'une simulation lagrangienne stochastique. Réduire l'extension du domaine lagrangien ré-

duit donc presque d'autant le coût de la simulation (le coût de la procédure de couplage est elle aussi très faible en comparaison de la simulation lagrangienne stochastique).

Le problème principal lors du développement d'une méthode hybride couplant deux approches aux formalismes différents réside dans l'échange d'informations entre les deux approches. Le couplage doit être assuré par cet échange d'informations tel que les résultats de chaque approche viennent influencer les résultats de l'autre. Nous proposons ici les premiers pas en direction d'un couplage entre approches lagrangienne stochastique et eulérienne dans les écoulements gaz-particules. C'est pourquoi l'accent est particulièrement mis sur les échanges d'informations nécessaires entre les deux approches, et les questions concernant la décomposition en sous-domaines ne seront que partiellement abordées. Cette décomposition devra être étudiée plus amplement pour une transposition de la méthode hybride à des écoulements plus complexes (*i.e.* écoulements de dimension 2 ou 3 et/ou écoulements instationnaires).

4.1 Stratégies de couplage proposées dans la littérature

4.1.1 Décomposition de domaines

Les méthodes de décomposition de domaines connaissent un regain d'intérêt motivé par les développements du calcul parallèle et de méthodes pour la résolution de problèmes présentants de multiples échelles.

La décomposition de domaines est par exemple utilisée dans la résolution par calculs parallèles des systèmes linéaires de grandes tailles issus de la discréétisation par éléments finis, différences finies ou volumes finis des équations décrivant l'élasticité ou la mécanique des fluides. Il est alors effectué un découpage du domaine spatial global de l'écoulement Ω , chaque sous-domaine interagissant avec ses voisins suivant différentes méthodes de couplage, la plus connue étant la méthode alternée de Schwarz (Lions [1987, 1988, 1989]). Cette décomposition de domaines ne fait pas intervenir différentes approches car chaque sous-domaine est résolu de manière identique à ses voisins. Le but ici recherché est l'utilisation maximale du calcul parallèle.

D'autres méthodes de décomposition de domaines sont utilisées pour le calcul de problèmes présentants de multiples échelles. La décomposition de domaine est alors généralement imposée dans l'espace des phases (ou non plus au niveau spatial, même si la variable d'espace peut être considérée comme une variable de l'espace des phases). Ainsi, Muradoglu et al. [1999] dissocient le traitement des effets convectifs et des effets chimiques dans leur résolution des écoulements réactifs turbulents. Ils séparent ainsi l'espace des phases en deux sous-domaines qui sont d'une part l'espace des phases associé aux variables positions et vitesses des particules, et d'autre part l'espace des phases associé à la composition chimique de l'écoulement. L'écoulement est alors résolu par deux approches différentes dans les deux sous-espaces des phases (par une discréétisation volume-finis des équations eulériennes de transport et par une méthode particulaire pour la composition). Il est aussi possible d'effectuer une décomposition en sous-domaines pour l'espace des phases associées aux variables de transport. Crouseilles et al. [2004] décompose ainsi l'espace des vitesses des particules d'un gaz entre le mouvement des particules "thermiques" (particules lentes) résolu par une approche fluide et le mouvement des particules rapides résolu par une méthode particulaire.

La méthode développée dans cette thèse est un mélange des deux approches précédentes. La décomposition de domaines est en effet utilisée dans le domaine spatial, mais deux approches différentes sont utilisées dans les deux sous-domaines. Cette méthode s'inspire de travaux antérieurs dans des problèmes similaires, en particulier dans le couplage des équations de Boltzmann et de Navier-Stokes (Qiu [1992], Bourgat et al. [1994], Schneider [1996], Le Tallec and Mallinger [1997], Schwartzentruber and Boyd [2006]). Ce type de méthodes, que nous appellerons par la suite méthodes hybrides, a été récemment développée dans de nombreuses applications comme les écoulements micro- et nano-fluidiques (O'Connell and Thompson [1995], Nie et al. [2004], Werder et al. [2005]).

Dans sa plus grande généralité l'écoulement gaz-particules est défini dans un domaine spatial global noté Ω . Ce domaine est alors décomposé en deux sous-domaines : le domaine eulérien Ω_{eul} et le domaine lagrangien Ω_{lag} où l'écoulement est respectivement résolu suivant l'approche eulérienne et l'approche lagrangienne. La réunion des deux sous-domaines est égale au domaine global et il doit exister au moins une frontière commune au deux sous-domaines ce qui se traduit par les conditions mathématiques :

$$\Omega = \Omega_{\text{eul}} \cup \Omega_{\text{lag}} \quad (4.1a)$$

$$\Omega_{\text{eul}} \cap \Omega_{\text{lag}} \neq \emptyset \quad (4.1b)$$

Seuls des cas où les deux sous-domaines sont compacts, c'est-à-dire en une seule partie, sont considérés. Il existe ainsi deux configurations de découpage géométrique du domaine global :

- couplage avec recouvrement où l'intersection des deux sous-domaines est lui-même un espace de même dimension que les deux sous-domaines.
- couplage sans recouvrement où l'intersection des deux sous-domaines est un hyperplan (ou surface) de l'espace global. Les deux sous-domaines sont alors séparés par une interface appelée Γ dont le vecteur normal $\underline{n}(\underline{x}_\Gamma)$ est par définition dirigé de Ω_{lag} vers Ω_{eul} (avec $\underline{x}_\Gamma \in \Gamma$).

Dans le cadre de la thèse ne seront considérées que les géométries de couplage avec sous-domaines fixes, c'est-à-dire dont l'extension spatiale ne varie pas au cours du temps. La contrainte de sous-domaines fixes est dictée par un soucis de clarté. Nous recherchons les solutions d'écoulements gaz-solides pour lesquels il n'est pas indispensable d'adapter la décomposition à un changement de physique du problème. C'est pourquoi les deux sous-domaines resteront inchangés au cours de nos simulations.

4.1.2 Méthode de couplage avec recouvrement total

On parle de recouvrement total lorsque le domaine de l'approche continue englobe totalement le domaine cinétique, *i.e.* $\Omega_{\text{eul}} \cap \Omega_{\text{lag}} = \Omega_{\text{lag}}$ (ou $\Omega_{\text{eul}} = \Omega$). Ce type de méthode est utilisé lorsque l'approche continue est valide à travers tout le domaine de calcul mais ne permet pas une bonne prise en compte des conditions aux limites. Cette approche a notamment été développée dans le couplage des équations d'Euler et de Boltzmann pour le calcul de l'écoulement autour d'un véhicule en rentrée atmosphérique (Qiu [1992]), dans un couplage des versions conservative et non-conservative des équations de Navier-Stokes et un couplage Navier-Stokes/Boltzmann (Tidriri [1992]).

Cette approche est très séduisante dans les cas où la difficulté de prise en compte de la physique se situe au niveau des conditions aux limites. Dans le cas du couplage Navier-Stokes/Boltzmann (Tidriri [1992]), la résolution de l'écoulement par des méthodes de Monte-Carlo dans le domaine "local" (Ω_{lag}) permet de dériver des conditions aux limites de glissement pour les équations de Navier-Stokes qui peuvent être appliquées aux frontières du domaine entier (ici directement sur la surface du corps plongé dans l'écoulement). Il est ainsi possible de calculer par la simulation locale la force de frottement ainsi que le flux de chaleur sur l'obstacle. Ces conditions sont alors imposées au calcul Navier-Stokes en lieu et place de la condition d'adhérence (qui introduit usuellement des problèmes de résolution).

Ce type d'approche échoue néanmoins pour des écoulements où la validité de l'approche continue n'est pas assurée dans tout le domaine Ω . Il est en effet nécessaire d'émettre certaines hypothèses pour obtenir la fermeture du système d'équations de l'approche continue. Par exemple par une fermeture BGK de l'opérateur de collision (cf § 2.5.2.1) pour obtenir les équations de Navier-Stokes, ou encore les fermetures supplémentaires eulériennes présentées au § 3.2.5. Si ces dernières sont mises en défaut les conditions aux limites calculées par une simulation "locale" ne suffisent pas à assurer une bonne prédition de l'écoulement par l'approche continue dans tout le domaine. Il est alors nécessaire de restreindre l'extension spatiale du domaine de simulation de l'approche continue.

4.1.3 Méthode de couplage avec recouvrement partiel

Lorsque l'approche continue n'est plus valable dans tout le domaine il est alors indispensable de restreindre le domaine eulérien à son domaine de validité. La configuration la plus classique est alors une situation où les deux sous-domaines se recouvrent, c'est-à-dire qu'une partie de chaque sous-domaine est commune avec l'autre, comme dans la figure 4.1 où la zone de recouvrement est hachurée. Les conditions aux limites imposées aux deux sous-domaines ne sont pas co-localisées mais sur deux surfaces distinctes que nous appellerons Γ_{lag} et Γ_{eul} et qui désignent respectivement la frontière intérieure du domaine lagrangien

et du domaine eulérien. on entend par frontière intérieure la frontière du domaine qui n'est pas commune avec la frontière du domaine global $\partial\Omega$ (cf. figure 4.1).

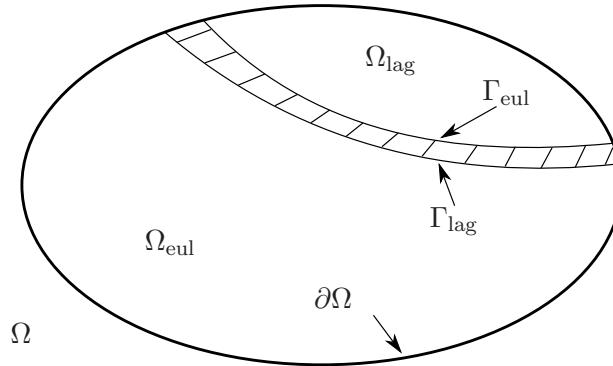


FIG. 4.1 –

Cette décomposition de domaines est directement issue de l'étude de la méthode alternée de Schwarz. Celle-ci fut développée pour les équations de convection-diffusion avec conditions aux limites de type Dirichlet sur les bords du domaine global. Prenons pour exemple le problème mono-dimensionnel :

$$v\phi' - \nu\phi'' = 0 \text{ sur }]0, 1[\quad (4.2a)$$

$$\phi(0) = a \quad (4.2b)$$

$$\phi(1) = b \quad (4.2c)$$

et décomposons le domaine $]0, 1[$ en deux sous-domaines $]0, h_1[$ et $]h_2, 1[$ avec $h_2 \leq h_1$. La méthode alternée de Schwarz consiste à remplacer le problème (4.2) par l'algorithme suivant :

1. trouver ϕ_2 sur $]h_2, 1[$ telle que

$$v\phi_2^{(n)'} - \nu\phi_2^{(n)''} = 0 \text{ sur }]h_2, 1[\quad (4.3a)$$

$$\phi_2^{(n)}(h_2) = \theta_2\phi_1^{(n-1)}(h_2) + (1 - \theta_2)\phi_2^{(n-1)}(h_2) \quad (4.3b)$$

$$\phi_2^{(n)}(1) = b \quad (4.3c)$$

2. trouver ϕ_1 sur $]0, h_1[$ telle que

$$v\phi_1^{(n)'} - \nu\phi_1^{(n)''} = 0 \text{ sur }]0, h_1[\quad (4.4a)$$

$$\phi_1^{(n)}(0) = a \quad (4.4b)$$

$$\phi_1^{(n)}(h_1) = \theta_1\phi_2^{(n)}(h_1) + (1 - \theta_1)\phi_1^{(n-1)}(h_1) \quad (4.4c)$$

Dans cette configuration il est possible de démontrer qu'il n'y a pas convergence de l'algorithme dans le cas sans recouvrement ($h_2 = h_1$ et avec $0 \leq \theta_1, \theta_2 \leq 2$) et que cette méthode converge toujours si $h_2 < h_1$ (Tidriri [1992]). Il est possible de montrer qu'une convergence optimale peut être obtenue sous condition qu'une des conditions ne soit pas relaxée ($\theta_1 = 1$ ou $\theta_1 = 2$). Dans ce cas la convergence optimale est obtenue pour une condition à la limite du deuxième problème sur-relaxée, une valeur précise permettant la convergence de l'algorithme en une itération (Tidriri [1992]). C'est pourquoi la méthode avec recouvrement partiel a été abondamment utilisée.

Les résultats obtenus dans le cas simple présenté au-dessus ne sont pas directement généralisables au couplage des deux systèmes d'équations qu'il s'agit de coupler ici. Premièrement, l'équation d'évolution de la pdf de notre système ne présente pas les mêmes propriétés que l'équation de convection-diffusion

stationnaire du système (4.2). Deuxièmement, les conditions aux limites (sur les bords du domaine global) associées à nos problèmes font intervenir à la fois des conditions de type Dirichlet et de type Neuman. L'étude précédente ne peut donc être menée pour obtenir des conditions de convergence de l'algorithme de couplage ou des conditions de relaxation des conditions aux limites pour une convergence optimale.

4.1.4 Méthode de couplage sans recouvrement

Les résultats du paragraphe précédent concernant la non-convergence de la méthode alternée dans le cas de non-recouvrement ne sont pas non plus généralisables à nos écoulements. De plus, imposer des conditions de type Dirichlet sur les deux faces Γ_{lag} et Γ_{eul} ne semble pas être la meilleure méthodologie de couplage des deux approches (en particulier en ce qui concerne l'approche particulière). C'est pourquoi les cas sans recouvrement sont aussi à considérer. La frontière intérieure des domaines lagrangien et eulérien est alors confondue et on utilise alors une notation condensée Γ représentant les deux frontières :

$$\Gamma_{\text{lag}} = \Gamma_{\text{eul}} = \Gamma \quad (4.5)$$

Les méthodes sans recouvrement de domaines ont été utilisées dans le développement de méthodes de couplage des équations de Boltzmann et des équations de Navier-Stokes ou Euler. Le Tallec and Mallinger [1997] et Tiwari [1998] développent ainsi des méthodologies de couplage basées sur une étude précise des flux cinétiques à travers une face unique de couplage. Les deux sous-domaines sont pris distincts l'un de l'autre comme dans la figure 4.2. Les deux sous-domaines sont alors séparés par une interface appelée Γ , prise par définition dirigée par le vecteur normal $\underline{n}(x_{\Gamma})$ dirigé de Ω_{lag} vers Ω_{eul}

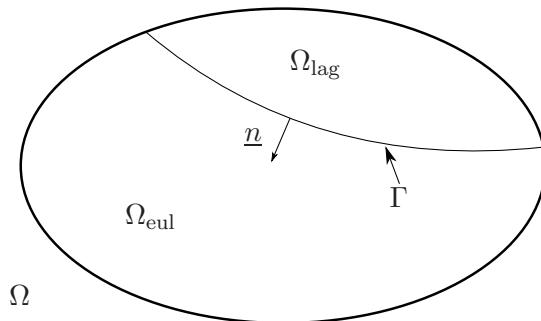


FIG. 4.2 – Configuration sans recouvrement

Les conditions aux limites imposées aux deux approches sont donc localisées sur la même surface, ce qui permet de limiter le coût du couplage (les informations sur les conditions aux limites d'une approche pouvant être reprises par l'autre approche et le domaine cinétique étant plus petit). Qiu [1992] effectue dans le cas d'un couplage des équations d'Euler et de Boltzmann par demi-flux des couplages avec et sans recouvrement. Dans les deux cas, les nombres d'itérations à convergence sont voisins, et si le raccordement est légèrement moins bon sans recouvrement, les temps d'exécutions sont plus faible car le domaine cinétique est réduit par rapport au cas avec recouvrement.

4.1.5 Extension spatiale des sous-domaines

La question de l'extension spatiale des sous-domaines est liée aux domaines de validité des deux approches, en particulier de l'approche continue qui possède un domaine de validité plus restreint. La décomposition du domaine s'effectue donc par une reconnaissance des zones de l'écoulement où l'approche

eulérienne est valide. La reconnaissance de ces zones est intimement liée à l'évaluation de l'écart de la pdf de l'écoulement à la pdf d'équilibre de référence de l'approche eulérienne (définie comme la pdf satisfaisant à toutes les hypothèses de fermeture émises lors de la dérivation de l'approche continue).

Les hypothèses de fermeture sont néanmoins nombreuses (cf. § 3.5) et chacune peut être mise en défaut dans une zone différente de l'écoulement. Deux fermetures peuvent être tout de même incriminées comme principales sources des inconsistances de l'approche eulérienne :

- La première à trait à la modélisation de la vitesse du fluide vu par une équation de Langevin. Le tenseur $\underline{\underline{A}}$ est en partie responsable de la prédiction de la vitesse de dérive et des corrélations fluide-particules. Une modélisation inadéquate de ce tenseur entraînera donc une mauvaise prédiction des corrélations entre le mouvement d'agitation des deux phases et, par l'intermédiaire de la traînée, des moments de la phase particulaire.
- la deuxième est la fermeture des corrélations triples (ou plutôt des termes de dispersion du mouvement d'agitation particulaire par lui-même), et en particulier l'hypothèse de pdf gaussienne nécessaire à la modélisation des corrélations quadruples. En l'absence d'effet de la turbulence sur la phase particulaire, Sakiz [1999] a montré que cette modélisation est la source principale d'inconsistance des modèles eulériens.

L'obtention de critères (ou d'un critère unique) sur la validité d'une approche eulérienne en fonction des observations précédentes est un travail théorique qui n'a pas été effectué. De tels critères permettraient cependant une décomposition automatique des sous-domaines qui amélioreraient l'efficacité de la méthode hybride.

Le temps de calcul lors d'une simulation est en très grande partie ($> 90\%$) utilisé pour la résolution lagrangienne stochastique. La réduction de l'extension du domaine lagrangien s'accompagne donc d'une réduction pratiquement équivalente du temps de calcul global de la simulation. L'utilisation d'un critère (comme lors de l'utilisation d'un critère CFL) permettrait de déterminer avec précision quelles zones seraient correctement prédites par l'approche eulérienne et donc abaisserait le temps de calcul global.

4.2 Principes de la méthode hybride eulérienne lagrangienne

4.2.1 Notations

Pour des raisons de clarté les notations utilisées par la suite pour expliquer la méthodologie de couplage sont ici définies (ou rappelées). Lorsque les abréviations "lag" et "eul" sont utilisées en indice elles dénotent l'appartenance respective au domaine lagrangien et eulérien. Ainsi Γ_{lag} et Γ_{eul} désignent respectivement les frontières intérieures du domaine lagrangien et eulérien. Lorsque la frontière intérieure n'est pas spécifiée, ou dans le cas du couplage sans recouvrement, la notation Γ sera utilisée. L'utilisation des abréviations "lag" et "eul" en exposant d'une variable dénote la prédiction de cette variable par l'approche concernée. Par exemple $\hat{f}_{fp}^{\text{eul}}$ désigne la pdf estimée par l'approche eulérienne et $\langle \Psi \rangle_p^{\text{lag}}$ désigne la valeur du moment $\langle \Psi \rangle_p$ calculé par la simulation lagrangienne.

Par définition les surfaces de couplage sont orientées par le vecteur normal \underline{n} dirigé du domaine lagrangien vers le domaine eulérien.

Pour toute fonction des vitesses $\Psi(\underline{c}_f, \underline{c}_p)$, le flux de Ψ au travers la surface Γ est défini par la quantité :

$$\mathcal{F}_\Gamma(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) = \int (\underline{c}_p \cdot \underline{n}) \Psi(\underline{c}_f, \underline{c}_p) f_{fp}(\underline{c}_f, \underline{c}_p, \underline{x}_\Gamma, t) d\underline{c}_f d\underline{c}_p \quad (4.6)$$

Ce flux cinétique peut ensuite se décomposer en deux demi-flux représentant chacun l'influence des sous-ensemble de particules ayant une vitesse normale à la frontière Γ positive ou négative. **Par convention nous appellerons demi-flux sortants \mathcal{F}_Γ^+ les flux de propriétés transportés par les particules ayant une vitesse normale à la face Γ positive. Les demi-flux incidents (ou entrants) \mathcal{F}_Γ^- sont alors le résultat du transport de propriétés par les particules de vitesse normale négative :**

$$\mathcal{F}_\Gamma^+(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) = \int_{\underline{c}_p \cdot \underline{n} > 0} (\underline{c}_p \cdot \underline{n}) \Psi(\underline{c}_f, \underline{c}_p) f_{fp}(\underline{c}_f, \underline{c}_p, \underline{x}_\Gamma, t) d\underline{c}_f d\underline{c}_p \quad (4.7a)$$

$$\mathcal{F}_\Gamma^-(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) = \int_{\underline{c}_p \cdot \underline{n} < 0} (\underline{c}_p \cdot \underline{n}) \Psi(\underline{c}_f, \underline{c}_p) f_{fp}(\underline{c}_f, \underline{c}_p, \underline{x}_\Gamma, t) d\underline{c}_f d\underline{c}_p \quad (4.7b)$$

$$\mathcal{F}_\Gamma(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) = \mathcal{F}_\Gamma^+(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) + \mathcal{F}_\Gamma^-(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) \quad (4.7c)$$

4.2.2 Généralités

Le couplage entre approche lagrangienne et approche eulérienne est basé sur la description probabiliste de l'écoulement à l'aide de la pdf jointe à une particule f_{fp} . Cette base commune permet un échange d'informations entre les deux approches à partir d'une décomposition cinétique des flux au travers de la surface de couplage Γ (ou Γ_{lag} et Γ_{eul} dans le cas du recouvrement partiel).

L'équation d'évolution de la pdf jointe à une particule (2.92) est une équation hyperbolique. Des conditions aux limites bien posées à la frontière $\partial\Omega_{\text{lag}}$ de Ω_{lag} nécessitent donc d'imposer les valeurs correspondantes aux caractéristiques entrantes le long de cette frontière. Cette frontière étant composée d'une partie commune avec le domaine global et d'une partie à l'intérieur de ce dernier, la solution dans le domaine lagrangien est donc imposée :

- d'une part par la donnée de la pdf des particules incidentes sur $\partial\Omega_{\text{lag}} \cap \partial\Omega$. Cette donnée est obtenue par des conditions de symétrie ou par la pdf des particules rebondissant sur les obstacles.
- d'autre part par la donnée de la pdf des particules incidentes sur Γ_{lag} . C'est à travers cette pdf incidente que le couplage de l'eulérien vers le lagrangien est réalisé. Ces particules incidentes dans le domaine lagrangien étant des particules sortantes du domaine eulérien, la condition à la limite de couplage de l'eulérien vers le lagrangien s'écrit $\forall (\underline{x}_{\Gamma_{\text{lag}}} \in \Gamma_{\text{lag}}, t)$:

$$\forall \underline{c}_p \cdot \underline{n} < 0, \hat{f}_{fp}^{\text{lag}}(\underline{c}_f, \underline{c}_p, \underline{x}_{\Gamma_{\text{lag}}}, t) = \hat{f}_{fp}^{\text{eul}}(\underline{c}_f, \underline{c}_p, \underline{x}_{\Gamma_{\text{lag}}}, t) \quad (4.8)$$

qui est néanmoins une condition de couplage théorique car l'information disponible à partir du modèle eulérien ne permet pas de caractériser complètement la pdf $\hat{f}_{fp}^{\text{eul}}$. Cette condition est intégrée dans la méthodologie de couplage pour les premiers moments qui lui sont associés, *i.e.* par la prise en compte des demi-flux $\mathcal{F}_{\Gamma_{\text{lag}}}^{\text{eul}-}(\Psi, \underline{x}_{\Gamma_{\text{lag}}}, t)$ pour les premiers moments de l'écoulement. Le couplage est donc effectué par génération de particules numériques à la frontière Γ_{lag} permettant de représenter (??) pour $\Psi = \{1; c_{f,i}; c_{p,i}; c''_{f,i}c''_{f,j}; c''_{f,i}c''_{p,j}; c''_{p,i}c''_{p,j}\}$. Ce processus est dénommé "injection de particules numériques dans le domaine lagrangien Ω_{lag} ". L'injection est effectuée par un tirage aléatoire des propriétés des particules numériques incidentes au domaine lagrangien. Il est alors nécessaire de se donner la loi de probabilité de ce tirage. Malheureusement la connaissance exacte de cette loi nécessiterait la connaissance des demi-flux $\mathcal{F}_{\Gamma_{\text{lag}}}^{\text{eul}-}$ pour tous les variables Ψ . Le modèle eulérien ne pouvant fournir toutes ces informations, il est alors nécessaire d'émettre une hypothèse sur la forme de la pdf de flux.

Les conditions aux limites à imposer au domaine eulérien sont elles aussi doubles :

- sur la frontière commune avec le domaine global $\partial\Omega_{\text{eul}} \cap \partial\Omega$ les conditions seront toujours de type symétrie. La méthode hybride permet en effet d'éviter le traitement de conditions aux limites sur les frontières d'éventuels obstacles, puisque celles-ci sont traitées par l'approche lagrangienne.

– les conditions aux limites sur la frontière Γ_{eul} sont les conditions de couplage avec le modèle lagrangien. Compte-tenu des fermetures eulériennes additionnelles (correspondant notamment au transport diffusif), le système eulérien n'est pas un système hyperbolique. Le couplage du lagrangien vers l'eulérien s'effectue donc par des conditions aux limites classiques de systèmes eulériens :

1. dans les cas sans recouvrement des conditions de type flux sur toutes les variables résolues sont préférées. On impose ainsi pour toutes les variables Ψ calculées dans le domaine eulérien et sur toute la surface de couplage ($\forall (\underline{x}_{\Gamma_{\text{eul}}}, t) \in \Gamma_{\text{eul}}$) les flux :

$$\mathcal{F}_{\Gamma_{\text{eul}}}(\Psi, \underline{x}_{\Gamma_{\text{eul}}}, t) \quad (4.9)$$

Les demi-flux associés aux particules incidentes dans le domaine lagrangien étant déjà connus, il est alors seulement nécessaire de calculer dans la simulation lagrangienne les demi-flux sortant du domaine pour les différentes variables (cf. § 4.5). Ce type de conditions assurent la continuité des flux lors du couplage, mais pas celle des variables (notamment en ce qui concerne la densité de particules).

2. dans les cas de recouvrements partiels, les conditions de type flux peuvent être avantageusement remplacées par des conditions de Dirichlet pour assurer la continuité des variables lors du processus de couplage. Afin d'éviter que les valeurs imposées comme conditions aux limites à la face Γ_{eul} ne soient extrapolées (avec tous les risques inhérents à une extrapolation), il convient alors de placer cette frontière suffisamment à l'intérieur du domaine lagrangien. On impose alors comme condition de couplage sur toute la face ($\forall (\underline{x}_{\Gamma_{\text{eul}}}, t) \in \Gamma_{\text{eul}}$) :

$$\langle \Psi \rangle_p(\underline{x}_{\Gamma_{\text{eul}}}, t) = \langle \Psi \rangle_p^{\text{lag}}(\underline{x}_{\Gamma_{\text{eul}}}, t) \quad (4.10)$$

4.2.3 Cas des situations à transport diffusif négligeable

Les situations où le transport diffusif est négligeable sont caractérisées par des corrélations triples négligeables, et seront ici assimilées aux zones homogènes de l'écoulement. Il est alors possible de baser la méthodologie de couplage sur une représentation de l'écoulement, dans le domaine eulérien, par une pdf jointe fluide-particule présumée et par une couplage sans recouvrement (Pialat et al. [2007]). Les surfaces Γ_{lag} et Γ_{eul} sont alors confondues et on les notera Γ .

4.2.3.1 Conditions aux limites pour le calcul lagrangien

Du fait de la nullité des corrélations triples, une pdf présumée valide à l'ordre deux permet d'obtenir exactement les valeurs des demi-flux $\mathcal{F}_{\Gamma}^{\text{eul}}(\Psi, \underline{x}_{\Gamma}, t)$ observées dans l'écoulement. Le choix de la pdf présumée s'est porté sur l'extension de la pdf de Richman aux écoulements gaz-particules (cf. Annexe). Premièrement, les moments issus du calcul eulérien sont projetés sur la face de couplage Γ . En notant $\langle \Psi \rangle_{\Gamma}^{\text{eul}}$ ces moments, le modèle de pdf valable à l'ordre 2 que nous avons choisi s'écrit (cf. Annexe) :

$$f_{fp}^{\text{eul}}(\underline{x}, \underline{c}, t) = \frac{n_{p,\Gamma}^{\text{eul}}(\underline{x}, t)}{\sqrt{8\pi^3 \det(\underline{\underline{R}}_{\Gamma}^{\text{eul}})}} \exp\left(-\frac{1}{2} \underline{c}'' \cdot \underline{\underline{R}}_{\Gamma}^{-1, \text{eul}} \underline{c}''\right) \quad (4.11)$$

qui se révèle être un modèle extrêmement fiable dans les écoulements homogènes cisaillés (cf. chapitre 5). Cette forme de pdf (qui est définie sur tout l'espace des vitesses) prédit correctement non seulement les moments à la face de couplage, mais aussi les demi-flux incidents observées dans un écoulement homogène. C'est pour cette dernière propriété qu'elle fut construite.

La méthode de réjection exposée au § 4.3.5 est alors utilisée pour injecter les particules suivant la pdf de demi-flux incident dans le domaine lagrangien issue de cette pdf ($g_p^-(\underline{x}, \underline{c}, t) = |\underline{c}_p \cdot \underline{n}| f_{fp}^{\text{eul}}(\underline{x}, \underline{c}, t)$ pour $\underline{c}_p \cdot \underline{n} < 0$).

4.2.3.2 Conditions aux limites pour le calcul eulérien

Les demi-flux incidents $\mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t)$ effectivement injectés dans le domaine lagrangien peuvent être calculés théoriquement (cf. § 4.5). Cette connaissance est alors utilisée pour calculer les conditions aux limites de type flux à imposer au domaine eulérien. Les flux totaux à la surface de couplage peuvent en effet être calculés à partir de la décomposition en demi-flux :

$$\mathcal{F}_\Gamma(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) = \mathcal{F}_\Gamma^{\text{lag}+}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) + \mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) \quad (4.12)$$

où les demi-flux sortants du domaine lagrangien $\mathcal{F}_\Gamma^{\text{lag}+}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t)$ sont calculés par sommation sur les particules numériques sortantes dans la simulation lagrangienne stochastique :

$$\mathcal{F}_\Gamma^{\text{lag}+}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) = \frac{\kappa}{dSdt} \sum_i \Psi_i \quad (4.13)$$

où dS est la surface de couplage et dt est la durée sur laquelle est effectuée la sommation.

4.2.3.3 Algorithme de couplage

Initialisation Le couplage est initialisé par une simulation eulérienne sur tout le domaine. Les propriétés des particules numériques présentes dans le domaine lagrangien sont initialisées pour suivre les profils calculés lors de la simulation eulérienne d'initialisation.

Boucle de couplage L'algorithme de couplage est basé sur un échange d'information entre les deux approches par une boucle en temps. L'algorithme présenté ici est le premier algorithme qui fut développé pour les cas d'écoulements homogènes. La boucle en temps qui est à la base du couplage à la structure générale suivante :

1. Résolution du système d'équations lagrangiennes pour m_{lag} pas de temps dt_{lag} en prenant en compte :
 - (a) les conditions aux limites qui n'appartiennent pas à la surface de couplage Γ_{lag} , c'est-à-dire des conditions de symétrie ou de rebond sur $\partial\Omega \cap \Omega_{\text{lag}}$,
 - (b) l'injection aléatoire de particules numériques à la face de couplage Γ suivant la pdf (4.11) obtenue à l'itération précédente et définie à partir des moments eulérien projetés sur la face de couplage,
2. Calcul des demi-flux lagrangiens sortants $\mathcal{F}_\Gamma^{\text{lag}+}(\Psi)$ ainsi que des conditions aux limites de type flux $\mathcal{F}_\Gamma(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t)$ à imposer à la simulation eulérienne,
3. Résolution du système d'équations eulériennes pour m_{eul} pas de temps dt_{eul} en prenant en compte :
 - (a) les conditions aux limites qui n'appartiennent pas à la surface de couplage Γ_{eul} , c'est-à-dire des conditions de symétries sur $\partial\Omega \cap \Omega_{\text{eul}}$,
 - (b) les conditions aux limites de type flux obtenues à partir des points 2 et 4 par (4.12),
4. Calcul au niveau de l'interface Γ des moments eulériens permettant, à partir de la relation (4.11), de présumer la pdf d'injection nécessaire au point 1b.

L'algorithme de couplage est donc basé sur plusieurs étapes d'échanges d'informations, étapes qui sont détaillées dans les sections suivantes.

Dans les écoulements instationnaires le choix des paramètres du couplage sont liés par des considérations numériques. Pour des phénomènes instationnaires il est en effet important que l'échange d'informations soit fait sur une durée identique pour les deux approches :

$$m_{\text{lag}} dt_{\text{lag}} = m_{\text{eul}} dt_{\text{eul}} \quad (4.14)$$

Il est de plus nécessaire, pour la consistance des approches, que l'échange d'informations se fasse plus rapidement que le temps caractéristique d'évolution macroscopique de l'écoulement. En appelant τ ce temps caractéristique macroscopique, la condition sur les nombres de pas de temps et leurs durées s'écrit :

$$m_{\text{lag}} dt_{\text{lag}} = m_{\text{eul}} dt_{\text{eul}} \ll \tau \quad (4.15)$$

Cette limitation n'a plus cours dans les écoulements stationnaires ($\tau \rightarrow \infty$) et il est possible de séparer "temporellement" la résolution des deux approches. Les deux approches peuvent en effet être simulées jusqu'à convergence en prenant en compte les conditions aux limites issues du couplage. Cette méthodologie, si elle ne présente pas la vitesse de convergence la plus grande, permet de considérer un nombre réduit de particules dans le domaine lagrangien car elle remplace les moyennes d'ensembles par des moyennes temporelles pour le calcul des moments.

4.2.4 Extension aux situations inhomogènes

Le cas des situations inhomogènes est plus délicat car il est alors nécessaire de prendre en considération dans le calcul des demi-flux des contraintes cinétiques les corrélations triples de vitesse fluctuante. Une forme présumée de pdf peut théoriquement prédire correctement les demi-flux de contraintes cinétiques si cette pdf est valable à l'ordre 3. Les tentatives effectuées à partir de formes présumées permettant d'incorporer les informations sur les corrélations triples n'ont pu aboutir du fait de la complexité de la caractérisation complète d'une telle pdf. La méthodologie de couplage a donc du être adaptée aux situations inhomogènes en prenant un point de vue différent concernant la détermination de la pdf d'injection.

4.2.4.1 Conditions aux limites pour le calcul lagrangien

N'ayant pu exhiber une pdf modèle permettant la prédiction des demi-flux incidents des moments jusqu'à l'ordre deux à partir des moments eulériens calculés à la face de couplage, les demi-flux incidents ont du être calculés différemment. Le calcul est maintenant effectué à partir de l'équation (4.7b) qui permet d'exprimer facilement les demi-flux incidents à partir de la relation :

$$\mathcal{F}_\Gamma^-(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) = \mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) - \mathcal{F}_\Gamma^{\text{lag}+}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) \quad (4.16)$$

Il est alors nécessaire de se doter d'un modèle de pdf d'injection qui possède des demi-flux incidents identiques aux demi-flux calculés par la relation précédente. Pour cela, nous nous servons des expressions théoriques des demi-flux associés à la pdf de Richman (cf. § 4.5) pour calculer les moments qui permettront d'obtenir les bons demi-flux incidents (cf. § 4.3.2). Cette pdf de flux n'est donc plus, comme dans les situations homogènes, reliée aux valeurs des moments eulériens à la face de couplage. Une fois la pdf d'injection caractérisée, les particules numériques sont injectées à l'aide d'une méthode de réjection identique au cas homogènes.

4.2.4.2 Conditions aux limites pour le calcul eulérien

Dans les situations homogènes, les conditions aux limites imposées étaient des conditions de type flux dont les valeurs étaient données par la relation (4.12). Cette relation étant utilisée pour le calcul de la pdf d'injection présentée au paragraphe précédent, un calcul de conditions de type flux la ré-utilisant ne permettrait pas un couplage fort des deux approches. Les conditions aux limites imposées au domaine eulérien dans les situations inhomogènes sont donc des conditions de Dirichlet issues de la simulation lagrangienne.

4.2.4.3 Algorithme de couplage

L'algorithme de couplage n'est que peu modifié par rapport à sa version en situation homogène. Seul le calcul des conditions aux limites diffère du cas précédent. Premièrement, le calcul des conditions d'injection est maintenant effectué pour obtenir des demi-flux associés à la pdf de Richman identiques aux demi-flux reconstruits à partir de la relation (4.16). Les moments de la pdf d'injection sont donc calculés et non pas imposés par les résultats de l'approche eulérienne. Deuxièmement, les conditions imposées au domaine eulérien sont maintenant des conditions de Dirichlet. Les changements induits dans l'algorithme de couplage sont marqués en gras :

1. Résolution du système d'équations lagrangiennes pour m_{lag} pas de temps dt_{lag} en prenant en compte :
 - (a) les conditions aux limites qui n'appartiennent pas à la surface de couplage Γ_{lag} , c'est-à-dire des conditions de symétrie ou de rebond sur $\partial\Omega \cap \Omega_{\text{lag}}$,
 - (b) l'injection aléatoire de particules numériques suivant la pdf du flux incident présumée à la face de couplage lagrangienne Γ_{lag} obtenue à l'itération précédente (pour la simulation de la condition (4.8)),
2. Calcul des demi-flux lagrangiens sortants $\mathcal{F}_{\Gamma}^{\text{lag}+}(\Psi)$ **ainsi que des conditions aux limites de Dirichlet** $\Psi >_p^{\text{lag}}$ **à imposer à la simulation eulérienne**,
3. Résolution du système d'équations eulériennes pour m_{eul} pas de temps dt_{eul} en prenant en compte :
 - (a) les conditions aux limites qui n'appartiennent pas à la surface de couplage Γ_{eul} , c'est-à-dire des conditions de symétries sur $\partial\Omega \cap \Omega_{\text{eul}}$,
 - (b) **les conditions aux limites de Dirichlet obtenues lors de la simulation lagrangienne**,
4. **Calcul au niveau de l'interface** Γ_{lag} **des moments (particule et fluide) permettant de représenter les demi-flux calculés par** (4.16) **à l'aide de la pdf de Richman** (résolution du système (4.20)).

4.3 Mise en œuvre numérique du couplage pour l'approche lagrangienne

4.3.1 Cellules frontières ou injection dans un plan ?

Le couplage de l'eulérien vers le lagrangien doit se faire par la génération de particules numériques incidentes au domaine lagrangien. Ces particules numériques sont générées aléatoirement à partir de la loi de probabilité des vitesses. Il se pose alors la question de savoir suivant quelle loi les particules doivent être générées. Deux réponses sont possibles :

- la première solution est de générer les particules numériques dans des cellules "frontières" à la face de couplage Γ_{lag} . Les cellules frontières sont des cellules situées à l'extérieur du domaine lagrangien effectif comme dans la figure 4.3. Ce type d'interfaçage entre la simulation continue et la simulation cinétique sont fréquents. On le retrouve notamment dans le couplage Euler/Boltzmann de Qiu [1992]. Ces

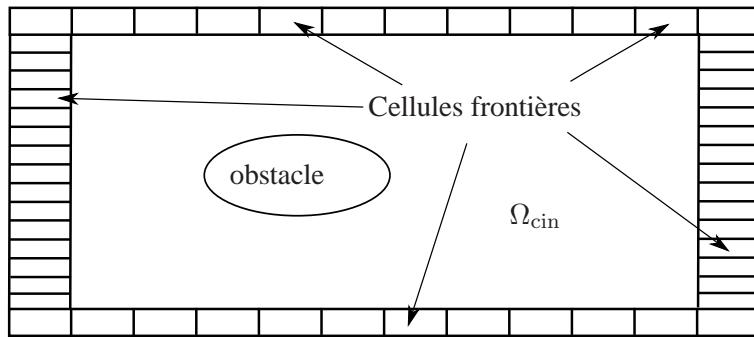


FIG. 4.3 –

méthodes présentent l'avantage de générer de manière très simple les particules numériques puisque la forme présumée de la pdf est une forme simple. Elles présentent néanmoins trois désavantages majeurs :

1. la présence des cellules frontières empêche l'utilisation de telles méthodes dans des configurations sans recouvrement,
 2. des particules (la moitié) ne rentrant pas dans le domaine lagrangien sont aussi générées ce qui limite l'efficacité de telles méthodes,
 3. enfin, il est difficile dans de telles configurations de prendre en compte les corrélations triples dans la génération des particules numériques. En effet, il est nécessaire que les moments de la loi de probabilité avec laquelle sont tirées aléatoirement les particules numériques coïncident avec les moments de l'écoulement à l'endroit de la cellule. Or il est difficile d'intégrer les corrélations triples dans un modèle présumé de pdf (cf. Annexe).
- la deuxième solution consiste à générer les particules numériques sur la surface de couplage suivant le pdf du flux incident associé à la pdf de référence. Elles sont ensuite transportées dans le domaine lagrangien pendant un temps aléatoire pour obtenir une injection régulière. Cette technique répond

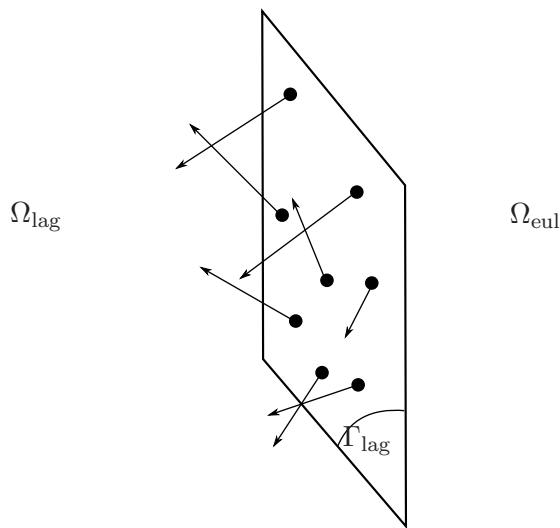


FIG. 4.4 – Injection sur un élément de surface

efficacement aux problèmes soulevés par les cellules frontières :

1. cette méthode peut s'utiliser dans les configurations avec et sans recouvrement,
2. seule la partie des particules numériques incidentes au domaine lagrangien est injectée,
3. les corrélations triples peuvent être prises en compte puisqu'on ne considère alors plus qu'une moitié de pdf. Même si cette pdf supposent des corrélations triples nulles, les demi-flux incidents issus de cette pdf concernant les corrélations doubles peuvent ne pas être nuls (ils sont juste les opposés des demi-flux sortants).

La contrepartie de ces avantages est la nécessité de considérer une pdf de flux (et non pas une pdf) qui est plus difficile à simuler car elle est le résultat de la multiplication de la pdf par la vitesse normale. Cette difficulté peut néanmoins être surmontée par l'utilisation d'une méthode de réjection permettant une simulation "à moindres frais" de la pdf de flux. C'est donc cette dernière solution qui a été retenue pour l'injection de nos particules.

4.3.2 Demi-flux incidents au domaine lagrangien en situation inhomogène

La condition à la limite (4.8) est équivalente à se donner les demi-flux incidents pour toute les variables Ψ :

$$\mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) = \int_{\underline{c}_p \cdot \underline{n} < 0} (\underline{c}_p \cdot \underline{n}) \Psi(\underline{c}_f, \underline{c}_p) \hat{f}_{fp}^{\text{eul}}(\underline{c}_f, \underline{c}_p, \underline{x}_\Gamma, t) d\underline{c}_f d\underline{c}_p \quad (4.17)$$

Malheureusement la pdf eulérienne $\hat{f}_{fp}^{\text{eul}}$ à la face Γ_{lag} (qui doit être donnée par les prédictions eulériennes) n'est connue qu'au travers des moments calculés par le modèle eulérien : $n_p, \underline{U}_p, \underline{\underline{R}}_{pp}, \underline{\underline{R}}_{fp}, \dots$. La connaissance de ces moments n'étant pas suffisante pour caractériser complètement la pdf $\hat{f}_{fp}^{\text{eul}}$, il est nécessaire de se donner une forme présumée pour la pdf $\hat{f}_{fp}^{\text{eul}}$. Cette dernière doit coïncider avec la vrai pdf en ce qui concerne tous les demi-flux (4.17) associés aux moments calculés par l'approche eulérienne.

Dans un premier temps nous avions choisi une forme présumée de pdf directement reliée aux valeurs à la face Γ_{lag} des moments calculés par l'eulérien (cf. § 4.2.3). Cette démarche, motivée par la possibilité de prendre une forme présumée de pdf dont les demi-flux permettent une prédition exacte des demi-flux incidents dans le domaine lagrangien, n'est valable que dans les zones homogènes de l'écoulement.

Les situations inhomogènes sont traitées par une méthodologie différente où les demi-flux incidents au domaine lagrangiens sont calculés à partir de la relation :

$$\mathcal{F}_\Gamma^-(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) = \mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) - \mathcal{F}_\Gamma^{\text{lag}+}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) \quad (4.18)$$

Les deux termes de droite de l'équation (4.18) sont connus et permettent ainsi un calcul aisément des demi-flux incidents au domaine lagrangien. Les flux $\mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t)$ sont en effet déjà calculés dans le modèle eulérien pour les variables jusqu'à l'ordre 2. Par exemple le flux concernant les contraintes cinétiques particulières sont les corrélations triples particule qui sont déjà calculées dans l'eulérien suivant leur modèle de fermeture (cf. § 3.2.5.3). Les demi-flux sortants du domaine lagrangien $\mathcal{F}_\Gamma^{\text{lag}+}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t)$ sont quant à eux calculés par la relation (4.13).

Pour injecter les particules numériques dans le domaine lagrangien en respectant ces demi-flux incidents il est alors nécessaire de choisir une forme présumée de pdf. Dans les situations inhomogènes les moments de la pdf d'injection ne sont pas directement donnés par les valeurs à la face Γ_{lag} des moments calculés par l'approche eulérienne (cas homogènes) mais calculés pour obtenir des demi-flux identiques à ceux donnés par (4.18).

4.3.3 Pdf d'injection présumée en situation inhomogène

Ayant pris le parti d'injecter les particules numériques selon une pdf de flux, il est nécessaire de s'assurer que les demi-flux incidents associés à cette pdf sont identiques aux demi-flux incidents devant être simulés par l'injection. Les demi-flux devant être simulés sont donnés par l'équation (4.18) pour les variables Ψ associées aux moments n_p , U_i et R_{ij} .

Le modèle de pdf choisi pour représenter les demi-flux est la pdf de Richman étendue au cas des écoulements gaz-particules (cf. Annexe) :

$$\hat{f}_{fp}^{\text{eul}}(\underline{x}, \underline{c}, t) = \frac{\hat{n}_p(\underline{x}, t)}{\sqrt{8\pi^3 \det(\hat{\underline{R}})}} \exp\left(-\frac{1}{2} \underline{c}^t \underline{c}'' \cdot \hat{\underline{R}}^{-1} \underline{c}''\right) \quad (4.19)$$

dont les demi-flux incidents peuvent être calculés explicitement à partir des moments présumés de cette pdf. Ces moments, qui ne sont pas encore connus et qui ne coïncident pas obligatoirement avec les moments de l'écoulement à l'endroit du couplage, sont calculés pour obtenir les bons demi-flux incidents de la pdf présumée. Nous les noterons \hat{n}_p , \hat{U}_i et \hat{R}_{ij} ces moments pour marquer leur différence avec les vrais moments du système. Le calcul des demi-flux incidents associés à (4.19) est développé au § 4.5 et fournit dans le cas général :

$$\mathcal{F}_{\Gamma}^{\text{eul-}}(1, \underline{x}_{\Gamma}, t) = \hat{n}_p \left[\sqrt{\hat{R}_{pp,nn}} J_1\left(\frac{\hat{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{\hat{R}_{pp,nn}}}\right) + (\hat{U}_p \cdot \underline{n}) J_0\left(\frac{\hat{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{\hat{R}_{pp,nn}}}\right) \right] \quad (4.20a)$$

$$\mathcal{F}_{\Gamma}^{\text{eul-}}(c_i, \underline{x}_{\Gamma}, t) = \hat{U}_i \mathcal{F}_{\Gamma}^{\text{eul-}}(1, \underline{x}_{\Gamma}, t) + \hat{n}_p \Theta_{i1} \hat{R}_{pp,nn} J_1\left(\frac{\hat{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{\hat{R}_{pp,nn}}}\right) \quad (4.20b)$$

$$\mathcal{F}_{\Gamma}^{\text{eul-}}(c_i'' c_j'', \underline{x}_{\Gamma}, t) = \hat{R}_{ij} \mathcal{F}_{\Gamma}^{\text{eul-}}(1, \underline{x}_{\Gamma}, t) + \hat{n}_p \Theta_{i1} \Theta_{j1} \hat{R}_{pp,nn} \sqrt{\hat{R}_{pp,nn}} J_1\left(\frac{\hat{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{\hat{R}_{pp,nn}}}\right) \quad (4.20c)$$

où J_0 et J_1 sont des fonctions explicites et $\underline{\Theta}$ est une matrice déterminée.

L'inversion d'un tel système n'est pas aisée car dans le cas général c'est un système non-linéaire à 28 inconnues. Des études qui n'ont pas encore été menées pourraient profiter de travaux analogues (Villedieu [1994]) pour prouver l'existence et l'unicité de telles solutions. Des considérations de convexité permettraient sans doute de résoudre le système par une méthode de Newton. Dans les cas sans effet de la turbulence pour lesquels ce système a été résolu, nous nous sommes contentés d'une solution explicite approchée (cf. chapitre 6)

Nous supposerons donc par la suite qu'il est possible de trouver des moments \hat{n}_p , \hat{U}_i et \hat{R}_{ij} pour lesquels les demi-flux incidents associés à la pdf (4.19) sont identiques aux demi-flux incidents donnés par la relation (4.18).

4.3.4 Flux de particules au travers de la surface de couplage

La pdf présumée étant maintenant choisie (que ce soit par le calcul des moments eulériens à la face de couplage pour les situations homogènes ou la résolution du système (4.20) pour les situations inhomogènes), il est possible d'exprimer de manière explicite le flux de particules au travers de la surface de couplage. Remarquons tout d'abord qu'à partir de l'équation (4.17) il est possible de définir la pdf du demi-flux incident (avec encore une fois un abus de langage car celle-ci n'est pas normalisée) par :

$$g_p^-(\underline{x}, \underline{c}, t) = |\underline{c}_p \cdot \underline{n}| \hat{f}_{fp}^{\text{eul}}(\underline{x}, \underline{c}, t) \text{ pour } \underline{c}_p \cdot \underline{n} < 0 \quad (4.21)$$

car $g_p^-(\underline{x}, \underline{c}, t) d\underline{c} dt dS$ représente bien le nombre probable de particules entrant dans le domaine lagrangien Ω_{lag} au travers l'élément de surface dS pendant la durée dt avec une "vitesse" $\underline{u} \in [\underline{c}, \underline{c} + d\underline{c}]$.

Le flux élémentaire de particules au travers l'élément de surface dS pendant la durée dt δN_p^- peut s'écrire sous la forme :

$$\delta N_p^- = \int_{\underline{c}_p \cdot \underline{n} < 0} g_p^-(\underline{x}_\Gamma, \underline{c}, t) d\underline{c} \cdot dS dt \quad (4.22a)$$

$$= \hat{n}_p \left[\sqrt{\hat{R}_{pp,nn}} J_1\left(\frac{\hat{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{\hat{R}_{pp,nn}}}\right) + (\hat{U}_p \cdot \underline{n}) J_0\left(\frac{\hat{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{\hat{R}_{pp,nn}}}\right) \right] dS dt \quad (4.22b)$$

$\delta \mathcal{N}_p^- = \delta N_p^- / \kappa$ fournit alors le nombre moyen de particules numériques à injecter lors de chaque pas de temps à travers l'élément de surface dS . Ce nombre n'étant en général pas entier, le nombre effectif de particules numériques injectées est donné par la partie entière de $\delta \mathcal{N}_p^-$ plus une éventuelle particule supplémentaire dont l'existence est donnée par comparaison de la partie fractionnaire avec un tirage aléatoire sur $[0, 1]$.

4.3.5 Simulation de la pdf incidente par une méthode de réjection

L'équation (4.22) permet de connaître le nombre de particules numériques à injecter chaque pas de temps à travers l'élément de surface de couplage. Il est alors nécessaire de doter chaque particule de propriétés (vitesses de la particule et du fluide vu) qui permettront de suivre en moyenne les propriétés du flux incident. Les propriétés des particules incidentes doivent donc être tirées aléatoirement en suivant la loi de probabilité donnée par :

$$g_p(\underline{c}) d\underline{c} = \frac{1}{\delta N_p^-} g_p^-(\underline{x}, \underline{c}, t) d\underline{c} = \frac{\hat{n}_p}{\delta N_p^- \sqrt{8\pi^3 \det(\hat{\underline{R}})}} |\underline{c}_p \cdot \underline{n}| \exp\left(-\frac{1}{2} \underline{c}^T \hat{\underline{R}}^{-1} \underline{c}\right) d\underline{c} \quad (4.23)$$

La simulation de la loi de probabilité (4.23) ne peut se faire par des changements de variables simples. Il est alors nécessaire de recourir à une méthode de simulation de variables aléatoires plus générale : la méthode de réjection. Déjà utilisée dans la résolution des collisions avec majorant de fréquence de collision (cf. § 2.8.3.3), cette méthode consiste à trouver une loi g_p^{ref} qui peut être facilement simulée et pour laquelle il est possible de trouver un réel α tel que pour tout \underline{c} :

$$g_p(\underline{c}) \leq \alpha g_p^{\text{ref}}(\underline{c}) \quad (4.24)$$

La méthode de réjection s'appuie alors sur le théorème dit de réjection (Graham and Méléard [1999]) : soit la séquence de variables aléatoires indépendantes $(\underline{c}_i)_{i \geq 1}$ de loi $g_p^{\text{ref}}(\underline{c}) d\underline{c}$ et $(z_i)_{i \geq 1}$ une séquence de tirages aléatoires indépendants distribués uniformément sur $[0, 1]$. Par construction, les deux variables définies par :

$$N = \inf \left\{ i \geq 1 \mid \alpha g_p^{\text{ref}}(\underline{c}_i) z_i \leq g_p(\underline{c}_i) \right\} \quad (4.25a)$$

$$\underline{c}^* = \underline{c}_N \quad (4.25b)$$

sont indépendantes, et de loi géométrique de moyenne α pour N et de loi $g_p(\underline{c}) d\underline{c}$ pour \underline{c}^* :

$$N \iff P(N = k) = \frac{1}{\alpha} \left(1 - \frac{1}{\alpha}\right)^{k-1} \quad (4.26a)$$

$$\underline{c}^* \iff g_p(\underline{c}) d\underline{c} \quad (4.26b)$$

Il est ainsi possible de simuler une loi quelconque en sur-échantillonnant (α fois) l'espace des réalisations et en décidant par comparaison à un tirage aléatoire uniforme quelles sont les réalisations à rejeter. Le paramètre α doit donc être pris le plus petit possible afin de réduire le coût de l'algorithme en minimisant le sur-échantillonnage.

Pour adapter cette méthode à la simulation de (4.23) il est donc nécessaire de trouver une loi de probabilité simple à simuler à laquelle est associée un réel α qui permet de majorer la pdf du flux incident. Un moyen simple de construire un tel couple est de choisir une vitesse normale maximum d'injection des particules v_{\max} sur laquelle est construite la pdf :

$$g_p^{\text{ref}}(\underline{c}) = v_{\max} \frac{1}{\delta N_p^-} f_{fp}^G(\underline{x}, \underline{c}, t) \quad (4.27)$$

La vitesse maximale est choisie en fonction des valeurs de la vitesse moyenne et de l'agitation, ainsi que de l'orientation de la surface de couplage. Cette vitesse maximale doit être suffisamment élevée car elle est la limite supérieure de vitesse d'injection.

Ce choix de majoration de la pdf des particules incidentes provient de la facilité à trouver une vitesse maximale d'injection ainsi que la possibilité de générer des vitesses fluctuantes suivant la loi de probabilité $g_p^{\text{ref}}(\underline{c})d\underline{c}$. Cette loi est en effet une loi gaussienne dont la matrice de covariance est donnée par $\underline{\underline{R}}$. Générer des variables aléatoires suivant cette loi est aisés. En partant d'un tirage de variables aléatoires indépendantes de loi normale, on obtient des variables suivant la loi gaussienne en multipliant le vecteur normal par la partie gauche de la décomposition de Choleski de $\underline{\underline{R}} =^t \underline{\underline{T}} \cdot \underline{\underline{T}}$:

$$\underline{X}_i \iff \mathbb{N}(\underline{0}, \underline{\underline{I}}_d) = \frac{1}{\sqrt{8\pi^3}} \exp\left(-\frac{\underline{X}_i^2}{2}\right) d\underline{X}_i \quad (4.28a)$$

$$\underline{Y}_i =^t \underline{\underline{T}} \cdot \underline{X}_i \iff \frac{1}{\sqrt{8\pi^3 \det(\underline{\underline{R}})}} \exp\left(-\frac{1}{2} \underline{Y}_i \cdot \underline{\underline{R}}^{-1} \cdot \underline{Y}_i\right) d\underline{Y}_i \quad (4.28b)$$

L'algorithme d'injection pour chaque particule numérique incidente est le suivant :

1. tirage aléatoire des vitesses fluctuantes $(\underline{u}_p'', \underline{u}_f'')$ suivant la loi de probabilité $g_p^{\text{ref}}(\underline{c})d\underline{c}$ en utilisant la propriété (4.28)
2. réjection des échantillons non-appropriés par comparaison de $-\underline{u}_p'' \cdot \underline{n}$ avec $v_{\max} z$, où z est un nombre aléatoire généré suivant une loi uniforme sur $[0, 1]$:
 - (a) si $-\underline{u}_p'' \cdot \underline{n} \geq v_{\max} z$ la particule est effectivement injectée dans le domaine lagrangien Ω_{lag} avec les vitesses $(\hat{\underline{U}}_p + \underline{u}_p'', \hat{\underline{U}}_f + \underline{u}_f'')$. Elle est ensuite avancée le long de sa trajectoire pour un temps aléatoire $\delta t^* \in [0, \delta t]$
 - (b) si $-\underline{u}_p'' \cdot \underline{n} < v_{\max} z$ la particule n'est pas injectée avec les vitesses générées précédemment. Le processus recommence alors au point 1 jusqu'à obtention de vitesses satisfaisant à la condition du point 2a

4.4 Mise en œuvre numérique du couplage pour l'approche eulérienne

4.4.1 Conditions de type flux

Dû fait de la discrétisation de type volumes-finis des équations eulériennes gouvernant le comportement de la phase dispersée dans Ω_{eul} , les conditions aux limites de couplage les plus naturelles pour le calcul

eulérien sont des conditions de type flux. Ce type de conditions aux limites a notamment été développé dans le couplage des équations de Boltzmann et Navier-Stokes (Le Tallec and Mallinger [1997]). Nous avons donc naturellement commencé à étudier ce genre de conditions de couplage dans les cas d'écoulements homogènes cisaillés.

Les conditions de type flux sont obtenues en séparant chaque flux total de la variable Ψ suivant le demi-flux entrant et le demi-flux incident du domaine lagrangien Ω_{lag} :

$$\mathcal{F}_\Gamma(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) = \mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) + \mathcal{F}_\Gamma^{\text{lag}+}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) \quad (4.29)$$

Les demi-flux sortants du domaine lagrangien $\mathcal{F}_\Gamma^{\text{lag}+}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t)$ sont calculés explicitement lors de la simulation lagrangienne stochastique par une somme sur toutes les particules numériques sortantes du domaine lagrangien au travers de l'élément de surface de couplage dS pendant dt :

$$\mathcal{F}_\Gamma^{\text{lag}+}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) = \frac{\kappa}{dSdt} \sum_i \Psi_i \quad (4.30)$$

Les demi-flux incidents sont quant à eux calculés à partir de la forme présumée de la pdf du domaine eulérien. Les informations eulériennes sont ainsi prises en compte dans le couplage puisqu'elles déterminent les demi-flux incidents dans le domaine lagrangien.

Cette méthodologie est ainsi dépendante de la possibilité de représenter correctement les demi-flux incidents au domaine lagrangien à partir d'informations eulériennes. Si tel est le cas dans le couplage Boltzmann/Navier-Stokes ou encore dans les écoulements homogènes cisaillés, il ne nous pas été possible de trouver une pdf présumée pouvant prédire fidèlement les demi-flux incidents pour les zones inhomogènes d'un écoulement (car les corrélations triples ne peuvent être prises en compte). La méthodologie mise en place pour un couplage du lagrangien vers l'eulérien par des conditions de type flux est donc limitée aux zones homogènes.

En effet, en présence d'inhomogénéité, la relation (4.29) est déjà utilisée pour obtenir les demi-flux incidents au domaine lagrangien. Si cette même relation est ensuite utilisée pour obtenir les flux à intégrer dans le calcul eulérien, le couplage n'est plus effectif puisque celui-ci revient à écrire :

$$\mathcal{F}_\Gamma(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) = \mathcal{F}_\Gamma(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) \quad (4.31)$$

Pour obtenir un couplage effectif il est nécessaire de pouvoir calculer correctement les demi-flux incidents au domaine lagrangien à partir de donnée eulériennes, ce que n'avons pas pu exhiber dans les zones inhomogènes. Les conditions de type flux semblent donc vouées aux zones homogènes de l'écoulement. Dans les cas contraires, ces dernières semblent ne pas être assez robustes pour imposer une solution au problème couplé.

4.4.2 Conditions de Dirichlet

Les conditions les plus robustes à imposer au calcul eulérien sont des conditions de Dirichlet :

$$\langle \Psi \rangle_p^{\text{eul}} = \langle \Psi \rangle_p^{\text{lag}} \quad (4.32)$$

La principale difficulté de telles conditions réside dans l'obtention des moments lagrangiens $\langle \Psi \rangle_p^{\text{lag}}$ au niveau de l'interface de couplage Γ_{eul} . Deux facteurs peuvent altérer une bonne prédiction de ces derniers :

1. le bruit statistique de la simulation lagrangienne (qui est commune avec les conditions de type flux).
Lors d'une simulation stochastique il est en effet indispensable de limiter le nombres de particules numériques pour des raisons de coût de calcul. Une limite inférieure du nombre de particules numériques minimum admise pour obtenir des statistiques instationnaires raisonnablement bruitées est d'une quinzaine de particules par cellule de calcul des statistiques. Ces cellules sont bien sûr dimensionnées pour obtenir des profils représentatifs de l'écoulement. Elles doivent donc être plus petites que les échelles macroscopiques de l'écoulement, et plus petites dans les zones hors-équilibre de l'écoulement. Les particules possédant un poids constant, imposer un nombre minimum de particules proche de l'interface de couplage peut donc engendrer une pénalisation de la simulation lagrangienne (il serait nécessaire de considérer plus de particules numériques pour représenter l'écoulement).
2. la prédition de $\langle \Psi \rangle_p^{\text{lag}}$ à partir des profils des moments lagrangiens. La simulation lagrangienne permet d'obtenir les moments de l'écoulement aux centres des cellules statistiques. Il est alors nécessaire de reconstruire à partir des profils la valeur du moment à la face Γ_{eul} . Il est à priori préférable d'effectuer une interpolation à la face de couplage plutôt qu'une extrapolation. Une interpolation nécessite cependant d'avoir un recouvrement suffisant des domaines eulérien et lagrangien. Une amélioration de la prédition des conditions de Dirichlet impose donc un temps de calcul plus important.

Les conditions de type Dirichlet restent tout de même les conditions de couplage les plus robustes dans les cas de couplage en zone inhomogène. Le premier point concernant les erreurs statistiques peut de plus être éludé dans les cas d'écoulements stationnaires. Il est en effet possible dans ces cas d'effectuer un couplage entre approches convergées en prenant des temps de couplage $m_{\text{eul}} dt_{\text{eul}}$ et $m_{\text{lag}} dt_{\text{lag}}$ suffisamment longs. Nous ne nous sommes intéressé qu'à la faisabilité et la convergence de la méthodologie de couplage évoquée dans ce chapitre, et les points plus numériques, bien que de première importance, ne sont pas traités dans la thèse. Des études plus approfondies seront nécessaires pour clarifier les quelques problématiques dégagées ici.

4.5 Demi-flux incidents associés à la pdf de Richman

4.5.1 Définition des demi-flux entrants

Les demi-flux entrants dans le domaine lagrangien sont définis pour chaque variable Ψ par :

$$\mathcal{F}_{\Gamma}^{\text{eul}-}(\Psi, \underline{x}_{\Gamma}, t) = \int_{\underline{c}_p \cdot \underline{n} < 0} (\underline{c}_p \cdot \underline{n}) \Psi(\underline{c}_f, \underline{c}_p) \hat{f}_{fp}^{\text{eul}}(\underline{c}_f, \underline{c}_p, \underline{x}_{\Gamma}, t) d\underline{c}_f d\underline{c}_p \quad (4.33)$$

où $\hat{f}_{fp}^{\text{eul}}(\underline{c}_f, \underline{c}_p, \underline{x}_{\Gamma}, t)$ est l'expression de la pdf présumée à partir des moments donnés par le calcul eulérien à la face de couplage (en \underline{x}_{Γ}) à l'instant t .

4.5.2 Expression de la pdf présumée à partir des moments Eulériens

On prend pour pdf de référence dans le calcul des demi-flux la pdf de Richman étendue aux écoulements gaz-solides (cf. Annexe) valable jusqu'à l'ordre 2, et qui permet de prendre en compte l'anisotropie des mouvements fluctuants :

$$\hat{f}_{fp}^{\text{eul}}(\underline{c}_f, \underline{c}_p, \underline{x}, t) = \frac{n_p(\underline{x}, t)}{\sqrt{8\pi^3 \det(\underline{\underline{R}})}} \exp\left(-\frac{1}{2} \underline{c}'' \underline{\underline{R}}^{-1} \underline{c}''\right) \quad (4.34)$$

4.5.3 Forme générique des demi-flux

Les variables Eulériennes considérées par notre modèle sont des moments entiers des composantes des vitesses particule et fluide vu, ce qui permet d'exprimer les fonctions générant ces moments sous la forme générale :

$$\Psi_{\{\alpha_i\}} = \prod_i c''_{\alpha_i} \quad (4.35)$$

Les demi-flux à calculer s'écrivent donc :

$$\mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) = \frac{n_p(\underline{x}_\Gamma, t)}{\sqrt{8\pi^3 \det(\underline{\underline{R}})}} \int_{\underline{c}_p \cdot \underline{n} < 0} (\underline{c}_p \cdot \underline{n}) \prod_i c''_{\alpha_i} \exp\left(-\frac{1}{2} {}^t \underline{c}'' \underline{\underline{R}}^{-1} \underline{c}''\right) d\underline{c} \quad (4.36)$$

4.5.4 Expression théorique des demi-flux

4.5.4.1 Notations

Dans la suite nous utiliserons les notations suivantes :

$$I_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} z^m e^{-z^2/2} dz \quad (4.37)$$

$$J_m(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{z < -\omega} z^m e^{-z^2/2} dz = \frac{(-1)^m}{\sqrt{2\pi}} \int_{z > \omega} z^m e^{-z^2/2} dz \quad (4.38)$$

I_m est nul pour tout m impair (non-nul), et par conséquent seules les intégrales I_{2p} sont intéressantes. Il est possible de démontrer par récurrence la formule suivante :

$$\begin{cases} I_{2p} &= \frac{(2p)!}{2^p p!} \\ I_{2p+1} &= 0 \end{cases} \quad (4.39)$$

De même, par récurrence, les intégrales $J_m(\omega)$ peuvent s'exprimer selon :

$$J_m(\omega) = (-1)^m [P_m(\omega) e^{-\omega^2/2} + C_m h(\omega)] \quad (4.40)$$

avec

$$\begin{cases} h(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\omega}^{+\infty} e^{-z^2/2} dz \\ P_m(\omega) &= \frac{\omega^{m-1}}{\sqrt{2\pi}} + (m-1)P_{m-2}(\omega) \\ P_0(\omega) &= 0 \\ P_1(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \\ C_{2q} &= \frac{(2q)!}{2^q q!} \\ C_{2q+1} &= 0 \end{cases} \quad (4.41)$$

4.5.4.2 Passage dans le repère lié à la normale

Le premier problème d'intégration réside dans le fait que les bornes des intégrales sont inter-dépendantes et ne permettent pas l'intégration classique de la forme gaussienne de $-\infty$ à $+\infty$. L'idée est alors de se placer dans un repère lié à la normale \underline{n} pour n'avoir d'intégrale à bornes définies que pour la seule composante normale des vitesses fluctuantes particule et fluide vu.

Pour passer dans le repère lié à la normale, il est d'abord nécessaire de définir le repère $(\underline{n}, \underline{t}_1, \underline{t}_2)$. La définition des vecteurs tangents \underline{t}_1 et \underline{t}_2 n'est pas unique mais n'affecte pas l'intégration des demi-flux. Le couple $(\underline{t}_1, \underline{t}_2)$ est donc choisi de manière *arbitraire*. Le changement de repère affecte de plus les vitesses fluctuantes particule et fluide vu. Comme nos vecteurs \underline{U} et \underline{c}'' représentent à la fois la vitesse particule et la vitesse fluide la matrice de changement de repère est donc une matrice de dimension 6. Une matrice de passage dans le repère lié à la normale peut s'exprimer sous la forme générique :

$$\underline{\underline{\Lambda}} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi & -\sin \varphi & -\cos \theta \cos \varphi & 0 & 0 & 0 \\ \sin \theta \sin \varphi & \cos \varphi & -\cos \theta \sin \varphi & 0 & 0 & 0 \\ \cos \theta & 0 & \sin \theta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sin \theta \cos \varphi & -\sin \varphi & -\cos \theta \cos \varphi \\ 0 & 0 & 0 & \sin \theta \sin \varphi & \cos \varphi & -\cos \theta \sin \varphi \\ 0 & 0 & 0 & \cos \theta & 0 & \sin \theta \end{pmatrix} \quad (4.42)$$

où θ et φ sont les coordonnées angulaires polaires du vecteur normal dans le repère de référence.

Cette matrice de passage permet d'écrire :

$$\underline{c}'' = \underline{\underline{\Lambda}} \underline{v} \quad (4.43)$$

avec pour les composantes particule et fluide

$$\underline{c}_p'' = v_1 \underline{n} + v_2 \underline{t}_1 + v_3 \underline{t}_2 \quad (4.44a)$$

$$\underline{c}_f'' = v_4 \underline{n} + v_5 \underline{t}_1 + v_6 \underline{t}_2 \quad (4.44b)$$

Les bornes de l'intégrale multiple sont donc toutes infinies excepté pour la composante v_1 :

$$\mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul-}}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) = \frac{n_p(\underline{x}_\Gamma, t)}{\sqrt{8\pi^3 \det(\underline{\underline{R}})}} \int_{v_1 < -\underline{U}_p \cdot \underline{n}} (v_1 + \underline{U}_p \cdot \underline{n}) \prod_i (\underline{\underline{\Lambda}} \underline{v})_{\alpha_i} \exp\left(-\frac{1}{2} \underline{v}^t \underline{\underline{\Lambda}} \underline{\underline{R}}^{-1} \underline{\underline{\Lambda}} \underline{v}\right) d\underline{v} \quad (4.45)$$

On définit alors la matrice $\underline{\underline{\Delta}}$:

$$\underline{\underline{\Delta}} = {}^t \underline{\underline{\Lambda}} \underline{\underline{R}}^{-1} \underline{\underline{\Lambda}} \quad (4.46)$$

L'inverse de cette matrice possède une signification physique simple car, au vu de la relation

$$\underline{\underline{\Delta}}^{-1} = {}^t \underline{\underline{\Lambda}} \underline{\underline{R}} \underline{\underline{\Lambda}} \quad (4.47)$$

la matrice $\underline{\underline{\Delta}}^{-1}$ représente le tenseur des contraintes cinétiques exprimé dans le repère lié à la normale.

4.5.4.3 Passage à une somme de carrés

Pour arriver à exprimer les demi-flux de manière explicite il alors nécessaire d'exprimer la somme ${}^t \underline{v} \underline{\underline{\Delta}} \underline{v}$ comme une somme de carrés en éliminant les termes croisés :

$$\sum_{i,j} \Delta_{ij} v_i v_j = \sum_k C_k \tilde{v}_k^2 \quad (4.48)$$

On définit $\underline{\underline{Q}}$ la matrice de changement de variable telle que la composante normale est préservée :

$$\tilde{\underline{v}} = \underline{\underline{Q}} \underline{v} \quad (4.49a)$$

$$v_1 = \tilde{v}_1 \quad (4.49b)$$

et il est possible de montrer que cette matrice de changement de variable peut être prise comme triangulaire inférieure avec une diagonale de 1, et donc le jacobien de la transformation est égal à l'unité. Dans la suite, pour la clarté des notations, nous noterons σ_k^2 l'inverse de C_k . La matrice $\underline{\underline{Q}}$ est donc définie pour obtenir la relation :

$${}^t \underline{\underline{\tilde{v}}} {}^t \underline{\underline{Q}}^{-1} \underline{\underline{Q}}^{-1} \underline{\underline{\tilde{v}}} = \sum_k \frac{\tilde{v}_k^2}{\sigma_k^2} \quad (4.50)$$

Nous noterons $\underline{\underline{\Theta}} = \underline{\underline{\Lambda}} \underline{\underline{Q}}^{-1}$ la matrice de passage du repère usuel au repère $\tilde{\cdot}$. Le demi-flux de la variable Ψ se réécrit ainsi :

$$\mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul-}}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) = \frac{n_p(\underline{x}_\Gamma, t)}{\sqrt{8\pi^3 \det(\underline{\underline{R}})}} \int_{\tilde{v}_1 < -\underline{U}_p \cdot \underline{n}} (\tilde{v}_1 + \underline{U}_p \cdot \underline{n}) \prod_i (\underline{\underline{\Theta}} \underline{\underline{\tilde{v}}})_{\alpha_i} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_k \frac{\tilde{v}_k^2}{\sigma_k^2}\right) d\underline{\underline{\tilde{v}}} \quad (4.51)$$

Enfin, en effectuant le changement de variable

$$\forall k, z_k = \frac{\tilde{v}_k}{\sigma_k} \quad (4.52)$$

dont le Jacobien est donné par (cf § 4.5.4.5) :

$$J = \left(\prod_k \sigma_k \right)^{-1} = \left(\sqrt{\det(\underline{\underline{R}})} \right)^{-1} \quad (4.53)$$

l'expression du demi-flux est :

$$\mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul-}}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) = \frac{n_p(\underline{x}_\Gamma, t)}{\sqrt{8\pi^3}} \int_{z_1 < -\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sigma_1}} (\sigma_1 z_1 + \underline{U}_p \cdot \underline{n}) \prod_i (\Theta_{\alpha_i k} \sigma_k z_k) \exp\left(-\frac{z \cdot \underline{z}}{2}\right) dz \quad (4.54)$$

4.5.4.4 Réécriture du produit issu des changements de variables

Pour avancer toujours plus en avant dans l'expression des demi-flux, il est maintenant nécessaire d'expliquer le produit $\prod_i (\Theta_{\alpha_i k} \sigma_k z_k)$. En notant n le cardinal de la famille $\{\alpha_i\}$, ce qui correspond à l'ordre du moment considéré, le produit précédent peut se décomposer en une somme de monômes de degré n (et uniquement de degré n). On note $a_{p,q,r,s,t}(\{\alpha_i\})$ le coefficient du monôme de puissance p en la variable z_2 , q en z_3 , ... (la puissance en la variable z_1 étant $n - p - q - r - s - t$) associé à la famille $\{\alpha_i\}$. Le produit se réécrit donc sous la forme :

$$\prod_i (\Theta_{\alpha_i k} \sigma_k z_k) = a_{p,q,r,s,t}(\{\alpha_i\}) (\sigma_1 z_1)^{n-(p+q+r+s+t)} (\sigma_2 z_2)^p (\sigma_3 z_3)^q (\sigma_4 z_4)^r (\sigma_5 z_5)^s (\sigma_6 z_6)^t \quad (4.55)$$

avec $p + q + r + s + t \leq n$.

Les intégrations suivant les variables autres que z_1 vont donner des intégrales I_m qui sont nulles pour m impair. On ne garde donc que les valeurs paires de p, q, r, s et t . Pour la concision des notations, nous utiliserons n^* comme raccourci de $n - (2p + 2q + 2r + 2s + 2t)$. Le demi-flux de la variable Ψ s'exprime donc suivant la formule :

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul-}}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) &= n_p(\underline{x}_\Gamma, t) a_{2p, 2q, 2r, 2s, 2t}(\{\alpha_i\}) \sigma_1^{n^*} \sigma_2^{2p} \sigma_3^{2q} \sigma_4^{2r} \sigma_5^{2s} \sigma_6^{2t} \\ &\quad I_{2p} I_{2q} I_{2r} I_{2s} I_{2t} \left[\sigma_1 J_{n^*+1} \left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sigma_1} \right) - (\underline{U}_p \cdot \underline{n}) J_{n^*} \left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sigma_1} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.56)$$

4.5.4.5 Propriétés des σ_k

Notons $\underline{\underline{\sigma}}$ la matrice diagonale composée des σ_k^2 . La première propriété intéressante de cette matrice est la valeur de son déterminant. D'après (4.50) :

$$\underline{\underline{\sigma}}^2 = \underline{\underline{Q}} \underline{\underline{\Delta}}^{-1} {}^t \underline{\underline{Q}} \quad (4.57)$$

or le Jacobien du changement de variable associé à $\underline{\underline{Q}}$ est égal à 1, de même que pour la matrice $\underline{\underline{\Delta}}$. Il est donc possible d'écrire :

$$\det(\underline{\underline{\sigma}}^2) = \det(\underline{\underline{Q}} \underline{\underline{\Delta}}^{-1} {}^t \underline{\underline{Q}}) = \det(\underline{\underline{\Delta}}^{-1}) = \det(\underline{\underline{R}}) \quad (4.58)$$

et comme $\underline{\underline{\sigma}}$ est diagonale :

$$\det(\underline{\underline{\sigma}}) = \prod_k \sigma_k = \sqrt{\det(\underline{\underline{R}})} \quad (4.59)$$

La valeur de la i-ème composante σ_i^2 peut être explicitée à partir de la relation (4.57) :

$$\sigma_i^2 = \left(\underline{\underline{Q}} \underline{\underline{\Delta}}^{-1} {}^t \underline{\underline{Q}} \right)_{ii} = Q_{ik} \Delta_{kl}^{-1} Q_{il} \quad (4.60)$$

Parmi ces composantes, la première composante σ_1^2 est particulièrement importante car elle apparaît dans toutes les expressions de demi-flux. Celle-ci possède de plus une signification physique claire car, en utilisant le caractère triangulaire inférieur de $\underline{\underline{Q}}$, elle s'exprime de manière simple :

$$\sigma_1^2 = Q_{1k} \Delta_{kl}^{-1} Q_{1l} = \Delta_{11}^{-1} \quad (4.61)$$

La composante σ_1^2 s'interprète donc comme la contrainte cinétique particulière suivant la direction normale à la face de couplage. C'est pourquoi nous utiliserons par la suite la notation :

$$\sigma_1^2 = R_{pp,nn} \quad (4.62)$$

4.5.5 Cas général

Les demi-flux associés à la pdf de Richman sont ici explicités pour les moments considérés dans l'approche eulérienne, c'est-à-dire pour les moments jusqu'à l'ordre deux. Ceci permettra de valider les expressions théoriques des demi-flux par une comparaison directe avec les résultats obtenus dans le cas du couplage Boltzmann/Navier-Stokes réalisé par Bourgat et al. [1994].

4.5.5.1 Demi-flux de densité

Demi-flux associé à la pdf de Richman Le demi-flux de densité est obtenu pour $\Psi = 1$, moment d'ordre 0. Dans ce cas tous les coefficients $a_{2p,2q,2r,2s,2t}$ sont nuls excepté le premier $a_{0,0,0,0,0} = 1$. L'expression du demi-flux masse associé à la pdf de Richman est donc :

$$\mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul-}}(1, \underline{x}_\Gamma, t) = n_p(\underline{x}_\Gamma, t) \left[\sigma_1 J_1\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sigma_1}\right) + (\underline{U}_p \cdot \underline{n}) J_0\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sigma_1}\right) \right] \quad (4.63a)$$

$$= n_p(\underline{x}_\Gamma, t) \left[\sqrt{R_{pp,nn}} J_1\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) + (\underline{U}_p \cdot \underline{n}) J_0\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) \right] \quad (4.63b)$$

Comparaison au couplage Boltzmann/Navier-Stokes Des calculs identiques aux calculs exposés dans ce chapitre ont été menés par Bourgat et al. [1994] dans le cadre du couplage des approches Boltzmann et Navier-Stokes pour les problèmes de rentrée atmosphérique. De manière identique à notre méthode, ceux-ci implémentent les conditions aux limites pour le calcul Navier-Stokes en se servant pour partie des demi-flux issus des moments calculés lors de la simulation Navier-Stokes (l'autre partie provenant de la simulation par DSMC de l'équation de Boltzmann). Pour cela ils explicitent, à partir du modèle BGK, une pdf f_{NS} dont l'équation d'évolution des premiers moments (la densité ρ , la vitesse moyenne \underline{u} et l'énergie cinétique totale E_c) sont exactement les équations de Navier-Stokes. L'approximation BGK permet ainsi d'expliciter les demi-flux associé à cette pdf comme la somme d'un demi-flux convectif et d'un demi-flux visqueux. L'existence de termes d'accélération non nuls dans l'équation d'évolution de la pdf (2.11), contrairement au cas monophasique, empêche toutefois d'effectuer un travail identique dans notre cas. La comparaison des demi-flux associés à notre pdf de référence sont donc à comparer avec les flux convectifs issus du couplage Boltzmann/Navier-Stokes.

Le moment d'ordre 2 considéré dans l'approche Navier-Stokes étant la température, nos comparaisons se feront en prenant la limite isotrope dans nos formules. Le tenseur $\underline{\underline{R}}$ est donc pris isotrope ce qui a comme conséquence que la matrice Δ est une matrice diagonale et donc que la matrice $\underline{\underline{Q}}$ est la matrice unité ($\underline{\underline{Q}} \equiv \underline{\underline{I}}$). Le couplage Boltzmann/Navier-Stokes étant de plus réalisé dans un cas 2D, les deux vecteurs \underline{t}_1 et \underline{t}_2 sont formellement similaires au vecteur tangent du couplage monophasique noté $\underline{\tau}$. La matrice de passage dans le repère lié à la normale est notée $\underline{\underline{\text{Rot}}}$. Les équivalences formelles entre nos expressions et le couplage Navier-Stokes sont donc :

$$n_p \equiv \rho \quad (4.64a)$$

$$\underline{U}_p \equiv \underline{u} \quad (4.64b)$$

$$R_{pp,nn} \equiv RT \quad (4.64c)$$

$$\underline{\underline{\Lambda}} \equiv \underline{\underline{\text{Rot}}} \quad (4.64d)$$

On retrouve donc une équivalence formelle entre le demi-flux de densité associé à la pdf de Richman dans le cas isotrope et le demi-flux convectif de masse associé à f_{NS} :

$$\underline{F}_1^c \cdot \underline{n} = \rho \left[\sqrt{RT} J_1 \left(\frac{\underline{u} \cdot \underline{n}}{\sqrt{RT}} \right) + (\underline{u} \cdot \underline{n}) J_0 \left(\frac{\underline{u} \cdot \underline{n}}{\sqrt{RT}} \right) \right] \quad (4.65)$$

4.5.5.2 Demi-flux de vitesse moyenne

Demi-flux associé à la pdf de Richman Le demi-flux de la composante i de la quantité de mouvement est obtenu pour $\Psi = c_i = U_i + c''_i$. Le demi-flux est donc la somme d'une contribution provenant du demi-flux de densité $(U_{p,i} \mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(1, \underline{x}_\Gamma, t))$ et d'une contribution provenant du mouvement fluctuant $\mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(c''_i, \underline{x}_\Gamma, t)$. Pour cette dernière les coefficients $a_{2p,2q,2r,2s,2t}$ sont identiquement nul sauf $a_{0,0,0,0,0} = \Theta_{i1}$, et cette-fois ci le moment considéré est d'ordre 1 :

$$\mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(c_i, \underline{x}_\Gamma, t) = U_i \mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(1, \underline{x}_\Gamma, t) + n_p(\underline{x}_\Gamma, t) \Theta_{i1} \left[\sigma_1^2 J_2 \left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sigma_1} \right) + \sigma_1 (\underline{U}_p \cdot \underline{n}) J_1 \left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sigma_1} \right) \right] \quad (4.66)$$

qui se simplifie en utilisant les propriétés des $J_m(\omega)$:

$$\mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(c_i, \underline{x}_\Gamma, t) = U_i \mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(1, \underline{x}_\Gamma, t) + n_p(\underline{x}_\Gamma, t) \Theta_{i1} R_{pp,nn} J_1 \left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}} \right) \quad (4.67)$$

Ecriture matricielle Il est possible de réécrire l'expression (4.67) sous forme matricielle. En utilisant :

$$U_{p,i} = \underline{U}_p \cdot \underline{e}_i = (\underline{U}_p \cdot \underline{n}) \underline{n} \cdot \underline{e}_i + (\underline{U}_p \cdot \underline{t}_1) \underline{t}_1 \cdot \underline{e}_i + (\underline{U}_p \cdot \underline{t}_2) \underline{t}_2 \cdot \underline{e}_i \quad (4.68a)$$

$$= \Lambda_{1i} \underline{U}_p \cdot \underline{n} + \Lambda_{2i} \underline{U}_p \cdot \underline{t}_1 + \Lambda_{3i} \underline{U}_p \cdot \underline{t}_2 \quad (4.68b)$$

ainsi que $\Theta_{i1} = \Lambda_{ik} Q_{k1}$ le demi-flux de vitesse moyenne des particules associé à la pdf de Richman peut s'écrire :

$$\underline{\mathcal{F}}_{\Gamma}^{\text{eul-}}(\underline{U}_p, \underline{x}_{\Gamma}, t) = n_p(\underline{x}_{\Gamma}, t) \underline{\underline{\Lambda}} \begin{pmatrix} [(\underline{U}_p \cdot \underline{n})(\underline{U}_p \cdot \underline{n}) + Q_{11} R_{pp,nn}] J_0\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) + \sqrt{R_{pp,nn}} (\underline{U}_p \cdot \underline{n}) J_1\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) \\ [(\underline{U}_p \cdot \underline{n})(\underline{U}_p \cdot \underline{t}_1) + Q_{11} R_{pp,nn}] J_0\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) + \sqrt{R_{pp,nn}} (\underline{U}_p \cdot \underline{t}_1) J_1\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) \\ [(\underline{U}_p \cdot \underline{n})(\underline{U}_p \cdot \underline{t}_2) + Q_{11} R_{pp,nn}] J_0\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) + \sqrt{R_{pp,nn}} (\underline{U}_p \cdot \underline{t}_2) J_1\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) \end{pmatrix} \quad (4.69)$$

Comparaison au couplage Boltzmann/Navier-Stokes Dans le cas où les données du calcul sont prises formellement équivalentes au cas du couplage Boltzmann/Navier-Stokes, l'expression du demi-flux de vitesse moyenne est :

$$\underline{\mathcal{F}}_{\Gamma}^{\text{eul-}}(m_p \underline{U}_p, \underline{x}_{\Gamma}, t) = n_p m_p \underline{\underline{\Lambda}} \begin{pmatrix} [(\underline{U}_p \cdot \underline{n})(\underline{U}_p \cdot \underline{n}) + R_{pp,nn}] J_0\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) + \sqrt{R_{pp,nn}} (\underline{U}_p \cdot \underline{n}) J_1\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) \\ [(\underline{U}_p \cdot \underline{n})(\underline{U}_p \cdot \underline{t}_1)] J_0\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) + \sqrt{R_{pp,nn}} (\underline{U}_p \cdot \underline{t}_1) J_1\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) \\ [(\underline{U}_p \cdot \underline{n})(\underline{U}_p \cdot \underline{t}_2)] J_0\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) + \sqrt{R_{pp,nn}} (\underline{U}_p \cdot \underline{t}_2) J_1\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) \end{pmatrix} \quad (4.70)$$

Cette dernière forme est formellement identique à l'expression obtenue dans le cas du couplage Boltzmann/Navier-Stokes 2D pour la partie convective :

$$\begin{pmatrix} \underline{F}_2^c \cdot \underline{n} \\ \underline{F}_3^c \cdot \underline{n} \end{pmatrix} = \rho \underline{\underline{R}_{\text{Rot}}} \begin{pmatrix} [RT + \underline{u} \cdot \underline{n}^2] J_0\left(\frac{\underline{u} \cdot \underline{n}}{\sqrt{RT}}\right) + \sqrt{RT} \underline{u} \cdot \underline{n} J_1\left(\frac{\underline{u} \cdot \underline{n}}{\sqrt{RT}}\right) \\ [\underline{u} \cdot \underline{n} \cdot \underline{u} \cdot \underline{\tau}] J_0\left(\frac{\underline{u} \cdot \underline{n}}{\sqrt{RT}}\right) + \sqrt{RT} \underline{u} \cdot \underline{\tau} J_1\left(\frac{\underline{u} \cdot \underline{n}}{\sqrt{RT}}\right) \end{pmatrix} \quad (4.71)$$

4.5.5.3 Demi-flux de corrélations de vitesses fluctuantes

Demi-flux associé à la pdf de Richman Le modèle eulérien considéré est un modèle à l'ordre deux, il est nécessaire de s'intéresser aux demi-flux des corrélations de vitesses fluctuantes. Ceux-ci sont obtenus à partir de $\Psi = c_i'' c_j''$. L'ordre étant maintenant de 2, les coefficients $a_{2p,2q,2r,2s,2t}$ sont non-nuls pour une des valeurs (p, q, r, s, t) égale à un et les autres nulles. Nous noterons pour simplifier a_k la valeur de ce coefficient pour la k -ième composante non-nulle, *i.e.* $a_1 = a_{0,0,0,0,0}$, $a_2 = a_{2,0,0,0,0}$, $a_3 = a_{0,2,0,0,0} \dots$ Avec ces notations, les valeurs des coefficients non-nuls sont données par :

$$a_k(c_i'' c_j'') = \Theta_{ik} \Theta_{jk} \quad (4.72)$$

Le demi-flux de corrélation de vitesse fluctuante est alors donné par :

$$\begin{aligned} \underline{\mathcal{F}}_{\Gamma}^{\text{eul-}}(c_i'' c_j'', \underline{x}_{\Gamma}, t) &= n_p a_0(c_i'' c_j'') \sigma_1^2 \left[\sigma_1 J_3\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) + (\underline{U}_p \cdot \underline{n}) J_1\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) \right] \\ &+ n_p m_p \sum_{k \neq 1} a_k \sigma_k^2 \left[\sigma_1 J_1\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) + (\underline{U}_p \cdot \underline{n}) J_0\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) \right] \end{aligned} \quad (4.73)$$

En remarquant que :

$$n_p \langle c_i'' c_j'' \rangle_p = a_k \sigma_k^2 \quad (4.74a)$$

$$\frac{1}{m_p} \mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(1, \underline{x}_\Gamma, t) = n_p \left[\sqrt{R_{pp,nn}} J_1\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) + (\underline{U}_p \cdot \underline{n}) J_0\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) \right] \quad (4.74b)$$

$$J_3(\omega) = (\omega^2 + 2) J_1(\omega) \quad (4.74c)$$

$$J_2(\omega) = -\omega J_1(\omega) + J_0(\omega) \quad (4.74d)$$

le demi-flux de corrélations de vitesse fluctuante associé à la pdf de Richman peut s'écrire :

$$\mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(c_i'' c_j'', \underline{x}_\Gamma, t) = R_{ij} \mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(1, \underline{x}_\Gamma, t) + n_p \Theta_{i1} \Theta_{j1} R_{pp,nn} \sqrt{R_{pp,nn}} J_1\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) \quad (4.75)$$

Comparaison au couplage Boltzmann/Navier-Stokes La comparaison n'est cette fois-ci pas directe car dans le couplage Boltzmann/Navier-Stokes considéré seule l'énergie cinétique totale est résolue par le code Navier-Stokes. On trouve ainsi dans Bourgat et al. [1994] uniquement l'expression du demi-flux d'énergie cinétique totale. L'expression du demi-flux d'énergie cinétique particulaire est donné dans notre cas par :

$$\mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(\underline{c}_p \cdot \underline{c}_p) = \underline{U}_p \cdot \underline{U}_p \mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(1) + 2U_{p,i} \mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(c_{p,i}'') + \mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(c_{p,i}'' c_{p,i}'') \quad (4.76)$$

En notant N la dimension de l'espace physique considéré ($N = 3$ dans nos cas et $N = 2$ pour le couplage Boltzmann/Navier-Stokes), on obtient :

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(\underline{c}_p \cdot \underline{c}_p) &= \frac{n_p m_p}{2} [(N+2)R_{pp,nn} + U_p^2] (\underline{U}_p \cdot \underline{n}) J_0\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) \\ &\quad + \frac{n_p m_p}{2} [(N+1)R_{pp,nn} + U_p^2] \sqrt{R_{pp,nn}} J_1\left(\frac{\underline{U}_p \cdot \underline{n}}{\sqrt{R_{pp,nn}}}\right) \end{aligned} \quad (4.77)$$

On retrouve ainsi une expression formellement identique au cas du couplage Boltzmann/Navier-Stokes (en dimension 2) :

$$F_A^c \cdot \underline{n} = \frac{\rho}{2} \left([4RT + (\underline{u} \cdot \underline{n})^2 + (\underline{u} \cdot \underline{\tau})^2] (\underline{u} \cdot \underline{n}) J_0\left(\frac{\underline{u} \cdot \underline{n}}{\sqrt{RT}}\right) + [3RT + (\underline{u} \cdot \underline{n})^2 + (\underline{u} \cdot \underline{\tau})^2] \sqrt{RT} J_1\left(\frac{\underline{u} \cdot \underline{n}}{\sqrt{RT}}\right) \right) \quad (4.78)$$

4.5.5.4 Conclusions

Les calculs menés dans le cadre de notre approche hybride concernant les demi-flux associés à la pdf de Richman permettent donc, dans un cas simplifié, de retrouver des expressions formellement identiques à des résultats pré-existants concernant une approche de couplage similaire à la notre dans un cas monophasique. Les demi-flux présentés dans ce chapitre peuvent donc être perçus comme une double extension des résultats issus du couplage Boltzmann/Navier-Stokes présentés dans Bourgat et al. [1994]. La première extension concerne la prise en compte du caractère diphasique de l'écoulement au travers la définition des vecteurs vitesse comme une concaténation des vecteurs vitesse associés aux particules et au fluide vu par ces particules. La deuxième extension concerne le passage d'une hypothèse de mouvement fluctuant isotrope à la prise en compte de l'anisotropie de ce mouvement. Celle-ci était indispensable en raison du caractère fortement anisotrope du mouvement fluctuant particulaire dans la majorité des applications.

4.5.6 Cas particuliers de l'écoulement simplement cisailé et de canal plan

Nous allons maintenant étudier plus précisément le cas des surfaces ne présentant pas de convection par le mouvement moyen, c'est-à-dire pour lesquelles $\underline{U}_p \cdot \underline{n} = 0$. Une telle famille d'écoulements sont les écoulements plans, c'est-à-dire pour lesquels l'écoulement est homogène dans deux directions (appelées directions longitudinale et transversale). Seules des surfaces orientées par la direction normale sont alors considérées. Ces surfaces sont un cas particulier de l'étude précédente mais constitue un cas important car tous nos travaux de couplage présentent cette configuration afin de simplifier quelque peu les expressions. Cette simplification est valable par exemple pour un écoulement homogène cisailé ou un écoulement de canal plan. La configuration type de l'étude est donc la suivante :

L'expression du demi-flux théorique de la variable $\Psi = \prod_i c''_{\alpha_i}$ associé à notre pdf de référence de type Richman s'écrit sous ces hypothèses :

$$\mathcal{F}_{\Gamma}^{\text{eul-}}(\Psi, \underline{x}_{\Gamma}, t) = n_p(\underline{x}_{\Gamma}, t) a_{2p,2q,2r,2s,2t}(\{\alpha_i\}) \sigma_1^{n^*+1} \sigma_2^{2p} \sigma_3^{2q} \sigma_4^{2r} \sigma_5^{2s} \sigma_6^{2t} I_{2p} I_{2q} I_{2r} I_{2s} I_{2t} J_{n^*+1}(0) \quad (4.79)$$

Dans un cas sans convection l'expression du demi-flux de densité associé à la pdf de Richman est :

$$\mathcal{F}_{\Gamma}^{\text{eul-}}(1, \underline{x}_{\Gamma}, t) = -n_p(\underline{x}_{\Gamma}, t) \sqrt{\frac{R_{pp,vv}}{2\pi}} \quad (4.80)$$

Les demi-flux de vitesses moyennes s'écrit :

$$\mathcal{F}_{\Gamma}^{\text{eul-}}(c_i, \underline{x}_{\Gamma}, t) = U_i \mathcal{F}_{\Gamma}^{\text{eul-}}(1, \underline{x}_{\Gamma}, t) + n_p(\underline{x}_{\Gamma}, t) \Theta_{i1} \frac{R_{pp,vv}}{2} \quad (4.81a)$$

$$= \mathcal{F}_{\Gamma}^{\text{eul-}}(1, \underline{x}_{\Gamma}, t) \left[U_i + \sqrt{\frac{\pi}{2}} \Theta_{i1} \sqrt{R_{pp,vv}} \right] \quad (4.81b)$$

et enfin les demi-flux de contraintes cinétiques :

$$\mathcal{F}_{\Gamma}^{\text{eul-}}(c_i'' c_j'', \underline{x}_{\Gamma}, t) = R_{ij} \mathcal{F}_{\Gamma}^{\text{eul-}}(1, \underline{x}_{\Gamma}, t) + n_p \Theta_{i1} \Theta_{j1} R_{pp,vv} \sqrt{\frac{R_{pp,vv}}{2\pi}} \quad (4.82a)$$

$$= \mathcal{F}_{\Gamma}^{\text{eul-}}(1, \underline{x}_{\Gamma}, t) [R_{ij} - \Theta_{i1} \Theta_{j1} R_{pp,vv}] \quad (4.82b)$$

Chapitre 5

Ecoulements turbulents homogènes simplement cisailés

Sommaire

5.1	Description de l'écoulement test	123
5.1.1	Ecoulement test	123
5.1.2	Cas simulés	124
5.1.3	Temps caractéristiques	125
5.2	Consistance des modèles eulérien et lagrangien	125
5.2.1	Turbulence du fluide	125
5.2.2	Contraintes fluide-particule	130
5.2.3	Contraintes particulaires	132
5.2.4	Conclusions	134
5.2.5	Cas B	136
5.2.6	Prise en compte des collisions : cas Ac	136
5.3	Etude <i>a priori</i> des demi-flux	137
5.3.1	Expressions des demi-flux associés à la pdf de Richman	138
5.3.2	Comparaison des demi-flux de Richman lagrangiens au calcul lagrangien	140
5.3.3	Conclusion	142
5.4	Méthode hybride	142
5.4.1	Validation de la méthode d'injection	143
5.4.2	Couplage par demi-flux	146
5.4.3	Couplage par conditions de Dirichlet	151
5.4.4	Extension aux cas de Stokes différents et aux cas avec collisions	154

Ce chapitre présente l'application de la méthode hybride au cas d'écoulements turbulents air-particules homogènes et simplement cisailés, avec ou sans prise en compte des collisions interparticulaires. Ce premier cas de validation est directement issu du dernier chapitre de la thèse de Laviéville [1997]. Ce type d'écoulement constitue, à certains égards, la première marche entre l'écoulement homogène isotrope sur lequel est basé une grande partie de la théorie et des écoulements "réalistes" de type canal ou couche limite. C'est pourquoi ce type d'écoulements a souvent constitué les premiers tests de validation de nouveaux modèles théoriques (Haworth and Pope [1986], Reeks [1993]). Il a notamment été étudié au sein du groupe Ecoulements Et Combustion de l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (Moreau et al. [2003, 2004]) pour la validation du code lagrangien stochastique STOCOLM (dont est grandement inspiré

le code développé et utilisé lors de cette thèse). Ce type d'écoulements présente tout de même le désavantage de l'instationnarité dû à une production par le cisaillement imposé qui ne peut être contre-balancée.

L'étude d'écoulements turbulent homogènes cisaillés va ainsi permettre de valider la consistance des deux modèles (lagrangien et eulérien) issus de l'approche pdf décrite au chapitre 2. Dans ces cas simplifiés, l'accent peut ainsi être mis sur certains processus physiques tel la production anisotropique du mouvement fluctuant particulaire (par les gradients de vitesses moyennes) ou l'effet des collisions interparticulaires. L'étude comparée des deux modèles non-couplés permet de mesurer le degré d'acuité des fermetures proposées dans l'approche eulérienne pour les deux phénomènes précités. De même, la validité de l'approche pdf peut être testée par la comparaison des résultats des modèles avec des "expériences numériques" sur cette même configuration.

La première partie du chapitre se propose de décrire les configurations d'écoulements retenus ainsi que la présentation des résultats des modèles sans couplage. Ceux-ci sont comparés avec des résultats de simulations LES/DPS de Laviéville [1997] et mis en perspectives avec les résultats connus de ces modèles dans ce type de configuration.

La deuxième partie du chapitre consiste en une étude à priori des hypothèses formulées sur la forme de la pdf et les demi-flux qui lui sont associés. L'évolution temporelle des demi-flux de masse, quantité de mouvement et contraintes cinétiques sont comparés à leur valeur théoriques issues du chapitre 4.

La troisième partie du chapitre étudie une configuration intermédiaire de couplage où seul le couplage de l'eulérien vers le lagrangien est pris en compte. Des particules sont ainsi injectées dans le domaine lagrangien suivant les moments données par le modèle eulérien non-couplé. Cette configuration permet d'observer précisément l'influence de la procédure d'injection sur le calcul lagrangien, permettant ainsi une validation de la méthode de réjection présentée au chapitre 4.

Enfin, le modèle couplé complet est appliqué au cas d'écoulements turbulents homogènes cisaillés et comparés aux résultats des deux approches ainsi qu'aux expériences numériques afin de valider la méthodologie de couplage présentée dans le chapitre 4.

5.1 Description de l'écoulement test

5.1.1 Ecoulement test

La configuration est identique à celle de Laviéville [1997]. Un écoulement de particules dans de l'air est préalablement convergé en écoulement homogène isotrope dans un cube de largeur $L = 0,192m$. Des conditions de périodicités sont imposées sur toutes les faces de la boîte de simulation : pour chaque particule sortant de la boîte par une des faces, une nouvelle est réinjectée par la face opposée avec des propriétés identiques :

$$x_{p,i}^{(m)} \leq \mp \frac{L}{2} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} x_{p,i}^{(m)} = x_{p,i}^{(m)} \pm L \\ \underline{u}_p^{(m)} = \underline{u}_p^{(m)} \end{cases} \quad (5.1)$$

Les caractéristiques principales de l'écoulement de la phase porteuse sont décrites dans le tableau suivant :

Caractéristiques de l'écoulement homogène isotrope	
Echelle de temps lagrangienne, τ_{fp}^t (s)	$36.7 \cdot 10^{-3}$
Energie turbulente du fluide, k_f ($m^2 \cdot s^{-2}$)	0.12

L'étude de l'écoulement cisaillé débute à l'instant $t = 0$ pour lequel un gradient est imposé à la fois pour la phase fluide et la phase particulaire (figure 5.1). Les intensités des cisaillements à l'instant $t = 0$ de la phase fluide et de la phase particulaire sont notées respectivement S_f et S_p . A l'instant $t = 0$, on applique alors aux propriétés de chaque particule la transformation :

$$\begin{cases} \underline{u}_{f@p}^{(m)} = \underline{u}_p^{(m)} + S_f y \times \underline{u} \\ \underline{u}_p^{(m)} = \underline{u}_p^{(m)} + S_p y \times \underline{u} \end{cases} \quad (5.2)$$

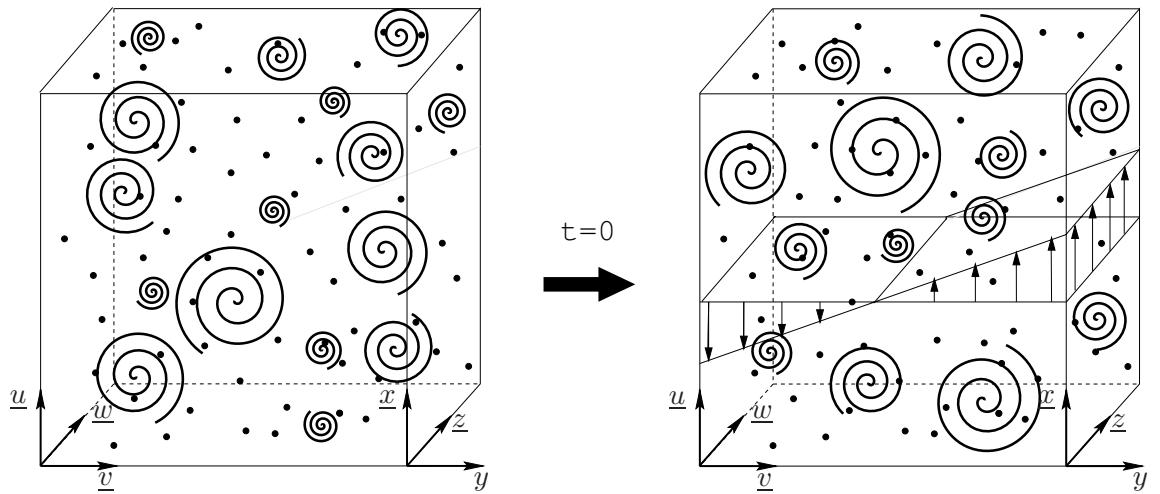


FIG. 5.1 – Description de l'écoulement test. Un gradient moyen de vitesse est superposé à l'écoulement THI à l'instant $t = 0$ pour les deux phases.

Les intensités de cisaillement à l'instant initial sont prises égales ($S_f = S_p$). Par la suite l'intensité du cisaillement de l'écoulement fluide est imposée constante tout le long de la simulation, permettant d'exprimer

simplement la vitesse moyenne du fluide :

$$U_{f,i}(\underline{x}) = S_f y \times \underline{u} \quad (5.3)$$

La vitesse moyenne des particules n'est quant à elle pas imposée dans les simulations à l'exception de l'instant $t = 0$, et découle donc de l'interaction de la phase particulaire avec la phase fluide via la traînée. Il est à noter que dans cette configuration, la vitesse moyenne des particules en temps long est alignée sur la vitesse moyenne du fluide. Le fait d'avoir imposé $S_f = S_p$ à l'instant initial permet d'avoir à chaque instant égalité entre la vitesse moyenne des particules et la vitesse moyenne du fluide. Les conditions de périodicité dans la direction y doivent être modifiée par rapport au cas isotrope dû à la présence du cisaillement. En ce qui concerne les directions \underline{x} et \underline{z} , les conditions restent inchangées. Par contre les conditions de périodicité dans la direction \underline{y} ne s'applique plus sur la vitesse totale mais sur la partie fluctuante de la vitesse des particules. L'écoulement étant homogène, le mouvement fluctuant des particules est lui périodique. Une particule réinjectée pour compenser une particule sortant du domaine par une surface $y = \pm \frac{L}{2}$ doit être réinjectée avec des propriétés identiques sur sa vitesse fluctuante. Les conditions aux limites utilisées lors des simulations sont donc :

$$y_p^{(m)} \leq \mp \frac{L}{2} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} y_p^{(m)} = y_p^{(m)} \pm L \\ u_p^{(m)} = u_p^{(m)} \pm S_p L \end{cases} \quad (5.4)$$

où le cisaillement moyen de la phase particulaire n'est pas donné par la relation $S_f = S_p$ mais par le calcul du gradient de vitesse moyenne des particules issu de la simulation. Cette dernière relation n'est donc pas utilisée mais vérifiée dans les simulations.

Les résultats de référence pour la validation en écoulement homogène cisaillé de la méthode hybride sont des résultats issus de simulations de Laviéville [1997] dans lesquelles la phase porteuse est résolue par LES et la phase particulaire par un suivi lagrangien déterministe de toutes les particules (DPS).

5.1.2 Cas simulés

	$d_p(m)$	$\rho_p(kg.m^{-3})$	collisions
Cas A	$656 10^{-6}$	100	non
Cas B	$656 10^{-6}$	50	non
Cas Ac	$656 10^{-6}$	100	oui

Les cas de Laviéville [1997] étudiés correspondent à 600000 particules réelles, c'est-à-dire à une fraction volumique moyenne $\overline{\alpha}_p = 1,25 10^{-2}$. Une simulation en utilisant des particules discrètes (comme les simulations DPS de Laviéville) doivent donc prendre en compte le mouvement de 600000 particules ainsi que leurs interactions. Les algorithmes de positionnement (nécessaires à la résolution des collisions) faisant usuellement le tri en $27N$, le coût des simulations numériques pour un écoulement aussi petit (seule une boîte de côté $L = 0,192m$ est considérée) et académique peut sembler prohibitif.

Le traitement statistique de la phase dispersée prend ici tout son sens car, même pour un calcul lagrangien stochastique, ce coût peut être grandement réduit. La résolution de l'équation de la pdf par une discréttisation en diracs (ou particules numériques) de la pdf permet en effet de travailler avec un nombre restreint de particules numériques. Les simulations dont sont tirés les résultats suivant font par exemple appel au maximum à 30000 particules numériques pour les calculs en lagrangien stochastique périodique.

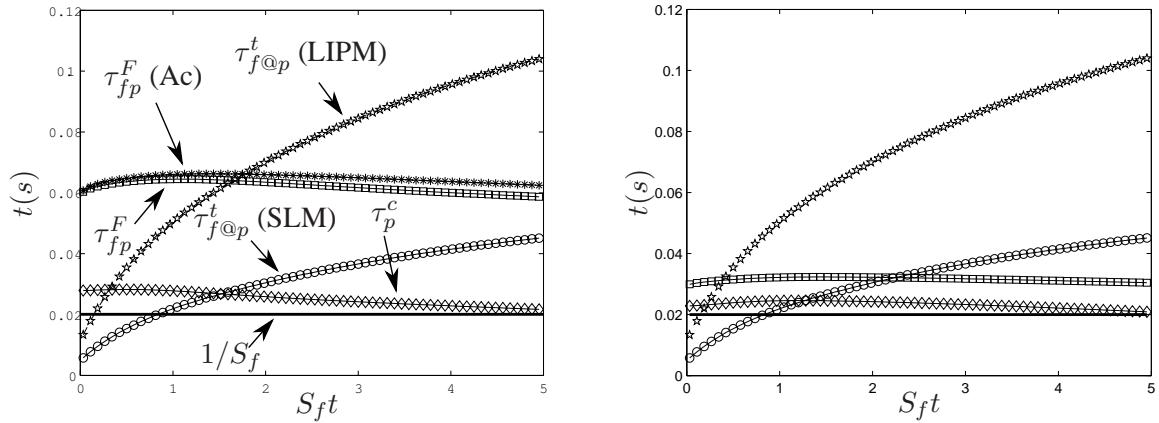


FIG. 5.2 – Temps caractéristiques des phénomènes physiques présents dans l’écoulement homogène cisaillé dans les cas A, Ac (gauche) et B (droite).

5.1.3 Temps caractéristiques

Tous les temps caractéristiques associés aux phénomènes physiques que sont la turbulence, la traînée, les collisions ou le gradient de vitesse moyenne sont tous du même ordre. Aucun phénomène physique ne peut donc être négligé, notamment le temps associé à l’évolution macroscopique du système (qui peut être pris comme $1/S_f$). Les écoulements homogènes simplement cisaillés considérés sont donc des écoulements fortement instationnaires, ce qui prohíbe toute utilisation de modèles à l’équilibre pour la prédition du mouvement d’agitation particulaire ou des contraintes fluide-particule.

5.2 Consistance des modèles eulérien et lagrangien

Dans cette section la consistance entre les approches eulérienne et lagrangienne développées dans les chapitres précédents est vérifiée. De part leur dérivation à partir de la même équation d’évolution de la pdf du système (2.11), les deux modèles sont par construction consistants. Une étude comparative des deux modèles est effectuée afin de prouver que les approches lagrangienne et eulérienne ne sont que deux moyens de résolution d’une même équation. Ainsi celles-ci doivent redonner des résultats identiques aux erreurs de fermeture de l’eulérien et aux erreurs numériques près (erreurs des schémas numériques et erreurs statistiques). Les résultats des deux modèles sont aussi comparés aux résultats LES/DPS de Laviéville [1997] pour déterminer la performance globale des hypothèses de fermeture de l’équation d’évolution de la pdf (2.11) et savoir si celles-ci permettent une prise en compte correcte des phénomènes physiques de l’écoulement. Les discussions ayant trait aux résultats des deux modèles dans le cas d’écoulements turbulents homogènes simplement cisaillés ne se veulent pas exhaustives, mais commentent les comportements pertinents dans l’optique d’une étude du couplage de ces deux approches. Pour une étude détaillée de ce type d’écoulements, le lecteur peut se référer à la thèse de Laviéville [1997].

5.2.1 Turbulence du fluide

La consistance entre les deux approches commence par le champ fluide vu par les particules. Le champ de vitesse moyenne étant imposé, la consistance des deux approches se vérifie pour les contraintes de Reynolds.

Les équations d'évolution des contraintes de Reynolds du fluide vu dérivées à partir du schéma de Langevin IPM (avec le tenseur G_{fp} donné par (2.56)) dans un écoulement homogène cisaillé s'écrivent :

$$\frac{\partial R_{ff,uu}}{\partial t} = -\frac{2R_{ff,uu}}{\tau_{f@p}^t} + C_0^* \varepsilon_f - 2(1 - \frac{2}{3}\gamma_f)S_f R_{ff,uv} \quad (5.5a)$$

$$\frac{\partial R_{ff,vv}}{\partial t} = -\frac{2R_{ff,vv}}{\tau_{f@p}^t} + C_0^* \varepsilon_f - \frac{2\gamma_f}{3}S_f R_{ff,uv} \quad (5.5b)$$

$$\frac{\partial R_{ff,ww}}{\partial t} = -\frac{2R_{ff,ww}}{\tau_{f@p}^t} + C_0^* \varepsilon_f - \frac{2\gamma_f}{3}S_f R_{ff,uv} \quad (5.5c)$$

$$\frac{\partial R_{ff,uv}}{\partial t} = -\frac{2}{\tau_{f@p}^t}[R_{ff,uv}] - (1 - \gamma_f)S_f R_{ff,vv} \quad (5.5d)$$

avec

$$\tau_{f@p}^t = \frac{1}{\beta_f} \frac{k_f}{\varepsilon_f} \quad (5.6)$$

La constante du modèle d'isotropisation de la production (IPM) γ_f vaut 0,6 et permet de prendre en compte les termes de pression-déformation rapides. Cette dernière vaut 0 dans le cas du modèle SLM consistant avec le modèle de Rotta. La constante C_0^* est donnée par $C_0^* = \frac{2}{3}(2\beta_f + \frac{\gamma_f}{2} \frac{\mathcal{P}_{f,kk}}{\varepsilon_f} - 1)$ dans le cas du modèle IPM (avec $\beta_f = 0,9$) et $C_0^* = C_0 = 2,1$ pour le modèle SLM (ce qui implique $\beta_f = 2,05$).

Pour valider le modèle de turbulence utilisé, les équations eulériennes sont résolues en prenant k_f et ε_f non pas calculés à partir des caractéristiques de la turbulence issues de la simulation, mais issues d'une simulation LES du fluide. Cette résolution permet d'être complètement consistant avec la résolution lagrangienne stochastique de l'écoulement gaz-particule puisque ces valeurs sont alors des données du problème. En prenant les valeurs issues de la LES, il est possible de comparer comment les différents processus de Langevin choisis pour simuler le champ fluide vu par les particules permettent de rendre compte de l'hypothèse fondamentale :

$$\tilde{\underline{\underline{R}}}_{ff} = \underline{\underline{R}}_{ff} \quad (5.7)$$

Ce ne sont donc pas à proprement parlé les modèles SLM ou LIPM qui sont testés ici mais leur application à la prévision du comportement de la phase particulaire dans les écoulements gaz-particules.

5.2.1.1 Modèles usuels

Le développement des contraintes de Reynolds du fluide est présenté en figure 5.3. Cette évolution est pilotée par plusieurs mécanismes. Dans un premier temps, du fait de l'imposition du gradient à l'instant $t = 0$, la turbulence est détruite par dissipation visqueuse. Dans le même temps, le gradient de vitesse moyenne est à l'origine de l'apparition de la contrainte de cisaillement $R_{ff,uv}$, qui engendre à son tour une production de la composante longitudinale $R_{ff,uu}$. Avec le développement de la contrainte de cisaillement, la production devient le mécanisme prépondérant devant la dissipation. Le mouvement fluctuant longitudinal est ensuite redistribué sur les composantes normale et transversale par les corrélations pression-déformations.

Les résultats lagrangiens sont obtenus par une moyenne sur toutes les particules présentes dans la boîte de simulation. La vitesse moyenne des particules n'est pas donnée (excepté à l'instant initial), celle-ci est donc calculée en divisant la boîte en N_{cell} cellules dans la direction normale. Le champ de vitesse moyenne est ainsi calculé dans chaque cellule et interpolé à la position de la particule pour obtenir la partie moyenne de la vitesse du fluide vu. Les résultats présentés ici sont obtenus avec un nombre proche de 30000 particules numériques ($\kappa = 20$) ce qui permet aux statistiques d'être effectuées sur approximativement 600 particules

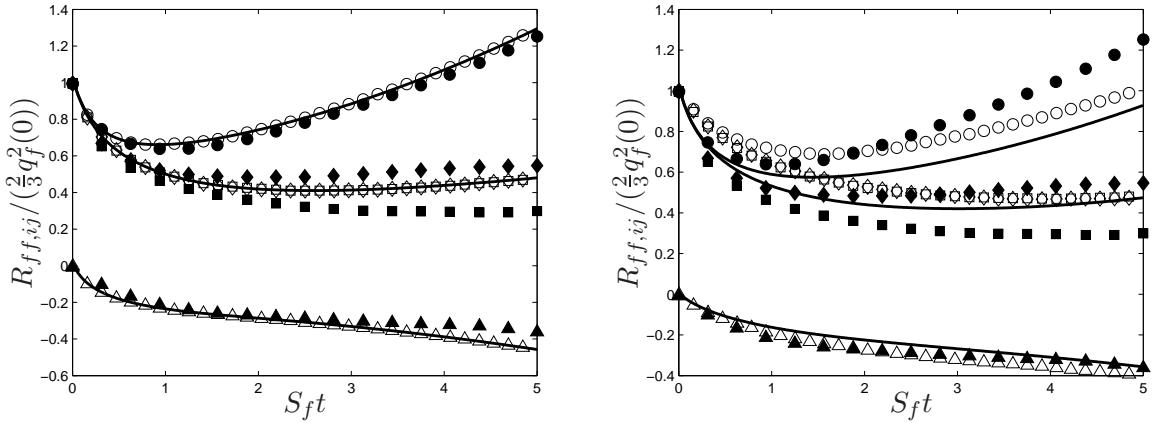


FIG. 5.3 – Développements des contraintes cinétiques du fluide vu par les particules (cas A) prédits par le modèle SLM (gauche) et le modèle LIPM (droite). ; \circ : lagrangien stochastique (\circ : $R_{ff,uu}$, \square : $R_{ff,vv}$, \diamond : $R_{ff,ww}$, \triangle : $R_{ff,uv}$) ; — : eulérian ; • : LES/DPS (Laviéville [1997]).

numériques par cellule de calcul ($N_{\text{cell}} = 50$). Ce nombre (par ailleurs trop important pour des simulations plus réalistes) permet d'éliminer les bruits d'origine statistique et de se focaliser sur la consistance des approches. La simulation s'étend sur une période de temps $S_f \Delta t_{\text{sim}} = 5$ laissant à peine le temps à l'écoulement de retrouver un état d'équilibre (état défini par un tenseur d'anisotropie constant). L'écoulement et les phénomènes qui s'y produisent sont donc instationnaires, ce pourquoi les résultats sont présentés en fonction du temps.

La comparaison de ces résultats dans le cas d'un cisaillement $S_f = 50\text{s}^{-1}$ avec la résolution LES de l'écoulement permet de confirmer le mauvais comportement des modèles LIPM dans le cas où l'échelle de temps caractéristique du mouvement moyen ne peut être considérée comme petite devant celle du mouvement d'agitation. Les équations de Langevin incorporant les termes rapides de pression-déformation ont ainsi tendance à trop isotropiser le mouvement fluctuant, et induisent une destruction de ce dernier. Le modèle LIPM ne permet donc pas en l'état d'assurer une des hypothèses de base du modèle eulérian ($\tilde{\underline{R}}_{ff} = \underline{\underline{R}}_{ff}$), et la consistance entre les deux modèles ne peut donc plus être assurée. Pour assurer la consistance il est nécessaire de résoudre à l'intérieur du code eulérian le système (5.5) afin d'obtenir des contraintes du fluide vu consistentes avec celles imposées dans le lagrangien stochastique. Cette résolution se ferait au détriment de la physique puisque l'hypothèse $\tilde{\underline{R}}_{ff} = \underline{\underline{R}}_{ff}$ semble assez bien supportée par l'expérience.

Le modèle SLM quant à lui présente un comportement global relativement satisfaisant. L'anisotropie du tenseur des contraintes de Reynolds est assez bien représentée, excepté pour la différence existante entre les composantes normale et transversale. Néanmoins, l'énergie turbulente vue par les particules est en bon accord avec la LES contrairement aux modèles LIPM. La dynamique de l'écoulement et les phénomènes physiques entrant en jeu sont correctement pris en compte, et ce malgré le manque d'équivalents aux termes rapides de pression-déformation. Bien que ne rendant pas compte de la différence de comportement entre les composantes normale et transversale, le modèle SLM s'avère donc dans notre cas le meilleur candidat pour une modélisation de la turbulence par une équation de Langevin avec un bruit stochastique satisfaisant à l'hypothèse de Kolmogorov $\underline{\underline{B}} = C_0 \varepsilon_f \underline{\underline{Id}}$.

5.2.1.2 Modèles avec correction du bruit

L'introduction de l'hypothèse de Kolmogorov sur la forme du bruit devant apparaître dans l'équation de Langevin décrivant la turbulence ressentie par les particules limite ainsi les modèles disponibles. Dans le cas de l'écoulement cisaillé, cette hypothèse conduit à considérer l'équation de Langevin compatible avec le modèle de corrélation pression-déformation le plus simple (modèle de Rotta, § 2.4.4). En nous affranchissant des limitations présentes dans une modélisation monophasique, nous allons voir comment il est possible de construire pour les écoulements monophasiques des modèles permettant d'obtenir $\tilde{\underline{\underline{R}}}_{ff} = \underline{\underline{R}}_{ff}$. Pour cela nous allons continuer à considérer les modélisation du tenseur $\underline{\underline{G}}_{fp}$ issues des modèles SLM ou LIPM, mais le bruit est maintenant corrigé selon (2.68) ou (2.67) pour essayer d'obtenir les bonnes contraintes du fluide vu. Le processus de Langevin n'est alors plus un moyen de recréer la turbulence mais un moyen de mimer celle-ci. Les caractéristiques de la turbulence à l'endroit de la particule sont ainsi assumée connues. Dans notre cas, l'information nécessaire se limite aux tenseur des contraintes de Reynolds à l'endroit de la particule (noté $\underline{\underline{R}}_{ff}^{\text{LES}}$ car donné par un calcul LES), et son évolution temporelle pour la version instationnaire. Dans une simulation gaz-particule, ces informations sont disponibles car calculées indépendamment par la simulation fluide. Pour chaque particule l'intensité du bruit stochastique est ainsi donnée par une décomposition de Choleski de la matrice :

$$\underline{\underline{B}} \cdot {}^t \underline{\underline{B}} = -\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{R}}_{ff}^{\text{LES}} - {}^t (\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{R}}_{ff}^{\text{LES}}) \quad (5.8)$$

ou dans sa version instationnaire :

$$\underline{\underline{B}} \cdot {}^t \underline{\underline{B}} = \frac{\partial}{\partial t} \underline{\underline{R}}_{ff}^{\text{LES}} - \underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{R}}_{ff}^{\text{LES}} - {}^t (\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{R}}_{ff}^{\text{LES}}) \quad (5.9)$$

Les contraintes cinétiques du fluide vu suivent ainsi l'équation :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\tilde{\underline{\underline{R}}}_{ff} - \underline{\underline{R}}_{ff}^{\text{LES}} \right] - \underline{\underline{A}} \cdot \left[\tilde{\underline{\underline{R}}}_{ff} - \underline{\underline{R}}_{ff}^{\text{LES}} \right] - {}^t \left[\tilde{\underline{\underline{R}}}_{ff} - \underline{\underline{R}}_{ff}^{\text{LES}} \right] \cdot {}^t \underline{\underline{A}} = \underline{\underline{0}} \quad (5.10)$$

Cette équation a de "bonnes chances" de tendre vers l'état d'équilibre si toutes les valeurs propres de la matrice $\frac{1}{2}(\underline{\underline{A}} + {}^t \underline{\underline{A}})$ sont négatives. La présence des deux termes $\underline{\underline{A}} \cdot \left[\tilde{\underline{\underline{R}}}_{ff} - \underline{\underline{R}}_{ff}^{\text{LES}} \right]$ et ${}^t \left[\tilde{\underline{\underline{R}}}_{ff} - \underline{\underline{R}}_{ff}^{\text{LES}} \right] \cdot {}^t \underline{\underline{A}}$ ne permet pas d'en faire une condition nécessaire et suffisante, mais nous prendrons cette propriété comme représentative de la possibilité d'obtenir un état d'équilibre. La matrice possède une forme simple pour les modèles de Langevin considérés :

$$\frac{1}{2}(\underline{\underline{A}} + {}^t \underline{\underline{A}}) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\tau_{f@p}^t} & -\frac{1-\gamma_f}{2} \frac{\partial U_f}{\partial y} & 0 \\ -\frac{1-\gamma_f}{2} \frac{\partial U_f}{\partial y} & -\frac{1}{\tau_{f@p}^t} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{\tau_{f@p}^t} \end{pmatrix} \quad (5.11)$$

ce qui permet d'obtenir une condition nécessaire et suffisante simple d'avoir toutes les valeurs propres négatives :

$$\tau_{f@p}^t \frac{\partial U_f}{\partial y} < \frac{2}{1 - \gamma_f} \quad (5.12)$$

La figure 5.4 montre la comparaison aux résultats LES des résultats obtenus en modifiant le bruit (en prenant en compte ou non l'instationnarité de l'écoulement) et en préservant une modélisation type SLM.

La figure 5.4 montre que la non-prise en compte de l'instationnarité dans l'équation (2.68) ne permet pas la prédiction correcte des contraintes cinétiques du fluide vu. Cette constatation est en adéquation avec les remarques faites sur les échelles de temps de l'écoulement qui ne permettent pas de se servir d'hypothèses

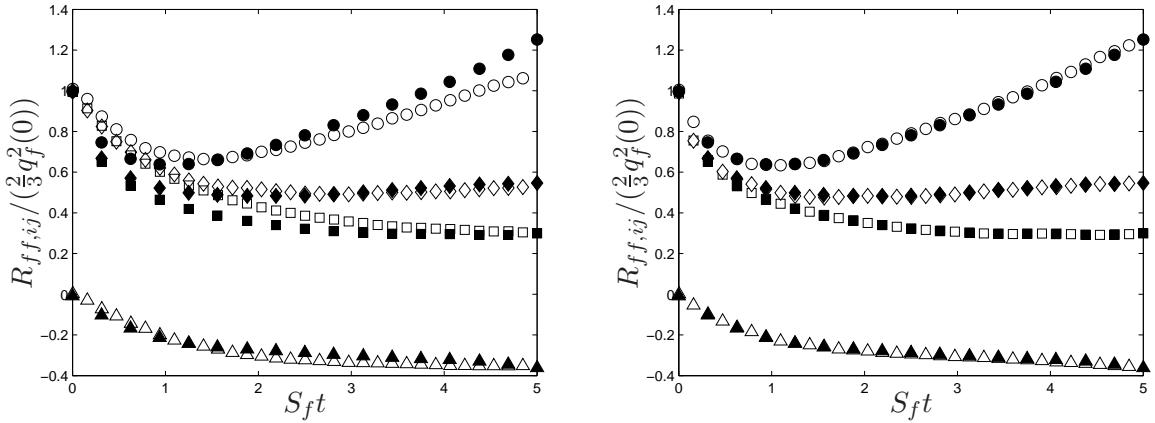


FIG. 5.4 – Développements des contraintes cinétiques du fluide vu par les particules (cas A). gauche : modèle NCSLM avec correction (5.8), droite : modèle NCSLM avec correction (5.9). \circ : lagrangien stochastique (\circ : $R_{ff,uu}$, \square : $R_{ff,vv}$, \diamond : $R_{ff,ww}$, \triangle : $R_{ff,uv}$) ; \bullet : LES/DPS (Laviéville [1997]).

d'équilibres (§ 5.1.3). La correction stationnaire du bruit tend tout de même vers des valeurs acceptables des contraintes cinétiques du fluide vu lorsque l'écoulement se rapproche de l'état d'équilibre en ce qui concerne l'anisotropie.

L'amélioration des prédictions des contraintes cinétiques du fluide vu en utilisant la correction instationnaire est spectaculaire car elle permet de rendre fidèlement compte de la différence de valeurs entre ces composantes, contrairement aux modèles sans correction du bruit. Dû à cette correction du bruit stochastique pour obtenir $\underline{\underline{R}}_{ff} = \underline{\underline{R}}_{ff}$, ce nouveau modèle est appelé "Noise Corrected Simplified Langevin Model" ou NCSLM. Toutes les contraintes sont exactement prédites tout au long de la simulation ce qui permet d'affirmer que les différences que l'on pourrait observer concernant la prédition des contraintes fluide-particules ou des contraintes particulières ne serait pas dues à une faiblesse de modélisation de la matrice d'amplitude du bruit.

L'application de la méthode de correction du bruit au modèle LIPM associé aux valeurs des constantes données par (2.61) n'est pas possible car la matrice issue de (5.8) ou (5.9) n'est alors pas décomposable selon Choleski (la condition (5.12) n'est plus satisfaite). Il est tout de même possible de construire un modèle intermédiaire dans le cas des écoulements gaz-particules. La correction du bruit permet en effet de s'affranchir de la condition reliant β_f et γ_f issue de (2.52). Le modèle "Noise Corrected Langevin Isotropization of Production Model" (NCLIPM) est ainsi défini en préservant $\beta_f = 2, 1$, en prenant $\gamma_f = 0.6$ et $C_0^* = C_0$. Les résultats issus de ce modèle concernant les contraintes cinétiques du fluide vu sont donnés en figure 5.5.

Le caractère fortement instationnaire de la simulation est une nouvelle fois à l'origine du mauvais comportement de la correction stationnaire. La correction instationnaire par contre permet une prédition exacte des contraintes cinétiques du fluide vu comme dans le cas du NCSLM avec correction instationnaire. C'est pourquoi par la suite il sera implicitement admis que sous la dénomination NCSLM et NCLIPM les corrections effectuées sont des correction instationnaires.

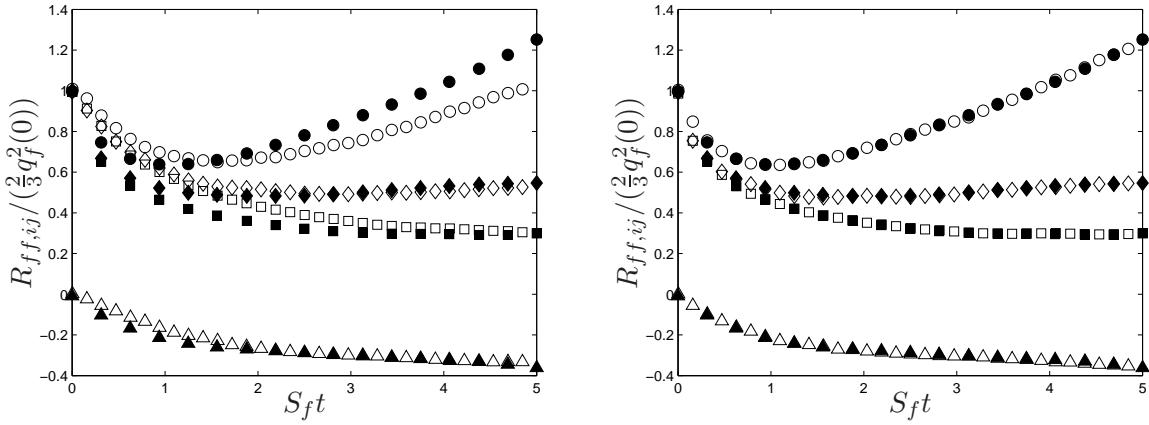


FIG. 5.5 – Développements des contraintes cinétiques du fluide vu par les particules (cas A). gauche : modèle NCLIPM avec correction (5.8), droite : modèle NCLIPM avec correction (5.9). \circ : lagrangien stochastique (\circ : $R_{ff,uu}$, \square : $R_{ff,vv}$, \diamond : $R_{ff,ww}$, \triangle : $R_{ff,uv}$) ; \bullet : LES/DPS (Laviéville [1997]).

5.2.2 Contraintes fluide-particule

Le système d'équations eulériennes dérivées à partir l'équation (2.11) concernant les contraintes fluide-particule dans le cas d'un écoulement homogène cisaillé simple prend la forme :

$$\frac{\partial R_{fp,uu}}{\partial t} = -\frac{1}{\tau_{fp}^F} [R_{fp,uu} - R_{ff,uu}] - \frac{R_{fp,uu}}{\tau_{f@p}^t} - S_p R_{fp,uv} - (1 - \gamma_f) S_f R_{fp,vu} \quad (5.13a)$$

$$\frac{\partial R_{fp,vv}}{\partial t} = -\frac{1}{\tau_{fp}^F} [R_{fp,vv} - R_{ff,vv}] - \frac{R_{fp,vv}}{\tau_{f@p}^t} \quad (5.13b)$$

$$\frac{\partial R_{fp,ww}}{\partial t} = -\frac{1}{\tau_{fp}^F} [R_{fp,ww} - R_{ff,ww}] - \frac{R_{fp,ww}}{\tau_{f@p}^t} \quad (5.13c)$$

$$\frac{\partial R_{fp,uv}}{\partial t} = -\frac{1}{\tau_{fp}^F} [R_{fp,uv} - R_{ff,uv}] - \frac{R_{fp,uv}}{\tau_{f@p}^t} - (1 - \gamma_f) S_f R_{fp,vv} \quad (5.13d)$$

$$\frac{\partial R_{fp,vu}}{\partial t} = -\frac{1}{\tau_{fp}^F} [R_{fp,vu} - R_{ff,vu}] - \frac{R_{fp,vu}}{\tau_{f@p}^t} - S_p R_{fp,uv} \quad (5.13e)$$

L'évolution de ces contraintes fluide-particules est donc pilotée par la compétition entre la production par les gradients des vitesses moyennes du fluide et des particules, la destruction du mouvement corrélé fluide-particule ($-R_{fp}/\tau_{f@p}^t$) et les interactions avec le fluide au travers de la traînée ($1/\tau_{fp}^F$). Les bilans de ces équations effectué par Laviéville [1997] montre que le mécanisme prépondérant est l'interaction via la traînée entre le fluide et les particules mais que la compétition entre production et dissipation doit être pris en compte. Les simplifications induites par les symétries de l'écoulement écartent toute étude de la consistance des modèles eulérien et lagrangien stochastique concernant la modélisation des corrélations triples dans l'eulérien. De même dans le cas de collisions corrélées ou sans collisions, les termes de collision sont nuls et ne peuvent donc pas être à l'origine d'une inconsistance. Les inconsistances découlant des hypothèses supplémentaires effectuées dans l'approche eulérienne se réduisent donc ici au traitement des termes de traînée.

5.2.2.1 Modèles usuels

La figure 5.6 présente les prédictions concernant les contraintes fluide-particules des modèles SLM et LIPM ainsi que les prédictions de leurs modèles eulériens consistants issues de (5.13).

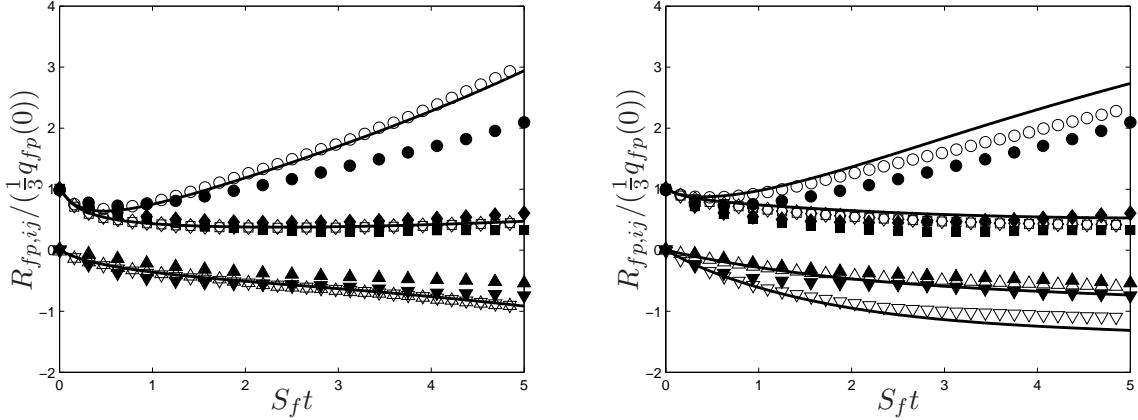


FIG. 5.6 – Développements des contraintes fluide-particules (cas A) prédits par le modèle SLM (gauche) et le modèle LIPM (droite). \circ : lagrangien stochastique (\circ : $R_{fp,uu}$, \square : $R_{fp,vv}$, \diamond : $R_{fp,ww}$, \triangle : $R_{fp,uv}$, ∇ : $R_{fp,vu}$) ; — : eulérien ; \bullet : LES/DPS (Laviéville [1997]).

La prédiction de l'évolution des contraintes fluide-particules est meilleure dans le cas du modèle SLM que dans le cas du modèle LIPM. La surestimation de la contrainte longitudinale est ainsi supérieure dans le cas du modèle LIPM. Ce résultat peut paraître surprenant du fait que la traînée joue un rôle prépondérant et que la contrainte $R_{ff,uu}$ est sous-estimée par le LIPM. Cette surproduction est en fait une conséquence indirecte de l'isotropisation de la production qui surestime la production de la contrainte de cisaillement $R_{fp,uv}$. Cette contrainte pilotant la production de la contrainte longitudinale $R_{fp,uu}$, la production de celle-ci est surestimée ce qui résulte en la surestimation observée.

5.2.2.2 Modèles avec correction du bruit

La figure 5.7 présente les prédictions concernant les contraintes fluide-particules des modèles NCSLM et NCLIPM. Au regard des résultats LES/DPS, il existe une légère différence dans le comportement des contraintes de cisaillement $R_{fp,uv}$ et $R_{fp,vu}$ qui est absente des prévisions du modèle NCSLM. Cette absence était prévisible car en présence de gradients de vitesses moyennes identiques ($S_p = S_f$), le modèle NCSLM ($\gamma_f = 0$) prédit une production identique pour les composantes $R_{fp,uv}$ et $R_{fp,vu}$. De plus le modèle NCLIPM semble donner un très bon accord avec les résultats LES/DPS, et ce pour toutes les composantes du tenseur. Le modèle NCSLM par contre semble sur-estimer la contrainte longitudinale $R_{fp,uu}$ du fait de la concentration de la production sur cette seule composante.

Ces résultats, qui pourraient paraître surprenants au vue des résultats de la figure 5.6, sont en fait cohérents du fait que dans les modèles NCSLM et NSLIPM les contraintes cinétiques du fluide vu sont égales aux contraintes de Reynolds, contrairement aux cas où le bruit n'est pas corrigé. Il s'agit donc dans la figure 5.7 d'observer le comportement des différents modèles lorsque l'hypothèse $\bar{R}_{ff} = \underline{R}_{ff}$ est bien respectée. Si cette contrainte ne pose aucun problème d'intégration dans la résolution des équations (5.13), il est nécessaire de s'assurer que celle-ci reste vrai dans le lagrangien stochastique en modifiant le bruit. Si le

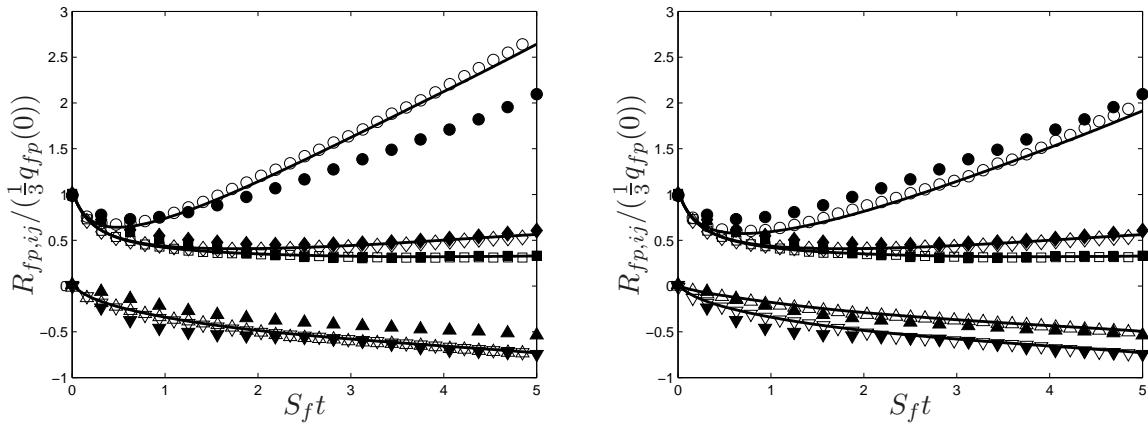


FIG. 5.7 – Développements des contraintes fluide-particules (cas A) prédits par le modèle NCSLM (gauche) et le modèle NCLIPM (droite). \circ : lagrangien stochastique (\circ : $R_{fp,uu}$, \square : $R_{fp,vv}$, \diamond : $R_{fp,ww}$, \triangle : $R_{fp,uv}$, ∇ : $R_{fp,vu}$) ; — : eulérien ; \bullet : LES/DPS (Laviéville [1997]).

modèle LIPM ne permet de s’assurer de cette hypothèse, il s’avère qu’une isotropisation de la production permet une meilleure prédiction des contraintes fluide-particules lorsque celle-ci est vérifiée.

Néanmoins, lorsque cette étude fut menée afin de valider la méthode hybride dans le cas de l’écoulement turbulent homogène simplement cisailé, la modification des modèles SLM et LIPM n’avait pas été envisagée. Pour des raisons de consistance entre les modèles, les études ont ainsi été réalisée avec un modèle de Langevin simplifié. C’est pourquoi les résultats présentés par la suite héritent des désavantages du modèle SLM en terme d’anisotropie de la production, notamment l’égalité $R_{fp,vu} = R_{fp,uv}$ et la sur-production de la contrainte longitudinale $R_{fp,uu}$. L’extension de la validation de la méthode hybride aux modèles NCSLM ou NCLIPM ne présentant à priori pas de différence avec le modèle SLM, la validation de la méthode avec modèle SLM garde un cadre général.

5.2.3 Contraintes particulières

Les équations eulériennes d’évolution des contraintes particulières dans le cas de l’écoulement turbulent homogène simplement cisailé sont considérées sans les termes de convection (sauf en ce qui concerne la densité de particules) et avec des termes de collision (éventuels) modélisés pour des collisions inter-particulaires élastiques et un chaos fluide-particulaire. Ces équations s’écrivent :

$$\frac{\partial R_{pp,uu}}{\partial t} = -\frac{2}{\tau_{fp}^F} [R_{pp,uu} - R_{fp,uu}] - \frac{\sigma_c}{\tau_p^c} (R_{pp,uu} - \frac{2}{3} q_p^2) - 2S_p R_{pp,uv} \quad (5.14a)$$

$$\frac{\partial R_{pp,vv}}{\partial t} = \frac{2}{\tau_{fp}^F} [R_{pp,vv} - R_{fp,vv}] - \frac{\sigma_c}{\tau_p^c} (R_{pp,vv} - \frac{2}{3} q_p^2) \quad (5.14b)$$

$$\frac{\partial R_{pp,ww}}{\partial t} = -\frac{2}{\tau_{fp}^F} [R_{pp,ww} - R_{fp,ww}] - \frac{\sigma_c}{\tau_p^c} (R_{pp,ww} - \frac{2}{3} q_p^2) \quad (5.14c)$$

$$\frac{\partial R_{pp,uv}}{\partial t} = -\frac{1}{\tau_{fp}^F} [2R_{pp,uv} - R_{fp,uv} - R_{fp,vu}] - \frac{\sigma_c}{\tau_p^c} R_{pp,uv} - S_p R_{pp,vv} \quad (5.14d)$$

L’évolution des contraintes particulières est donc le résultat de la compétition entre :

- la production par le gradient de vitesse moyenne des particules

- la traînée qui tend à emmener les corrélations particulières vers la corrélation symétrique fluide-particule correspondante
- éventuellement les collisions qui tendent à isotropiser le mouvement fluctuant particulaire.

Les sources potentielles d'inconsistance entre les deux approches proviennent donc du traitement des termes de traînée et de collision dans l'eulérien.

Le système (5.14) est aussi le premier dans la hiérarchie développée aux paragraphes précédents à ne pas dépendre du modèle de Langevin utilisé pour mimer la turbulence. Le schéma de Langevin n'agit donc sur le comportement de la phase particulaire que par l'intermédiaire de sa capacité à prédire correctement les contraintes fluide-particules.

La figure 5.8 présente les résultats concernant les contraintes particulières issus des modèles SLM et LIPM.

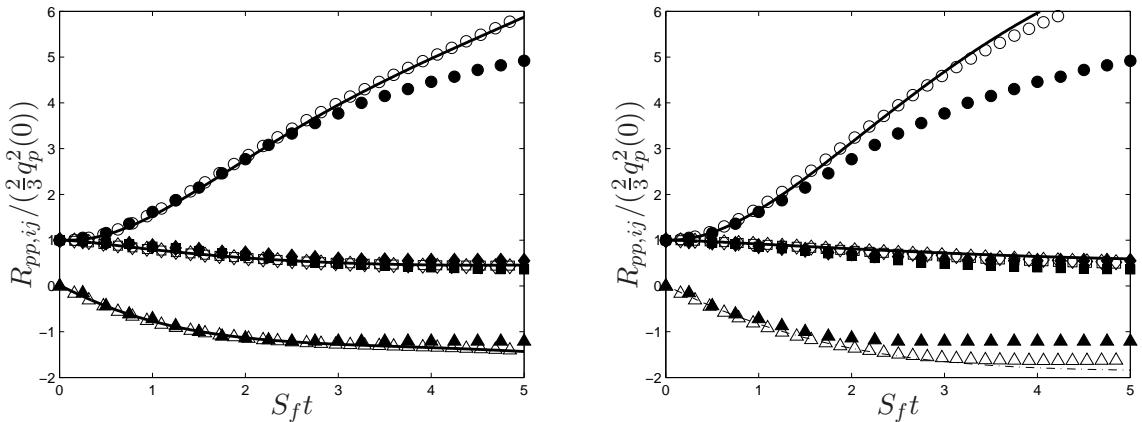


FIG. 5.8 – Développements des contraintes particulières (cas A) prédits par le modèle SLM (gauche) et le modèle LIPM (droite). \circ : lagrangien stochastique (\circ : $R_{pp,uu}$, \square : $R_{pp,vv}$, \diamond : $R_{pp,ww}$, \triangle : $R_{pp,uv}$) ; — : eulérien ; \bullet : LES/DPS (Laviéville [1997]).

En adéquation avec les prédictions concernant les contraintes fluide-particules, le modèle SLM prédit mieux le comportement des contraintes particulières que le modèle LIPM. Tous les défauts constatés pour les contraintes fluide-particules se retrouvent via la traînée dans le comportement des contraintes particulières, principalement la surestimation des contraintes longitudinale et tangentielle.

La figure 5.9 présente les résultats concernant les contraintes particulières issus des modèles NCSLM et NCLIPM.

L'amélioration apportée par la modification du bruit est peu visible dans le cas présenté ici (cas A), mais il est tout de même possible de voir que la faible différence entre les composantes normale et tangentielle est maintenant bien prise en compte. L'amélioration apportée par la correction du bruit est surtout notable dans le cas du modèle NCLIPM. Si le modèle LIPM prédit de très mauvaises contraintes particulières du fait de son incapacité à assurer $\tilde{R}_{ff} = R_{ff}$, lorsque cette dernière est assurée les contraintes fluide-particules et par suite les contraintes particulières sont alors prédites avec une très bonne précision.

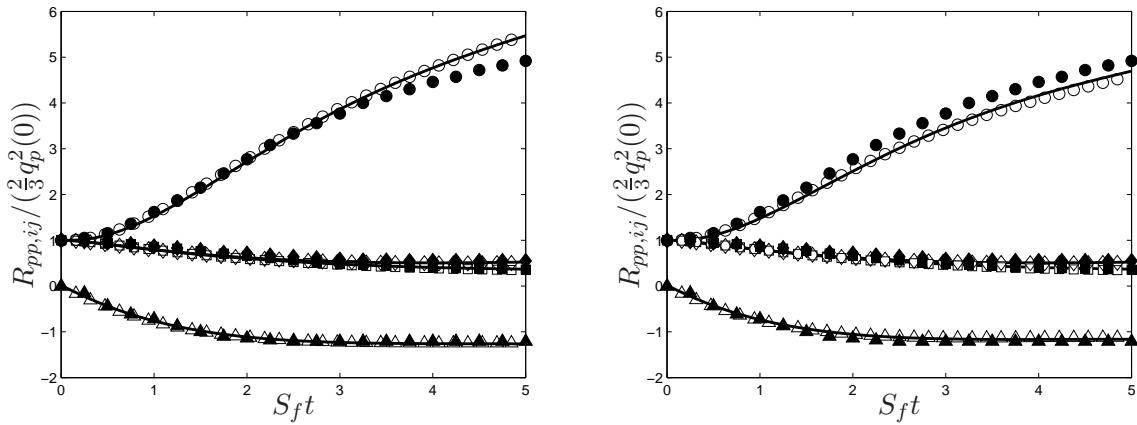


FIG. 5.9 – Développements des contraintes particulières (cas A) prédits par le modèle NCSLM (gauche) et le modèle NCLIPM (droite). \circ : lagrangien stochastique (\circ : $R_{pp,uu}$, \square : $R_{pp,vv}$, \diamond : $R_{pp,ww}$, \triangle : $R_{pp,uv}$; — : eulérien ; • : LES/DPS (Laviéville [1997]).

5.2.4 Conclusions

5.2.4.1 Considérations théoriques sur les modèles de Langevin

Par la suite seuls les résultats issus des modèles SLM et NCLIPM seront présentés puisqu'ils nous semblent les plus représentatifs. Le modèle SLM est en effet un modèle simple mais les figures précédentes ont permis de montrer son efficacité dans la modélisation des écoulements turbulents homogènes cisaillés. Le modèle NCLIPM quant à lui est un bon exemple d'un modèle qui ne peut avoir de sens que dans les écoulements gaz-particules puisqu'il n'est pas auto-consistant du point de vue de la turbulence. Le modèle NCLIPM nécessite en effet de connaître en avance les caractéristiques de la turbulence vue par les particules. L'utilisation de techniques de modification du bruit stochastique pour obtenir des valeurs correctes des contraintes cinétiques du fluide vu quelque soit le modèle permet alors de s'affranchir de la condition (2.52), pour peu que l'on s'affranchisse de la consistance du modèle avec une des hypothèses de Kolmogorov (on peut de plus avancer que la correction du bruit tendrait pour des Reynolds infinis vers une matrice isotrope, donc qu'il n'y aurait pas d'inconsistance). Le problème central de la modélisation de l'influence de la turbulence sur la phase particulaire devient alors la capacité du modèle à prédire correctement le comportement des contraintes fluide-particules. Ces prédictions sont directement reliées à la modélisation des tenseurs $\underline{\underline{A}}$ ou $\underline{\underline{G}}_{fp}$ comme le montre le système eulérien (5.13). Il nous semble donc que le problème central de la modélisation de la dispersion de particules par la turbulence réside en une modélisation appropriée du tenseur $\underline{\underline{A}}$ à partir des paramètres statistiques de la turbulence et des propriétés physiques des particules. De nombreuses études ont été effectuées dans ce sens sans toutefois arriver à dégager un modèle général capable de modéliser correctement l'effet de la turbulence sur la phase particulaire. Une voie intéressante pour explorer plus en avant les potentialités de la modélisation par une équation de Langevin de la dispersion de particules par la turbulence semble être le recours à des outils numériques de simulation directe. Dans une étude très intéressante Arcen [2006] utilise une résolution DNS du fluide associée à un suivi déterministe des particules pour étudier les hypothèses des modèles de Pope [1983] et Oesterlé and Zaichik [2004] à la lumière de ses résultats. Des pistes sont avancées pour permettre de mesurer effectivement dans des simulations directes le tenseur $\underline{\underline{A}}$, notamment à partir du système (5.13) ou encore par la mesure directe dans les simulations des corrélations :

$$< \frac{du''_{f,i}}{dt} u''_{p,j} >_p \quad (5.15)$$

L'utilisation de telles techniques permettra dans l'avenir de déterminer le comportement du tenseur $\underline{\underline{A}}$ pour différents écoulements, constituant ainsi un banque de données de référence pour construire des modèles précis de $\underline{\underline{A}}$ ne dépendant que des paramètres statistiques de la turbulence et des propriétés physiques des particules. Cela permettra éventuellement de répondre de plus à la question théorique de savoir si un processus de Langevin est suffisant pour décrire la turbulence, phénomène au nombre de degrés de liberté infini. Les hypothèses inhérentes au modèles de Langevin, notamment sur la forme présumée de la fonction d'autocorrélation lagrangienne, se révéleront peut être trop restrictive pour arriver à décrire ne serait-ce que la dispersion de particules inertielles par la turbulence.

5.2.4.2 Consistance des deux approches

Les fermetures supplémentaires effectuées pour le modèle eulérien semblent être suffisamment précises car peu de différences peuvent être observées entre les prédictions issues des simulations lagrangiennes et des simulations eulériennes. Les deux simulations prédisent tout de même un comportement légèrement différent pour la contrainte longitudinale. Cette différence peut s'expliquer par divers mécanismes :

1. La fermeture du terme de traînée effectuée dans l'approche eulérienne peut introduire un léger biais dans le traitement de la traînée. Le terme de traînée est en effet linéarisé dans l'eulérien ($Re_p < 1$),
2. Les caractéristiques du mouvement d'agitation à l'instant initial ne sont pas exactement identiques. Le tenseur de contraintes particulières est en effet initialisé dans l'eulérien par le résultat de la simulation THI *convergée*. Le mouvement fluctuant à l'instant initial est donc totalement isotrope contrairement à la simulation lagrangienne qui est initialisée à l'aide du dernier pas de temps de la simulation THI. La production au début de la simulation n'est donc pas exactement identique, ce qui pourrait entraîner cette différence de comportement
3. les contraintes cinétiques du fluide vu par les particules dans la simulation lagrangienne n'est pas exactement identique au contraintes de Reynolds qui sont elles utilisées dans la simulation eulérienne. Cette différence est alors répercutée via la traînée sur le mouvement fluctuant des particules.

La différence entre les deux approches provient essentiellement du deuxième point évoqué au-dessus. Le traitement des termes de traînée est en effet adéquat, ce qui peut être montré par une étude du bilan de la contrainte $R_{pp,uu}$ (Laviéville [1997]). La différence dans la prédition des corrélations fluide-particule est minime d'après le paragraphe 5.2.2 car dépendant de la faculté du modèle de Langevin à garantir la relation $\widetilde{R}_{ff} = \underline{\underline{R}}_{ff}$. Cette dernière est bien respectée par le modèle SLM dans le cas de l'écoulement turbulent homogène simplement cisaillé ce qui explique le très bon accord des prévisions relatives à chaque approche. La seule source possible d'inconsistance est donc de nature statistique (le deuxième point provient d'un biais statistique).

Enfin la figure 5.10 présente le développement des composantes du tenseur d'anisotropie du mouvement fluctuant particulaire. Le tenseur d'anisotropie est défini par :

$$b_{pp,ij} = \frac{R_{pp,ij} - 2/3q_p^2}{2/3q_p^2} \quad (5.16)$$

Comme pour le cas de l'écoulement fluide, le mouvement particulaire est aussi fortement instationnaire comme le montre la figure 5.10. L'état stationnaire du tenseur d'anisotropie est seulement atteint en fin de simulation ce qui explique pourquoi des modèles basés sur l'agitation particulaire q_p^2 associé à des hypothèses d'équilibre (cf. § 3.2.4) ont peu de chances de bien prédire ce type d'écoulements.

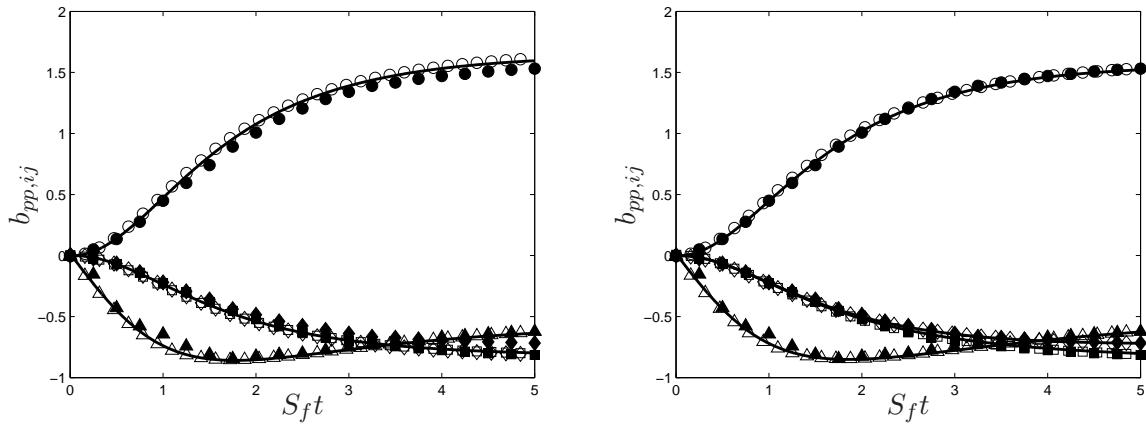


FIG. 5.10 – Développement du tenseur d'anisotropie des contraintes particulières (cas A) prédit par le modèle SLM (gauche) et le modèle NCLIPM (droite). \circ : lagrangien stochastique (\circ : $b_{pp,uu}$, \square : $b_{pp,vv}$, \diamond : $b_{pp,ww}$, \triangle : $b_{pp,uv}$) ; — : eulérian ; ● : LES/DPS (Laviéville [1997]).

5.2.5 Cas B

Des particules de moindre densité ont aussi été prises en compte afin de s'assurer de la généralité des arguments avancés pour les résultats précédents. Le cas B fait donc référence à des particules de densité deux fois plus petite que le cas précédent mais ne prend toujours pas en compte les collisions. Les figures suivantes présentent donc les résultats identiques aux paragraphes précédents dans le cas B.

La figure 5.11 montre que les résultats obtenus sans le cas A sont facilement généralisables à des cas de particules présentant un Stokes différent (que ce soit par une modification de la densité ou du diamètre). C'est pourquoi le cas B ne sera pas étudié dans les validations intermédiaires de l'approche hybride.

5.2.6 Prise en compte des collisions : cas Ac

L'introduction des collisions dans la résolution de l'écoulement turbulent homogène simplement cisailé apporte potentiellement une nouvelle source d'inconsistance entre les deux approches. La modélisation des termes collisionnels faite dans l'approche eulérienne peut en effet entraîner des inconsistances avec le lagrangien stochastique. Les collisions sont traitées dans le cadre de vitesses fluide non corrélées et considérées comme élastiques. On utilise un algorithme de type Bird (cf. § 2.8.3.3) dans la simulation lagrangienne stochastique et on modélise les termes collisionnels dans la simulation eulérienne par :

$$\mathcal{C}(R_{fp,ij}) = -\frac{2n_p}{3\tau_p^c} R_{fp,ij} \quad (5.17a)$$

$$\mathcal{C}(R_{pp,ij}) = -n_p \frac{\sigma_c}{\tau_p^c} \left[R_{pp,ij} - \frac{2}{3} q_p^2 \delta_{ij} \right] \quad (5.17b)$$

La destruction des contraintes fluide-particules due à l'hypothèse de chaos fluido-moléculaire est mise en évidence par la figure 5.12. Cette hypothèse, qui stipule que les vitesses du fluide vu par deux particules entrant en collisions ne sont pas corrélées, détruit ainsi artificiellement les contraintes fluide-particules. Laviéville [1997] montre dans sa thèse comment une hypothèse adéquate sur les vitesses du fluide vu par les particules permet d'éliminer cet effet de modélisation. Celui-ci suppose la partie fluctuante des vitesses du

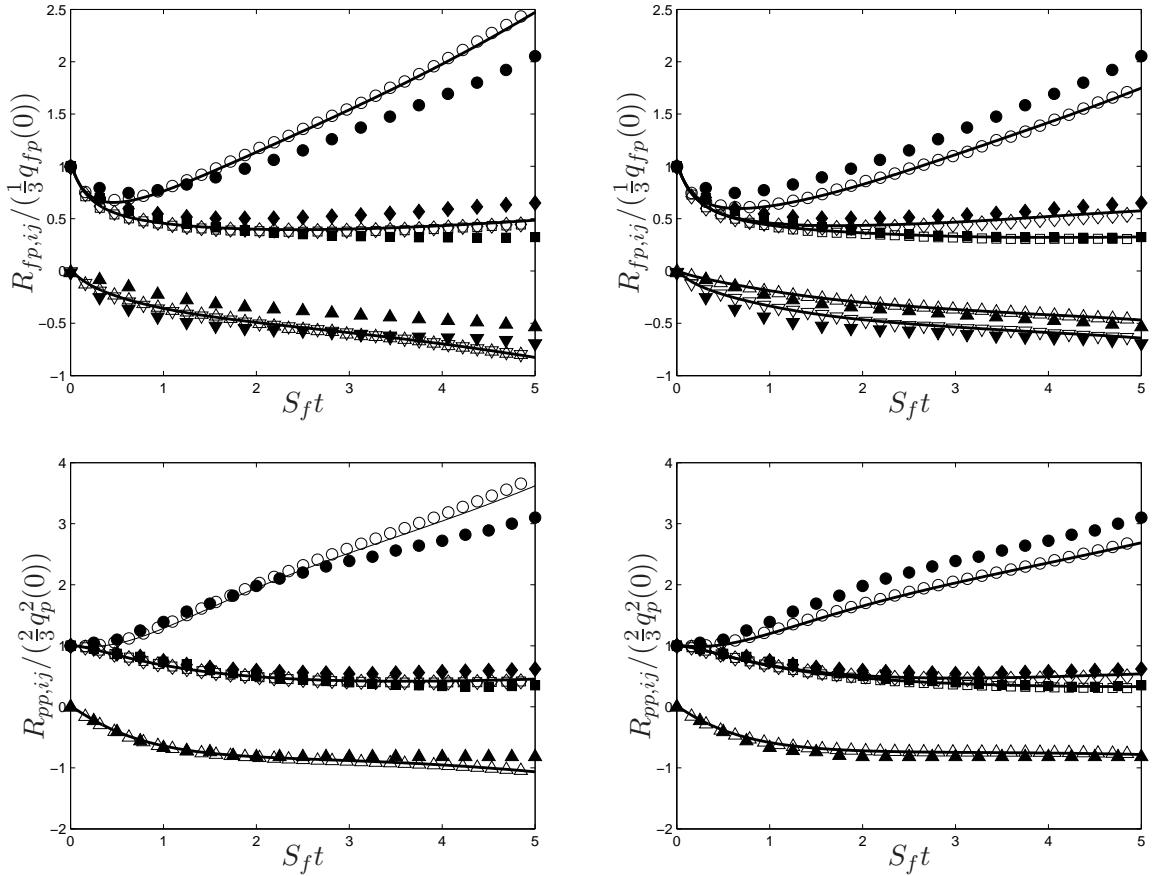


FIG. 5.11 – Développements des contraintes cinétiques (cas B) prédits par le modèle SLM (gauche) et le modèle NCLIPM (droite). \circ : lagrangien stochastique ; — : eulérien ; • : LES/DPS (Laviéville [1997]).

fluide vu comme complètement corrélées et montre qu’alors les collisions ne détruisent plus artificiellement les corrélations fluide-particules.

La destruction des contraintes fluide-particules est à l’origine d’une prédiction dégradée des propriétés du mouvement d’agitation de la phase particulaire, particulièrement pour les composantes longitudinale et de cisaillement. Les prédictions issues à partir du modèle SLM sont de plus en meilleure adéquation avec les résultats LES/DPS que les résultats issus du modèle NCLIPM, ce qui paraît surprenant au vu des résultats précédents. Il s’agit en fait d’un effet des collisions décorrélées. La destruction due à celles-ci étant à peu près identique dans les deux cas, la surestimation plus importante du modèle SLM compense mieux la destruction que le modèle LIPM. La figure 5.13 montre les résultats issus de simulations eulériennes en prenant en compte les collisions corrélées (et donc sans terme de collision pour les contraintes fluide-particules). Les prévisions du modèle NCLIPM sont cette fois-ci en meilleure adéquation avec les résultats LES/DPS que les résultats issus du modèle SLM.

5.3 Etude a priori des demi-flux

Afin de valider l’hypothèse sur la forme présumée des demi-flux des variables à travers la surface de couplage issus d’une pdf de type Richman (on rappelle que la pdf de type Richman peut être prise comme modèle de référence dans les écoulements homogènes, cf. § 4.2.3), une étude des demi-flux a été réalisée

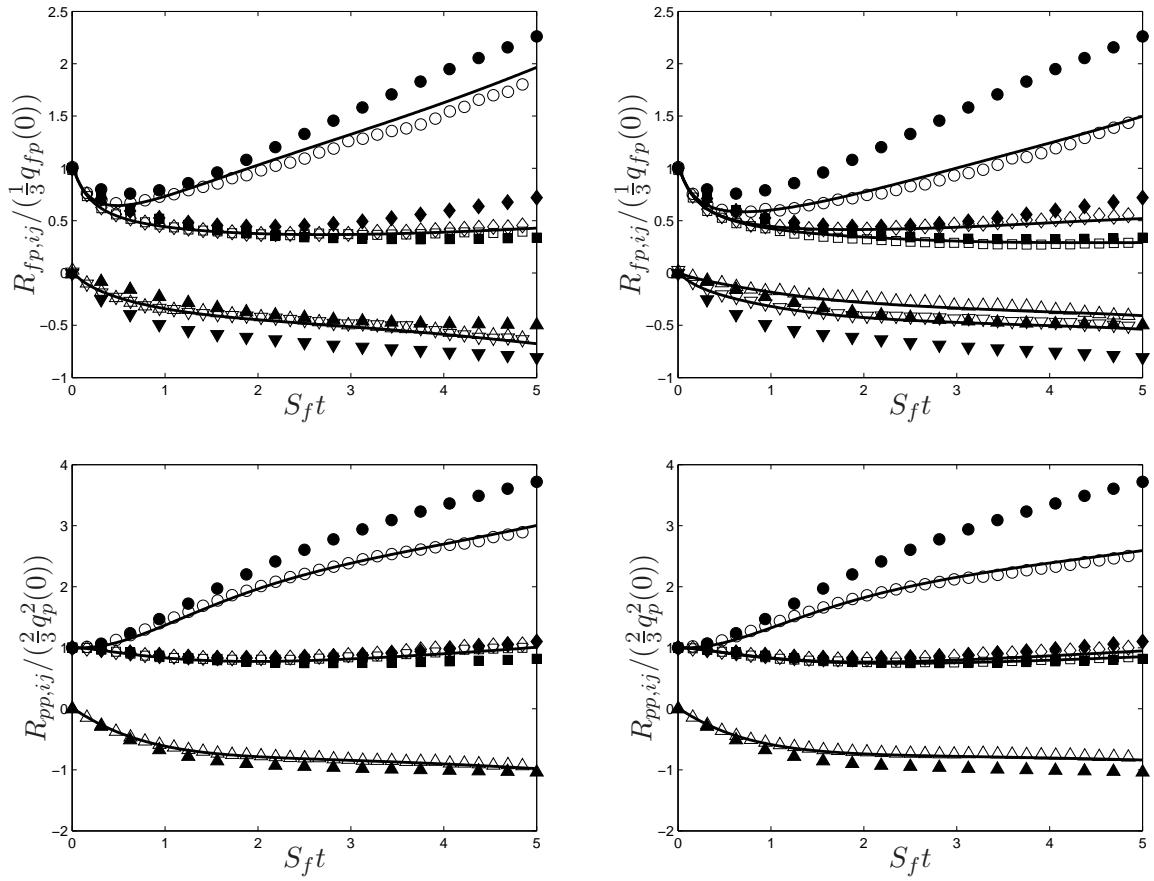


FIG. 5.12 – Développements des contraintes cinétiques (cas Ac) prédits par le modèle SLM (gauche) et le modèle NCLIPM (droite). \circ : lagrangien stochastique ; — : eulérien ; • : LES/DPS (Laviéville [1997]).

lors de la simulation lagrangienne stochastique seule.

Par symétrie les particules sortant du domaine par la face "gauche" de la boîte lagrangienne (Γ_1 dans la figure 5.3) sont aussi (au gradient de vitesse moyenne près) les particules entrant dans le domaine par la face "droite" de couplage Γ_r . Les propriétés du mouvement fluctuant de ces deux types de particules sont identiques, et les propriétés du mouvement moyen se déduisent par une translation de vitesse $\partial U_p / \partial y = L$. Par symétrie, les résultats suivants sont aussi valables pour n'importe quelle face de normale y .

5.3.1 Expressions des demi-flux associés à la pdf de Richman

Les expressions des demi-flux associés à la pdf de Richman dans le cas de l'écoulement turbulent simplement cisillé sont données par :

$$\mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(1, \underline{x}_\Gamma, t) = -n_p(\underline{x}_\Gamma, t) \sqrt{\frac{R_{pp,vv}}{2\pi}} \quad (5.18a)$$

$$\mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(c_i, \underline{x}_\Gamma, t) = \mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(1, \underline{x}_\Gamma, t) \left[U_i + \sqrt{\frac{\pi}{2}} \Theta_{i1} \sqrt{R_{pp,vv}} \right] \quad (5.18b)$$

$$\mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(c_i'' c_j'', \underline{x}_\Gamma, t) = \mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(1, \underline{x}_\Gamma, t) [R_{ij} - \Theta_{i1} \Theta_{j1} R_{pp,vv}] \quad (5.18c)$$

Les demi-flux de vitesses moyennes et de contraintes cinétiques sont ainsi très simplement reliés au flux

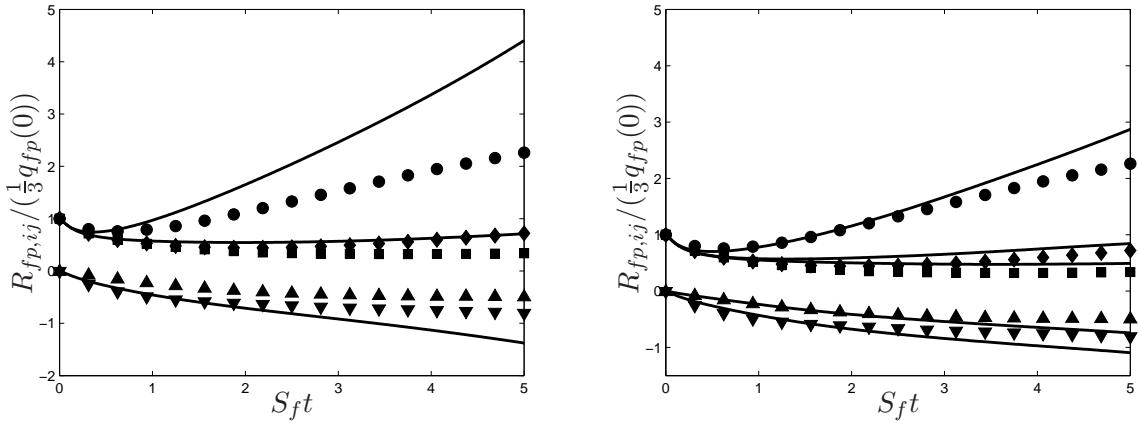


FIG. 5.13 – Développements des contraintes cinétiques (cas Ac) prédits par le modèle SLM (gauche) et le modèle NCLIPM (droite). — : eulérien avec collisions corrélées ; ● : LES/DPS (Laviéville [1997]).

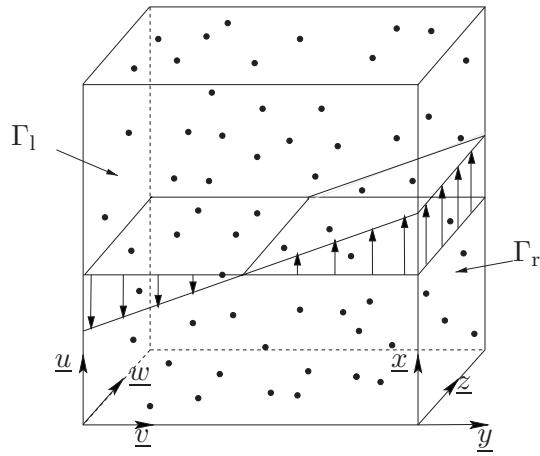


FIG. 5.14 – Configuration de l'écoulement

de densité de particules. On définit ainsi la moyenne sur les particules "entrantes" $\langle \cdot \rangle_{\Gamma}^-$ par la relation :

$$\langle \Psi \rangle_{\Gamma}^- = \frac{\mathcal{F}_{\Gamma}^{\text{eul}^-}(\Psi, \underline{x}_{\Gamma}, t)}{\mathcal{F}_{\Gamma}^{\text{eul}^-}(1, \underline{x}_{\Gamma}, t)} \quad (5.19)$$

Les moyennes sur les particules sortantes s'expriment donc ainsi simplement à partir des moments n_p , \underline{U} et \underline{R} . Ces moments (et donc les valeurs des demi-flux associés) peuvent être donnés aussi bien par la simulation lagrangienne que par la simulation eulérienne. Lorsque ces demi-flux (resp. moyennes) sont calculés à partir des moments lagrangiens (resp. eulériens), nous parlerons de demi-flux (resp. moyennes) de Richman lagrangiens (resp. eulériens). Même si seuls les demi-flux de Richman eulériens sont intéressants dans l'optique du couplage, il est intéressant de comparer les demi-flux réels avec les demi-flux associés de Richman lagrangiens afin de valider l'hypothèse de pdf de Richman.

Le nombre moyen de particules numériques sortantes par pas de temps δt au travers la face d'étude (de surface L^2) est donné par :

$$\delta \mathcal{N}_p^- = \frac{n_p(\underline{x}_{\Gamma}, t)}{\kappa} \sqrt{\frac{R_{pp,vv}}{2\pi}} L^2 \delta t \quad (5.20)$$

ce qui donne pour les conditions de la simulation $\delta \mathcal{N}_p^- \simeq 0,7$. Ce nombre est trop petit (en considérant la nécessité de faire des statistiques sur les particules sortantes) et c'est pourquoi il a été pris le parti de diviser la taille de la boîte par 10 ($L = 1,92 \cdot 10^{-2} \text{ m}$) tout en gardant le nombre de particules numériques constant. Le nouveau poids de nos particules numériques est donc $\kappa = 2 \cdot 10^{-2}$, ce qui permet de multiplier le rapport L^2/κ par 10 et ainsi de s'assurer que plusieurs particules numériques traversent la face d'étude à chaque pas de temps.

5.3.2 Comparaison des demi-flux de Richman lagrangiens au calcul lagrangien

La figure 5.15 présente la comparaison au cours du temps du demi-flux de particules numériques sortantes issu du calcul lagrangien périodique avec le demi-flux de Richman lagrangien. Au cours de la simulation environ 28% des 30000 particules numériques initiales sont passées au travers la face d'étude, soit une moyenne proche de 5 particules numériques par pas de temps. Ce faible nombre explique la variance assez élevée du calcul du flux de particules numériques visible sur les points de la moyenne glissante sur 5 points de la figure 5.15. Cet effet est moins important pour la moyenne glissante sur 100 points ce qui permet de remarquer que le demi-flux est très bien prédict par une hypothèse de type Richman sur la pdf de l'écoulement.

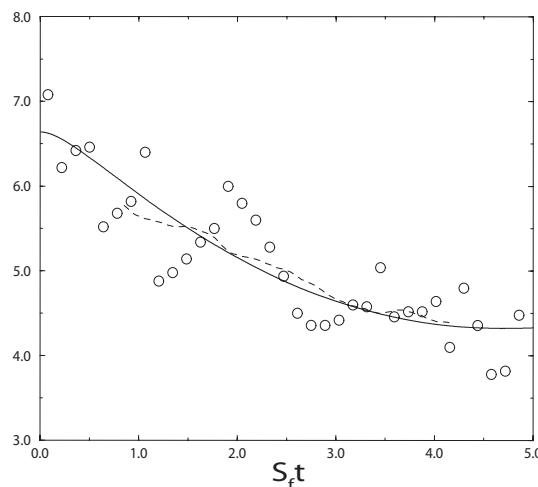


FIG. 5.15 – Comparaison du nombre de particules numériques sortantes par pas de temps (cas A). \circ : lagrangien stochastique (moyenne glissante sur 5 pas de temps) ; $\cdots \cdots$: lagrangien stochastique (moyenne glissante sur 100 pas de temps) ; — : demi-flux de Richman associés au moments lagrangiens.

La figure 5.16 présente quant à elle le développement des composantes de la vitesse moyenne des particules sortantes au travers Γ_1 . Les résultats du lagrangien sont donnés au travers d'une moyenne glissante sur 10 pas de temps, équivalent à une statistique sur une cinquantaine de particules numériques. Les résultats sont cette fois-ci très satisfaisants aussi bien pour la valeur moyenne que pour la variance. Le développement de la vitesse moyenne longitudinale des particules sortantes est particulièrement en accord avec l'hypothèse de pdf de Richman. Les flux de quantité de mouvement étant parfaitement décrit par une pdf de Richman ce comportement était attendu car cette pdf est valable à l'ordre 2. On retrouve néanmoins naturellement le mécanisme favorisant la traversée de la face Γ_1 par des particules de plus grande vitesse longitudinale du fait du développement de la contrainte de cisaillement $R_{pp,uv}$ (cette contrainte étant négative, les particules venant de la droite ($v_p < 0$) ont en moyenne une vitesse fluctuante longitudinale positive).

La figure 5.17 présente le développement des demi-flux de corrélations fluide-particules en introduisant

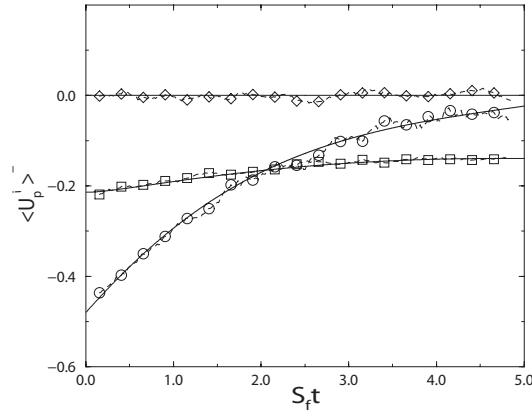


FIG. 5.16 – Comparaison du développement des vitesses moyennes des particules sortantes (cas A). \circ : lagrangien stochastique ($\circ : \langle U_p \rangle^-$, $\square : \langle V_p \rangle^-$, $\diamond : \langle W_p \rangle^-$); ······ : lagrangien stochastique (moyenne glissante sur 10 pas de temps); — : moyennes sortantes sur les demi-flux de Richman associés aux moments lagrangiens.

la comparaison aux moyennes sur les demi-flux de Richman associés aux moments lagrangiens et eulériens. Dans le cas des contraintes fluide-particules les prédictions des approches eulérienne et lagrangienne sont très proches ce qui explique le très bon accord entre les moyennes de Richman eulériennes et lagrangiennes. L'accord est tout aussi bon avec les valeurs issues de la simulation lagrangienne stochastique ce qui montre l'acuité de la pdf de Richman comme pdf de référence en ce qui concerne les corrélations fluide-particules dans le cas de l'écoulement turbulent simplement cisaillé.

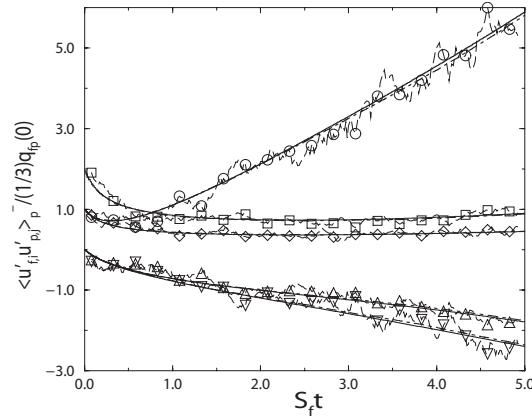


FIG. 5.17 – Développements des corrélations fluide-particules sortantes (cas A). \circ : lagrangien stochastique ($\circ : \langle R_{fp,uu} \rangle^-$, $\square : \langle R_{fp,vv} \rangle^-$, $\diamond : \langle R_{fp,ww} \rangle^-$, $\triangle : \langle R_{fp,uv} \rangle^-$); - - - : moyennes sur les demi-flux de Richman associés aux moments lagrangiens; — : moyennes sur les demi-flux de Richman associés aux moments eulériens.

Finalement la figure 5.18 présente les résultats concernant le développement des demi-flux des contraintes cinétiques particulières. La différence est maintenant légèrement plus sensible concernant la contrainte longitudinale $R_{pp,uu}$ ce qui implique une légère différenciation dans les moyennes de Richman eulériennes et lagrangiennes. Les résultats lagrangiens sont à nouveau en très bon accord avec les moyennes de Richman, spécialement les moyennes lagrangiennes. L'hypothèse d'une pdf de Richman est donc encore une fois bien supportée par les simulations, et ce durant toute la simulation. Il est ainsi remarquable que cette hypothèse

(qui est presque une hypothèse d'équilibre) ne soit jamais prise en défaut, y compris en début de simulation pendant la période de temps où le tenseur d'anisotropie a un comportement fortement instationnaire.

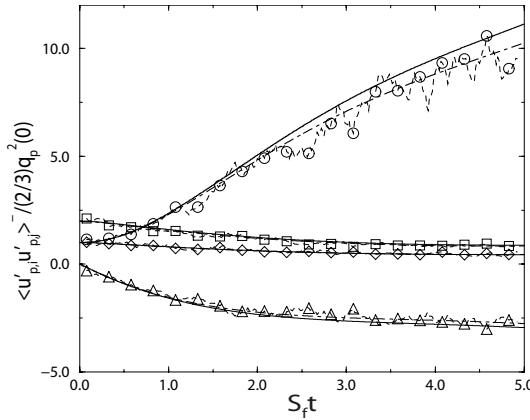


FIG. 5.18 – Développements des corrélations particule-particule sortantes (cas A). \circ : lagrangien stochastique (\circ : $\langle R_{pp,uu} \rangle^-$, \square : $\langle R_{pp,vv} \rangle^-$, \diamond : $\langle R_{pp,ww} \rangle^-$, \triangle : $\langle R_{pp,uv} \rangle^-$); - - - : moyennes sur les demi-flux de Richman associés aux moments lagrangiens ; — : moyennes sur les demi-flux de Richman associés aux moments eulériens.

5.3.3 Conclusion

L'hypothèse modélisant la pdf d'équilibre de l'écoulement suivant une pdf de type Richman généralisée s'avère particulièrement pertinente dans le cadre des écoulements turbulents homogène simplement cisaillés. Bien qu'aucun travail mathématique n'a encore démontré que la pdf de Richman (6.35) est solution de l'équation d'évolution de la pdf (2.11) fermée avec les modèles décrits au chapitre 2, les résultats issus de simulations numériques montrent que cette dernière est très proche de la pdf représentant l'écoulement. Il serait d'ailleurs peut-être possible de démontrer que la pdf de Richman est solution dans un cadre où la traînée est linéarisée et où l'opérateur de collision est équivalent à l'opérateur de Boltzmann, *i.e.* pour des collisions décorrélées.

En étendant ainsi la forme de la pdf de Richman aux écoulements gaz-particule, un outil "simple" et capable de prédire correctement les demi-flux de moments jusqu'à l'ordre deux est disponible pour les écoulements turbulents simplement cisaillés. Le choix de cette pdf de référence en lieu et place du développement de Grad à partir d'une pdf Maxwellienne paraît donc pertinent. Outre le fait que la forme de Richman semble en parfaite adéquation avec la pdf contrairement au développement de Grad, ce dernier possède de plus des boucles négatives qui n'ont pas de justifications physiques. Le modèle de Richman semble donc être un modèle plus intéressant comme référence.

5.4 Méthode hybride

La méthodologie complète de couplage de l'approche hybride eulérienne-lagrangienne (HELM) est maintenant appliquée à l'écoulement homogène cisaillé du cas A. Le domaine spatial est ainsi divisé en deux sous-domaines. La normale des surfaces de couplage \underline{n} est toujours orientée dans la direction normale de l'écoulement ($\underline{n} \equiv \underline{y}$), c'est-à-dire pour des configurations sans vitesses moyennes normales aux faces de couplage. Le domaine lagrangien Ω_{lag} est toujours de dimension trois pour une résolution adéquate des

collisions. Le domaine lagrangien n'est plus cubique car celui-ci est coupé dans la direction normale. La longueur dans la direction normale du domaine lagrangien est notée L_{lag} . Le domaine eulérien quant à lui peut être limité à des maillages monodimensionnels comme dans la figure 5.19.

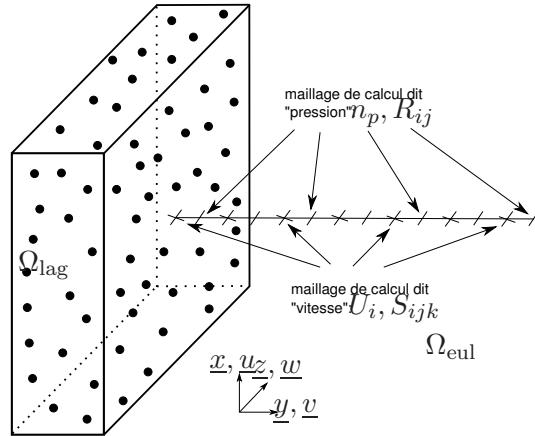


FIG. 5.19 – Description schématique des domaines lagrangien et eulérien.

On définit alors le rapport de volume du domaine lagrangien :

$$\eta = \frac{V_{\text{lag}}}{L^3} = \frac{L_{\text{lag}}}{L} \quad (5.21)$$

Lorsque ce rapport de volume diminue, le couplage a de plus en plus d'influence sur la partie lagrangienne. En effet le nombre de particules numériques injectées reste identique quelle que soit la position de l'interface tandis que le nombre de particules numériques présentes dans le domaine est directement proportionnel au rapport de volume η . Cet effet statistique n'est pas présent dans les simulations eulériennes et le paramètre η n'influence donc pas directement le comportement de la simulation dans le domaine eulérien.

L'écoulement est résolu dans le domaine eulérien par une discréttisation volumes-finis sur deux maillages décalés. Un premier maillage dit "vitesse" sert de points de calculs pour les vitesses moyennes ainsi que les corrélations triples. Un deuxième, décalé par rapport au premier et dit "pression", est utilisé pour le calcul de la densité de particule ainsi que les corrélations doubles. Les points du deuxième maillage se trouvent au centre des cellules du premier maillage, excepté pour le dernier point qui est situé à l'extérieur du maillage vitesse (cf. figure 5.23). L'utilisation de ces deux maillages décalés permet un calcul propre des termes de flux dans toutes les équations car les corrélations d'ordre supérieur au moment concerné sont calculées sur les facettes des cellules de calcul du moment.

5.4.1 Validation de la méthode d'injection

Cette section sert de validation de la procédure d'injection développée au chapitre 4. On ne considère que l'injection de particules numériques dans le domaine lagrangien afin de simuler les demi-flux des moments $\mathcal{F}_{\Gamma}^{\text{eul}-}(\psi, \underline{x}_{\Gamma}, t)$. A cette fin les particules entrantes à travers la face Γ_r ne seront pas prises identiques aux particules qui sortent à travers la face Γ_1 mais injectées suivant la pdf de flux (4.21) associée aux moments eulériens. Les particules sortantes sont quant à elles perdues pour la simulation lagrangienne stochastique.

A chaque pas de temps eulérien les moments eulériens sont évalués à la face d'injection et la pdf de flux est prise à chaque pas de temps selon (4.21) pour $\underline{c}_p \cdot \underline{n} < 0$:

$$g_p^-(\underline{c}, t) = |\underline{c}_p \cdot \underline{n}| \frac{n_{p, \Gamma}^{\text{eul}}}{\sqrt{8\pi^3 \det(\underline{\underline{R}}_{\Gamma}^{\text{eul}}(t))}} \exp\left(-\frac{1}{2} \underline{c}'' \cdot \underline{\underline{R}}_{\Gamma}^{-1, \text{eul}}(t) \cdot \underline{c}''\right) \quad (5.22)$$

L'écoulement étant homogène dans les directions longitudinales et transversales, cette pdf ne dépend pas de la position sur la face d'injection. Les particules injectées sont donc réparties suivant une loi uniforme sur la face d'injection. A chaque pas de temps la pdf du flux incident est modifiée en accord avec le développement des contraintes cinétiques de la simulation eulérienne.

L'écoulement dans la partie lagrangienne est quant à lui résolu à l'aide d'un schéma de Langevin SLM. L'injection est effectuée à partir de la même pdf d'injection sur plusieurs pas de temps lagrangiens, ici 5. Cette contrainte est imposée afin d'obtenir un pas de temps eulérien plus grand que le pas de temps lagrangien : $dt_{\text{eul}} = 5dt_{\text{lag}}$. L'utilisation de schémas partiellement implicites dans le code eulérien permet en effet de considérer des pas de temps plus grands dans le domaine eulérien. Il est nécessaire alors de faire attention à ce que le pas de temps eulérien respecte toujours les échelles caractéristiques temporelles de l'écoulement, dont la plus représentative est ici l'échelle basée sur le gradient moyen $1/S_f$.

La simulation eulérienne fournit alors le développement en temps des moments eulériens : $\langle \Psi \rangle_p (i \cdot dt_{\text{eul}})$. L'injection des particules pendant les 5 pas de temps lagrangiens entre $i \cdot dt_{\text{eul}}$ et $(i + 1) \cdot dt_{\text{eul}}$ peut s'effectuer suivant la pdf de flux associée aux moments à l'instant $i \cdot dt_{\text{eul}}$ ou à l'instant $(i + 1) \cdot dt_{\text{eul}}$. Des tests qui ne sont pas exposés ont montré que pour des valeurs raisonnables du pas de temps eulérien, les résultats issus de l'injection ne dépendent pas de l'instant auxquels les moments eulériens d'injection sont pris. Ils seront donc par la suite pris à l'instant initial du calcul eulérien $i \cdot dt_{\text{eul}}$.

Les figures suivantes présentent la comparaison des propriétés des particules effectivement injectées dans le domaine lagrangien aux propriétés théoriques de la pdf modèle d'injection (4.21).

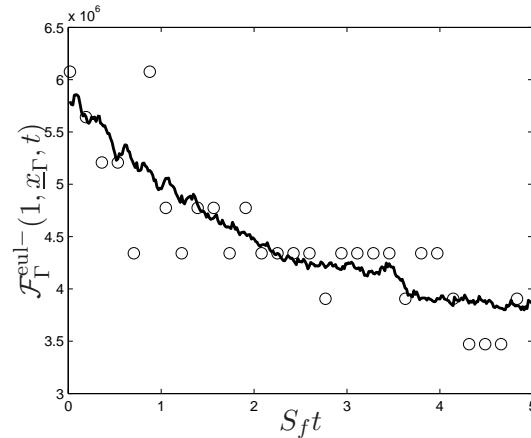


FIG. 5.20 – Développement du flux de particules entrantes par la surface de couplage (cas A). \circ : demi-flux de particules injecté ; — : demi-flux de particules de Richman associé aux moments eulériens à la face de couplage.

Les propriétés des particules injectées par la méthode de réjection présentent donc une variance allant croissant dans la simulation. Cet effet est dû au comportement de la contrainte particulaire normale $R_{pp,vv}$ qui est décroissante lors de la simulation. Comme le flux de particules passant à travers la surface de couplage s'écrit :

$$\mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(1, \underline{x}_\Gamma, t) = -n_p(\underline{x}_\Gamma, t) \sqrt{\frac{R_{pp,vv}}{2\pi}} \quad (5.23)$$

le nombre de particules injectées à chaque pas de temps diminue au cours de la simulation. Le poids des particules numériques κ a de plus été choisi pour obtenir une valeur limite du nombre de particules numériques injectées par pas de temps eulérien. Dans la simulation dont sont tirés les résultats il passe entre 10 et

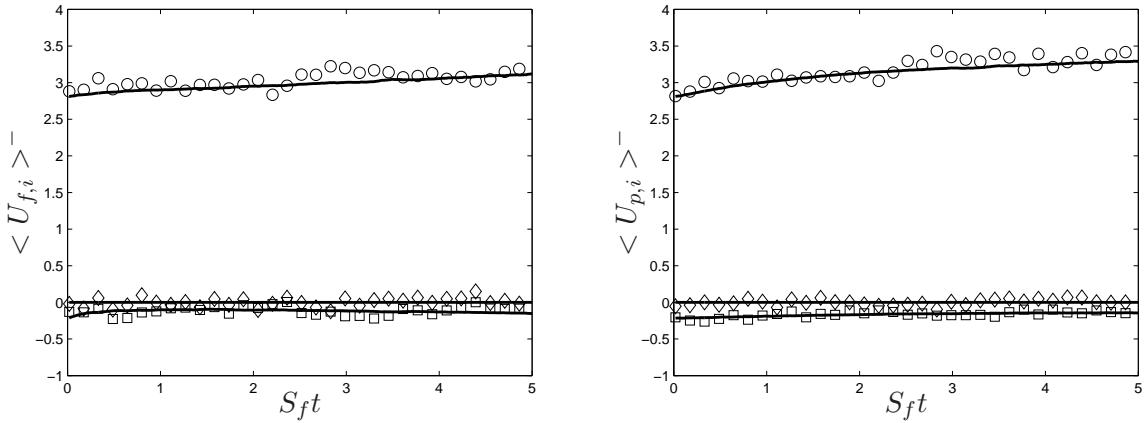


FIG. 5.21 – Développement de la vitesse moyenne du fluide vu (gauche) et des particules entrantes (droite) par la surface de couplage (cas A). \circ : moyennes sur les particules injectées ($\circ : \langle U \rangle^-$, $\square : \langle V \rangle^-$, $\diamond : \langle W \rangle^-$); — : moyennes issues de la pdf de Richman associée aux moments eulériens à la face couplage.

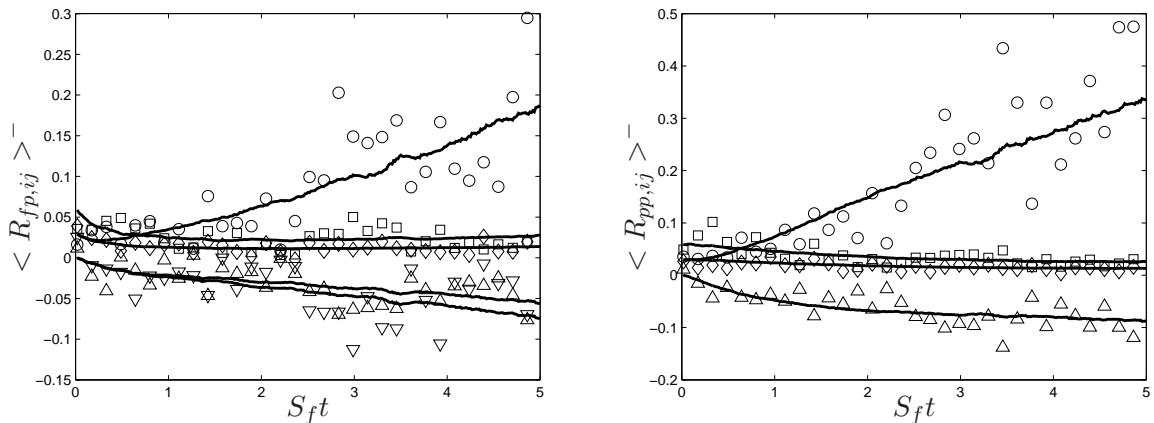


FIG. 5.22 – Développements des contraintes fluide-particules entrantes (gauche) et des contraintes particulières entrantes (droite) dans le cas A. \circ : moyennes sur les particules numériques injectées ($\circ : \langle R_{uu} \rangle^-$, $\square : \langle R_{vv} \rangle^-$, $\diamond : \langle R_{ww} \rangle^-$, $\triangle : \langle R_{uv} \rangle^-$); — : moyennes issues de la pdf de Richman associée aux moments eulériens à la face couplage.

15 particules numériques pas pas de temps eulérien (et donc 2 à 3 par pas de temps lagrangien), ce qui peut être considéré comme une limite basse pour effectuer des statistiques sur ces particules. Malgré ce nombre plutôt bas de particules injectées la variance, bien qu'importante, reste tout de même raisonnable et ne vient pas perturber outre mesure l'écoulement dans le domaine lagrangien qui présente en soi un bruit statistique du même ordre. L'étude à priori des demi-flux du § 5.3 a en effet montré qu'une moyenne sur au moins 10 pas de temps lagrangiens était nécessaire pour obtenir des variances faibles.

La procédure d'injection de particule numériques par la méthode de réjection présentée au § 4.3.5 semble donc être une réponse efficace au problème de l'injection.

5.4.2 Couplage par demi-flux

5.4.2.1 Configuration

Les maillages eulériens sont des maillages réguliers de raison 1. Le premier point du maillage vitesse est situé à l'interface d'injection des particules numériques dans le domaine lagrangien (cf. figure 5.23). Les flux des moments calculés en ce point ne sont pas les flux traversant la surface de couplage mais traversant une face légèrement décalée par rapport à celle-ci. Les demi-flux sortants du lagrangien ainsi que les demi-flux théoriques concernant les vitesses moyennes du fluide vu et des particules sont donc calculés sur cette deuxième face située à l'intérieur du domaine lagrangien.

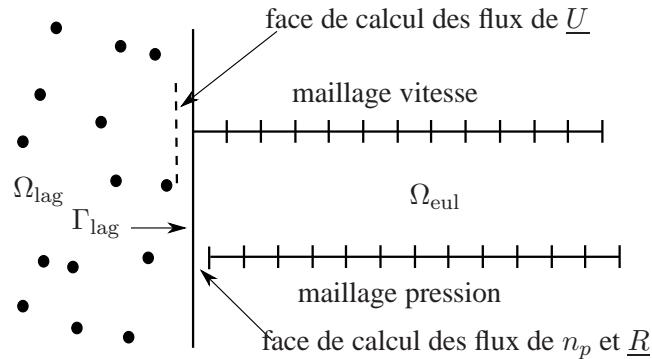


FIG. 5.23 – Description des maillages dans le cas du couplage par demi-flux.

5.4.2.2 Développement temporel

Les premières validations de la méthode hybride eulérienne-lagrangienne ont été effectuées à partir d'une méthodologie développée pour les écoulements homogènes. Cette méthodologie, développée au § 4.2.3, permet d'effectuer le couplage du lagrangien vers l'eulérien en utilisant des conditions de flux.

La partie gauche de la figure 5.24 présente le comportement de la décomposition des flux totaux selon (4.21) pour quelques moments. Les conditions de type flux (imposées au domaine eulérien) associées sont représentés sur la partie droite.

La partie gauche de la figure 5.24 est donnée pour chaque pas de temps eulérien (qui représente toujours 5 pas de temps lagrangiens) et présente ainsi une grande variance dans le calcul des demi-flux sortants du domaine lagrangien. Les demi-flux entrants présentent un bruit stochastique beaucoup moins important car ces demi-flux sont calculées à partir des formules théoriques du § 4.5 et donc ne dépendent que des valeurs des moments eulériens à la face de couplage.

Les résultats concernant les flux totaux issus de la formule (4.21) sont représentés en partie droite après une moyenne sur 6 pas de temps eulériens (ou 30 pas de temps lagrangiens). Cette durée $\Delta t = 6dt_{\text{eul}}$ a été choisie pour obtenir $\Delta t S_f \approx 1/10$. Comme $1/S_f$ représente le temps caractéristique d'évolution macroscopique de l'écoulement, les résultats filtrés sur cette durée de temps sont représentatifs du comportement moyen de la méthodologie de couplage par demi-flux sur des périodes de temps plus petites que les échelles caractéristiques du mouvement moyen. La figure 5.24 permet donc de caractériser le comportement en moyenne de la méthodologie de couplage.

La variance du calcul des demi-flux sortants est fonction du nombre de particules sortantes à chaque pas de temps eulérien. Cette variance est ici assez élevée car il sort en début de simulation une trentaine de particules

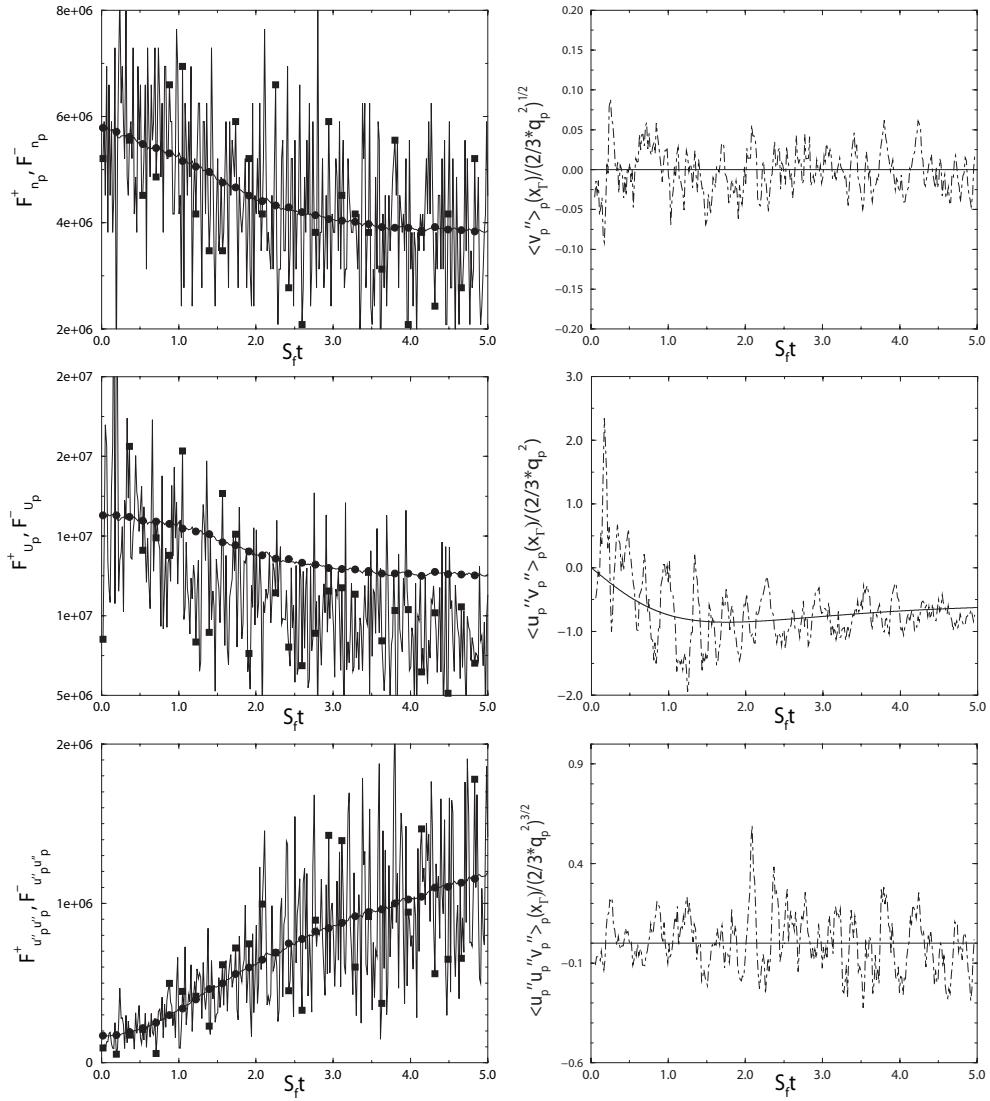


FIG. 5.24 – Développements des flux de n_p , U_p et $R_{pp,uu}$. gauche : demi-flux entrant (\circ) et demi-flux sortant (\square). droite : condition de flux imposée au domaine eulérien associée aux demi-flux de gauche et moyennée sur $\Delta t = 6dt_{\text{eul}}$ ($\cdots\cdots$) et valeurs théoriques (—).

par pas de temps eulérien, et une quinzaine en fin de simulation. Ces nombres peuvent être considérés comme petits pour le calcul de statistiques, et semblent être une limite basse à ne pas trop dépasser pour effectuer un couplage fort entre les deux approches. En effet, le nombre de particules sortantes étant égal au nombre de particules entrantes, plus ce nombre est faible et moins le lagrangien est sensible à l'injection suivant les moments lagrangiens. Ce nombre doit donc garder une valeur minimale même si la prévision des flux en moyenne pourrait être assurée avec moins de particules passant à travers la surface de couplage.

Malgré un bruit stochastique très important en ce qui concerne les demi-flux sortants, la reconstruction des flux totaux selon (4.21) s'avère très précise car les valeurs obtenues avec HELM sont proches des valeurs théoriques issues d'un calcul périodique. Il faut ici souligner l'importance de s'être donné les demi-flux incidents de Richman associés aux moments eulériens à la face de couplage. Le calcul de ces demi-flux est ainsi nettement moins bruité ce qui permet d'obtenir des fluctuations raisonnables dans le calcul des flux totaux.

Les flux totaux des variables eulériennes étant calculés précisément en moyenne, les résultats dans les

domaines lagrangien et eulérien issus de la méthodologie de couplage sont en très bon accord avec les résultats issus de chaque approche non couplée. La figure 5.25 montre ainsi le développement temporel des contraintes fluide-particules et particulières dans les domaine lagrangien et eulérien. Les résultats exposés dans la figure ne sont pas les résultats de chaque approche dans une zone proche de la face de couplage mais des résultats représentatif de l'effet du couplage sur le comportement global des deux approches. Les résultats lagrangien sont ainsi donnés par une moyenne sur tout le domaine lagrangien et les résultats eulériens sont donnés pour un point situé au centre du domaine eulérien.

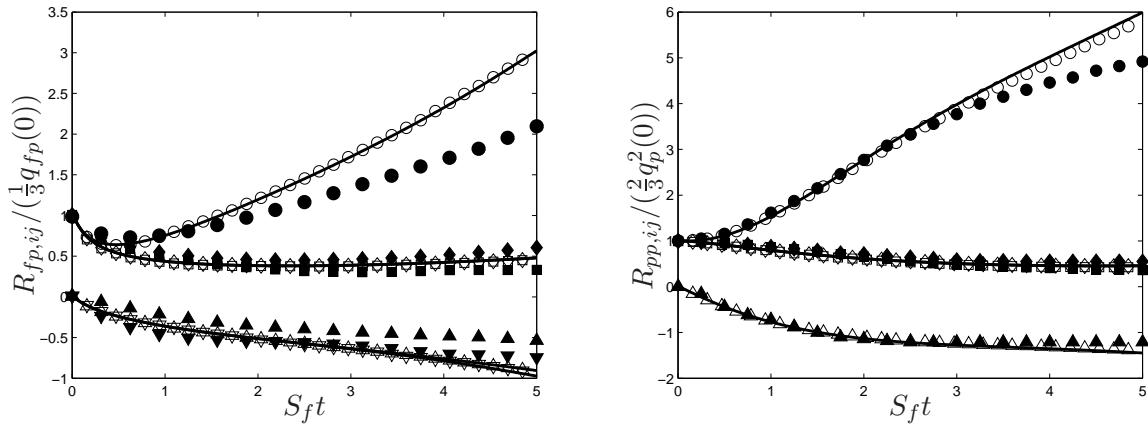


FIG. 5.25 – Développements des contraintes fluide-particules (gauche) et des contraintes particulières (droite) prédits par HELM avec $\eta = 0,3$. \circ : moyenne dans le domaine lagrangien (\circ : R_{uu} , \square : R_{vv} , \diamond : R_{ww} , \triangle : R_{uv}) ; — : moments au centre du domaine eulérien ; \bullet : LES/DPS (Laviéville [1997]).

Les résultats présentent peu de sensibilité au couplage ce qui est normal car, les deux approches étant consistantes, les résultats issus des deux approches sont très proches. La méthodologie de couplage ne doit donc pas modifier les résultats dans chaque domaine.

L'influence du rapport de volume η sur le développement des contraintes particulières dans le domaine lagrangien est présenté dans la figure 5.26. Les résultats issus du lagrangien périodique ($\eta = 1$) sont comparés aux résultats issus de simulation HELM avec des rapports de volume $\eta = 0,1$ et $\eta = 0,3$. Les résultats issus des simulations HELM sont les moyennes sur tout le domaine lagrangien. C'est pourquoi les effets du couplage sont de moins en moins marqués lorsque le rapport de volume augmente.

Dans toutes les simulations le poids numérique des particules κ est gardé constant. Le rapport du nombre de particules numériques entrantes sur le nombre de particules dans le domaine lagrangien est ainsi identique dans le cas $\eta = 0,1$ et l'étude des demi-flux du § 5.3.

Du fait du nombre restreint de particules dans le cas $\eta = 0,1$, les moyennes des contraintes particulières sur le domaine lagrangien fluctuent légèrement. De plus d'après la figure 5.25 la contrainte longitudinale particulaire d'injection issue de l'eulérien est légèrement supérieure à celle observée dans le domaine lagrangien. L'augmentation de la contrainte $R_{pp,uu}$ avec la réduction du rapport de volume est donc normale.

5.4.2.3 Développement spatial

Après avoir étudié le développement temporel du couplage, les figures 5.27 et 5.28 présentent les profils dans la direction normale issus d'une simulation HELM avec un rapport de volume $\eta = 0,3$ et $\eta = 0,1$. Ces profils sont donnés en fin de simulation à l'instant $S_ft = 5$ pour le cas A. Le nombre moyen de particules

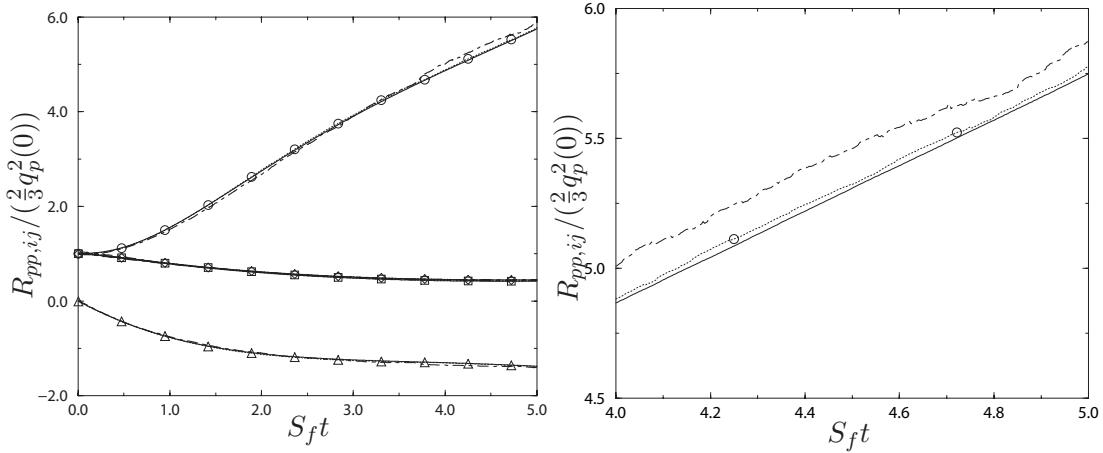


FIG. 5.26 – Influence de η sur le développement des contraintes particulières dans Ω_{lag} (cas A). \circ : HELM avec $\eta = 0.3$ (\circ : $R_{pp,uu}$, \square : $R_{pp,vv}$, \diamond : $R_{pp,ww}$, \triangle : $R_{pp,uv}$) ; - - - : HELM avec $\eta = 0.1$; — : lagrangien stochastique périodique $\eta = 1$.

numériques par cellules dans le domaine lagrangien n'est pas constant car le couplage avec $\eta = 0,3$ a été réalisé avec 15 cellules statistiques dans le domaine et le cas $\eta = 0,1$ avec 10 cellules. Le cas $\eta = 0,1$ présente donc 3 fois moins de particules numériques et en moyenne deux fois moins de particules par cellule statistique, d'où un bruit statistique plus important.

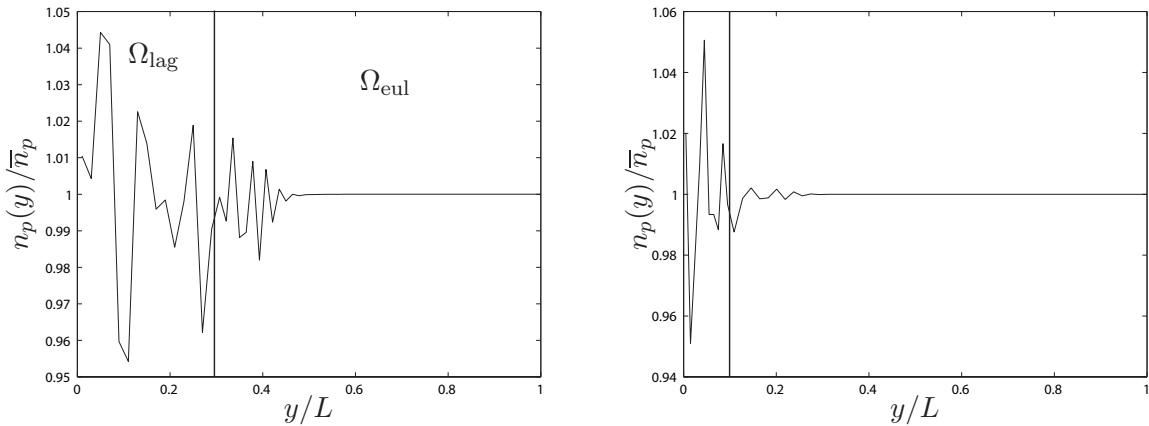


FIG. 5.27 – Profils de densité de particules à l'instant $t = 5/S_f$ issus de HELM avec $\eta = 0,3$ (gauche) et $\eta = 0,1$ (droite).

Les figures 5.27 présentent les profils de densité ainsi que les profils des contraintes fluide-particules et particulières pour deux rapports de volume $\eta = 0,3$ et $\eta = 0,1$. Les flux totaux de ces moments sont théoriquement nuls pour des écoulements homogènes. Nous avons tout de même vu avec la figure 5.24 que le calcul des demi-flux sortants dans le lagrangien stochastique introduit un bruit dans le calcul effectif des flux totaux par la relation (4.21). La nullité des flux totaux concernant la densité et les contraintes particulières n'est ainsi pas assurée à chaque pas de temps, mais en moyenne.

La non-nullité du flux total de densité à chaque pas de temps est responsable de la fluctuation du profil de densité dans le domaine eulérien observé dans la figure 5.27. Les fluctuations du flux se répercutent à travers le domaine eulérien car le terme de flux est le seul terme non nul dans l'équation d'évolution de la

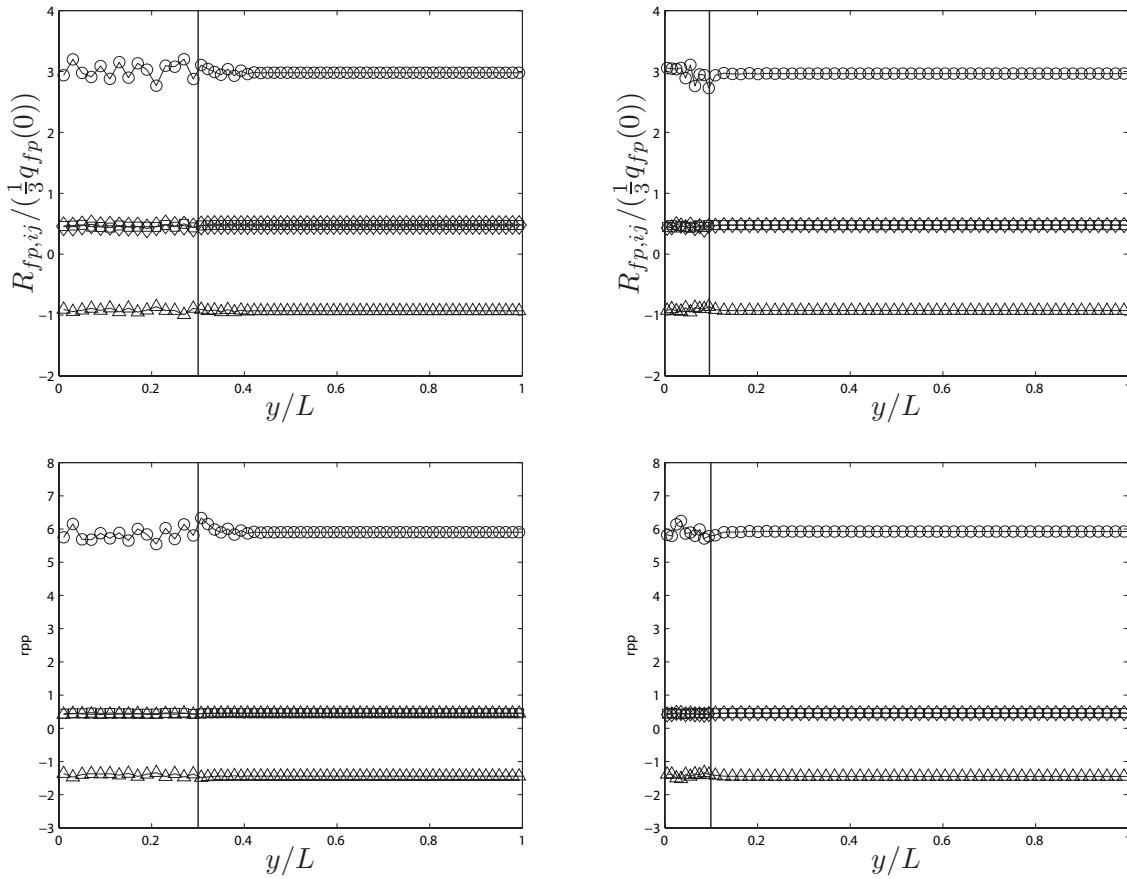


FIG. 5.28 – Profils de contraintes fluide-particules et particulaires à l'instant $t = 5/S_f$ issus de HELM avec $\eta = 0, 3$ (gauche) et $\eta = 0, 1$ (droite) ; $\circ : R_{uu}$, $\square : R_{vv}$, $\diamond : R_{ww}$, $\triangle : R_{uv}$.

densité de particules. Les fluctuations semblent se propager dans le domaine eulérien mais en perdant en amplitude. Les fluctuations présentes dans le domaine eulérien sont tout de même moins importantes que les fluctuations statistiques présentes dans le domaine lagrangien, ce qui représente une amélioration par rapport à un calcul lagrangien stochastique seul.

Les flux totaux de contraintes particulaires à la face de couplage ne sont pas non plus exactement nuls comme le montre la figure 5.24. Les fluctuations des flux totaux calculés n'influencent pourtant pas les résultats dans le domaine eulérien. La présence de termes prépondérants comme la traînée permet d'expliquer ce comportement. En effet, les flux totaux sont nuls en moyenne et les fluctuations qui leurs sont associées ne sont pas du même ordre que les termes de traînée. Les fluctuations n'influencent donc pas en moyenne les profils des contraintes particulaires.

La figure 5.29 présente le profil de vitesse moyenne dans la direction normale de l'écoulement en fin de simulation. Un zoom sur la zone de couplage est aussi tracé pour évaluer le transfert d'information entre les deux domaines.

La vitesse moyenne est ici le seul moment dont le flux total n'est pas théoriquement nul au cours de la simulation. Le flux de vitesse moyenne est en effet donné par la contrainte $R_{pp,uv}$ qui se développe au cours de la simulation (cf. figure 5.25). L'information sur cette contrainte étant contenue dans la pdf étendue de Richman, son traitement ne pose à priori pas de problèmes théoriques. Cette constatation est appuyée par les résultats présentés dans la figure 5.29 car le gradient de vitesse moyenne est correctement prédit à

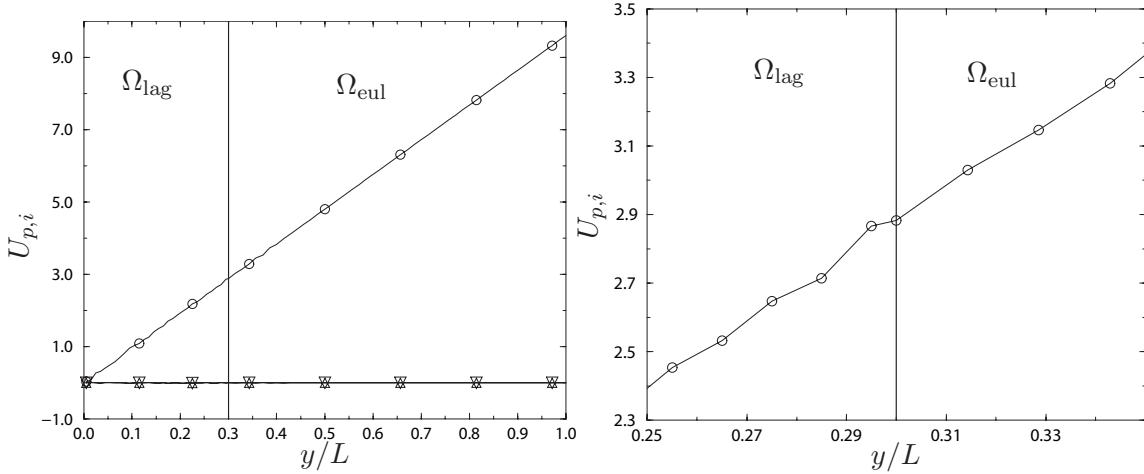


FIG. 5.29 – Profils de la vitesse moyenne des particules à l'instant $t = 5/S_f$ issus de HELM avec $\eta = 0.3$ (droite :zoom) ; \circ : U_p , \square : V_p , \diamond : W_p .

la traversée de l'interface. La méthode hybride permet donc de rendre compte de flux totaux non-nuls de manière satisfaisante.

5.4.3 Couplage par conditions de Dirichlet

Cette dernière partie du chapitre est consacrée à la transition de la méthodologie de couplage qui a été premièrement développée dans les cas d'écoulements homogènes et qui fut ensuite étendue aux écoulements inhomogènes pour donner la méthodologie présentée au chapitre 4. Par manque de temps, la méthodologie inhomogène n'a pas été appliquée dans sa globalité. En effet l'inversion du système (4.20) n'est pas chose aisée lorsque les mouvements d'agitation du fluide et des particules sont à considérer. Les cas d'écoulements homogènes cisaillé étant des cas de validation intéressants mais n'étant pas la finalité de ce travail, cette difficulté a été occultée pour les écoulements homogènes cisaillés.

La méthodologie de couplage utilisée est donc une méthodologie "entre deux" prenant en compte des conditions de Dirichlet comme conditions aux limites pour le calcul eulérien mais en préservant l'injection suivant une pdf modèle associée aux moments eulériens projetés à la face de couplage Γ_{lag} et non pas calculés à partir de (4.18) et (4.20).

5.4.3.1 Configuration

Le domaine lagrangien garde la même configuration que dans le cas du couplage par demi-flux et les variables eulériennes sont toujours calculées sur deux maillages décalés. L'extension spatiale des deux maillages doit tout de même être modifiée pour permettre d'obtenir des conditions aux limites de Dirichlet interpolée et non pas extrapolées.

5.4.3.2 Sensibilité aux conditions

Du fait de la méthodologie de couplage adoptée l'imposition de conditions aux limites de type Dirichlet rend la simulation sensible aux nombres de particules numériques présentes dans les cellules du domaine lagrangien proches de la zone de couplage. La pdf d'injection des particules numériques étant donnée en

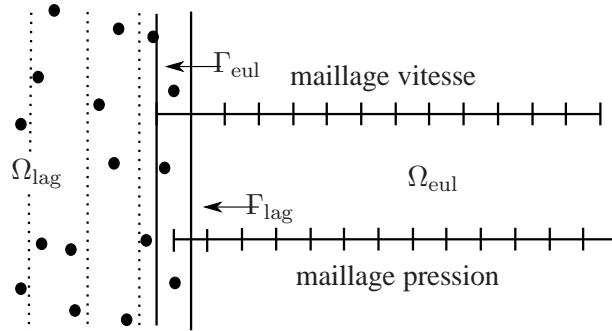


FIG. 5.30 – Description des maillages dans le cas du couplage par conditions de Dirichlet.

fonction des moments eulériens à la face Γ_{lag} , cette pdf dépend en partie des conditions de Dirichlet imposées. En effet, en ce qui concerne la densité de particules et les contraintes cinétiques, l'interpolation des moments eulériens à la face Γ_{lag} est donnée par :

$$\langle \Psi \rangle_{p, \Gamma_{\text{lag}}}^{\text{eul}} = \frac{1}{2} (\langle \Psi \rangle_p^{\text{eul}} (y_{mp}(0)) + \langle \Psi \rangle_p^{\text{eul}} (y_{mp}(1))) \quad (5.24)$$

où $\langle \Psi \rangle_p^{\text{eul}} (y_{mp}(i))$ est la valeur calculée par le code eulérien au i -ème point du maillage pression. Or pour des conditions aux limites de type Dirichlet, les valeurs $\langle \Psi \rangle_p^{\text{eul}} (y_{mp}(0))$ sont données par le calcul lagrangien. Une erreur trop importante dans le calcul de ces conditions entraîne donc une erreur importante dans la pdf d'injection des particules.

De plus, contrairement au calcul des demi-flux incidents par la relation (4.18), les demi-flux sont ici imposés par la valeur des moments eulériens à la face Γ_{lag} . Les éventuelles erreurs commises sur les conditions de Dirichlet ont ainsi tendance à être amplifiées, contrairement à la méthodologie développée pour les écoulements inhomogènes. Par exemple si le calcul des conditions de Dirichlet associées aux contraintes particulières donne une valeur trop importante de la contrainte longitudinale, cette sur-agitation se répercute sur la pdf d'injection qui aura tendance à injecter des particules avec des vitesses fluctuantes en norme plus importante dans la direction longitudinale. Le calcul des conditions de Dirichlet au pas de temps suivant présentera donc à priori un écart plus important encore à la vrai valeur.

Cet effet est atténué par le nombre de particules présentes dans les cellules lagrangiennes les plus proches de la zone de couplage. Ici le problème peut être résolu par une augmentation de la taille des cellules car l'écoulement est homogène. Mais cette contrainte sur le nombre minimum de particules ne permet pas de faire converger le couplage dans tous les cas. Cette méthodologie "entre-deux" est donc plus sensible aux paramètres de simulation dans le domaine lagrangien que le couplage par demi-flux.

Les figures 5.31, 5.32 et 5.33 présentent ainsi les résultats concernant le développement temporel et spatial du couplage pour deux rapports de volume différents lorsque des conditions de Dirichlet sont utilisées à la frontière du domaine eulérien. Les profils des vitesses moyennes ne sont pas exposés pour un soucis de concision, les résultats étant très précis quelque soit la méthodologie utilisée.

les rapports de volume ont été fixés à $\eta = 0,3$ et $\eta = 0,1$ pour observer si ce paramètre avait une influence dans nos simulations. Les résultats dans le domaine lagrangien sont en effet plus sensibles aux conditions d'injection issues de la simulation eulérienne dans le $\eta = 0,1$ que dans le cas $\eta = 0,3$ car le nombre de particules injectées reste identique mais le nombre de particules dans le domaine est divisé par 3.

La figure 5.31 montre que le paramètre η a une influence assez faible sur les résultats des deux approches concernant le développement des contraintes particulières. Les résultats lagrangiens sont donnés par une

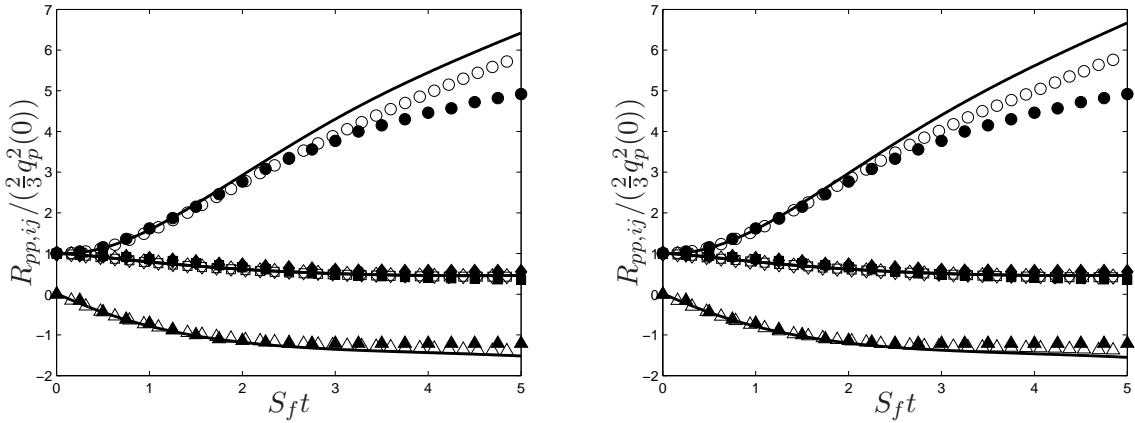


FIG. 5.31 – Développements des contraintes particulières prédicts par HELM avec $\eta = 0, 3$ (gauche) et $\eta = 0, 1$ (droite). \circ : moyenne dans le domaine lagrangien (\circ : $R_{pp,uu}, < R_{pp,uu} >^-$, \square : $R_{pp,vv}, < R_{pp,vv} >^-$, \diamond : $R_{pp,ww}, < R_{pp,ww} >^-$, \triangle : $R_{pp,uv}, < R_{pp,uv} >^-$); — : moments au 5ième point du maillage pression eulérien ; ● : LES/DPS (Laviéville [1997]).

moyenne sur tout le domaine lagrangien tandis que les moments eulériens sont pris au cinquième point du maillage pression. L'influence semble légèrement plus importante dans le domaine eulérien, ce qui peut paraître surprenant par rapport à ce qui a été avancé précédemment. En fait l'imposition de la condition de Dirichlet en frontière du domaine eulérien vient "polluer" une zone plus importante du domaine eulérien, cette condition étant beaucoup plus contraignante qu'une condition de flux (dont nous avons vu qu'elle n'a que peu d'influence par rapport aux termes de traînée). De plus l'approche eulérienne a tendance dans ces simulations à surestimer la contrainte longitudinale $R_{pp,uu}$ par rapport au lagrangien stochastique.

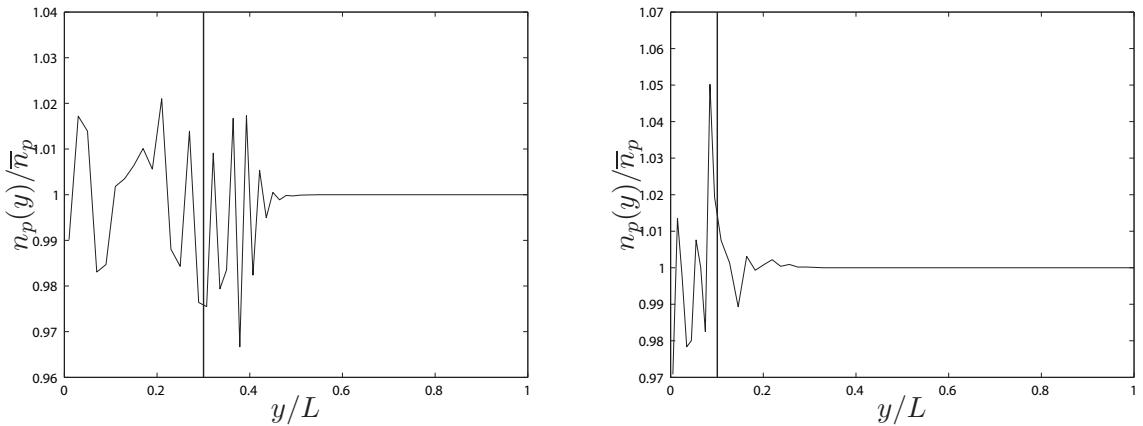


FIG. 5.32 – Profils de densité de particules à l'instant $t = 5/S_f$ issus de HELM avec $\eta = 0, 3$ (gauche) et $\eta = 0, 1$ (droite).

La figure 5.32 montre l'évolution des profils de densité dans la boîte pour les deux cas $\eta = 0, 3$ et $\eta = 0, 1$. Les résultats sont dégradés par rapport au couplage par demi-flux, notamment dans le cas $\eta = 0, 3$ où les fluctuations de densité dans le domaine eulérien sont importantes par rapport aux fluctuations observées lors du couplage par demi-flux (figure 5.27). Les fluctuations dans le domaine eulérien semblent moins importantes dans le cas $\eta = 0, 1$ mais le mauvais comportement de la méthodologie s'observe au niveau de

l'amplitude des oscillations qui s'accroît dans la zone proche de la face de couplage. L'effet d'amplification des erreurs évoqué plus haut semble ici jouer un rôle important.

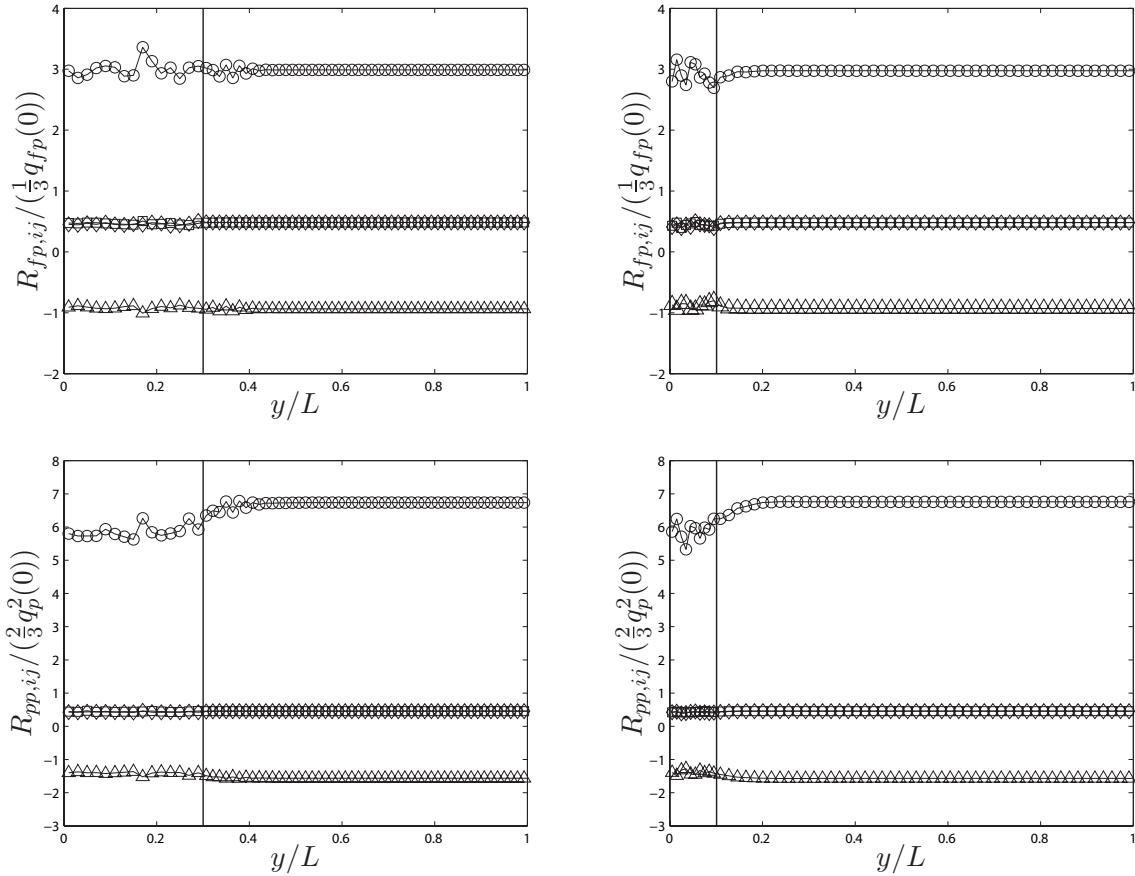


FIG. 5.33 – Profils de contraintes fluide-particules et particulières à l'instant $t = 5/S_f$ issus de HELM avec $\eta = 0, 3$ (gauche) et $\eta = 0, 1$ (droite) ; \circ : R_{uu} , \square : R_{vv} , \diamond : R_{ww} , \triangle : R_{uv} .

Finalement, la figure 5.33 présente les profils des corrélations doubles pour les deux rapports de volume. En accord avec ce qui a été observé précédemment, les moments dans le domaine eulérien sont surestimés par rapport au domaine lagrangien. Les prédictions dans le domaine lagrangien restent correctes et les moments eulériens viennent s'aligner sur ces prédictions à la surface de couplage.

La procédure "entre-deux" développée ici ne fait donc pas office de bon candidat pour un couplage précis des deux approches (notamment en ce qui concerne les fluctuations de densité dans le domaine eulérien), mais prouve néanmoins que l'utilisation de conditions de Dirichlet en frontière du domaine eulérien est possible.

5.4.4 Extension aux cas de Stokes différents et aux cas avec collisions

La validation de la méthode hybride ne serait pas complète sans avoir appliquer la (les) méthodologie(s) aux cas B et Ac. Par soucis de concision, nous donnerons ici les résultats les plus pertinents concernant le couplage. Ceux-ci ne présentent pas d'écart de comportement par rapport aux résultats concernant le cas A ce qui achève la validation de la méthode hybride eulérienne-lagrangienne dans le cas des écoulements homogènes cisailés. Les deux cas sont simulés avec un rapport de volume $\eta = 0, 3$. Les conditions aux limites concernant le cas B sont prises de type flux, tandis qu'elles sont de type Dirichlet dans la cas Ac.

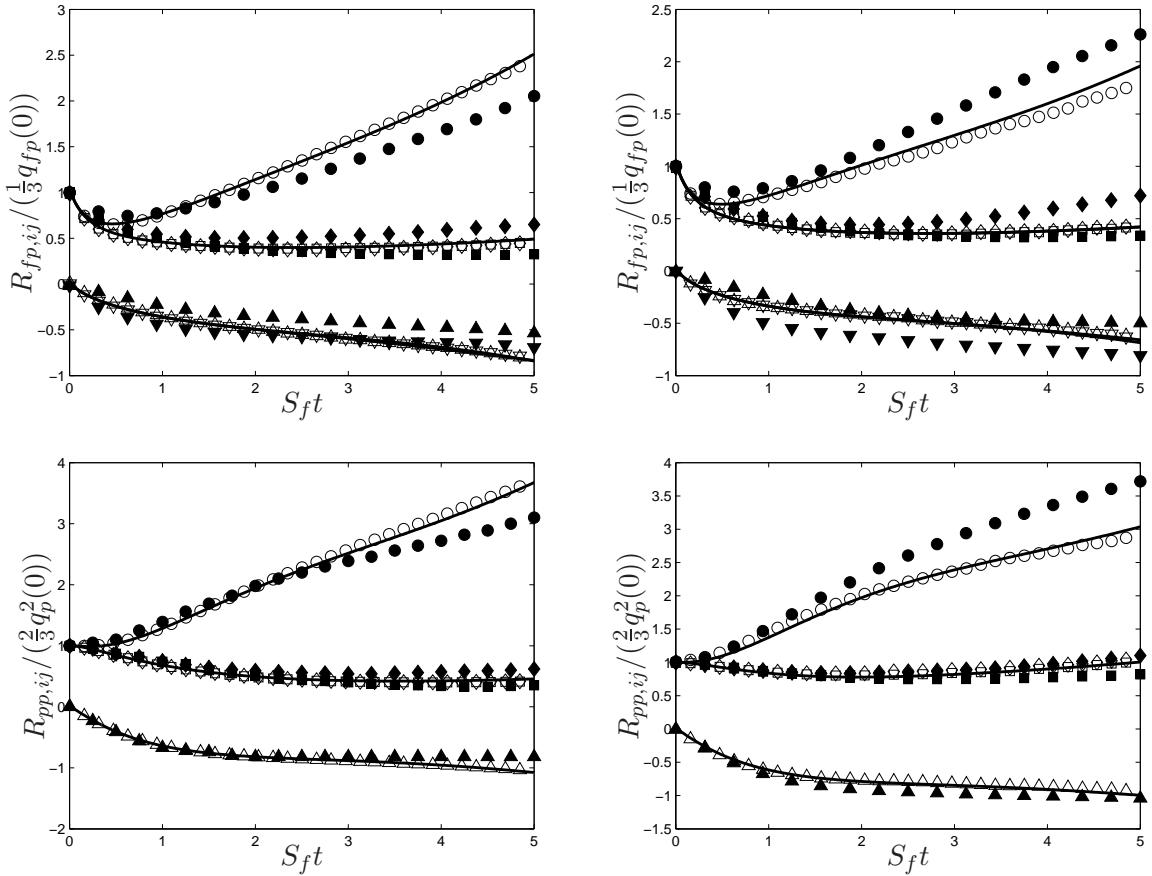


FIG. 5.34 – Développements des contraintes fluide-particules et particulières prédits par HELM avec $\eta = 0,3$ pour le cas B (gauche) et le cas Ac (droite). \circ : moyenne dans le domaine lagrangien (\circ : $R_{pp,uu}$, \square : $R_{pp,vv}$, \diamond : $R_{pp,ww}$, Δ : $R_{pp,uv}$) ; — : moments au 5ième point du maillage pression eulérien ; \bullet : LES/DPS (Laviéville [1997]).

La figure 5.34 présente le développement temporel des corrélations doubles issues d'un couplage par demi-flux pour un cas d'inertie différente ($\rho_p = 50 \text{ kg.m}^{-3}$) et d'un couplage par conditions de Dirichlet avec prise en compte des collisions. Voucncrant les corrélations doubles, la procédure de couplage ne dégrade pas les prédictions des deux approches par rapport aux calculs lagrangien stochastique et eulérien.

Les profils de densité issus de ces simulations sont présentés dans la figure 5.35. Les deux profils sont identiques aux résultats précédents. Les fluctuations dans le domaine eulérien sont en effet raisonnables pour la méthodologie de couplage par demi-flux, et présentent une amplitude plus grande dans le cas des conditions de Dirichlet.

Les prédictions concernant les corrélations doubles présentées dans la figure 5.36 sont aussi en accord avec les observations effectuées sur les cas précédents, et ce pour les deux cas présentés ici.

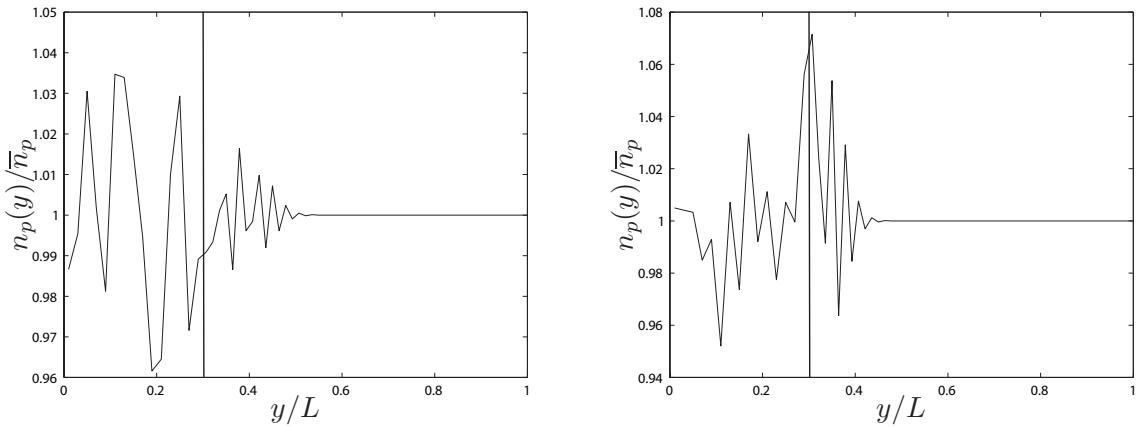


FIG. 5.35 – Profils de densité de particules à l'instant $t = 5/S_f$ issus de HELM avec $\eta = 0,3$ pour le cas B (gauche) et la cas Ac (droite).

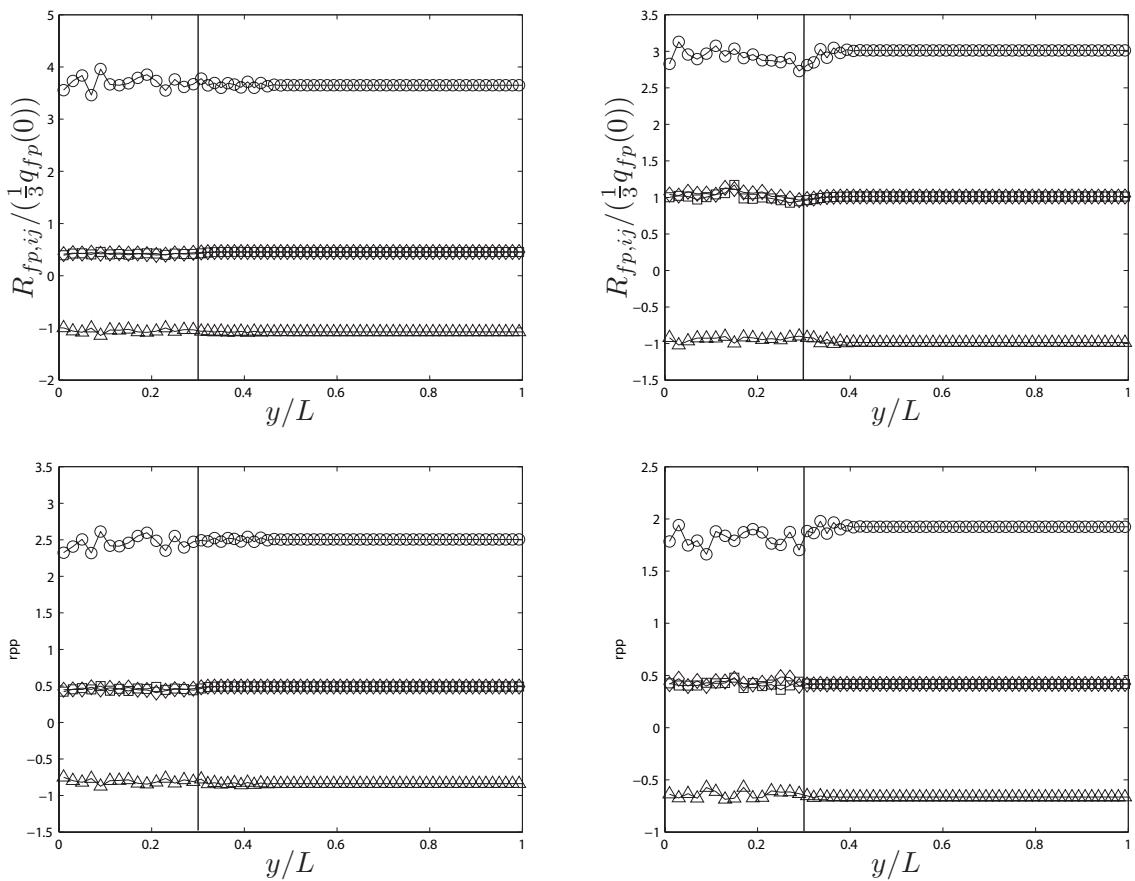


FIG. 5.36 – Profils de contraintes fluide-particules et particulières à l'instant $t = 5/S_f$ issus de HELM avec $\eta = 0,3$ pour le cas B (gauche) et le cas Ac (droite) ; \circ : R_{uu} , \square : R_{vv} , \diamond : R_{ww} , \triangle : R_{uv} .

Chapitre 6

Ecoulement de canal plan

Sommaire

6.1	Description de l'écoulement test	159
6.1.1	Configuration géométrique	159
6.1.2	Ecoulement fluide	160
6.1.3	Caractéristiques de la phase particulaire	160
6.1.4	Temps caractéristiques	161
6.2	Consistance des deux approches	161
6.2.1	Résultats bruts des deux approches	161
6.2.2	Correction des termes de traînée	164
6.2.3	Correction des corrélations triples	166
6.2.4	Équations eulériennes décrivant le système	169
6.2.5	Résultats avec fermetures modifiées	170
6.3	Configuration spatiale et méthodologie de couplage	172
6.3.1	Configuration spatiale	173
6.3.2	Initialisation	174
6.3.3	Algorithme de couplage	174
6.3.4	Calculs des conditions aux limites	175
6.4	Résultats HELM avec correction par effet de Knudsen	177
6.4.1	Cas A2	177
6.4.2	Bilans de vitesse moyenne longitudinale	179
6.4.3	Cas B3	181
6.4.4	Discussion	183
6.5	Résultats HELM sans correction par effet de Knudsen	183
6.5.1	Cas A2	184
6.5.2	Cas B3	186
6.6	Influence du rapport de volume	187

Le chapitre précédent a montré les potentialités de la méthode hybride eulérienne-lagrangienne développée au chapitre 4. L'application de cette méthode dans le cas des écoulements turbulents homogènes cisaillés a montré que la procédure de couplage détériore peu la solution dans chaque sous-domaine (lagrangien et eulérien). Dans ce type d'écoulements les deux approches sont complètement consistantes entre elles comme peuvent le montrer les résultats identiques obtenus avec l'approche lagrangienne stochastique et l'approche eulériennes développée aux chapitres 2 et 3.

La validation de la méthode hybride eulérienne-lagrangienne devait donc se faire de plus dans un cas plus réaliste et complexe. Notre premier choix s'est porté sur l'écoulement de canal plan turbulent gaz-solides avec un nombre de Reynolds de frottement $Re_\tau = 180$ étudié dans Vance et al. [2006]. Cet écoulement à nombre de Reynolds assez faible s'est révélé (à notre surprise) impossible à prédire correctement en utilisant les modèles lagrangiens stochastiques classiques ! Des tentatives de simulations avec la correction du bruit présentée au chapitre précédent se sont révélée tout aussi infructueuses : aucun modèle classique du tenseur $\underline{\underline{G}}_{fp}$ ne permet de prendre correctement en compte l'effet de la turbulence sur la phase particulaire dans cet écoulement.

Notre choix s'est donc reporté sur un écoulement de canal déjà plusieurs fois étudié et présentant la particularité de considérer des particules suffisamment inertielles pour que la turbulence du fluide n'ai pas d'influence sur le comportement de la phase particulaire. La première étude de ce canal est due à Tanaka and Tsuji [1991] qui ont suivi les particules de manière déterministe dans un écoulement de canal cylindrique vertical ascendant. He and Simonin [1993] et Sakiz [1999] reprennent dans un canal plan les expériences de Tanaka and Tsuji [1991] qu'ils simulent par l'approche eulérienne développée au chapitre 3. La thèse de Sakiz [1999] a de plus permis de constituer une banque de données sur cet écoulement puisque l'écoulement a alors été simulé pour divers jeux de propriétés des particules à l'aide d'une simulation aux particules discrètes (DPS). Bien que ne présentant pas le phénomène de dispersion des particules par la turbulence, ce cas présente des caractéristiques intéressantes par rapport à l'écoulement homogène cisaillé :

- l'écoulement est maintenant inhomogène. La présence des parois induit en effet des inhomogénéités qui impliquent la présence de flux pour les corrélations d'ordre deux. Il n'est alors plus possible de travailler avec un modèle simple de pdf permettant de prendre en compte les corrélations triples qui découlent de l'inhomogénéité. Il a donc été nécessaire d'adapter la méthodologie de couplage pour intégrer l'information concernant les corrélations triples.
- les deux approches ne sont plus parfaitement consistantes. Les hypothèses sur lesquelles sont fondées les fermetures additionnelles présentées au § 3.2.5 ne sont plus aussi valides que dans le cas de l'écoulement homogène cisaillé. Les fermetures eulériennes additionnelles ne sont donc plus aussi précises qu'au chapitre précédent et des disparités de prédictions entre les deux modèles sont observées. Le cas étudié permettra donc d'étudier le comportement de la méthodologie de couplage lorsque les deux approches ne sont plus tout à fait consistantes.
- des simulations avec des rebonds sur paroi non élastiques ont été réalisées. Des conditions de rebond plus réalistes vont donc pouvoir être simulées et permettre d'observer le comportement de l'approche hybride dans des cas éloignés de l'équilibre. Cette configuration est un premier pas vers le traitement de conditions aux limites plus réelles telles que les parois rugueuses ou le dépôt.

La première partie du chapitre est consacrée à l'étude de la consistance des deux approches. Les résultats issus des approches lagrangienne stochastique et eulérienne sont comparées aux résultats DPS de Sakiz [1999]. Il est aussi montré comment des fermetures eulériennes additionnelles plus élaborées permettent d'améliorer la capacité de prédition de l'approche eulérienne.

La deuxième partie du chapitre est consacrée à l'étude de la méthode hybride eulérienne-lagrangienne lorsque l'approche lagrangienne stochastique est couplée avec l'approche eulérienne possédant les meilleures fermetures additionnelles qui ont été testées.

Enfin la dernière partie traite du comportement de l'approche hybride eulérienne-lagrangienne lorsque les fermetures eulériennes "standard" sont utilisées. Ces fermetures ne permettent pas d'obtenir une bonne consistance entre les deux approches, spécialement dans les zones proches des parois. Les erreurs de prédictions observées en proche paroi sont de plus source d'une mauvaise prédition à travers tout le canal. L'utilisation d'une méthode hybride permet alors de mitiger ces effets et d'améliorer la prédition de l'écoulement dans tout le canal.

6.1 Description de l'écoulement test

6.1.1 Configuration géométrique

L'écoulement étudié est un écoulement gaz-solides ascendant entre deux plaques parallèles et infinies formant un canal plan vertical (figure 6.1). Cette configuration d'écoulement est directement reprise des travaux de thèse de Sakiz [1999] qui poursuivaient eux-mêmes des travaux menés par Tanaka and Tsuji [1991] et He and Simonin [1993]. Tanaka and Tsuji [1991] effectuent des simulations lagrangiennes déterministe d'un canal cylindrique vertical avec prise en compte des forces de traînée et de portance, ainsi que des rebonds irréguliers de type rugosité. Plusieurs jeux de caractéristiques de la phase particulaire sont explorés, mais les particules possèdent toujours un diamètre très important ($d_p \sim 400 10^{-6} m$). Cette dernière propriété leur permet de négliger l'influence de la turbulence sur la phase particulaire. Les données issues de ces simulations ont ensuite été utilisées pour valider l'approche eulérienne développée par He and Simonin [1993]. Ceux-ci ne prennent pas en compte la rotation des particules (pas de portance) ou les rebonds irréguliers (mais par contre les rebonds avec frottement sont pris en compte). La dérivation de modèles prenant en compte la rotation ou les relations de frottement, ainsi que leurs validations, a alors fait l'objet des travaux de thèse de Sakiz [1999].

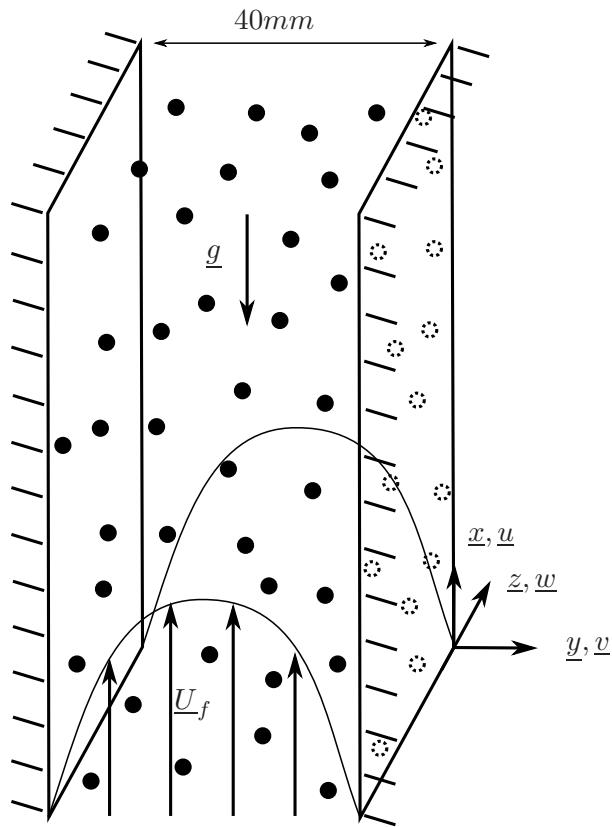


FIG. 6.1 – Description de l'écoulement test.

L'extension spatiale du canal est considérée comme infinie, ce qui permet de supposer l'homogénéité dans les directions longitudinale et transverse de l'écoulement. Des conditions de périodicité peuvent donc être appliquées dans ces deux directions. Les parois sont supposées planes et lisses ce qui exclue les rebonds irréguliers de type rugosité. La direction longitudinale est notée \underline{x} en ce qui concerne la position, et \underline{u} en ce qui concerne la vitesse. La direction normale à la paroi est repérée par \underline{y} et \underline{v} , la direction transverse \underline{z} et \underline{w} .

6.1.2 Ecoulement fluide

Les caractéristiques physiques du fluide sont conformes aux données de Tanaka and Tsuji [1991] :

$$\left| \begin{array}{l} \rho_f = 1,205 \text{ kg.m}^{-3} \\ \nu_f = 1,515 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1} \end{array} \right.$$

La vitesse longitudinale moyenne est fixée à $\bar{U}_f = 16 \text{ m.s}^{-1}$ ce qui correspond à un nombre de Reynolds basé sur la demi-largeur du canal d'approximativement $2,1 \cdot 10^4$. Les calculs sont réalisés à l'aide du modèle $k - \varepsilon$ bas Reynolds de Launder and Sharma [1974]. En accord avec Tanaka and Tsuji [1991], le couplage inverse n'est pas considéré ce qui permet d'effectuer le calcul de l'écoulement fluide une seule fois. Le profil de vitesse qui résulte de ce calcul est présenté en figure 6.2 pour toute la largeur du canal.

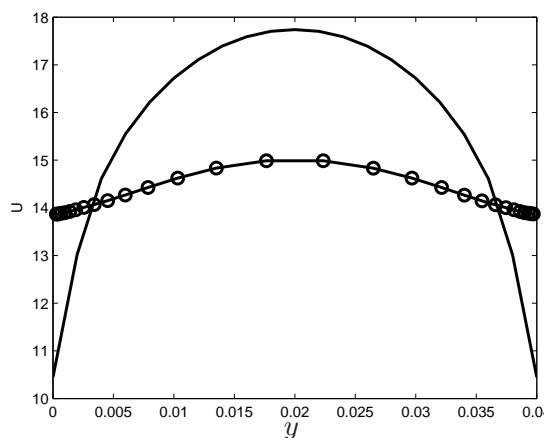


FIG. 6.2 – Profils de vitesse moyenne longitudinale du fluide (—) et de vitesse moyenne des particules dans le cas B3 (—○—).

Le profil de vitesse moyenne du fluide présente donc un fort gradient de vitesse moyenne entre la paroi et le centre du canal. Au centre du canal les particules ont ainsi une vitesse moyenne plus faible que celle du fluide (sous l'action de la gravité) mais le gradient de vitesse moyenne des particules étant bien moins important (collisions), on assiste à un changement de signe de la différence des vitesses moyennes. Les particules sont ainsi accélérées par le fluide au centre du canal mais freinées dans les zones de proche paroi. Il existe de plus une zone (située aux alentours de $y = 3 \cdot 10^{-3} \text{ m}$) où la traînée joue un rôle très faible, contrairement au reste de l'écoulement.

6.1.3 Caractéristiques de la phase particulaire

Les caractéristiques physiques des particules utilisées sont tirées de Tanaka and Tsuji [1991] et Sakiz [1999]. Un seul type de particules est utilisé, correspondant aux billes de polystyrène de diamètre $d_p = 406 \cdot 10^{-6} \text{ m}$ des expériences de Tanaka and Tsuji [1991]. Ces particules sont utilisées pour valider le code suivant plusieurs fraction volumique globales et avec ou sans frottement sur les parois. Les collisions interparticulaires seront toujours considérée comme élastiques. Les propriétés des particules sont résumées dans le tableau suivant :

	$d_p(\text{m})$	$\rho_p(\text{kg.m}^{-3})$	e_{pw}	μ_{pw}	e_{pp}	μ_{pp}
Cas A	$406 \cdot 10^{-6}$	1038	1	0	1	0
Cas B	$406 \cdot 10^{-6}$	1038	0,94	0,325	1	0

La fraction volumique moyenne de l'écoulement varie entre $\bar{\alpha}_p = 1,23 \cdot 10^{-3}$ et $\bar{\alpha}_p = 10^{-2}$, ce qui représente des cas d'écoulements dilués de très grosses particules. Les collisions ont tout de même un effet non négligeable sur l'écoulement, et des collisions élastiques entre particules seront donc considérées.

He and Simonin [1994] réalisent une étude de l'influence de la turbulence du fluide sur le comportement de la phase particulaire en "éteignant" dans le modèle eulérien les corrélations fluide-particule ($\underline{\underline{R}}_{fp} = \underline{\underline{0}}$). Les résultats obtenus par cette méthode ne diffèrent que très peu des résultats prenant en compte la turbulence, retrouvant ainsi les résultats de Tanaka and Tsuji [1991]. Par soucis de simplicité, nous négligerons donc l'influence de la turbulence sur la phase particulaire.

6.1.4 Temps caractéristiques

Le tableau suivant récapitule les valeurs représentatives des temps caractéristiques observés pour les différentes configurations d'écoulements considérés.

	Cas A		Cas B	
	cas A2	cas A3	cas B2	cas B3
$\bar{\alpha}_p$	10^{-2}	$1,23 \cdot 10^{-3}$	10^{-2}	$1,23 \cdot 10^{-3}$
plage de τ_{fp}^F (s)	$0,125 - 0,25$	$0,13 - 0,25$	$0,13 - 0,22$	$0,13 - 0,25$
plage de τ_p^c (s)	$7,4 - 8 \cdot 10^{-3}$	$6 - 7 \cdot 10^{-2}$	$5,4 \cdot 10^{-3}$	$6 - 6,7 \cdot 10^{-2}$
plage de $\tau_{f@p}^t$ (s)			$0 - 6 \cdot 10^{-4}$	

Les nombres de Stokes basés sur l'échelle temporelle intégrale lagrangienne ($St = \tau_{fp}^F / \tau_{f@p}^t$) sont donc supérieurs à 200 dans tout le canal, et ce pour tous les cas de simulations. On retrouve ici les conclusions de Tanaka and Tsuji [1991] et Sakiz [1999] concernant l'influence minime de la turbulence sur le comportement de la phase particulaire.

Concernant l'influence des collisions, le rapport τ_p^c / τ_{fp}^F est proche de 0,5 dans les cas "denses" ($\bar{\alpha}_p = 10^{-2}$) et de 0,05 dans les cas "dilués" ($\bar{\alpha}_p = 1,23 \cdot 10^{-3}$). Les deux écoulements peuvent donc être classés comme dilués d'un point de vue diphasique, mais les collisions ne peuvent pour autant être négligées, particulièrement dans les cas "denses".

6.2 Consistance des deux approches

Cette section est dédiée à l'étude des approches lagrangienne stochastique et eulérienne indépendamment l'une de l'autre. Les deux approches sont donc utilisées dans toute la demi-largeur du canal pour observer leurs spécificités.

6.2.1 Résultats bruts des deux approches

La figure 6.3 présentent les résultats issus de simulations lagrangiennes stochastiques et eulériennes. Les simulations eulériennes ont été réalisées avec les fermetures "classiques" des approches eulériennes de "type Simonin" :

- les termes de traînée sont fermés en utilisant l'hypothèse de nombre de Reynolds particulaire faible ce qui permet d'exprimer les termes de traînée en utilisant l'équation (3.32). Les termes de traînée s'écrivent alors :

$$n_p \left\langle \frac{F_{d,k}}{m_p} \right\rangle_p = -n_p \frac{U_{p,k} - U_{f,k}}{\tau_{fp}^F} \quad (6.1a)$$

$$\Pi_{p,ij} = -\frac{2}{\tau_{fp}^F} [R_{pp,ij} - \mathcal{R}_{fp,ij}] \quad (6.1b)$$

- les termes de collisions sont fermés en utilisant l'hypothèse de chaos fluido-moléculaire. La turbulence n'ayant pas d'influence sur le comportement de la phase particulaire, la fermeture de chaos fluido-moléculaire est équivalente à la fermeture aux vitesses corrélées :

$$\mathcal{C}(R_{pp,ij}) = -\frac{\sigma_c}{\tau_p^c} \left(R_{pp,ij} - \frac{2}{3} q_p^2 \delta_{ij} \right) \quad (6.2)$$

- les corrélations triples sont fermées à partir de l'équation d'évolution de celles-ci. Plusieurs hypothèses sont alors utilisées comme, entre autres, la modélisation des corrélations quadruples suivant une pdf gaussienne (formule de Milan-Tchekov), une hypothèse de Grad pour exprimer les termes de collision où encore une fermeture des corrélations $S_{fp,ijk}$ consistante avec des modèles de turbulence mono-phasique. Il en résulte deux expressions pour les corrélations triples :
 - l'équivalent de la fermeture formulée par Hanjalic and Launder [1972] qui s'écrit dans la cas du canal (avec la notation des indices en gras moyennés sur toutes les permutations) :

$$S_{ppp,ijk} = -K_{p,vi}^t \frac{\partial}{\partial y} [R_{pp,ij}] \quad (6.3a)$$

$$K_{p,mn}^t = \left[\frac{\xi_{fp}^F}{\tau_{fp}^F} + \frac{\xi_p^c}{\tau_p^c} \right]^{-1} R_{pp,mn} \quad (6.3b)$$

$$\xi_{fp}^F = 3 \quad ; \quad \xi_p^c = (1 + e_{pp})(49 - 33e_{pp})/60 \quad (6.3c)$$

- la forme contractée type Daly and Harlow [1970] qui en découle (et qui n'est valable que lors de l'expression des flux des contraintes cinétiques, c'est-à-dire lorsque la divergence de l'expression qui suit est prise) :

$$S_{ppp,ijk} = -K_{p,vi}^t \frac{\partial}{\partial y} [R_{pp,ij}] \quad (6.4a)$$

$$K_{p,mn}^t = \left[\frac{\xi_{fp}^F}{\tau_{fp}^F} + \frac{\xi_p^c}{\tau_p^c} \right]^{-1} R_{pp,mn} \quad (6.4b)$$

$$\xi_{fp}^F = 9/5 \quad ; \quad \xi_p^c = 2/5\sigma_c \quad (6.4c)$$

La figure 6.3 présente les résultats issus des approches lagrangienne stochastique et eulérienne lorsque les fermetures supplémentaires de l'eulérien sont celles données précédemment. Les résultats sont comparés avec les résultats DPS issus de Sakiz [1999].

Les résultats du lagrangien stochastique sont en très bon accord avec les résultats DPS de Sakiz [1999] ce qui tend à valider la partie particulaire du code lagrangien stochastique (étapes de vol libre et de collision, sans équation de Langevin pour la vitesse du fluide vu). Les effets de dispersion par le mouvement d'agitation particulaire sont correctement retranscrits par la résolution de Runge-Kutta d'ordre 2 des équations du mouvement des particules (§ 2.8.5.1) et l'utilisation de la méthode du majorant de fréquence de Bird pour la résolution des collisions (§ 2.8.3.3) semble appropriée. Les fermetures communes aux approches eulérienne

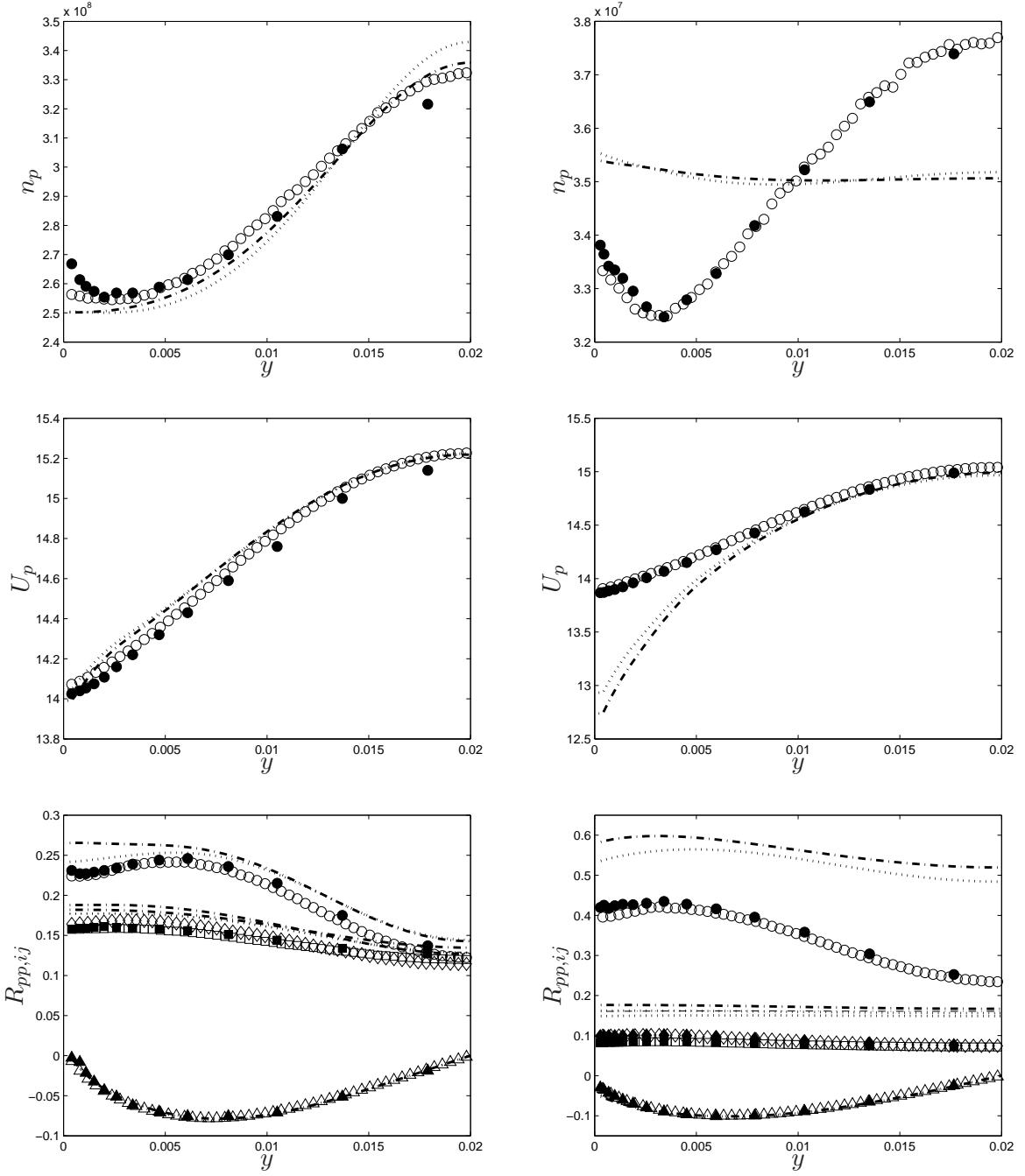


FIG. 6.3 – Résultats dans les cas A2 (gauche) et B3 (droite) concernant la densité, vitesse moyenne longitudinale et contraintes cinétiques des particules. \circ : lagrangien stochastique (\circ : $R_{pp,uu}$, \square : $R_{pp,vv}$, \diamond : $R_{pp,ww}$, \triangle : $R_{pp,uv}$) ; $-\cdots-$: eulérien avec fermeture (6.3) ; $\cdots\cdots$: eulérien avec fermeture (6.4) ; \bullet : DPS (Sakiz [1999]).

et lagrangienne stochastique sont donc des fermetures précises car une résolution directe de l'équation de la pdf (2.92) par une méthode particulaire, néanmoins sans la prise en compte de la turbulence, fournit des résultats particulièrement proches de l'"expérience numérique" de la DPS.

Les résultats eulériens présentent par contre de grosses différences avec les résultats DPS, spécialement dans le cas B3 où la faible concentration et les conditions aux limites de paroi plus réalistes mettent en

défaut les fermetures eulériennes évoquées plus haut. L'approche eulérienne péche principalement dans la prédiction du profil de vitesse moyenne longitudinale des particules U_p qui a un gradient trop élevé dans la zone de proche paroi. Ce gradient est responsable de la surestimation de la production de la contrainte longitudinale $R_{pp,uu}$ qui entraîne une surestimation de cette composante. Cette surestimation est aussi la source, via les collisions, de la surestimation des contraintes normales et transversales. Dans les cas où les particules frottent sur les parois, il y a alors un effet d'amplification car la condition à la limite sur $R_{pp,uv}$ (en paroi $R_{pp,uv} = -\mu_{pw}R_{pp,vv}$) entraîne une surestimation de la contrainte de cisaillement. Cette dernière étant directement reliée à la production, la surestimation de $R_{pp,uv}$ est responsable d'une surestimation de la production de la contrainte longitudinale, etc...

Le système eulérien modélisant le comportement de la phase particulaire dans le cas du canal est donc un système aux mécanismes subtils dont la solution peut aisément dévier des résultats de référence. Certaines hypothèses semblent ne pas être mises en défaut, notamment la modélisation des collisions dont les tests *a priori* effectués par Sakiz [1999] ont montré qu'il est nécessaire de les corriger que dans la zone de proche paroi. Ces corrections sont de plus d'un ordre inférieur par rapport aux corrections à apporter aux termes de traînée et de corrélations triples qui sont nécessaires sur toute la largeur du canal. Par soucis de concision ces corrections ne seront donc pas considérées. D'autres hypothèses, comme celle du faible nombre de Reynolds particulaire pour la traînée, peuvent être affinées pour obtenir des fermetures eulériennes plus proches des phénomènes observés. Enfin, la modélisation des corrélations triples peut être améliorée par un changement de fermeture. Cette dernière amélioration est tout de même en grande partie basée sur l'expérience empirique des précédents utilisateurs de tels systèmes eulériens et ne présente pas une grande généralité d'applications.

6.2.2 Correction des termes de traînée

La première hypothèse de fermeture à remettre en cause est l'hypothèse permettant la fermeture des termes de traînée. Celle-ci stipule que le nombre de Reynolds particulaire reste faible pour effectuer une approximation linéaire de la traînée. Il est donc nécessaire que la vitesse relative moyenne entre les deux phases soit faible. Comme il est possible de la voir dans la figure 6.2, cette propriété n'est pas du tout vérifiée dans l'écoulement de canal considéré où la différence des vitesses moyennes $|U_p - U_f|$ peut atteindre des valeurs de l'ordre de $3m.s^{-1}$. Il est alors nécessaire de recalculer les termes de traînée sous des hypothèses moins restrictives.

Sakiz [1999] effectue un développement limité au premier ordre en $|\underline{v}_r|^2$ de la force de traînée au voisinage de $\bar{v}_r^2 = <|\underline{v}_r|^2>_p$:

$$\frac{F_{d,k}}{m_p} = - \left[1 + 0,6565 \times 0,15 \left(\frac{d_p}{\nu_f} \right)^{0,687} \bar{v}_r^{0,687} + 0,3435 \times 0,15 \left(\frac{d_p}{\nu_f} \right)^{0,687} \frac{|\underline{v}_r|^2}{\bar{v}_r^{1,313}} \right] \frac{v_{r,k}}{\tau_{fp}^{St}} \quad (6.5)$$

où τ_{fp}^{St} est le temps caractéristique de traînée de Stokes (§ 1.3.9).

Ce développement limité permet alors d'effectuer la fermeture des termes de traînée par la formule suivante :

$$n_p < \frac{F_{d,k}}{m_p} \psi >_p = - \frac{1}{\tau_{fp}^F} \left[< v_{r,k} \psi >_p - 0,3435 \frac{0,15 \bar{Re}_p^{0,687}}{1 + 0,15 \bar{Re}_p^{0,687}} < (1 - \frac{|\underline{v}_r|^2}{\bar{v}_r^2}) v_{r,k} \psi >_p \right] \quad (6.6)$$

où $\bar{Re}_p = Re_p(\bar{v}_r)$ est le nombre de Reynolds particulaire associé à la vitesse relative moyenne.

La modification en cas de vitesse relative moyenne entre les deux phases importantes (d'où un nombre de Reynolds particulaire grand) permet d'obtenir des expressions qui font intervenir un grand nombre de

moments. Il est alors nécessaire d'émettre des hypothèses, notamment sur l'existence d'une direction privilégiée du mouvement relatif, pour obtenir des expressions des termes de traînée plus simples. Pour des expressions plus générales, le lecteur peut se référer à Sakiz [1999]. Nous supposerons ici que la direction privilégiée du mouvement relatif moyen entre la phase particulaire et le fluide se situe dans la direction longitudinale, les autres composantes pouvant être négligées. Ces hypothèses ont permis à Sakiz [1999] de dériver un modèle tronqué ne prenant pas en compte les corrélations d'ordre trois et quatre apparaissant normalement dans les expressions. C'est ce modèle qui sera utilisé dans ce chapitre, à l'exception du terme de traînée intervenant dans l'équation sur la vitesse moyenne longitudinale des particules. En notant $h(\overline{Re}_p) = 0.0515\overline{Re}_p^{0.687}/(1 + 0,15\overline{Re}_p^{0.687})$ la correction proposée par Sakiz [1999] s'écrit :

$$\langle \frac{F_{d,u}}{m_p} \rangle_p = -\frac{1}{\tau_{fp}^F} (U_p - U_f) - \frac{2}{\tau_{fp}^F} h(\overline{Re}_p) \frac{R_{pp,uu}}{\bar{v}_r^2} (U_p - U_f) \quad (6.7)$$

et prédit donc une augmentation de l'inverse du temps caractéristique de traînée associé à la vitesse longitudinale (avec un facteur $1 + 2h(\overline{Re}_p)R_{pp,uu}/\bar{v}_r^2$) par rapport au modèle à faible nombre de Reynolds particulaire. Les tests *a priori* présentés dans la figure 6.4 montrent que la correction est à l'origine d'un mauvais traitement du terme de traînée. Le terme de traînée $\langle F_{d,u}/m_p \rangle_p$ est correctement traité quelque soit le modèle choisi car ce terme s'ajuste à l'évolution des autres termes de l'équation gouvernant le comportement de la vitesse moyenne (c'est-à-dire la gravité et la dispersion). L'inverse du temps caractéristique de traînée associé à la vitesse moyenne longitudinale par contre est quant à lui légèrement surestimé par la modélisation à faible nombre de Reynolds particulaire du terme de traînée, et largement surestimé pour une modélisation de traînée modifiée tronqué. En conséquence, le terme de traînée étant correct, la différence des vitesses moyennes $U_p - U_f$ doit ainsi être surestimée.

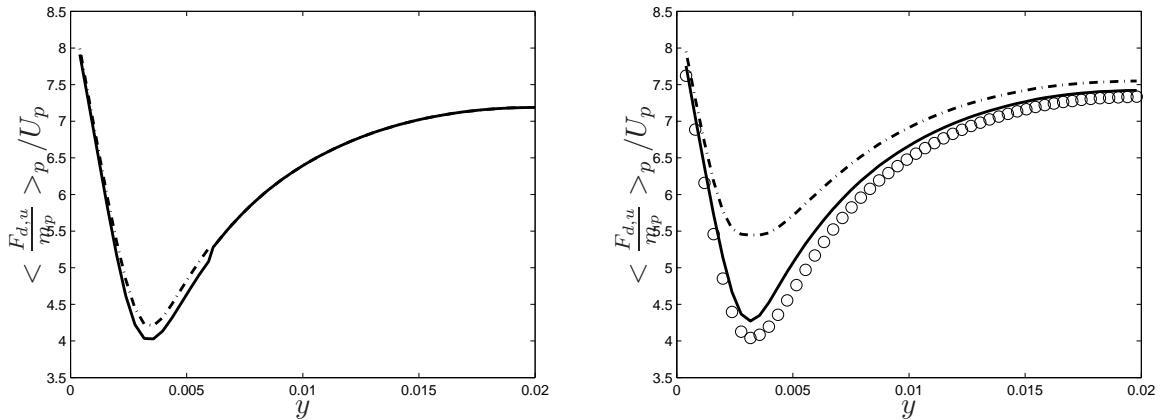


FIG. 6.4 – Inverse du temps caractéristique de traînée dans les cas A2 (gauche) et B3 (droite). \circ : lagrangien stochastique ; — : $1/\tau_p(\langle |\underline{v}_r| \rangle_p)$ évalué avec les moments lagrangiens ; ······ : $\langle \frac{F_{d,u}}{m_p} \rangle_p / U_p$ évalué selon (6.7) avec les moments lagrangiens.

Les autres corrections du modèle modifié tronqué de Sakiz [1999] apportent quant à elles un meilleur traitement des termes de traînée, notamment en ce qui concerne la composante normale de la vitesse moyenne pour laquelle le terme était nul alors qu'il est maintenant relié à la vitesse moyenne longitudinale via la contrainte de cisaillement $R_{pp,uv}$.

Le modèle utilisé est donc le suivant :

$$\langle \frac{F_{d,u}}{m_p} \rangle_p = -\frac{1}{\tau_{fp}^F} (U_p - U_f) \quad (6.8)$$

$$\langle \frac{F_{d,v}}{m_p} \rangle_p = -\frac{2}{\tau_{fp}^F} h(\overline{Re}_p) \frac{R_{pp,uv}}{\bar{v}_r^2} (U_p - U_f) \quad (6.9)$$

$$\Pi_{p,uu} = - \left[1 - \left(1 - 3 \frac{(U_p - U_f)^2}{\bar{v}_r^2} \right) h(\overline{Re}_p) \right] \frac{2R_{pp,uu}}{\tau_{fp}^F} \quad (6.10)$$

$$\Pi_{p,vv} = - \left[1 - \left(1 - \frac{(U_p - U_f)^2}{\bar{v}_r^2} \right) h(\overline{Re}_p) \right] \frac{2R_{pp,vv}}{\tau_{fp}^F} \quad (6.11)$$

$$\Pi_{p,ww} = - \left[1 - \left(1 - \frac{(U_p - U_f)^2}{\bar{v}_r^2} \right) h(\overline{Re}_p) \right] \frac{2R_{pp,ww}}{\tau_{fp}^F} \quad (6.12)$$

$$\Pi_{p,uv} = - \left[1 - \left(1 - 2 \frac{(U_p - U_f)^2}{\bar{v}_r^2} \right) h(\overline{Re}_p) \right] \frac{2R_{pp,uv}}{\tau_{fp}^F} \quad (6.13)$$

6.2.3 Correction des corrélations triples

La fermeture des corrélations de type Hanjalic and Launder [1972] est donnée par l'équation (3.47) :

$$S_{ppp,ijk} = -K_{p,kl}^t \frac{\partial}{\partial x_l} R_{pp,ij} \quad (6.14)$$

avec le tenseur de diffusivité donné dans le cas du canal par :

$$K_{p,mn}^t = \left[\frac{\xi_{fp}^F}{\tau_{fp}^F} + \frac{\xi_p^c}{\tau_p^c} \right]^{-1} R_{pp,mn} \quad (6.15)$$

avec $\xi_{fp}^F = 3$ et $\xi_p^c = (1 + e_{pp})(49 - 33e_{pp})/60$

La forme contractée similaire aux fermetures type Daly and Harlow [1970] (3.49) s'écrit quant à elle :

$$\frac{\partial}{\partial x_k} [S_{ppp,ijk}] = -\frac{\partial}{\partial x_k} \left[K_{p,kl}^t \frac{\partial}{\partial x_l} R_{pp,ij} \right] \quad (6.16)$$

avec $\xi_{fp}^F = 9/5$ et $\xi_p^c = 2/5\sigma_c$

Des hypothèses émises pour obtenir les modélisations (3.47) et (3.49) la plus sensible semble être la modélisation des corrélations quadruples par une formule de Milan-Tchekov valable pour une pdf gaussienne. Sakiz [1999] a en effet montré qu'en introduisant seulement cette hypothèse dans une étude à priori des équations des corrélations triples (c'est-à-dire que tous les autres termes sont calculés de manière exacte par une DPS), le comportement des modèles de corrélations triples ne sont pas satisfaisants lors de forts déséquilibres. Sakiz [1999] introduit alors une correction des termes de dispersion des corrélations doubles similaire à Louge et al. [1991]. Pour un écoulement en conduite verticale pour lequel la turbulence du fluide n'influe pas sur le mouvement d'agitation particulaire, Sakiz [1999] construit l'équivalent du libre parcours moyen pour la phase dispersée¹ λ_p à partir de l'équation (3.26) :

$$\lambda_p = \sqrt{\frac{\pi R_{pp,vv}}{2}} \left(\frac{2}{\tau_{fp}^F} + \frac{\sigma_c}{\tau_p^c} \right)^{-1} \quad (6.17)$$

¹En théorie cinétique des gaz, le libre parcours moyen λ_c est relié à la viscosité ν_c et la température T par la relation $\nu_c = \lambda_c \sqrt{2T/\pi}$

La correction du tenseur de diffusivité du mouvement fluctuant particulaire pour un canal de demi-largeur L_y s'écrit alors :

$$K_{p,mn}^{Kn} = \frac{K_{p,mn}^t}{1 + C \frac{\lambda_p}{L_y}} \quad (6.18)$$

où C est une constante du modèle. Le rapport λ_p/L_y est un rapport d'un libre-parcours moyen à une échelle de longueur caractéristique macroscopique de l'écoulement et représente donc un nombre de Knudsen particulier. C'est pourquoi la correction (6.18) sera appelée correction par effet de Knudsen.

La figure 6.5 présente pour une demi-largeur de canal dans les cas A2 les prédictions *a posteriori* de l'approche eulérienne concernant les corrélations triples, pour une constante $C = 4$ dans la correction par effet de Knudsen (la constante C ayant été "fittée" à la valeur $C = 4$ par Sakiz [1999] dans le cas du canal). Les prédictions sont dites *a posteriori* car la prédition des corrélations triples est prise en compte dans les équations des contraintes particulières. Ces dernières sont donc influencées par la modélisation, et influencent en retour les préditions des corrélations triples.

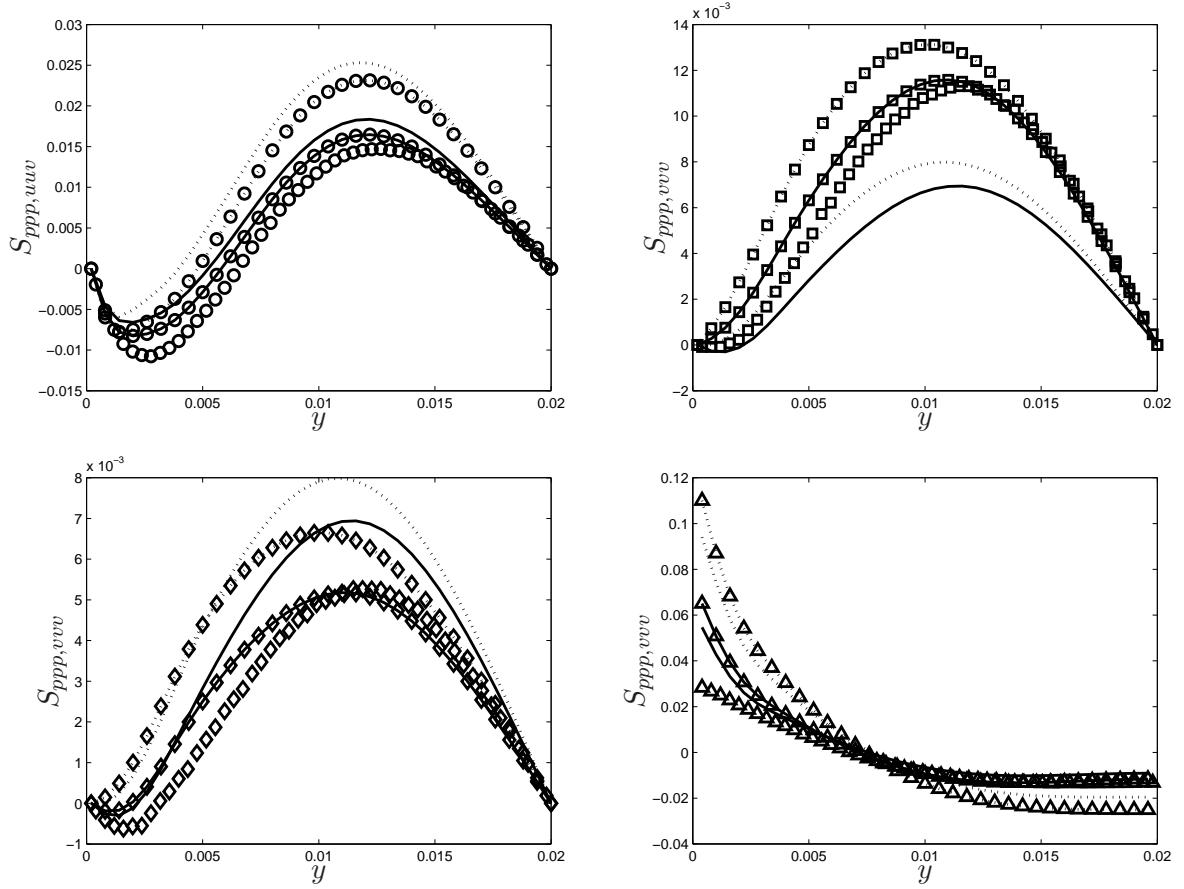


FIG. 6.5 – Comparaison des corrélations triples prédites par les différents modèles pour le cas A2. \circ : lagrangien stochastique ; — : équation (6.14) ; —○— : équation (6.14) avec correction (6.18) ; ····· : équation (6.16) ; ···○··· : équation (6.16) avec correction (6.18).

La correction par effet de Knudsen apporte donc une amélioration notable des prédictions des contraintes triples à travers tout le canal, que ce soit pour l'approche type Hanjalic and Launder [1972] ou Daly and Harlow [1970]. Les effets les plus visibles concernent la contrainte $S_{ppp,vvv}$ qui est maintenant correctement prédite alors que sans correction par effet de Knudsen les prédictions sous-estimaient grandement (avec un

rapport deux) cette corrélation. L'amélioration est aussi notable en ce qui concerne la contrainte $S_{ppp,uvw}$, moins importante pour la composante $S_{ppp,uuv}$ tandis qu'elle détériore très raisonnablement la prédition de la corrélation $S_{ppp,uvv}$. Sur toutes les composantes, avec correction par effet de Knudsen, la modélisation de type Hanjalic and Launder [1972] donne de meilleurs résultats que la modélisation type Daly and Harlow [1970].

La figure 6.6 présente les résultats *a posteriori* des modèles décrits au-dessus pour la modélisation des corrélations triples dans un cas plus dilué et avec des conditions de frottement en paroi, le cas B3. La présence du frottement en paroi est à l'origine d'un déséquilibre plus important de l'écoulement, notamment par une dissymétrisation de la distribution des vitesses normales des particules à cause des rebonds inélastiques ($v_p^* = -e_{pw}v_p$).

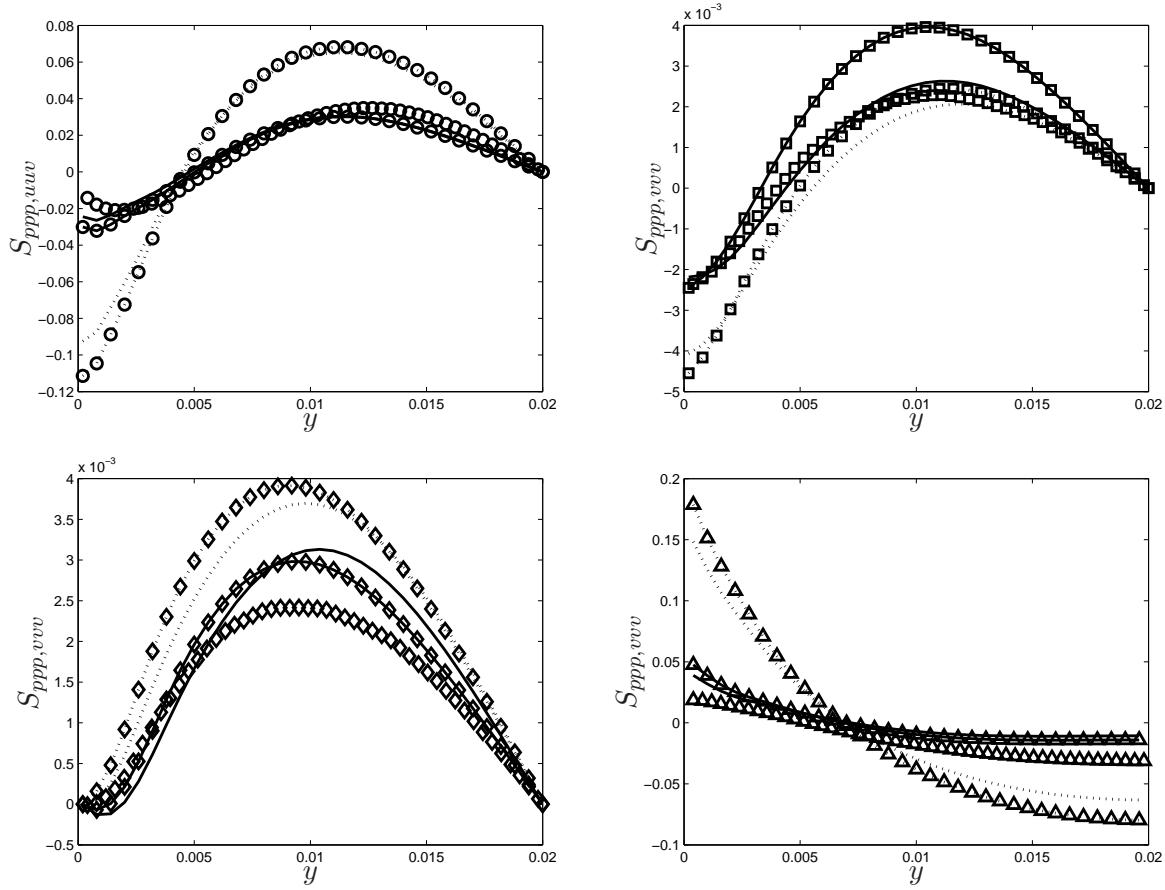


FIG. 6.6 – Comparaison des corrélations triples prédites par les différents modèles pour le cas B3.
 ○ : lagrangien stochastique ; — : équation (6.14) ; —○— : équation (6.14) avec correction (6.18) ; ····· : équation (6.16) ; ···○··· : équation (6.16) avec correction (6.18).

Comme le montre la figure 6.6 la correction avec $C = 4$ donne aussi de bons résultats concernant le cas B3 plus dilué et avec frottement sur les parois. Le modèle type Hanjalic and Launder [1972] permet encore une meilleure prédition que le modèle type Daly and Harlow [1970]. Les résultats sont néanmoins plus mitigé que dans le cas B2 car l'amélioration ne profite pas à toutes les contraintes triples. La correction dégrade par exemple la prédition de la contrainte $S_{ppp,vvv}$ qui était pourtant très bonne dans le cas sans correction par effet de Knudsen. Le modèle gaussien pour la prédition des corrélations quadruples, qui devrait être moins bon à cause du déséquilibre, semble donner de meilleurs résultats que la correction par effet de Knudsen. Les résultats ne sont tout de même pas trop dégradés par l'utilisation de la correction, et nous préserverons

donc cette correction pour tous les cas d'écoulements. Au vu des résultats de la figure 6.6, la correction par effet de Knudsen n'apparaît tout de même pas comme universelle.

La correction présente de plus le désavantage d'être adaptée uniquement à l'écoulement de canal considéré. Cette correction étant en effet basée sur une correction par un nombre de Knudsen particulaire prenant en compte le pseudo libre-parcours moyen en l'absence d'effet de la turbulence sur la phase particulaire. Celle-ci a donc peu de chance d'être précise dans les cas où la turbulence est le facteur prépondérant de dispersion des particules.

En conclusion, nous préserverons pour certaines simulations la correction par effet de Knudsen, tout en gardant en tête que cette correction est seulement une manière habile de corriger un problème ouvert (la modélisation des corrélations triples) dans le cas du canal étudié. Nous utiliserons par la suite pour le calcul des corrélations triples le modèle type Hanjalic and Launder [1972] associé à une correction par effet de Knudsen avec une constante $C = 4$.

6.2.4 Equations eulériennes décrivant le système

Les hypothèses émises pour dériver les équations eulériennes décrivant le comportement de la phase particulaire sont :

- les termes de convection (sauf en ce qui concerne la densité de particules) sont négligés,
- les termes de traînée sont pris selon le modèle modifié tronqué de la traînée exposé au § 6.2.2,
- les corrélations triples sont modélisées par une forme type Hanjalic and Launder [1972] avec la correction par effet de Knudsen,
- les termes de collision sont calculés pour des collisions inter-particulaires élastiques et un chaos fluido-particulaire.

Sous ces hypothèses les équations eulériennes décrivant le comportement de la phase particulaire sont :

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} = \frac{\partial n_p V_p}{\partial y} \quad (6.19a)$$

$$\frac{\partial V_p}{\partial t} = \frac{1}{n_p} \frac{\partial n_p R_{pp,vv}}{\partial y} - \frac{2}{\tau_{fp}^F} h(\overline{Re}_p) \frac{R_{pp,uv}}{\bar{v}_r^2} (U_p - U_f) \quad (6.19b)$$

$$\frac{\partial U_p}{\partial t} = \frac{1}{n_p} \frac{\partial n_p R_{pp,uv}}{\partial y} - \frac{1}{\tau_{fp}^F} (U_p - U_f) \quad (6.19c)$$

$$\frac{\partial R_{pp,uu}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y} \left[n_p K_{p,vv}^t \frac{\partial R_{pp,uu}}{\partial y} \right] - \left[1 - (1 - 3 \frac{(U_p - U_f)^2}{\bar{v}_r^2}) h(\overline{Re}_p) \right] \frac{2R_{pp,uu}}{\tau_{fp}^F} \quad (6.19d)$$

$$- \frac{\sigma_c}{\tau_p^c} (R_{pp,uu} - \frac{2}{3} q_p^2) - 2R_{pp,uv} \frac{\partial U_p}{\partial y}$$

$$\frac{\partial R_{pp,vv}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y} \left[n_p K_{p,vv}^t \frac{\partial R_{pp,vv}}{\partial y} \right] - \left[1 - (1 - \frac{(U_p - U_f)^2}{\bar{v}_r^2}) h(\overline{Re}_p) \right] \frac{2R_{pp,vv}}{\tau_{fp}^F} \quad (6.19e)$$

$$- \frac{\sigma_c}{\tau_p^c} (R_{pp,vv} - \frac{2}{3} q_p^2)$$

$$\frac{\partial R_{pp,ww}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y} \left[n_p K_{p,vv}^t \frac{\partial R_{pp,ww}}{\partial y} \right] - \left[1 - (1 - \frac{(U_p - U_f)^2}{\bar{v}_r^2}) h(\overline{Re}_p) \right] \frac{2R_{pp,ww}}{\tau_{fp}^F} \quad (6.19f)$$

$$- \frac{\sigma_c}{\tau_p^c} (R_{pp,ww} - \frac{2}{3} q_p^2)$$

$$\frac{\partial R_{pp,uv}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y} \left[n_p K_{p,vv}^t \frac{\partial R_{pp,uv}}{\partial y} \right] - \left[1 - (1 - 2 \frac{(U_p - U_f)^2}{\bar{v}_r^2}) h(\overline{Re}_p) \right] \frac{2R_{pp,uv}}{\tau_{fp}^F} \quad (6.19g)$$

$$- \frac{\sigma_c}{\tau_p^c} R_{pp,uv} - R_{pp,uv} \frac{\partial U_p}{\partial y}$$

$$K_{p,mn}^t = \left[\frac{\xi_{fp}^F}{\tau_{fp}^F} + \frac{\xi_p^c}{\tau_p^c} \right]^{-1} R_{pp,mn} \quad (6.19h)$$

$$K_{p,mn}^t = K_{p,mn}^{Kn} \quad \text{si correction par effet de Knudsen} \quad (6.19i)$$

6.2.5 Résultats avec fermetures modifiées

La figure 6.7 présente les résultats concernant la phase particulaire lorsque le système (6.19) est résolu sans et avec correction par effet de Knudsen dans la modélisation des corrélations triples.

Dans les deux cas la correction par effet de Knudsen n'apporte pas d'amélioration notable dans la pré-diction de la densité de particules sur la demi-largeur du canal. L'amplitude du gradient de densité est ainsi surévalué par la correction dans le cas B3 (alors que cette concentration est sous-évaluée sans correction), et la pré-diction est moins bonne dans le cas A2.

Cet effet est largement contre-balance par l'amélioration des prédictions concernant la vitesse moyenne longitudinale. Il est en effet nécessaire de considérer la correction par effet de Knudsen pour obtenir des profils de vitesse moyenne corrects, spécialement dans le cas le plus dilué. L'erreur par rapport aux résultats DPS dans le cas B3 est ainsi réduite de plus de 1350% en paroi. La pré-diction de la vitesse moyenne longitudinale des particules semble particulièrement sensible au modèle de corrélations triples dans les cas où les particules frottent sur les parois. Cette sensibilité provient de la condition à la limite $R_{pp,uv} = -\mu_{pw} R_{pp,vv}$ qui pilote en partie la production dans les zones de proche paroi. Alors que sans correction la contrainte de cisaillement est surestimée en paroi car la contrainte normale l'est aussi, la correction par effet

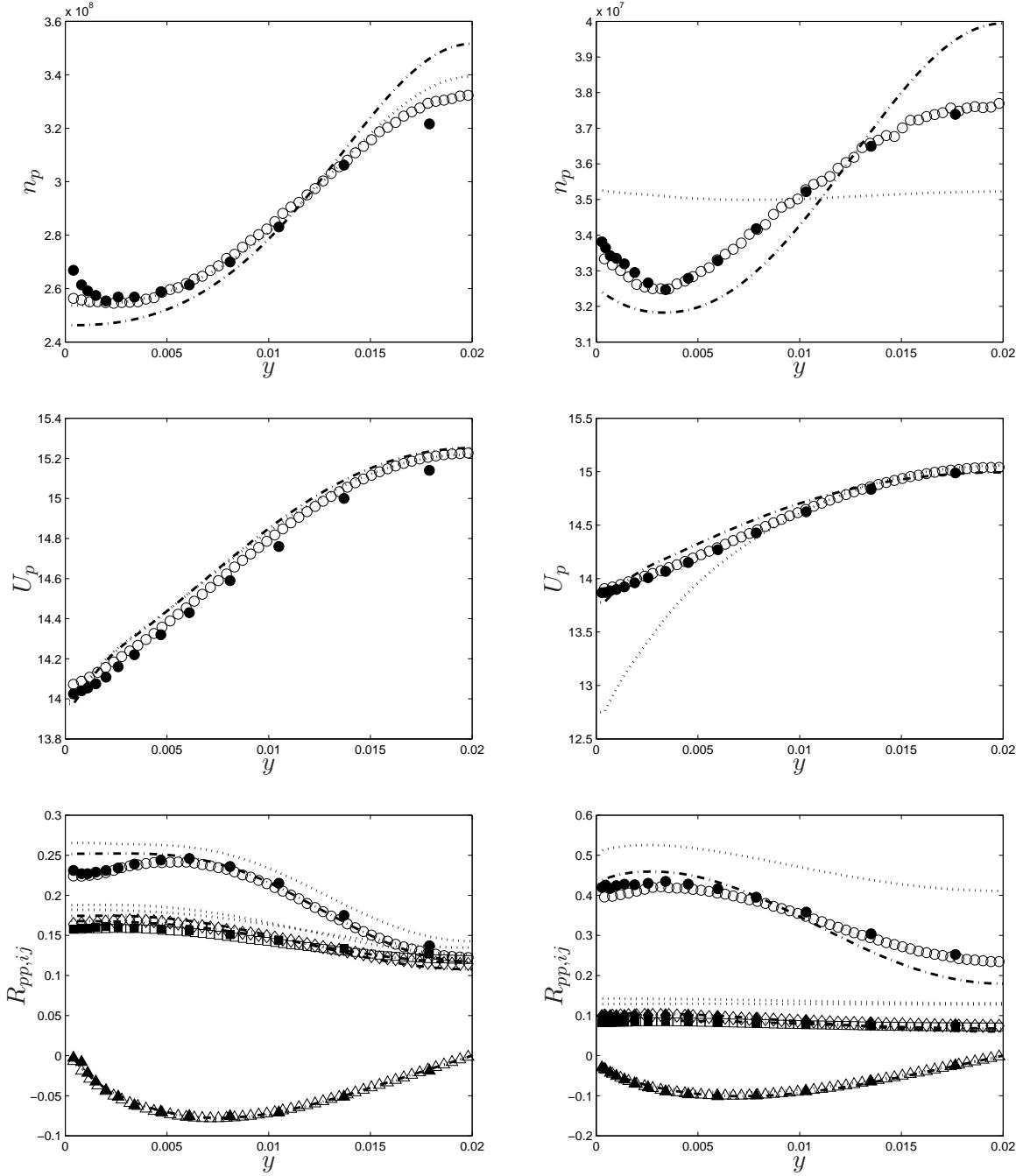


FIG. 6.7 – Résultats dans les cas A2 (gauche) et B3 (droite) concernant la densité, vitesse moyenne longitudinale et contraintes cinétiques des particules. \circ : lagrangien stochastique (\circ : $R_{pp,uu}$, \square : $R_{pp,vv}$, \diamond : $R_{pp,ww}$, \triangle : $R_{pp,uv}$) ; ······ : eulérian (6.19) ; - - - : eulérian (6.19) avec correction par effet de Knudsen (6.18) ; ● : DPS (Sakiz [1999]).

de Knudsen permet d'annihiler cet effet et le profil de vitesse est ainsi mieux prédit. Les profils de vitesse moyenne prédits avec la correction par effet de Knudsen présentent néanmoins des gradients trop importants par rapport à ceux de la DPS ou du lagrangien stochastique dans les zones proches des parois.

Ces gradients étant responsables de la production des contraintes longitudinale et de cisaillement, la production de ces deux contraintes est alors surestimée dans les zones de proche paroi ce qui est visible aux

valeurs trop importantes de la contrainte $R_{pp,uu}$ en proche paroi (et ce dans les deux cas présentés). La dispersion par le mouvement fluctuant (dont le moteur est ici la corrélation $S_{ppp,uuv}$) propage de plus cette sur-estimation vers l'intérieur du canal ($S_{ppp,uuv}$ est positive pour $y > 6 \cdot 10^{-2} m$), particulièrement pour les modèles sans la correction par effet de Knudsen (6.18). De plus les collisions, qui tendent à isotropiser le mouvement d'agitation des particules, propagent ce défaut aux autres composantes diagonales du tenseur des corrélations particulières.

Les fermetures eulériennes modifiées dans les paragraphes précédents améliorent donc de manière importante les prédictions issues de l'approche eulérienne. Quelques défauts substituent tout de même dans les zones de proche paroi, défauts qui ont tendance à se propager dans les cas étudiés du fait de l'absence d'influence de la turbulence. Il est tout de même remarquable que des corrections aussi "simples" puissent autant améliorer la prédition des écoulements, particulièrement dans les cas de rebonds inélastiques avec frottement sur les parois. La figure 6.8 présente par exemple les distributions de vitesses longitudinale et normale des particules dans la demi-largeur du canal pour le cas B3.

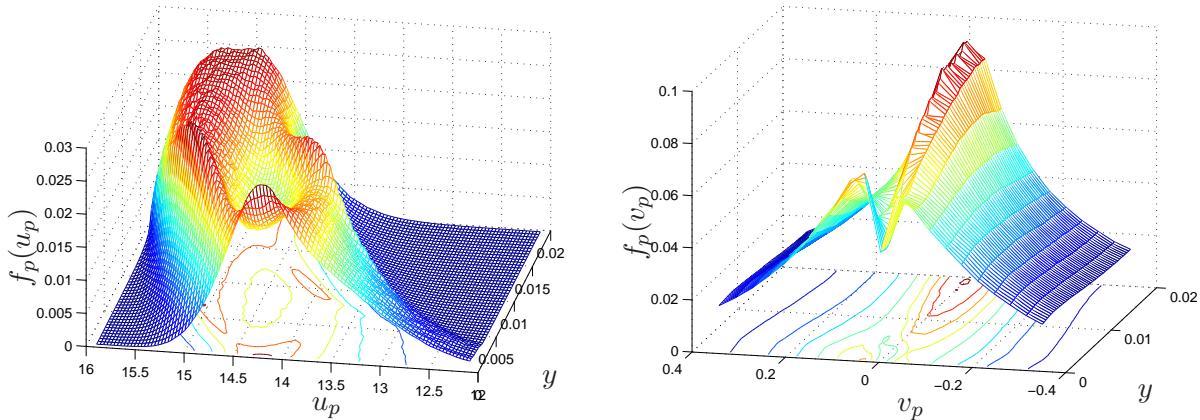


FIG. 6.8 – PDF normalisées des distributions des vitesses longitudinale (gauche) et normale (droite) dans la demi-largeur du canal (la paroi étant située en $y = 0$) dans le cas B3. PDF obtenues lors d'une simulation lagrangienne stochastique.

Les défauts de prédictions de l'approche eulérienne apparaissent donc comme localisés en espace dans des zones où l'écoulement est éloigné de l'équilibre par des phénomènes localisés tel que le frottement sur la paroi. Cette constatation, qui fut la germe de l'idée de méthode hybride, se retrouve être particulièrement pertinente ici. Une méthode hybride, au travers de sa composante lagrangienne, fournirait ainsi des prédictions correctes de l'écoulement dans les zones hors-équilibre, c'est-à-dire proche des parois. Ces valeurs permettraient ensuite une meilleure prédition dans le domaine eulérien car les conditions aux limites imposées par l'approche lagrangienne seraient plus réalistes que celles fournies par une résolution eulérienne des zones hors-équilibre.

6.3 Configuration spatiale et méthodologie de couplage

Les travaux effectués dans le cas du canal ont été dédiés à l'étude de la faisabilité du couplage entre approches lagrangienne et eulérienne dans les écoulements inhomogènes. Les études ont porté plus particulièrement sur la convergence de l'algorithme de couplage et sur la possibilité de mieux prédire l'écoulement dans le domaine eulérien par l'utilisation de la méthode hybride. Les questions relatives aux aspects nu-

mériques (vitesse de convergence du couplage, coût de l'algorithme de couplage, gain de temps CPU par rapport aux simulations purement lagrangiennes...), bien que très importantes, ne sont pas abordées ici.

6.3.1 Configuration spatiale

La décomposition de domaines est identique au cas de l'écoulement turbulent homogène cisailé pour la demi-largeur du canal. Les faces de couplage sont ainsi prises parallèles aux parois, c'est-à-dire dans une configuration ne présentant pas de vitesse moyenne normale à la face de couplage. Le domaine lagrangien est situé près de la paroi (figure 6.9) ; celle-ci fait maintenant partie des conditions aux limites imposées au domaine lagrangien. Le domaine eulérien est quant à lui situé au cœur de l'écoulement comme dans la figure 6.9.

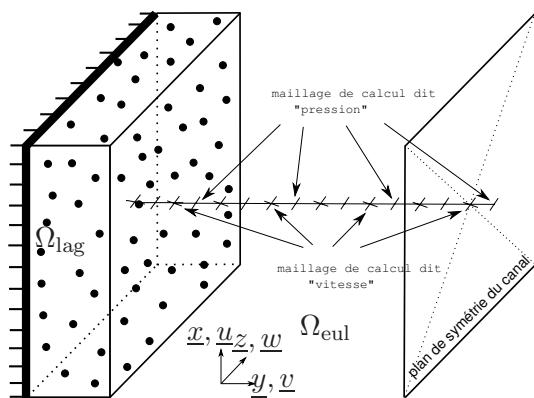


FIG. 6.9 – Description schématique des domaines lagrangien et eulérien

Le rapport de volume est toujours défini comme :

$$\eta = \frac{V_{\text{lag}}}{L^3} = \frac{L_{\text{lag}}}{L_y} \quad (6.20)$$

où L_{lag} est la longueur de la direction normale du domaine lagrangien et L_y est la demi-largeur du canal.

L'utilisation de conditions de Dirichlet comme conditions aux limites pour le calcul eulérien nécessite un recouvrement des domaines lagrangien et eulérien afin de réduire les erreurs numériques lors du calcul des valeurs à imposer. La coupe transversale de l'écoulement présenté sur la figure 6.10 est donc identique au cas homogène cisailé.

Les maillages eulériens sont construits pour satisfaire aux conditions suivantes :

- le deuxième point du maillage vitesse coïncide avec la face de couplage lagrangienne Γ_{lag} . Le premier point du maillage vitesse (où sont imposées les conditions de Dirichlet pour les vitesses moyennes) coïncide avec la face de couplage eulérienne Γ_{eul} ,
- le dernier point du maillage vitesse coïncide avec le plan de symétrie du canal (le centre du canal),
- les noeuds du maillage pression sont situés aux centres des mailles du maillage vitesse,
- le dernier point du maillage pression est le symétrique (par rapport au plan de symétrie du canal) de l'avant-dernier.

Lors des simulations hybrides les maillages eulériens utilisés comptaient entre 70 et 100 noeuds. Aucune différence n'a été observée par un raffinement du maillage, mais une étude sur les maillages à peu de noeuds n'a pas été réalisée. La convergence en maillage sera donc assumée pour toutes les simulations.

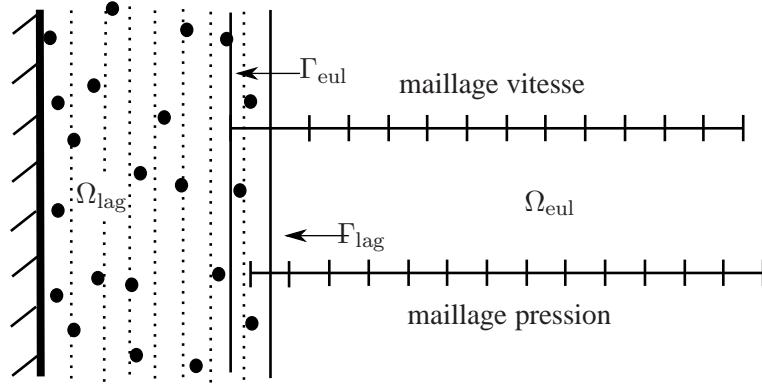


FIG. 6.10 – Description des maillages dans le cas du canal

6.3.2 Initialisation

Afin d'accélérer le processus de convergence les simulations hybrides sont initialisées par un calcul eulérien convergé sur toute la largeur du canal. Ces calculs sont généralement effectués en prenant en compte la correction par effet de Knudsen (6.18). Une initialisation par un calcul eulérien sans correction fournit des résultats identiques à convergence pour la méthode hybride, mais cette convergence demande quelques itérations de couplage supplémentaires. C'est pourquoi les profils d'initialisation sont ceux prédicts par le calcul eulérien avec correction (6.18) présentés dans la figure 6.7.

Les profils obtenus sont ensuite projetés sur les maillages du domaine eulérien par une interpolation par splines cubiques. Les profils sont de même projetés dans le domaine lagrangien sur les centres des cellules de calcul des statistiques. Les particules numériques sont ensuite initialisées en considérant la densité de particules homogène dans chaque cellule statistique, et en supposant la pdf localement gaussienne. Les moments de cette pdf modèle sont donnés par les projections des profils initiaux.

6.3.3 Algorithme de couplage

1. Résolution du système d'équations lagrangiennes pour m_{lag} pas de temps dt_{lag} en prenant en compte :
 - (a) les conditions aux limites qui n'appartiennent pas à la surface de couplage Γ_{lag} , c'est-à-dire des conditions de symétrie ou de rebond sur $\partial\Omega \cap \Omega_{\text{lag}}$,
 - (b) l'injection aléatoire de particules numériques suivant la pdf de flux incident présumée à l'interface de couplage lagrangienne Γ_{lag} (pour la simulation de la condition (4.8)),
2. Calcul des demi-flux lagrangiens sortants $\mathcal{F}_{\Gamma}^{\text{lag}+}(\Psi)$ ainsi que des conditions aux limites de Dirichlet $\langle \Psi \rangle_{\text{lag}}$ à imposer à la simulation eulérienne,
3. Résolution du système d'équations eulériennes (avec ou sans la correction par effet de Knudsen (6.18)) pour m_{eul} pas de temps dt_{eul} en prenant en compte :
 - (a) les conditions aux limites qui n'appartiennent pas à la surface de couplage Γ_{eul} , c'est-à-dire des conditions de symétries sur $\partial\Omega \cap \Omega_{\text{eul}}$,
 - (b) les conditions aux limites de Dirichlet obtenues lors de la simulation lagrangienne,
4. Calcul au niveau de l'interface Γ_{lag} des moments (particule et fluide) permettant de représenter les demi-flux calculés par (4.18) à l'aide de la pdf de Richman (résolution du système (4.20)).

Nous ne considérerons dans nos simulations que le cas du couplage stationnaire, c'est-à-dire pour lequel chaque approche est convergée en prenant en compte les conditions aux limites issues du couplage. L'approche par couplage instationnaire n'a pas encore été testée, mais fera l'objet de futurs travaux. Les paramètres choisis pour l'algorithme de couplage sont donc les suivants :

- $m_{\text{lag}} = 10000$ et $dt_{\text{lag}} = 5 \cdot 10^{-4} \text{ s}$,
- $m_{\text{eul}} = 20000$ et $dt_{\text{eul}} = 10^{-4} \text{ s}$.

La boucle de couplage est ainsi répétée au moins 10 fois pour s'assurer que les résultats fournis par la méthode hybride sont les résultats à convergence de la méthodologie de couplage. L'expérience montre que la convergence est obtenue plus rapidement (3 à 5 itérations), mais les calculs ont été menés avec plus d'itérations (jusqu'à 20) pour s'assurer que la convergence soit atteinte (et que le processus ne diverge pas).

Il est nécessaire lors de l'utilisation de cette méthodologie de couplage de s'assurer la conservation du nombre total de particules dans le canal (ou plutôt dans sa demi-largeur). Les deux approches étant couplées "à convergence", l'information sur le nombre de particules échangées par les deux domaines est perdue ; à moins de garder en mémoire pour chaque pas de temps de chaque simulation l'information nécessaire à la reconstruction de l'information globale. Nous avons pris le parti ici d'effectuer une renormalisation du nombre de particules présents dans le canal à la fin de chaque itération de couplage. Le nombre de particules réelles présentes dans le domaine lagrangien ($\kappa \mathcal{N}_p$) est alors additionné au nombre de particules calculé par la simulation eulérienne ($\int n_p(y) L_x L_z dy$, où L_x et L_z sont les longueurs des directions longitudinales et transversales de la boîte lagrangienne). Cette somme est alors renormalisée pour obtenir le nombre de particules initialement présents dans le domaine de calcul ($N_p = (6\bar{\alpha}_p)/(\pi d_p^3) L_x L_y L_z$). Cette renormalisation est effectuée par un changement du poids numérique des particules dans le domaine lagrangien, et par une homothétie du profil de n_p dans le domaine eulérien.

6.3.4 Calculs des conditions aux limites

6.3.4.1 Calcul des moments associés à la pdf d'injection

La condition à la limite imposée au domaine lagrangien est l'imposition d'une pdf des particules incidentes dont les demi-flux associés intègrent l'information des corrélations triples. Les demi-flux incidents sont ainsi calculés à l'aide de l'équation (4.18) :

$$\mathcal{F}_\Gamma^-(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) = \mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) - \mathcal{F}_\Gamma^{\text{lag}+}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) \quad (6.21)$$

où les flux totaux $\mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t)$ sont donnés dans les cas où les vitesses moyennes normales à la face de couplage sont nulles :

$$\mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}}(1, \underline{x}_\Gamma, t) = n_p V_p (= 0 \text{ pour un couplage stationnaire}) \quad (6.22a)$$

$$\mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}}(u_{p,i}, \underline{x}_\Gamma, t) = n_p R_{pp,iv} \quad (6.22b)$$

$$\mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}}(u''_{p,i} u''_{p,j}, \underline{x}_\Gamma, t) = n_p S_{ppp,ijv} \quad (6.22c)$$

Les demi-flux sortants du domaine lagrangien sont calculés directement par sommation, dans la simulation lagrangienne, sur les particules sortantes du domaine par la face de couplage :

$$\mathcal{F}_\Gamma^{\text{lag}+}(\Psi, \underline{x}_\Gamma, t) = \frac{\kappa}{dSdt} \sum_i \Psi_i \quad (6.23)$$

où dS est la surface de couplage et dt est la durée sur laquelle est effectuée la sommation.

Les moments associés à la pdf de Richman dont les demi-flux sont exactement identiques aux demi-flux calculés par (6.21) (en ce qui concerne les demi-flux des variables jusqu'à l'ordre deux) sont ensuite calculés en inversant le système (4.20). Cette inversion est ici facilitée par l'omission (justifiée) des corrélations fluide-particules et des contraintes de Reynolds du fluide. Le système peut alors s'exprimer de manière explicite (les demi-flux issus de la pdf modèle de Richman ayant une formulation explicite). Ainsi le bilan des demi-flux de densité permet d'écrire :

$$\mathcal{F}_\Gamma^{\text{eul}-}(1, \underline{x}_\Gamma, t) = -\hat{n}_p \sqrt{\frac{\hat{R}_{pp,vv}}{2\pi}} \quad (6.24a)$$

$$= -\mathcal{F}_\Gamma^{\text{lag}+}(1, \underline{x}_\Gamma, t) \quad (6.24b)$$

Le bilan des demi-flux des composantes longitudinales et normales de la vitesse moyenne des particules permet d'obtenir de manière identique les relations :

$$\hat{n}_p \sqrt{\frac{\hat{R}_{pp,vv}}{2\pi}} \left[\hat{U}_p - \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\hat{R}_{pp,uv}}{\sqrt{\hat{R}_{pp,vv}}} \right] = n_p^{\text{eul}} R_{pp,uv}^{\text{eul}} - \mathcal{F}_\Gamma^{\text{lag}+}(u_p, \underline{x}_\Gamma, t) \quad (6.25a)$$

$$\hat{n}_p \hat{R}_{pp,vv} = 2 \left[n_p^{\text{eul}} R_{pp,vv}^{\text{eul}} - \mathcal{F}_\Gamma^{\text{lag}+}(v_p, \underline{x}_\Gamma, t) \right] \quad (6.25b)$$

Enfin le bilan sur les demi-flux des contraintes particulières fournit les dernières équations du système :

$$\hat{n}_p \sqrt{\frac{\hat{R}_{pp,vv}}{2\pi}} \left[\hat{R}_{pp,uu} + \frac{\hat{R}_{pp,uv}^2}{\hat{R}_{pp,vv}} \right] = n_p^{\text{eul}} S_{ppp,uvv}^{\text{eul}} - \mathcal{F}_\Gamma^{\text{lag}+}(u_p'' u_p'', \underline{x}_\Gamma, t) \quad (6.26a)$$

$$2\hat{n}_p \sqrt{\frac{\hat{R}_{pp,vv}}{2\pi}} \hat{R}_{pp,vv} = n_p^{\text{eul}} S_{ppp,vvv}^{\text{eul}} - \mathcal{F}_\Gamma^{\text{lag}+}(v_p'' v_p'', \underline{x}_\Gamma, t) \quad (6.26b)$$

$$\hat{n}_p \sqrt{\frac{\hat{R}_{pp,vv}}{2\pi}} \hat{R}_{pp,ww} = n_p^{\text{eul}} S_{ppp,wwv}^{\text{eul}} - \mathcal{F}_\Gamma^{\text{lag}+}(w_p'' w_p'', \underline{x}_\Gamma, t) \quad (6.26c)$$

$$2\hat{n}_p \sqrt{\frac{\hat{R}_{pp,vv}}{2\pi}} \hat{R}_{pp,uv} = n_p^{\text{eul}} S_{ppp,uvv}^{\text{eul}} - \mathcal{F}_\Gamma^{\text{lag}+}(u_p'' v_p'', \underline{x}_\Gamma, t) \quad (6.26d)$$

Le système est donc trop contraint car il existe trois équations, (6.24), (6.25b) et (6.26b) ayant pour inconnues la densité \hat{n}_p et contrainte cinétique particulaire $\hat{R}_{pp,vv}$. Ce défaut provient de l'hypothèse que la vitesse moyenne normale à la face de couplage est nulle. Pour le régler il faudrait se donner un degré de liberté supplémentaire en autorisant à la pdf d'incorporer une vitesse \hat{V}_p mais les expressions des demi-flux en seraient alors grandement modifiées. Nous avons donc pris la parti de calculer la contrainte cinétique moyenne des particules entrantes par la relation (6.26b) et d'oublier la relation (6.25b). Plusieurs tests ont montré que cette dernière relation était bien satisfaite dans nos simulations. La densité \hat{n}_p est alors calculée par la relation (6.24).

6.3.4.2 Conditions de Dirichlet issues du calcul lagrangien

Les simulations lagrangiennes stochastiques effectuées sur toute la demi-largeur du canal considèrent 20000 particules numériques réparties dans 50 cellules statistiques. Les simulations lagrangiennes effectuées lors de l'application de la méthode hybride préservent ce ratio en considérant $\eta \times 20000$ particules numériques dans $\eta \times 50$ cellules statistiques. La largeur des cellules statistiques lors des simulations hybrides

est donc constante quelque soit le rapport de volume ($L_c = 4 \cdot 10^{-4} m$). La largeur des cellules eulériennes quant à elle est assez proche de $\delta y \sim 2 \cdot 10^{-4} m$. Les conditions de Dirichlet sont donc extrapolées et non pas interpolées. Les échelles de longueur macroscopiques de l'écoulement étant tout de même bien supérieures aux échelles L_c et δy , le calcul des conditions de Dirichlet peut être considéré comme fiable.

Les statistiques pour l'obtention des conditions de Dirichlet et des flux sortants débutent à partir de la 4000ème itération et s'arrêtent en fin de simulation à la 10000ème itération. Les particules ont ainsi le temps d'effectuer plusieurs fois l'aller-retour jusqu'à la paroi (le temps de parcours de paroi à paroi est au plus de 0,5s) et les résultats issus de la simulation lagrangienne sont donc pilotés par l'injection de particules numériques issue du couplage.

6.4 Résultats HELM avec correction par effet de Knudsen

Une première phase de validation a été réalisée pour un couplage utilisant la meilleure approche possible concernant le domaine eulérien. La méthode hybride couple donc la résolution du modèle eulérien avec correction par effet de Knudsen (6.18) à l'approche lagrangienne stochastique. Pour cette raison ce type de simulation sera dénommé HELM-EKC (pour "Hybrid Eulerian-Lagrangian Method with Eulerian Knudsen Correction").

Les résultats issus du modèle eulérien avec correction sont proches des résultats DPS de Sakiz [1999] et peuvent être considérés comme déjà consistants. Les enjeux associés à ces simulations sont donc multiples :

1. vérifier que la méthodologie de couplage ne dégrade pas les prédictions dans la zone eulérienne,
2. étudier l'effet du couplage sur les résultats dans le domaine lagrangien,
3. identifier les éventuels défauts.

6.4.1 Cas A2

La figure 6.11 présente les évolutions dans la direction normale, pour le cas A2 et un rapport de volume $\eta = 0,3$, des résultats issus de la méthode HELM-EKC comparés aux résultats de "l'expérience numérique" de la DPS ainsi que du lagrangien stochastique et de l'eulérien utilisés dans toute la demi-largeur du canal.

Les résultats concernant la prédition du profil de densité de particules sont mitigés. Si le profil prédit par la méthode HELM-EKC est légèrement meilleur que le profil issu d'un calcul eulérien, les caractéristiques du profil semblent être principalement dictées par les prédictions eulériennes. La densité de particules dans le domaine lagrangien est ainsi sous-estimée et surestimée dans le domaine eulérien. Des améliorations sont visibles, mais le profil ne suit pas vraiment le profil prédit par la simulation lagrangienne stochastique.

L'effet de la méthode hybride se révèle par contre bien plus important sur la prédition du profil de vitesse moyenne longitudinale. Ainsi un des défauts majeurs de l'approche eulérienne semble avoir été corrigé. Le profil de vitesse moyenne dans le domaine lagrangien est en effet bien prédit, notamment en ce qui concerne le gradient de vitesse moyenne. Cette amélioration se fait au prix d'une transition assez raide du profil de vitesse moyenne entre les deux domaines de calcul. Le profil suit en effet assez fidèlement le profil prédit par chaque approche dans sa zone respective, ce qui implique un saut de vitesse moyenne à la traversée de l'interface qui est assez peu visible dans la figure 6.11 mais l'est plus dans la figure 6.15.

La correction du défaut de l'approche eulérienne dans la prédition du gradient de vitesse moyenne est visible au très bon comportement des prédictions issues de la méthode HELM-EKC concernant la contrainte $R_{pp,uu}$. Le gradient de vitesse moyenne longitudinale est en effet en partie responsable de la production de

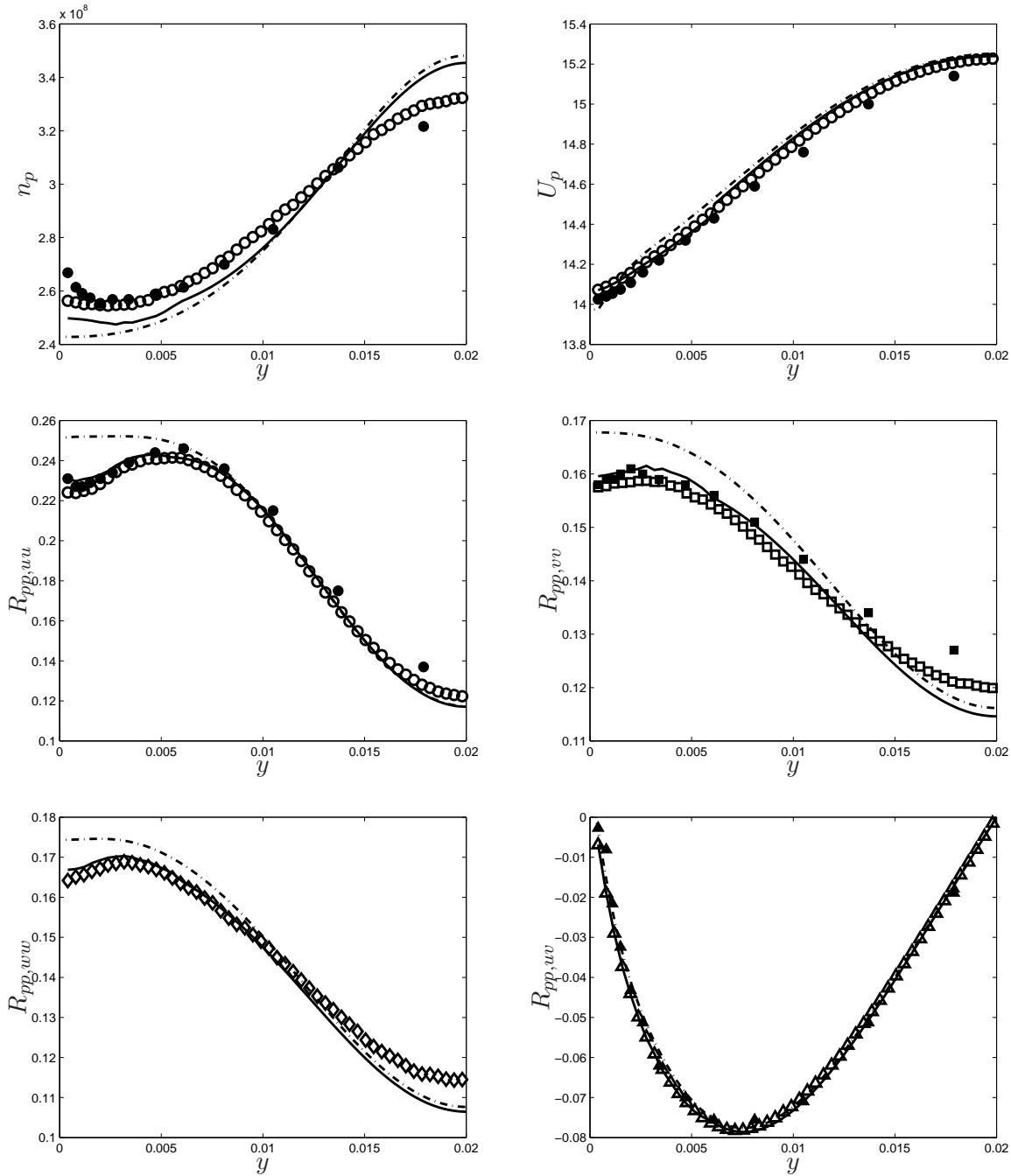


FIG. 6.11 – Résultats de HELM-EKC avec un rapport de volume $\eta = 0,3$ dans le cas A2. \circ : lagrangien stochastique ; $-\cdots-$: eulérien (6.19) avec correction par effet de Knudsen (6.18) ; — : HELM-EKC ; \bullet : DPS (Sakiz [1999]).

cette contrainte cinétique. Le gradient n'étant plus surestimé, la prédiction de la production s'avère meilleure et la prédiction de la corrélation $R_{pp,uu}$ de même. Comme le montre la figure 6.11 les résultats issus de la méthode HELM-EKC concernant toutes les contraintes cinétiques sont en très bon accord avec l'approche lagrangienne stochastique (et avec la DPS). L'imposition de conditions aux limites de type Dirichlet issues d'un calcul lagrangien améliore ainsi assez sensiblement la prédiction des contraintes cinétiques dans le domaine eulérien. Les fermetures eulériennes supplémentaires semblent donc justifiées dans le cas A2 à l'exception des zones de proche paroi.

Il est ici nécessaire d'expliquer pourquoi le saut de vitesse moyenne n'influence pas la prédiction des contraintes cinétiques. Le gradient de vitesse moyenne est en effet en partie responsable de la production des contraintes $R_{pp,uu}$ et $R_{pp,uv}$, et en ce sens un des régulateurs du système d'équations eulériennes. C'est par exemple la surestimation du gradient de vitesse moyenne qui est à l'origine de la surestimation par l'approche eulérienne des contraintes particulières dans les zones de proche paroi. Le saut observé à la traversée de l'interface de couplage pourrait donc être à l'origine d'une surproduction locale.

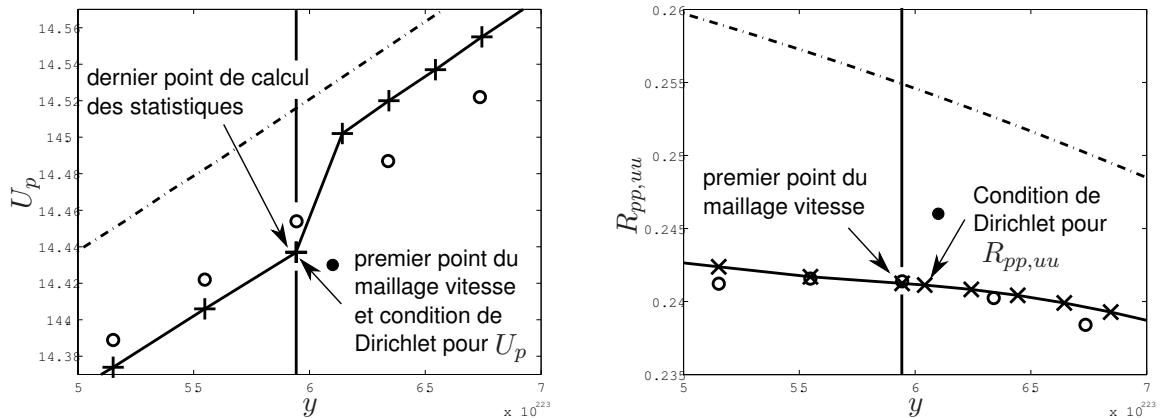


FIG. 6.12 – Configuration des premiers points des maillages vitesse et pression lors d'une simulation HELM.

Le saut de vitesse observé dans nos simulations n'est pas un saut de vitesse entre les domaines lagrangien et eulérien mais un saut qui s'effectue entre les deux premiers points du maillage eulérien dit "vitesse". La condition de Dirichlet imposée au premier point du maillage vitesse à la vitesse est bien issue du profil de vitesse moyenne obtenu dans la simulation lagrangienne et interpolée à la position de ce premier point du maillage. Ce n'est donc pas un point de calcul de l'approche eulérienne. De manière identique le premier point du maillage pression n'est pas un point de calcul pour l'approche eulérienne car y sont imposées des conditions de Dirichlet. Le premier point de calcul des contraintes cinétiques (faisant donc intervenir le gradient de vitesse moyenne pour le calcul de la production) est donc le deuxième point du maillage pression. Ce point étant situé entre les points 2 et 3 du maillage vitesse, le saut de vitesse moyenne entre les points 1 et 2 n'influence pas les simulations eulériennes (cf. figure 6.12). La configuration avec maillages décalés dans le domaine eulérien permet ainsi d'avoir une demi-maille de décalage qui permet d'absorber des conditions aux limites de type Dirichlet qui ne seraient pas exactement consistantes avec les prédictions dans le domaine eulérien, notamment en ce qui concerne la vitesse moyenne longitudinale.

6.4.2 Bilans de vitesse moyenne longitudinale

Le saut de vitesse moyenne longitudinale à la traversée de l'interface de couplage est très proche de la différence de prédictions entre les approches lagrangienne et eulérienne à l'emplacement de l'interface. Le profil de vitesse moyenne suit en effet les prédictions de chaque approche comme le montre bien par exemple la figure 6.15.

Pour comprendre les raisons de ce saut, la figure 6.13 trace l'évolution dans la direction normale pour les cas B2 et B3 des bilans de vitesse moyenne des particules pour des simulations HELM et HELM-EKC avec $\eta = 0, 3$.

Dans le domaine lagrangien les termes de dispersion et de gravité sont calculés à partir des moments dans le domaine lagrangien tandis que les termes de traînée sont mesurés directement. Dans la zone eulérienne

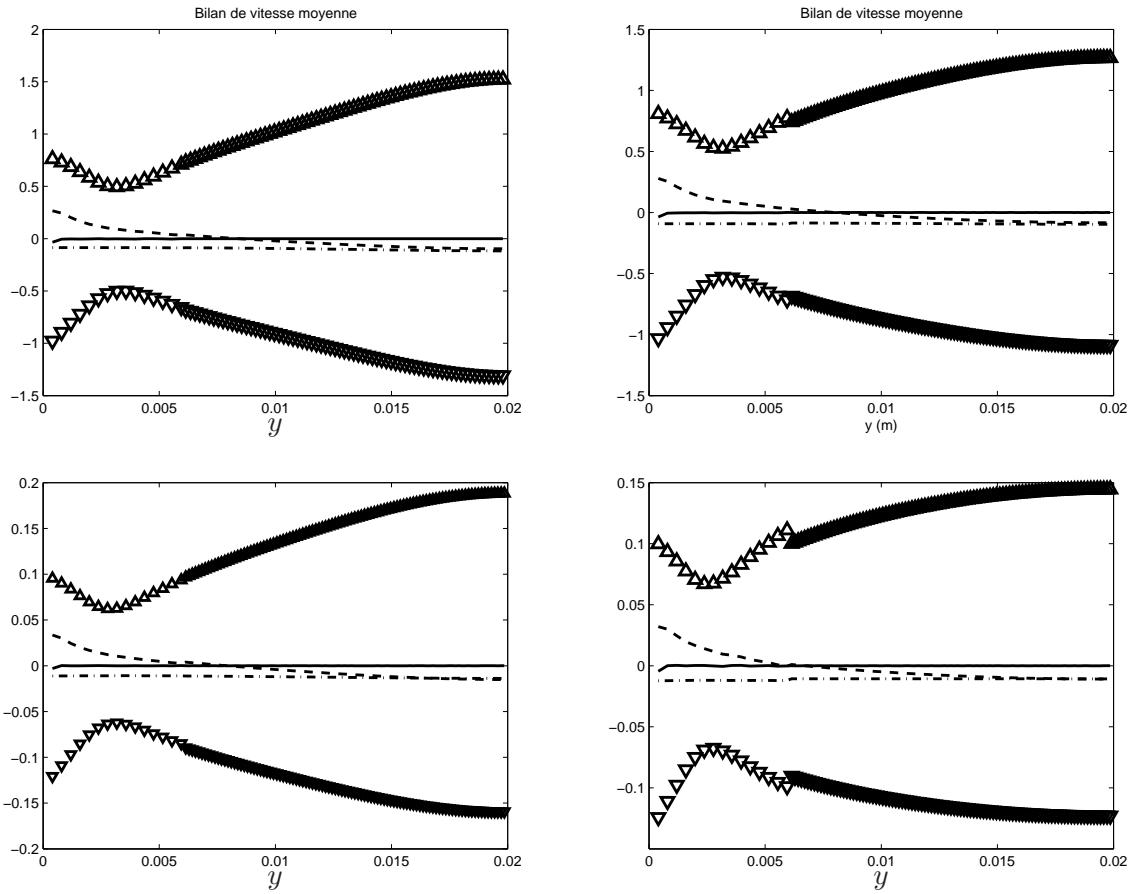


FIG. 6.13 – Bilan de la vitesse moyenne particulaire issus de simulations HELM-EKC (gauche) et HELM (droite) avec $\eta = 0,3$ dans les cas A2 (haut) et dans le cas B3 (bas). Δ : $\alpha_p < u_f / \tau_p >_p$; ∇ : $-\alpha_p < u_p / \tau_p >_p$; \cdots : $\partial / \partial y (\alpha_p R_{pp,uv})$; $\cdots \cdots$: $\alpha_p g$; —: bilan de la composante

les termes de dispersion et gravité sont connus et les termes de traînée sont modélisés par :

$$\left\langle \frac{u_f}{\tau_p} \right\rangle_p = \frac{U_f}{\tau_{fp}^F} \quad (6.27a)$$

$$\left\langle \frac{u_p}{\tau_p} \right\rangle_p = \frac{U_p}{\tau_{fp}^F} \quad (6.27b)$$

La figure 6.13 montre que tous les termes du bilan de vitesse moyenne U_p ne sont pas obligatoirement continus à la traversée de l'interface de couplage. Dans le cas A2 l'utilisation de la méthode HELM-EKC assure ainsi non seulement la continuité du terme de traînée $\left\langle F_{d,u} / m_p \right\rangle_p$, mais aussi des termes $\left\langle u_p / \tau_p \right\rangle_p$ et $\left\langle u_f / \tau_p \right\rangle_p$. Seul le terme de traînée global est bien traité par la méthode HELM dans le cas A2, les deux composantes associées à la vitesse du fluide et des particules présentant des discontinuités. Cette propriété n'est même plus vérifiée dans les cas plus dilués (B3). La composante de la vitesse fluide présente ainsi une légère discontinuité pour le cas B3 et HELM-EKC qui est compensée par une discontinuité (non visible sur la figure) du terme de dispersion. Le terme de traînée global n'est alors plus continu à la traversée de la surface de couplage. Cet effet est de plus accentué par l'utilisation de la méthode HELM dans le cas B3.

Le profil de vitesse moyenne du fluide étant imposé et identique pour toutes les approches, nous nous sommes intéressé à la validité de la relation $\left\langle \tau_p \right\rangle_p = \tau_{fp}^F$ qui peut se déduire du traitement du terme de

traînée tel qu'il est effectué ici. Le temps caractéristique de traînée est donné par :

$$\tau_{fp}^F = \tau_p(\bar{v}_r) \quad (6.28a)$$

$$\bar{v}_r^2 = \langle |\underline{u}_p - \underline{u}_{f@p}|^2 \rangle_p \quad (6.28b)$$

La figure 6.14 présente donc l'évolution dans la direction normale de l'inverse du temps caractéristique de traînée mesuré lors de simulations HELM ou HELM-EKC comparée à la prédiction donnée par l'équation (6.28).

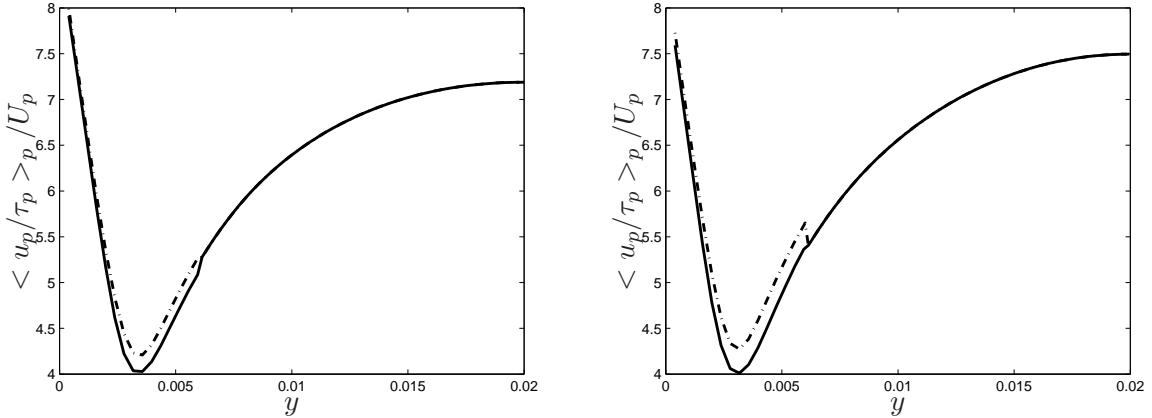


FIG. 6.14 – Inverse du temps caractéristique de traînée associé à la vitesse moyenne longitudinale dans les cas A2 (gauche) et B3 (droite). — : mesuré dans HELM (gauche) ou HELM-EKC (droite) ; - - - - : prédiction (6.28) à partir des moments issus de la méthode hybride.

La prédiction dans le domaine eulérien est identique au temps mesuré car dans le domaine eulérien la mesure durant une simulation HELM ou HELM-EKC est la prédiction par (6.28). On observe donc sur la figure 6.14 que la prédiction du temps caractéristique de traînée associé à la vitesse moyenne longitudinale des particules n'est pas toujours régulière à la traversée de l'interface. Il est ici nécessaire de rappeler que nous avons écarté la correction de traînée pour cette composante au vu des tests *a priori* de la figure 6.4. La figure 6.14 montre que la modélisation du terme de traînée de la vitesse moyenne longitudinale n'est tout de même pas consistante entre les deux approches dans les zones où la vitesse relative moyenne devient faible. Les écarts constatés dans les figures 6.4 et 6.14 sont en effet localisés dans la zone $2 \cdot 10^{-2} m < y < 8 \cdot 10^{-2} m$, zone pour laquelle l'écart entre les vitesses moyennes est assez faible, et par conséquence la vitesse relative moyenne. Le traitement de ce terme de traînée doit donc être amélioré en eulérien, principalement dans la zone où la vitesse relative moyenne devient faible.

6.4.3 Cas B3

La figure 6.15 présente les résultats issus de la méthode HELM-EKC appliquée au cas B3. Le cas B3 considère le frottement des particules sur les parois lors des rebonds ainsi qu'une densité globale inférieure. Il est visible sur la figure 6.7 que ces conditions sont plus sévères au niveau des fermetures eulériennes et que dans ce cas les approches lagrangienne stochastique et eulérienne ne fournissent alors plus des résultats proches.

Les commentaires précédents concernant la densité de particules dans le cas A2 sont identiques ici. La figure 6.15 montre que la méthode hybride introduit une légère amélioration de la prédiction du profil de

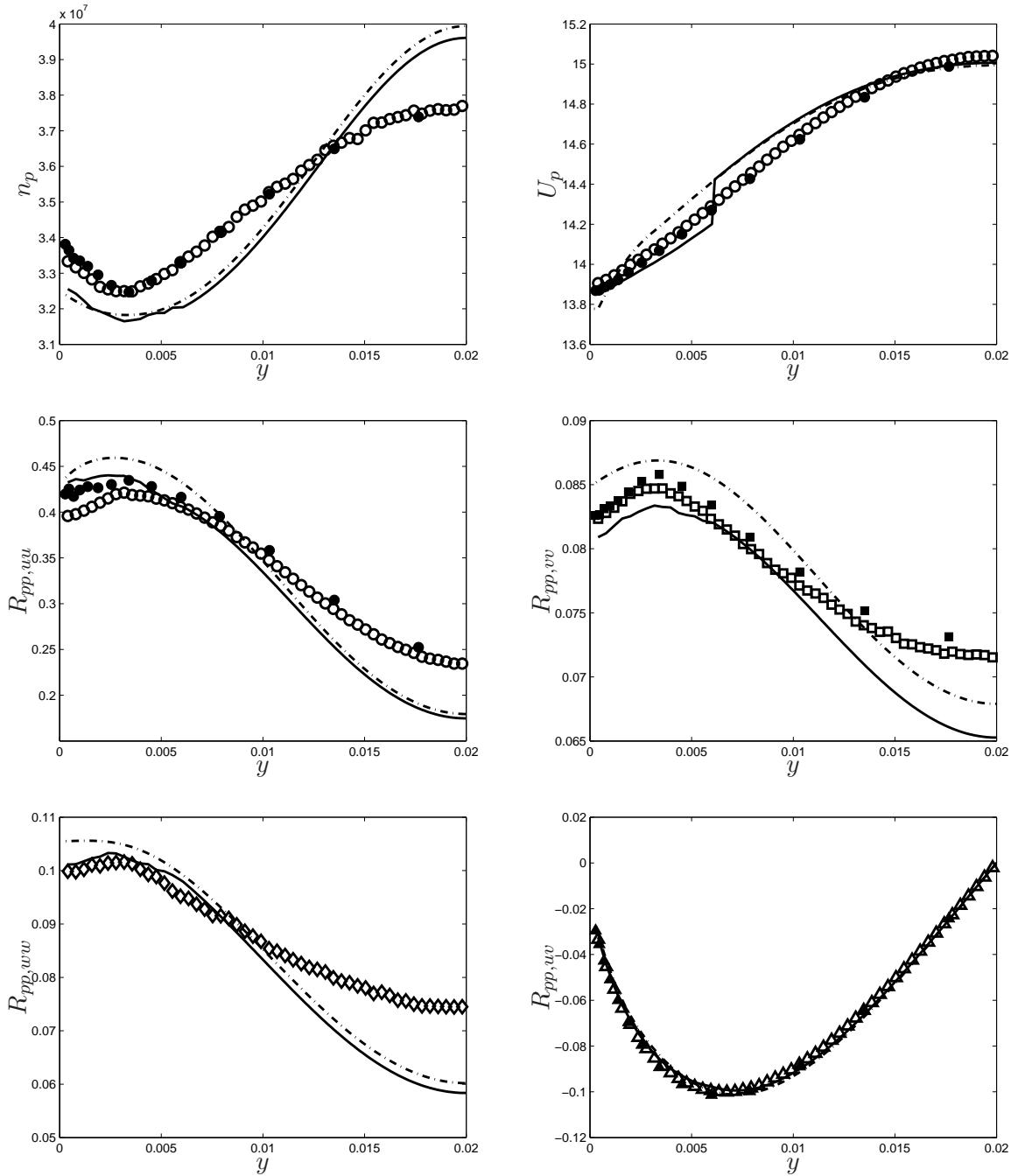


FIG. 6.15 – Résultats de HELM-EKC avec un rapport de volume $\eta = 0,3$ dans le cas B3. \circ : lagrangien stochastique ; $-\cdots-$: eulérien (6.19) avec correction par effet de Knudsen (6.18) ; — : HELM-EKC ; \bullet : DPS (Sakiz [1999]).

densité, amélioration néanmoins très limitée. Les résultats concernant la densité de particules semblent de nouveau être dictés par la prédition de l'approche eulérienne.

Le saut du profil de vitesse moyenne est beaucoup plus visible dans la figure 6.15 qu'auparavant du fait de l'écart assez important dans la prédition de la vitesse moyenne entre les deux approches à l'emplacement de la face de couplage. La prédition est de plus légèrement dégradée dans le domaine lagrangien avec une sous-estimation de la vitesse moyenne. Le gradient de vitesse moyenne par contre reste bien prédit,

contrairement aux prédictions du modèle eulérien qui le prédit deux fois trop grand.

En conséquence la prédition de la contrainte cinétique longitudinale $R_{pp,uu}$ est une fois de plus mieux prédicté par la méthode HELM-EKC que par le modèle eulérien. Les contraintes transversale et de cisaillement suivent aussi cette tendance avec une amélioration (même légère) de leur prédition par la méthode HELM-EKC.

Le cas de la contrainte cinétique $R_{pp,vv}$ est un cas particulier. La prédition de cette composante est améliorée par la méthode HELM-EKC dans la zone lagrangienne par rapport à l'approche eulérienne. Néanmoins l'imposition de la condition à la limite de Dirichlet, même si elle semble parfaitement "coller" à la valeur issue d'une simulation lagrangienne stochastique (et donc représente théoriquement la meilleure condition possible pour le calcul eulérien) ne permet pas dans ce cas une meilleure prédition dans le domaine eulérien. La cause exacte de ce mécanisme n'a pas été mise en lumière, mais doit être probablement recherchée à partir de la mauvaise prédition de la corrélation $S_{ppp,vvv}$ montrée par la figure 6.6.

6.4.4 Discussion

Après cette étude rapide, des premiers éléments de réponse aux enjeux posés par la validation de la méthode HELM-EKC peuvent être avancés :

1. l'application de la méthode HELM-EKC dans le cas de l'écoulement de canal plan *a minima* ne détériore pas les prédictions dans l'ensemble du domaine global par rapport aux prédictions effectuées à partir d'une approche eulérienne. La majorité des moments sont ainsi mieux prédis, que ce soit dans le domaine lagrangien ou le domaine eulérien,
2. l'application de la méthode HELM-EKC perturbe les prédictions lagrangiennes dans le domaine lagrangien. L'effet le plus visible se situe dans le profil de densité de particules qui a tendance à suivre le profil eulérien jusque dans le domaine lagrangien. Cette perturbation reste cependant "encadrée" par les prédictions de l'approche eulérienne et restent donc une amélioration par rapport à l'approche eulérienne seule,
3. la méthode hybride semble présenter deux principaux défauts :
 - le saut de vitesse moyenne à la traversée de l'interface de couplage. Si le saut reste peu important dans le cas A2 avec une erreur relative de moins de 0,5%, cette erreur est proche de 1,5% dans le cas B3. Le profil de vitesse moyenne prédict par la méthode HELM-EKC est de plus très proche dans chaque domaine des prédictions de l'approche utilisée. Il est alors nécessaire de recourir à l'utilisation de maillages décalés dans le domaine eulérien pour que le saut de vitesse moyenne ne vienne pas "polluer" la prédition des contraintes particulières.
 - le profil de densité de particules suit de manière plus ou moins proche le profil prédict par l'approche eulérienne. Ce défaut provient probablement de l'incapacité du modèle eulérien de prédir un bon profil dans le domaine eulérien. Le nombre de particules dans le canal étant constant, une sous-estimation dans le domaine eulérien entraîne un surplus de particules dans le domaine lagrangien. Les profils de densité issus de simulations HELM présentent donc des gradients proches de ceux observés par la DPS ou le lagrangien stochastique, mais des valeurs supérieures.

6.5 Résultats HELM sans correction par effet de Knudsen

Après avoir utilisé pour le couplage l'approche eulérienne avec la correction adéquate des fermetures eulériennes supplémentaires, la méthodologie de couplage est appliquée avec une approche eulérienne "standard". On entend par approche eulérienne standard une approche sans correction par effet de Knudsen, mais

en préservant les corrections apportées aux termes de traînée. Ceux-ci se trouvent en effet (excepté pour la vitesse moyenne longitudinale) justifiés par l'importante vitesse relative entre les deux phases. Les fermetures eulériennes utilisées maintenant lors du couplage sont théoriquement justifiées, contrairement à la correction par effet de Knudsen qui a été introduite de manière empirique. La méthode hybride est tout de même confrontée à un problème plus raide que précédemment car les deux approches couplées ne sont plus consistantes et prédisent des résultats assez éloignés (figure 6.7).

6.5.1 Cas A2

La figure 6.16 présente les résultats issus de la méthode HELM dans le cas A2 et $\eta = 0,3$.

Le profil de densité de particules est toujours très influencé par la prédiction issue du modèle eulérien. L'utilisation dans le domaine eulérien d'un modèle de corrélations triples présentant une plus grande dispersion (la diffusivité du mouvement d'agitation augmentant) résulte dans une forme du profil trop plate en comparaison des résultats DPS ou lagrangien stochastique. Le gradient de densité reste tout de même assez correctement prédit dans le domaine lagrangien en comparaison des résultats du lagrangien stochastique. Considéré dans son ensemble, la prédiction du profil de densité est un échec pour la méthode hybride car elle se révèle moins bonne que la prédiction eulérienne. Il est à noter que dans ce cas le processus de renormalisation n'est pas anodin car environ 4% du nombre de particules présentes dans le canal est perdu à chaque itération de couplage. La condition à la limite de Dirichlet imposée par le calcul lagrangien concernant la densité ne permet pas d'obtenir une bonne prédiction du profil de densité car la dispersion de particules n'est pas suffisamment bien modélisé. Ce problème concernant la méthode hybride semble donc plus provenir de la précision de l'approche continue utilisée que de la méthodologie de couplage. Il est tout de même regrettable que ce défaut ne puisse être corrigé par l'utilisation de la méthode hybride.

Le profil de vitesse moyenne prédit par la méthode HELM, par contre, est en très bon accord avec les résultats de la DPS et du lagrangien stochastique. Le saut de vitesse moyenne à la traversée de l'interface est réduit ce qui dénote un bon traitement du terme de traînée dans ce cas précis. La prédiction dans la zone de proche paroi est très bonne, notamment concernant le gradient qui est très mal prédit dans ce cas par l'approche eulérienne.

Le bon comportement du profil de vitesse explique en partie les prédictions améliorées de la méthode HELM par rapport à l'approche eulérienne concernant les contraintes cinétiques particulières. La figure 6.16 montre une amélioration notable de la prédiction du tenseur des contraintes particulières. En ce qui concerne les moments d'ordre 2, l'approche lagrangienne stochastique semble être plus influente que pour les moments d'ordres inférieurs sur les résultats dans le domaine eulérien. Les conditions de Dirichlet imposées en frontière du domaine eulérien semblent améliorer les prédictions issues de l'approche eulérienne dans l'ensemble du domaine eulérien. L'imposition de conditions provenant du calcul lagrangien semble avoir surtout jouer le rôle de "bonnes" conditions aux limites. Lors d'un calcul eulérien complet le gradient de vitesse moyenne trop important en paroi résulte en une surestimation des contraintes dans la zone de proche paroi. Ce défaut ayant été ici gommé par l'utilisation de la méthode hybride, le modèle eulérien se comporte de manière assez similaire au cas où tout le canal est simulé, mais avec des conditions aux limites plus réalistes à la frontière du domaine de calcul eulérien. Les profils des contraintes particulières qui en résulte sont légèrement plus plats que ceux prédits par l'approche eulérienne car, les valeurs des contraintes étant plus faible que dans l'approche eulérienne, la diffusivité du mouvement d'agitation (donnée par (6.19h)) est plus faible que celle prédite par l'approche eulérienne. Les profils résultants sont donc légèrement plus plats prédits par HELM que prédits par l'approche eulérienne.

En évitant d'utiliser l'approche eulérienne dans les zones où sa consistance n'est pas assurée, la méthode

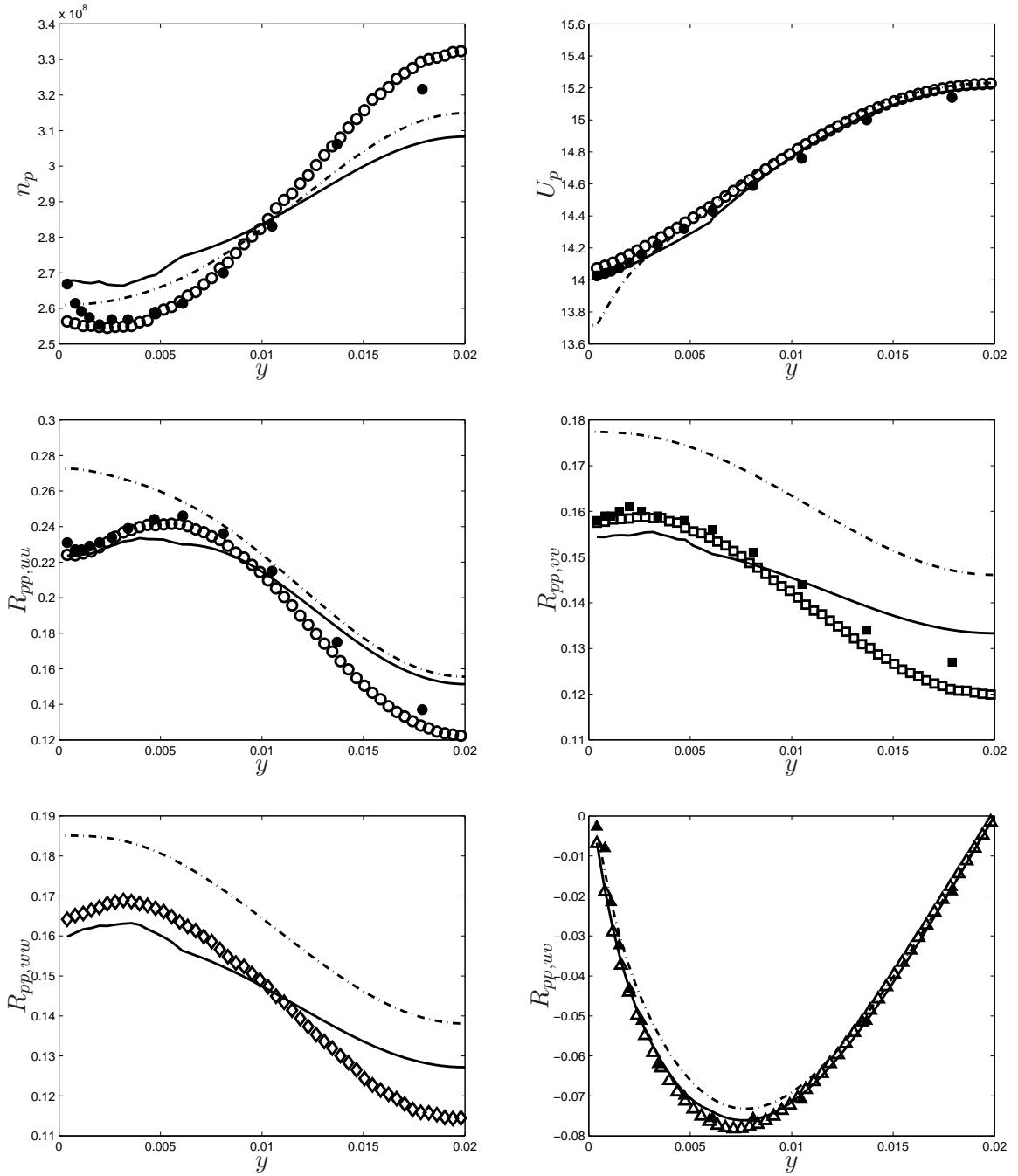


FIG. 6.16 – Résultats de HELM avec un rapport de volume $\eta = 0,3$ dans le cas A2. \circ : lagrangien stochastique ; $\cdots \cdots$: eulérien (6.19) ; — : HELM ; \bullet : DPS (Sakiz [1999]).

hybride assure alors une meilleure prédition dans le domaine global de la vitesse moyenne et des corrélations cinétiques. La prédition du moment d'ordre 0 (la densité de particules) par la méthode hybride est par contre moins bonne que la prédition eulérienne. Il est néanmoins nécessaire pour confirmer cette tendance d'effectuer des validations supplémentaires dans des cas où l'écoulement particulaire est plus proche d'un état d'équilibre, notamment en ce qui concerne la dimension de l'écoulement par rapport au libre parcours moyen des particules. La figure 6.7 montre par exemple combien la modélisation des corrélations triples influence le profil de densité (par exemple sur la surestimation de la densité au centre du canal).

6.5.2 Cas B3

La figure 6.17 présente les résultats de la méthode HELM dans le cas encore plus "déséquilibré" B3. Le frottement en paroi ainsi que la densité plus faible entraîne un déséquilibre plus fort dans la pdf comme on peut le voir dans la figure 6.8. Les résultats issus de l'approche eulérienne sans correction par effet de Knudsen sont alors très éloignés des mesures de la DPS ou du lagrangien stochastique.

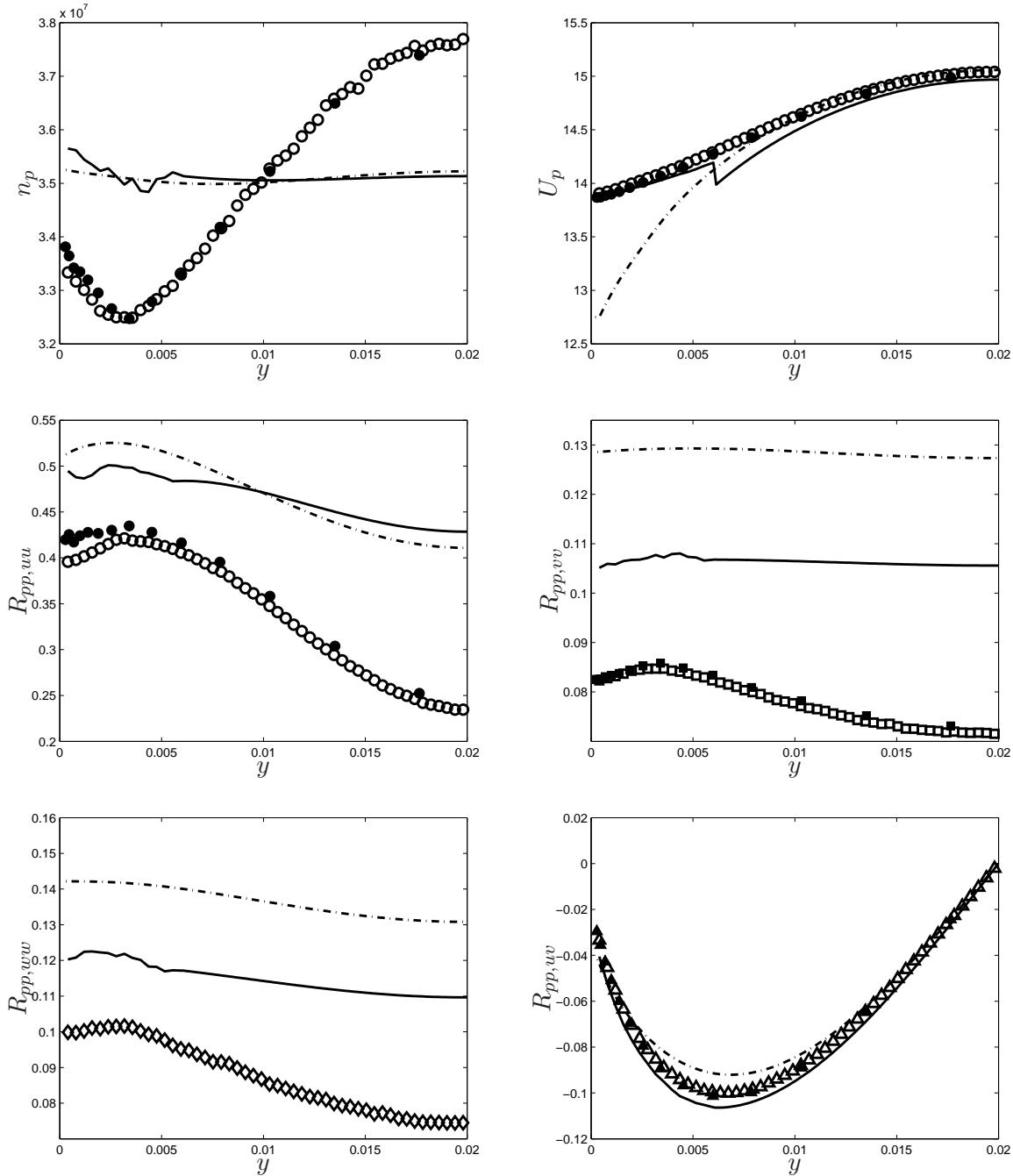


FIG. 6.17 – Résultats de HELM avec un rapport de volume $\eta = 0,3$ dans le cas B3. \circ : lagrangien stochastique ; $-\cdots-$: eulérien (6.19) ; — : HELM ; \bullet : DPS (Sakiz [1999]).

Malgré le comportement assez éloigné des prédictions issues de l'approche lagrangienne stochastique, les améliorations apportées par l'utilisation de la méthode hybride dans le cas B3 sont notables. L'amélioration

de la prédiction de la vitesse moyenne à la paroi est spectaculaire car elle a réduit pratiquement totalement l'erreur commise par l'approche eulérienne. La prédiction par HELM de la contrainte longitudinale ne présente pas contre pas d'amélioration particulière lorsque l'on considère l'ensemble du canal. La prédiction dans le domaine lagrangien est légèrement meilleure, mais une dispersion plus faible que celle prédictive par l'approche eulérienne résulte en une prédiction dégradée au centre du canal. Cet effet ne se retrouve pas pour les contraintes normales et transversales qui voient l'erreur dans leurs prédiction divisée par 2 par l'utilisation de la méthode hybride. Enfin la prédiction de la contrainte de cisaillement est améliorée sur une grande partie du canal mais la valeur obtenue en paroi n'est que peu différente de la valeur observée dans une simulation eulérienne. Cette particularité permet d'expliquer le mauvais comportement de la prédiction de la contrainte $R_{pp,uu}$ par une surestimation de la production dans la zone de proche paroi.

Le défaut observé jusqu'à présent concernant la prédiction du profil de densité persiste toujours dans le cas B3. Ce comportement apparaît comme normal car les modèles eulériens sont dans ce cas extrêmement sensibles au modèle de corrélations triples choisi. La méthode hybride préserve le caractère "plat" du profil dans le domaine eulérien, et présente des gradients de densité dans le domaine lagrangien pas très éloignés de ceux observés en lagrangien stochastique. Les valeurs obtenues pour ce profil sont tout de même toujours très éloignées des résultats DPS ou du lagrangien stochastique et représente donc une fois de plus le principal effet non corrigé par la méthode hybride.

6.6 Influence du rapport de volume

Dans l'optique d'obtenir la méthode hybride la plus efficace possible il est nécessaire de réduire au maximum l'extension du domaine lagrangien. La majorité du temps de calcul dans nos simulations hybrides est en effet consacré à la résolution stochastique lagrangienne dans le domaine lagrangien. Les ordres de grandeur sont de l'ordre de 95% du temps pour un rapport de volume $\eta = 0,1$, et 98% pour $\eta = 0,3$. Le temps de calcul de la simulation lagrangienne est en effet négligeable. Le coût du couplage se situe donc dans la procédure d'injection des particules numériques ainsi que dans le calcul des statistiques sur les flux sortants du domaine lagrangien et ne représente qu'une petite partie du calcul lagrangien complet. Réduire l'extension spatiale du domaine lagrangien, c'est donc réduire de pratiquement autant le coût numérique de la simulation.

Réduire l'extension spatiale du domaine lagrangien s'effectue lors d'une simulation hybride par une optimisation de l'extension spatiale du domaine eulérien. Cette extension étant limitée par le domaine de validité de l'approche eulérienne utilisée, une optimisation suppose un critère de validité sur lequel fonder la calcul de l'extension spatiale du domaine eulérien. L'étude théorique nécessaire à l'élaboration d'un tel critère reste à faire, et pose un problème complexe dans le cadre général des écoulements turbulents gas-solides. Si l'obtention d'un tel critère est possible, la mise en place d'un algorithme de décomposition automatique de domaine (Tiwari [1998]) sera alors un grand pas en avant vers une implémentation efficace de la méthode hybride dans des codes de calculs industriels.

Nous prenons ici le parti d'effectuer une étude préliminaire de sensibilité en faisant varier le paramètre η dans nos simulations. La figure 6.18 compare ainsi les résultats issus de la méthode HELM-EKC pour les paramètres $\eta = 0,3$ et $\eta = 0,1$ dans le cas de simulation le plus "raide", càd le cas B3.

Seuls les résultats concernant la densité de particules ne semblent pas influencés par la valeur du rapport de volume. Les résultats concernant la vitesse moyenne longitudinale sont ainsi sensiblement différents car le saut de vitesse dans le cas $\eta = 0,1$ est plus faible que dans le cas $\eta = 0,3$ (le saut pour $\eta = 0,1$ n'est pas visible sur la figure mais est tout de même existant), et la prédiction dans le domaine lagrangien est en meilleur accord pour $\eta = 0,1$ par rapport à $\eta = 0,3$.

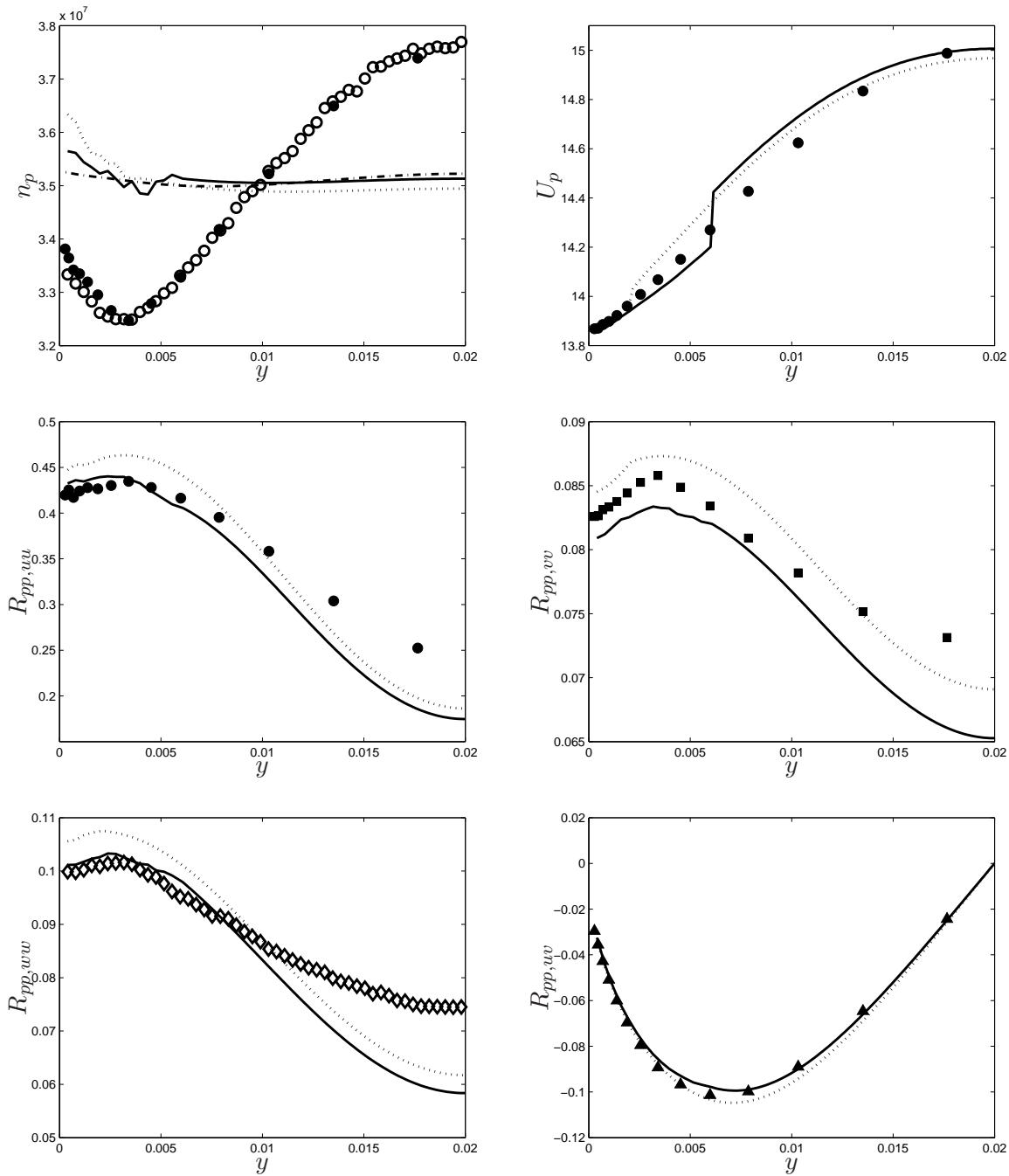


FIG. 6.18 – Influence du rapport de volume η dans le cas B3. \circ : lagrangien stochastique ; $-\cdots-$: eulérien (6.19) avec correction par effet de Knudsen (6.18) ; — : HELM-EKC avec $\eta = 0, 3$; ····· : HELM-EKC avec $\eta = 0, 1$; • : DPS (Sakiz [1999]).

Cette amélioration est néanmoins la seule car la prédition des contraintes particulières se trouve largement dégradée dans le cas $\eta = 0, 1$. Les résultats de l'approche couplée sont dans ce cas précis moins bons que les résultats eulériens dans tout le canal en ce qui concerne les corrélations particulières. Une explication possible de ce phénomène réside dans la mauvaise prédition de la corrélation $S_{ppp,uvw}$ dans la zone de proche paroi qui amène à une prédition détériorée de la contrainte $R_{pp,uv}$ dans la demi-largeur du canal. Les termes de production sont présentent ainsi une légère différence avec le cas $\eta = 0, 3$, d'où les résultats observés dans la figure 6.18.

La figure 6.18 montre ainsi l'importance de placer l'interface de couplage dans une zone de l'écoulement où les hypothèses de fermeture eulériennes ne sont pas trop mises en défaut. Cette remarque est corroborée par l'échec de la procédure de couplage dans le cas $\eta = 0, 1$ lors d'une simulation HELM (sans correction par effet de Knudsen des corrélations triples).

La figure 6.19 présente les résultats de la méthode HELM pour les cas $\eta = 0, 3$ et $\eta = 0, 2$ (puisque le couplage échoue pour $\eta = 0, 1$).

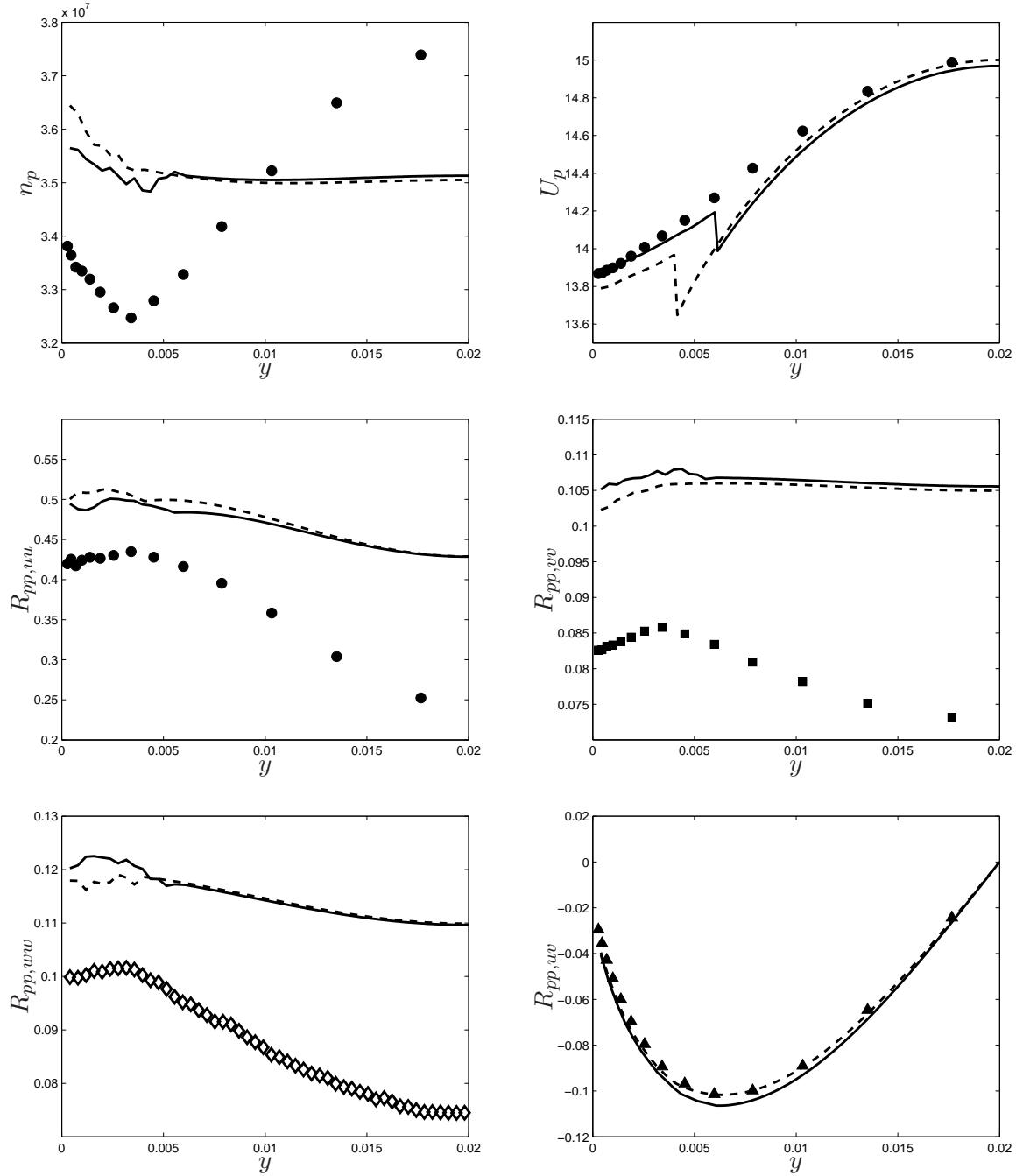


FIG. 6.19 – Influence du rapport de volume η dans le cas B3. \circ : lagrangien stochastique ; $-\cdots-$: eulérien (6.19) ; — : HELM avec $\eta = 0, 3$; ····· : HELM avec $\eta = 0, 2$; ● : DPS (Sakiz [1999]).

Cette fois les résultats obtenus par la méthode hybride sont identiques pour les cas $\eta = 0, 2$ et $\eta = 0, 3$,

hormis pour la vitesse moyenne. Cette propriété laisse supposer que la frontière de couplage dans le cas $\eta = 0,2$ se situe encore dans le domaine de validité de l'approche eulérienne. Cette propriété a de plus déjà été observée par Bourgat et al. [1994] lors de couplages Boltzmann/Navier-Stokes avec une méthodologie de couplage sensiblement différente de la méthodologie développée ici. Ceux-ci observe en effet dans leurs simulations que l'algorithme de couplage semble converger indépendamment des conditions aux limites imposées sur le corps de rentrée (l'équivalent de la paroi), de la discrétisation du domaine particulaire ainsi que de la position de la frontière entre les deux domaines. Cette dernière propriété semble donc s'étendre à la méthodologie de couplage développée, avec la condition nécessaire additionnelle stipulant que cette frontière doit être placée en accord avec la validité de l'approche eulérienne.

Cette propriété rend encore plus importante la recherche d'un critère permettant une optimisation de la localisation de l'interface de couplage. Les résultats de l'approche n'étant *a priori* dépendant de cette localisation si l'approche eulérienne est valide en cet endroit, le coût numérique global d'une simulation hybride peut ainsi être minimisée.

Conclusion et perspectives

La problématique de cette thèse financée par la DGA et le CNRS résidait dans le développement d'une méthodologie de couplage entre une approche particulaire et une approche continue pour la simulation de la phase particulaire dans les écoulements turbulents gaz-particules. Ce travail a été effectué au sein de deux laboratoires toulousains : d'une part le Département Modèles pour l'Aérodynamique et l'Energétique du centre ONERA de Toulouse, et le groupe Ecoulements Et Combustion de l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT). L'objectif fixé était une démonstration de faisabilité d'une telle méthode hybride pour un niveau assez en amont des travaux de recherches et développements effectués actuellement sur les écoulements gaz-particules. Aucune contrainte n'était fixée concernant l'implémentation de la méthode hybride dans un code pré-existant ce qui a permis d'adapter tout ou parties des codes de calcul MELO-DIF et STOCOLM (issus du groupe Ecoulements Et Combustion de l'IMFT et EDF) et de maîtriser ainsi exactement les méthodes de résolutions dans chacun des sous-domaines.

Le travail a débuté par une étude bibliographique des deux approches ainsi que des méthodologies de couplage développées dans des problématiques similaires aux écoulements turbulents gaz-particules. Les études qui ont le plus retenu notre attention concernent le développement d'un couplage entre une équation cinétique (équation de Boltzmann) et une approche continue (équations d'Euler ou de Navier-Stokes) pour la résolution des écoulements de rentrée atmosphérique (Le Tallec and Mallinger [1997]). La méthodologie développée est rendue possible par la dérivation du système d'équations continues à partir de l'équation cinétique. Cette approche, intellectuellement attrayante, est de plus une approche qui a été extensivement utilisée au sein du groupe EEC pour la modélisation de la phase particulaire dans les écoulements gaz-solides. Le choix des approches à coupler s'est donc porté sur deux approches issues d'une description en terme de probabilités de la phase particulaire.

Les écoulements considérés présentant à priori une influence importante de la turbulence sur la phase dispersée, la description du nuage de particules est effectuée à l'aide d'une fonction densité de probabilité (pdf) jointe fluide-particule en un point. La fermeture de l'équation d'évolution de la pdf nécessite la spécification de modèles concernant l'accélération des particules, de l'accélération du fluide vu et la modélisation de la pdf jointe en deux points qui sont développés au chapitre 2 pour permettre la prise en compte des phénomènes physiques exposés au chapitre 1. La résolution approchée de cette équation par une méthode particulaire est ensuite présentée (au chapitre 2) avec les considérations numériques qui lui sont associées. La dérivation des équations eulériennes gouvernant le comportement des premiers moments du système est alors présentée au chapitre 3. Cette dérivation fait apparaître de nombreux termes nécessitant des hypothèses de modélisation supplémentaires. Ces hypothèses, basées sur des concepts d'équilibres, ne sont pas valides pour tous les régimes d'écoulements et sont donc à l'origine d'erreurs dans les prédictions issues à partir d'une approche eulérienne. Les zones de l'écoulement où ces fermetures ne sont pas valides sont tout de même limitées spatialement aux zones où des phénomènes physiques complexes (et non pris en compte par les fermetures additionnelles) apparaissent. C'est notamment le cas dans les zones proches des parois dans un écoulement de canal (cf chapitre 6).

La majeure partie du travail lors du développement de la méthode hybride a consisté à établir une méthodologie de couplage permettant un échange fructueux d'informations entre les deux approches. Cet échange doit être effectué par l'imposition de conditions aux limites bien posées à chaque frontière des deux sous-domaines permettant à chaque approche de venir influencer les résultats de l'autre approche. Le développement de cette approche ne fut pas un processus linéaire et a connu de nombreux rebondissements. Les concepts développés dans la définition de la méthodologie de couplage exposées au chapitre 4, et qui sont ici développés chronologiquement, ont permis de mettre en place un couplage qui semble naturel dans son principe et dans son implémentation. Cette méthodologie peut de plus théoriquement s'appliquer indépendamment du modèle eulérien choisi. Les étapes du développement des principes de la méthode hybride eulérienne-lagrangienne ont été les suivantes :

- la première étape fut la conception de la condition à la limite concernant le domaine lagrangien. Il s'agit ici d'injecter des particules numériques dans le domaine en prenant compte des résultats issus du calcul eulérien. Le premier réflexe fut de choisir, comme dans le cas du couplage Boltzmann/Navier-Stokes, une pdf de référence permettant de représenter les résultats eulériens. D'abord développée dans un cas sans turbulence, la pdf de référence prit la forme gaussienne de la pdf de Richman. Le demi-flux injecté dans le domaine lagrangien est alors totalement déterminé par les valeurs des moments eulérien à la face de couplage. Le choix fut alors fait d'effectuer une injection à travers la surface de couplage (et non pas dans des cellules frontières), choix qui se retrouvera plus tard (par chance) être le plus pertinent. La simulation de la pdf de flux associée à la pdf de référence était alors effectuée une méthode de transformation d'un tirage aléatoire gaussien. Les propriétés de chaque particule numérique injectée sont ainsi déterminées par un tirage aléatoire. L'extension de cette méthode au cas des écoulements turbulents a premièrement posé le problème de la détermination de la pdf de référence. Cette extension est ici effectuée par une généralisation de la forme gaussienne de la pdf de Richman aux deux mouvements fluctuants (du fluide et des particules). Cette extension, novatrice à nos yeux, s'est révélée très performante car contenant l'information des moments du système jusqu'à l'ordre deux, et ce sous une forme accessible. Elle est de plus très précise dans le cas des écoulements homogènes. Mais cette forme a généré un nouveau défi car la méthode de transformation évoquée plus haut pour le tirage aléatoire des caractéristiques des particules numériques entrantes n'était alors plus efficace. Après quelques tâtonnements, une lecture heureuse a permis de mettre au point la procédure de réjection qui est utilisée dans tout le manuscrit
- la deuxième étape concernait la mise en place de conditions aux limites pour le calcul eulérien. Les premières conditions implémentées étaient des conditions de type flux directement inspirées du couplage par demi-flux de Le Tallec and Mallinger [1997]. Afin de réduire le bruit statistique lors du calcul de ces conditions, les expressions théoriques des demi-flux associés à la pdf de référence de Richman ont été obtenus. Les expressions obtenues apparaissent comme une double extension des résultats obtenus par Bourgat et al. [1994] aux cas des écoulements gaz-solides et pour des mouvements fluctuants anisotropes. Ces conditions se seront trouvées être trop faibles lors de l'application de la méthode hybride dans les cas d'écoulements inhomogènes, et ont alors été remplacées par des conditions de Dirichlet issues du calcul lagrangien.
- la dernière étape dans le développement de la méthodologie, et de loin la plus ardue, fut la généralisation de la méthodologie aux écoulements inhomogènes. Le premier problème rencontré résidait dans l'incapacité actuelle des modèles de Langevin classiques à simuler correctement l'effet de la turbulence sur la phase dispersée dans un écoulement fortement inhomogène. Ce résultat, non attendu, nous a forcé à considérer le développement de nouveaux modèles qui ont débouché sur quelques idées concernant les schémas de Langevin qui sont développées aux § 2.4.5 et 5.2. Malgré quelques progrès, le canal turbulent reste encore aujourd'hui hors de portée des modèles de Langevin classiques. La validation en écoulement inhomogène s'est alors reportée sur un cas déjà étudié dans le groupe EEC : le canal

des travaux de thèse de Sakiz [1999]. Il a alors fallu se rendre à l'évidence en constatant qu'aucune forme simple de pdf de référence permet d'intégrer l'information concernant les corrélations triples. Ces corrélations triples jouent pourtant un rôle important et leur omission (c'est-à-dire en conservant la méthodologie développée pour les écoulements homogènes) ne permet pas un couplage efficace des deux approches. La méthodologie développée pour les écoulements homogènes devait donc être remise en cause, principalement la détermination de la pdf d'injection des particules numériques. L'idée majeure lors de cette extension repose sur la décomposition du flux qui servait en homogène à calculer les conditions de type flux à imposer au domaine eulérien, mais qui ont été dans les situations inhomogènes repris pour le calcul des demi-flux incidents dans le domaine lagrangien. Les calculs des demi-flux théoriques associés à la pdf de Richman étendues n'ont donc pas été vains puisqu'il permettent de déterminer les moments de la pdf d'injection qui assurent que les demi-flux des moments jusqu'à l'ordre deux sont bien injectés dans le domaine lagrangien.

La validation des étapes successives du développement de la méthodologie de couplage est présentée dans les deux derniers chapitre. Le chapitre 5 propose une étude du comportement des deux approches couplées dans le cas des écoulements homogènes simplement cisailés. Deux schémas de Langevin classiques (SLM et LIPM) sont utilisés, et la correction de l'amplitude du bruit afin d'obtenir les corrélations cinétiques du fluide vu identiques aux contraintes de Reynolds du fluide est introduite. Une étude précise des demi-flux dans la direction normale de l'écoulement permet de valider la forme de la pdf de référence de type gaussienne ainsi que la procédure d'injection de particules numérique basée sur une méthode de réjection. Une étude du développement temporel et spatial associés au couplage des deux approches est alors effectuée d'où il ressort que les conditions aux limites sont bien posées et permettent un couplage effectif des deux approches. Les conditions de Dirichlet semblent rendre la simulation hybride plus sensible dans la zone eulérienne concernant la densité de particules, mais dans l'ensemble la méthode hybride a un comportement sain dans un cas académique où l'hybridation n'apporte pas d'améliorations mais où la consistance du couplage peut ainsi être prouvée.

Le dernier chapitre aborde le cas des écoulements inhomogènes par une application de la méthode hybride au cas du canal plan de Sakiz [1999]. Une étude préliminaire des deux approches permet d'introduire un certains nombre de corrections aux fermetures "standard" qui permettent une meilleure prédition de l'écoulement par l'approche eulérienne. Malgré ces fermetures corrigées, le modèle eulérien présente toujours certaines inconsistances avec l'approche lagrangienne stochastique, particulièrement dans les zones proches des parois. C'est donc un cas idéal de validation de la méthode hybride qui permet de voir les améliorations apportées par un traitement lagrangien des zones proches des parois. l'application de la méthode hybride à divers cas d'écoulements permet de tirer un certains nombres de conclusions préliminaires sur la méthodologie développée :

1. lorsque le domaine eulérien reste dans le domaine de validité de l'approche eulérienne, la méthode hybride permet une prédition améliorée par rapport aux prédictions eulériennes. Cette constatation est d'autant plus vraie que l'approche eulérienne utilisée est inconsistante avec l'approche lagrangienne, ce qui laisse présager des applications très intéressantes dans d'autres écoulements. Les résultats dans le domaine lagrangien sont quant à eux peu perturbés par rapport aux résultats lagrangiens si les prédictions des deux approches sont proches au niveau de la phase de couplage. Dans les cas d'approches eulériennes inconsistantes, les résultats issus de la méthode hybride dans la zone lagrangienne se situent entre les prédictions lagrangienne et eulérienne et constituent donc une amélioration par rapport à l'approche continue.
2. le traitement de la vitesse moyenne à la traversée de l'interface présente une discontinuité due à un mauvais traitement des termes de traînée qui lui sont associés, particulièrement lorsque la différence des vitesses moyennes devient faible. Cette difficulté devrait être surmontée par une meilleure modé-

- lisation de la traînée dans le canal, et ne représente pas un défaut intrinsèque de la méthode hybride.
3. la forme des profils densité est dictée par l'approche eulérienne. La conservation du nombre de particules dans le canal induit ainsi une prédiction par la méthode hybride sans réelle amélioration par rapport à l'approche eulérienne.

L'étude effectuée dans le chapitre 6 a permis de plus de soulever certaines problématiques qui n'ont pu qu'être abordées lors de cette thèse. La détermination d'un critère de validité de l'approche eulérienne (identique à Tiwari [1998]) apparaît ainsi comme une étape nécessaire avant toute utilisation systématique de la méthode hybride pour la simulation de la phase dispersée. Ce point devra dans un avenir proche faire l'objet d'études plus approfondies dans le cas du canal (qui représente un cas "simplifié" d'écoulements plus complexes) pour déterminer le critère pertinent.

Une autre voie d'amélioration des travaux présentés ici réside dans la construction d'un modèle de Langevin permettant une prédiction adéquate d'un cas d'écoulement turbulent inhomogène. Les cas de canal présentés dans Arcen [2006] et Vance et al. [2006] seraient des cas idéaux pour de telles recherches puisque les informations nécessaires à l'élaboration d'un tel modèle sont disponibles lors d'une simulation LES/DPS. Arcen [2006], lors de ses travaux, utilise déjà ce type de méthodologie avec des schémas de Langevin classiques. les idées développées dans cette thèse, notamment sur la détermination du tenseur de diffusion (c'est-à-dire la matrice d'amplitude du bruit stochastique) intervenant dans l'équation de Langevin de la vitesse du fluide, pourront peut-être permettre le développement d'un modèle de Langevin représentatif de l'effet de la turbulence sur la phase particulaire en écoulement inhomogène.

Enfin, dans une optique de développement (et non plus de recherche), il semble important d'adapter les outils développés lors de ces travaux au couplage d'approches différentes du lagrangien stochastique et de l'approche eulérienne d'ordre deux considérées ici. La plupart des codes industriels considèrent utilisent l'approche eulérienne pour la simulation de la phase particulaire, l'approche lagrangienne étant trop coûteuse. Les modèles eulériens utilisés ne sont cependant pas aussi évolués que le modèle considéré lors de ces travaux. Le couplage de l'approche lagrangienne stochastique avec un modèle eulérien au niveau de description inférieur (par exemple un modèle $q_{fp} - R_{pp,ij}$ ou un modèle $q_{fp} - q_p^2$) permettrait de quantifier les améliorations possibles lors de l'utilisation d'une méthode hybride dans un code industriel.

Enfin, cette idée novatrice a pu éclore au sein de la "communauté diphasique" toulousaine du fait de l'interaction croissante entre laboratoires, et plus particulièrement ici entre Olivier Simonin de l'IMFT et Philippe Villedieu du centre toulousain de l'ONERA. Leurs interactions et échanges de points de vue sont à l'origine de l'idée de méthode hybride eulérienne-lagrangienne, et leur complémentarité dans ce domaine ressemblerait à s'y méprendre à la complémentarité des approches couplées ici.

Annexe : Modèles de pdf

L'obtention des équations d'Euler ou de Navier-Stokes à partir de l'équation de Boltzmann en supposant une fermeture type BGK de l'opérateur de collision (cf. § 2.5.2.1) permet d'assumer que la pdf Maxwellienne est une pdf de référence pour les écoulements monophasiques. Cette dernière propriété est d'ailleurs à la base de méthodes de décomposition de domaines adaptatives pour les méthodes hybride Euler/Boltzmann ou Navier-Stokes/Boltzmann, et basé sur un critère d'écart à la maxwellienne.

Une telle pdf de référence ne peut être exhibée dans les écoulements gaz-particules du fait des nombreuses hypothèses (parfois très hétérogènes) faites pour fermer le système. Les termes de collision sont ainsi fermés par une hypothèse de type Grad sur la pdf tandis que les corrélations quadruples sont modélisées à l'aide d'une formule de Milan-Tchekov uniquement valable pour des pdf gaussiennes. Doit-on alors choisir la pdf de Grad ou la pdf gaussienne comme référence ? Cette hétérogénéité d'hypothèses rend difficile la détermination d'une telle pdf. Nous allons donc choisir notre pdf présumée sur des arguments de compatibilité avec les demi-flux incidents (4.18) plutôt que sur les hypothèses de fermeture eulériennes additionnelles.

Modèle Maxwellien de pdf

Les modèles Maxwellien de pdf proviennent directement des travaux de Maxwell en théorie cinétique des gaz et de leurs extensions aux milieux granulaire. Le modèle suppose l'isotropie du mouvement d'agitation des particules, ce qui implique dans la statistique Maxwellienne que la pdf f_p soit de la forme :

$$f_p^M(t; \underline{x}, \underline{c}_p) = \frac{n_p(t; \underline{x})}{(4/3\pi q_p^2(t; \underline{x}))^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\underline{c}_p - \underline{U}_p(t; \underline{x}))^2}{4/3q_p^2(t; \underline{x})}\right) \quad (6.29)$$

Il est assez courant pour des écoulements qui peuvent être considérés comme granulaires (*i.e.* pour des particules très grosses non affectées par le fluide) de définir par abus de langage la température granulaire T_p :

$$T_p(t; \underline{x}) = \frac{1}{3} \langle (\underline{c}_p - \underline{U}_p(t; \underline{x}))^2 \rangle_p = \frac{2}{3} q_p^2(t; \underline{x}) \quad (6.30)$$

Cette définition est un abus de langage car la température granulaire équivalente à la température cinétique (ou de translation) d'un gaz n'est pas directement T_p mais $m_p T_p$.

Le modèle Maxwellien est toujours très utilisé de nos jours pour sa simplicité et son très bon accord avec l'expérience dans les cas académiques simples. Dès lors que les écoulements deviennent du cas homogène isotrope, ce modèle apparaît tout de même limité par son isotropie forcée. Pour contrer ce problème existent deux principales familles de solutions. La première famille de solutions tentent d'introduire l'anisotropie en gardant la forme isotrope de la forme Maxwellienne précédente tout en travaillant sur les différentes composantes des vecteurs vitesses : ce sont les expansions de Grad. La deuxième famille de solutions tentent quant à elles de généraliser la forme en exponentielle de la Maxwellienne en incorporant l'anisotropie à l'intérieur de l'exponentielle à l'aide de tenseurs.

Développement de Grad du modèle Maxwellien

On sait depuis la théorie cinétique des gaz qu'il est possible de prendre en compte l'anisotropie (et n'importe quel moment de n'importe quel ordre) d'un écoulement en effectuant un développement polynomial approprié à partir de la Maxwellienne f_p^M . Cette théorie a été popularisée dans le cas monophasique par le développement en polynômes d'Hermite effectué par Grad [1949] :

$$f_p(t; \underline{x}, \underline{c}_p) = \left[a - a_i \frac{\partial}{\partial c_{p,i}} + \frac{a_{ij}}{2!} \frac{\partial^2}{\partial c_{p,i} \partial c_{p,j}} - \frac{a_{ijk}}{3!} \frac{\partial^3}{\partial c_{p,i} \partial c_{p,j} \partial c_{p,k}} + \dots \right] f_p^M(t; \underline{x}, \underline{c}_p) \quad (6.31)$$

Le développement le plus connu est celui du troisième ordre où les moments jusqu'à l'ordre trois sont explicitement reliés aux coefficients du polynôme. Du fait de la forme de la Maxwellienne, les dérivées s'expriment de plus directement en fonction de celle-ci (en remarquant que $\partial/\partial \underline{c}_p = \partial/\partial \underline{c}'_p$). On obtient alors pour forme de pdf :

$$f_p(t; \underline{x}, \underline{c}_p) = \left[1 + \frac{a_{ij}}{2T_p^2(t; \underline{x})} c''_{p,i} c''_{p,j} + \frac{a_{ijk}}{6T_p^3(t; \underline{x})} c''_{p,i} c''_{p,j} c''_{p,k} - \frac{a_{ikk}}{2T_p^2(t; \underline{x})} c''_{p,i} \right] f_p^M(t; \underline{x}, \underline{U}_p, \underline{c}'_p) \quad (6.32)$$

Après certains développements calculatoires (Grad [1949]) il est possible de relier les coefficients du polynôme aux moments de la pdf de Grad :

$$\begin{aligned} a_{ij} &= R_{pp,ij} - \frac{2}{3} q_p^2 \delta_{ij} \\ a_{ijk} &= S_{ppp,ijk} \end{aligned}$$

Pour obtenir une pdf présumée valable au troisième ordre il est donc nécessaire de connaître vingt-trois moments de cette pdf (n_p , la vitesse moyenne \underline{U}_p et les coefficients symétriques a_{ij} et a_{ijk}). Afin d'obtenir un développement plus contracté (intermédiaire entre les développements à l'ordre deux et trois), Grad [1949] fait remarquer que seuls les coefficients a_{ijj} sont importants pour la prise en compte du flux d'énergie. Grad [1949] obtient ainsi une description à treize moments qui permet d'exprimer la pdf présumée par :

$$f_p(t; \underline{x}, \underline{c}_p) = \left[1 + \frac{a_{ij}}{2T_p^2(t; \underline{x})} c''_{p,i} c''_{p,j} + \frac{a_{imm}}{10T_p^2(t; \underline{x})} \left(\frac{c''_p}{T_p(t; \underline{x})} - 5 \right) c''_{p,i} \right] f_p^M(t; \underline{x}, \underline{c}_p) \quad (6.33)$$

Les coefficients a_{ijk} avec $j \neq k$ sont alors reliés aux termes a_{ijj} par la relation :

$$a_{ijk} = \frac{1}{5} (a_{imm} \delta_{jk} + a_{jmm} \delta_{ik} + a_{kmm} \delta_{ij}) \quad (6.34)$$

Il est possible d'obtenir à l'aide de polynômes de degrés supérieurs des développements d'ordres supérieurs (Sakiz [1999]). Il est ainsi possible de construire un développement d'ordre quatre (et les contractions associées) prenant en compte trente-cinq moments (vingt-et-un pour les contractions). Outre le nombre de moments à considérer (mais ce problème est inévitable), le défaut majeur des développements de type Grad concerne leurs problèmes de réalisabilité. Il est ainsi possible qu'un jeu de moments pourtant physiques soit associés à une pdf du type (6.33) présentant des boucles négatives, c'est-à-dire des pour laquelle certaines parties de l'espace des phases sont à densité de particules négative. Il existerait alors certaines vitesses pour lesquelles le nombre de particules ayant ces vitesses est négatif, phénomène contraire à la physique.

Une limitation dans l'utilisation des développements de type Grad intervient lorsque la pdf doit effectivement être approximée. Les développements de Grad possèdent en effet une structure très adaptée au calcul

de moments (c'est pourquoi les termes de collision sont généralement calculés à partir de telles formes), mais il est très difficile d'aboutir au calcul effectif de la pdf. Les développements de Grad représentent donc avant tout un outil efficace d'approximation de la pdf lorsque celle-ci n'a pas besoin d'être explicitement connue (ou seulement par l'intermédiaire de ses premiers moments).

les problèmes de réalisabilité en font de plus un modèle de pdf pouvant présenter des boucles négatives ; C'est pourquoi lui sera préféré un modèle à l'ordre 2 basé sur une distribution gaussienne ne présentant pas ce problème.

Modèle Gaussien de pdf : pdf de Richman

Le modèle gaussien est un modèle permettant d'introduire l'anisotropie de l'écoulement tout en conservant la forme exponentielle qui fait la simplicité du modèle Maxwellien. Cette forme fût introduite par Richman [1989] pour les écoulements granulaires et donne à la pdf présumée f_p la forme :

$$f_p^G(t; \underline{x}, \underline{c}_p) = \frac{n_p(t; \underline{x})}{\sqrt{8\pi^3 \det(\underline{\underline{R}}_{pp})}} \exp\left(-\frac{1}{2} \underline{c}_p'' \cdot \underline{\underline{R}}_{pp}^{-1} \cdot \underline{c}_p''\right) \quad (6.35)$$

Après quelques calculs, il est possible d'exprimer les moments de cette pdf suivant :

$$\langle c_{p,i_1} \cdots c_{p,i_n} \rangle_p^G = \begin{cases} 0 & \text{si } N \text{ est impair} \\ \frac{n!}{(n/2)! 2^{n/2}} R_{pp, \mathbf{i}_1 \mathbf{i}_2} \cdots R_{pp, \mathbf{i}_{n-1} \mathbf{i}_n} & \text{si } N \text{ est pair} \end{cases} \quad (6.36)$$

où les familles d'indices en gras sont à moyenner sur toutes les permutations ($a_{ijk} = \frac{1}{3!}(a_{ijk} + a_{jik} + a_{ikj} + a_{jki} + a_{kij} + a_{kji})$). En particularisant aux moments d'ordre trois et quatre on obtient :

$$S_{ppp,ijk} = 0 \quad (6.37)$$

$$Q_{ppp,ijkl} = 3R_{pp,ij}R_{pp,kl} \quad (6.38)$$

ce qui montre que la pdf de Richman est une approximation d'ordre deux. On retrouve de plus la formule de Milan-Tchekov reliant les moments d'ordre quatre aux moments d'ordre deux pour un processus gaussien.

Afin d'augmenter l'ordre d'approximation à partir de cette pdf de Richman, il est possible d'effectuer un développement en polynômes d'Hermite avec comme fonction de référence la gaussienne. Ces développements héritent des mêmes défauts que les développements de type Grad (non-réalisabilité et nécessité de connaître des moments mal modélisés) et ne sont donc pas explicités.

Modèle de pdf retenue pour la pdf jointe de référence

Les modèles de pdf issus de la littérature concernent le plus souvent des formes présumées pour la pdf non-jointe à une particule f_p . Celles-ci concernent bien évidemment seulement la phase particulaire et nécessitent une extension pour inclure une description des corrélations des mouvements fluctuants du fluide et des particules ainsi que de l'agitation turbulente. Une première idée consisterait à multiplier les pdf précédentes par la pdf des vitesses du fluide. On approximerait alors la pdf jointe par la formule $f_{fp} = f_f f_p$ qui n'est bien évidemment pas suffisante pour caractériser les corrélations fluide-particule. Il faut donc trouver une forme de pdf permettant de représenter ces informations. Cette étape peut se faire par une généralisation de la pdf de Richman (ou gaussienne) au cas des écoulements gaz-solides. Il faut pour cela au préalable définir

la matrice des corrélations globales de l'écoulement $\underline{\underline{R}}$ à partir des différentes matrices de corrélations $\underline{\underline{R}}_{pp}$, $\underline{\underline{R}}_{fp}$ et $\underline{\underline{R}}_{ff}$:

$$\underline{\underline{R}} = \begin{bmatrix} \underline{\underline{R}}_{pp} & \underline{\underline{R}}_{fp} \\ \underline{\underline{R}}_{fp} & \underline{\underline{R}}_{ff} \end{bmatrix} \quad (6.39)$$

et les vecteurs vitesses moyen et fluctuant globaux \underline{U} et \underline{c}'' :

$$\underline{c} = {}^t (\underline{c}_p, {}^t \underline{c}_f), \underline{U} = {}^t (\underline{U}_p, {}^t \tilde{\underline{U}}_f), \text{ et } \underline{c}'' = \underline{c} - \underline{U}$$

L'extension de la pdf gaussienne aux écoulements gaz-solides s'écrit alors :

$$f_{fp}^G(\underline{x}, \underline{c}, t) = \frac{n_p(\underline{x}, t)}{\sqrt{8\pi^3 \det(\underline{\underline{R}})}} \exp\left(-\frac{1}{2} {}^t \underline{c}'' \cdot \underline{\underline{R}}^{-1} \underline{c}''\right) \quad (6.40)$$

Bibliographie

- B. Arcen. *Etude par simulation numérique directe du comportement et de la dispersion de particules solides en écoulement non homogène isotherme ou anisotherme*. PhD thesis, Université Henri Poincaré - Nancy I, 2006.
- B. Arcen, A. Tanière, and B. Oesterlé. Assessing of the effects of near wall corrections of the force acting on particles in gas-solid channel flows. In 10th *Int. Symp. on Gas-Particle Flows*, Houston, TX, USA, 2005.
- H. Babovsky. On a simulation scheme for the boltzmann equation. *Math. Meth. Appl. Sci.*, 8 :223–233, 1986.
- P. Bagchi and S. Balachandar. Effect of turbulence on the drag and lift of a particle. *Phys. Fluids*, 15(11) : 3496–3513, 2003.
- A. B. Basset. *Treatise on Hydrodynamics*, volume 2. Deighton Bell, London, 1888.
- G.K. Batchelor. Diffusion in a field of homogeneous turbulence. *Austral. J. Sci. Res.*, 2 :437–450, 1949.
- A. Berlemont, P. Desjonquieres, and G. Gouesbet. Particle lagrangian simulation in turbulent flows. *Int. J. Multiphase Flow*, 16 :19–34, 1990.
- A. Berlemont, O. Simonin, and M. Sommerfeld. Validation of inter-particle collision models based on large eddy simulation. In *Proc. 6th Int. Symp. On Gas-Solid Flows*, pages 359–369. ASME FED, 1995.
- G.A. Bird. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford Science Publications, 1994.
- G. Blanquart, H. Pitsch, and R. Fox. Direct numerical simulation of soot particle dynamics using dqmom. *APS Meeting Abstracts*, pages L6+, 2006.
- M. Boivin. *Etude de l'influence des particules sur la turbulence à partir des simulations directes et de simulations des grandes échelles d'écoulements diphasiques gaz-solides homogènes isotropes stationnaires*. PhD thesis, EDF-DRD, 1996.
- L. Boltzmann. *Lectures on Gas Theory*. University of California Press, Berkeley, CA, 1964.
- L. Boltzmann. Weitere studien über das wärme gleichgenicht unfer gasmoläkuler. *Sitzungsberichte der Akademie der Wissenschaften*, 66 :275–370, 1872.
- J.F. Bourgat, P. Le Tallec, F. Mallinger, B. Perthame, and Y. Qiu. Couplage boltzmann navier-stokes. Technical report, INRIA Rocquencourt, 1994.
- J.F. Bourgat, P. Le Tallec, and M.D. Tidriri. Coupling boltzmann and navier-stokes equations by friction. *J. Comp. Physics*, 127 :227–245, 1995.

- J. Boussinesq. *Théorie Analytique de la Chaleur*, volume 2. Ecole Polytechnique, Paris, 1903.
- J.F. Brady, R.J. Phillips, J.C. Lester, and G. Bossis. Dynamic simulation of hydrodynamically interacting suspensions. *J. Fluid Mech.*, 195 :257, 1988.
- D. Burry and G. Bergeles. Dispersion of particles in anisotropic turbulent flow. *Int. J. Mult. Flow*, 19(4) :651, 1993.
- T.M. Burton and J.K. Eaton. Fully resolved simulations of particle-turbulence interaction. *J. Fluid Mech.*, 545 :67–111, 2005.
- Y. Buyevitch. Statistical hydromechanics of dispersed systems. part 1 : Physical background and general equations. *J. Fluid Mech.*, 49 :489–507, 1971.
- C.P. Chen and P.E. Wood. Turbulence closure modeling of dilute gas-particle axisymmetric jet. *AIChE J.*, 32 (1) :163–166, 1986.
- A. Clamen and W.H. Gauvin. Effect of turbulence on the drag coefficient of spheres in a supercritical flow regime. *AIChE J.*, page 184, 1969.
- R. Clift and W.H. Gauvin. The motion of particles in turbulent gas streams. In *Proc. CHEMCA 1*, page 14, 1970.
- R. Clift, J.R. Grace, and M.E. Weber. *Bubbles, drops and particles*. Academic Press, 1978.
- N. Crouseilles, P. Degond, and M. Lemou. A hybrid kinetic/fluid model for solving the gas dynamics boltzmann-bgk equation. *J. Comp. Phys.*, 199 (2) :776–808, 2004.
- C.T. Crowe. On the relative importance of particle-particle collisions in gas-particle flows. In *Proceedings of the Conference on Gas Borne Particles*, pages 135–137, 1981.
- C.T. Crowe, M. Sommerfeld, and Y. Tsuji. *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. CRC Press LLC, 1998.
- G.T. Csanady. Trubulent diffusion of heavy particles in the atmosphere. *J. Atm. Sci.*, 20 :201–208, 1963.
- B.J. Daly and F.H. Harlow. Transport equations in turbulence. *Phys. Fluids*, 13(1) :2634–2649, 1970.
- I.V. Derevich and L.I. Zaichik. Precipitation of particles from a turbulent flow. *Mekhanika Zhidkosti i Gaza*, 5 :96–104, 1988.
- P. Desjonquieres, G. Gouesbet, A. Berlemont, and A. Picart. Dispersion of discrete particles by continuous turbulent motions : New results and discussions. *Phys. Fluids*, 29 :2147–2151, 1986.
- L. Desvillettes and S. Mischler. About the splitting algorithm for boltzmann and b.g.k equations. *Math. Models Methods Appl. Sci.* 6, 8 :1079–1101, 1996.
- E. Deutsch. *Dispersion de particules dans une turbulence homogène isotrope stationnaire calculée par simulation numérique directe des grandes échelles*. PhD thesis, EDF-DRD, 1992.
- E. Deutsch and O. Simonin. Large eddy simulation applied to the motion of particles in stationnary homogeneous fluid turbulence. In *Turbulence Modification in Multiphase Flows*, volume 110, pages 35–42. ASME FED, 1991.

- G. Dufour. *Modélisation multi-fluide eulérienne pour les écoulements diphasiques à inclusions dispersées*. PhD thesis, ENSAE, 2005.
- L. Durlofsky, J.F Brady, and G. Bossis. Dynamic simulation of hydrodynamically interacting particles. *J. Fluid Mech.*, 180 :21, 1987.
- J.K. Eaton and J.R. Fessler. Preferential concentration of particles by turbulence. *Int. J. Multiphase Flow*, 20(supp. 1) :169–209, 1994.
- S. Elghobashi and T.W. Abou-Arab. A two-equation turbulence model for two-phase flows. *Phys. of Fluids*, 26(4) :931–937, 1983.
- S. Elghobashi and G.C. Truesdell. On the two-way interaction between homogeneous turbulence and dispersed solid particles. i : Turbulence modification. *Phys. of Fluids*, 5(7) :1790–1801, 1993.
- L.C. Evans. *An Introduction to Stochastic Differential Equations*. <http://math.berkeley.edu/~evans/SDE.course.pdf>, 2000.
- P. Fede. *Modélisation et Simulation de l’Influence de la Turbulence sur les Collisions dans les Ecoulements Mono- et Bi-Solides*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2004.
- P. Fede and O. Simonin. Numerical study of the subgrid fluid turbulence effects on the statistics of heavy colliding particles. *Phys. Fluids*, 18 :O45103, 2006.
- P. Fede, O. Simonin, and P. Villedieu. Monte-carlo simulation of colliding particles in gas-solid turbulent flows from a joint fluid-particle pdf equation. In *V^{eme} Symposium on Numerical Method for Multiphase Flows*. ASME FED, 2002.
- R.O. Fox. Bivariate direct quadrature method of moments for coagulation and sintering of particle populations. *Journal of Aerosol Science*, 37 :1562, 2006.
- P. Février and O. Simonin. Constitutive relations for fluid-particle velocity correlations in gas-solid turbulent flows. In *3rd Int. Conf. on Multiphase Flows*, Lyon, France, June 8-12, 1998. Paper number 81-0323.
- R. Gatignol. The faxen formulae for a rigid sphere in an unsteady non uniform stokes flow. *J. Méc. Th. Appl.*, 9 :143–160, 1983.
- A.D. Gosman and E. Ioanides. Aspects of computer simulation of liquis-fuelled combustors. In *19th Aerospace Science Meeting*, St. Louis, 1981. AIAA. Paper number 81-0323.
- H. Grad. On the kinetic theory of rarefied gases. *Com. on Pure and Applied Mathematics*, 2 :331–407, 1949.
- C. Graham and S. Méléard. Probabilistic tools and monte-carlo approximations for some boltzmann equations. Technical report, CEMRACS, 1999.
- D.E. Groszmann and C.B. Rogers. Turbulent scales of dilute particle-laden flows in microgravity. *Phys. Fluids*, 16(12) :4671–4684, 2004.
- N.G. Hadjiconstantinou, A.L. Garcia, M.Z. Bazant, and G.E. He. Statistical error in particle simulations of hydrodynamic phenomena. *J. Comp. Physics*, 187 :274–297, 2003.
- K. Hanjalic and B.E. Launder. A reynolds stress model of turbulence and its application to thin shear flow. *J. Fluid Mech.*, 52 :609–638, 1972.

- D.C. Haworth and S.B. Pope. A generalized langevin model for turbulent flows. *Phys. of Fluids*, 29 : 387–404, 1986.
- J. He and O. Simonin. Non-equilibrium prediction of the particle-phase stress tensor in vertical pneumatic conveying. In *Gas-Solid Flows-1993*, volume 166, pages 253–263. ASME FED, 1993.
- J. He and O. Simonin. Modélisation numérique des écoulements turbulents gaz-solides en conduite verticale. Rapport EDF HE-44/94/021A, 1994.
- S. Heinz. On the kolmogorov constant in stochastic turbulence models. *Phys. Fluids*, 14(11) :4095–4098, 2002.
- J.O. Hinze. Turbulent fluid and particle interaction. *Prog. Heat Mass Transfer*, 6 :433–452, 1972.
- J.O. Hinze. *Turbulence*. McGraw-Hill, 1975.
- J.J. Hylkema and P. Villedieu. A random particle method to simulate coalescence phenomena in dense liquid sprays. In *Proc. 16th Int. Conf. on Num. Meth. in Fluid Dyn.* Lecture Notes in physics 515, Springer-Verlag, 1999.
- J.T. Jenkins and M.W. Richman. Grad's 13-moment system for a dense gas of inelastic spheres. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 87 :355–377, 1985.
- I. Kim, S. Elghobashi, and W.A Sirignano. On the equation for spherical-particle motion : Effect of reynolds and acceleration numbers. *J. Fluid Mech.*, 367 :221–253, 1998.
- J. Kim, P. Moin, and R. Moser. Turbulence statistics in fully developed channel flow at low reynolds number. *J. Fluid Mech.*, 177 :133, 1987.
- A.N. Kolmogorov. Local structure of turbulence in an incompressible fluid at very high reynolds number. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 30 :299–303, 1941.
- A.N. Kolmogorov. A refinement of hypothesis concerning the local structure of turbulence in a viscous incompressible fluid at high reynolds number. *J. Fluid Mech.*, 62 :82, 1962.
- N.A. Konan. *Modélisation Numérique Stochastique des Rebonds de Particules sur Parois Rugueuses*. PhD thesis, INPT, 2007.
- N.A. Konan, O. Simonin, and K.D. Squires. Rough wall boundary condition derivation for particle co-continuum equations : Validation from les/dps of gas-solid turbulent channel flow. In *Proceedings of FEDSM2006*. ASME FED, 2006.
- B. Lapeyre, E. Pardoux, and R. Sentis. *Méthodes de Monte-Carlo pour les Equations de Transport et de Diffusion*. Mathématiques & Applications. Springer, New York, 1997.
- B.E. Launder and B.I. Sharma. Application of the energy-disipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1 :131–138, 1974.
- J. Laviéville. *Simulations Numériques et Modélisation Des Interactions Entre L'entraînement Par la Turbulence et Les Collisions Interparticulaires en Écoulement Gaz-Solides*. PhD thesis, Université de Rouen, 1997.
- P. Le Tallec and F. Mallinger. Coupling boltzmann and navier-stokes equations by half fluxes. *J. Comp. Physics*, 136 :51–67, 1997.

- C.D. Levermore. Moment closure hierarchies for kinetic theories. *J. Stat. Phys.*, 83 :1021–1065, 1996.
- P.L. Lions. On the schwarz alternating method i. In *R. Glowinski, G. Golub and J. Periaux, Eds., Proceedings of the first international symposium on domain decomposition methods for partial differential equations*, January 7-9, Paris, France, 1987. SIAM, Philadelphia.
- P.L. Lions. On the schwarz alternating method ii. In *T. Chan, R. Glowinski, J. Periaux and O. Widlund, Eds., Proceedings of the second international symposium on domain decomposition methods for partial differential equations*, January 14-16, Los Angeles, USA, 1988. SIAM, Philadelphia.
- P.L. Lions. On the schwarz alternating method iii. In *T. Chan and R. Glowinski, Eds., Proceedings of the third international symposium on domain decomposition methods for partial differential equations*, March 20-22, Houston, USA, 1989. SIAM, Philadelphia.
- M.Y. Louge, E. Mastorakos, and J.T. Jenkins. The role of particle collision in pneumatic transport. *J. Fluid Mech.*, 231 :345–359, 1991.
- J. Magnaudet, M. Rivero, and J. Fabre. Accelerated flows past a rigid sphere or a spherical bubble. part 1. steady straining flow. *J. Fluid Mech.*, 284 :97–135, 1995.
- M.R. Maxey and J.J. Riley. Equation of motion for a small rigid sphere in a non uniform flow. *Phys. of Fluids*, 26(4) :2883–2889, 1983.
- J.C. Maxwell. On the dynamical theory of gases. *Philos. Trans.Roy. Soc. London Ser. A*, 157 :49–88, 1867.
- J.C. Maxwell. *The Scientific Papers of J.C. Maxwell : 1862-1873, Vol. 2*. Cambridge University Press, 1995.
- J. P. Minier. Construction de la trajectoire d'une particule dans un écoulement turbulent. In *rapport EDF, HE-44/88.16*, Chatou, 1988. L.N.H.
- J.P. Minier and J. Pozorski. Wall-boundary conditions in probability density function methods and application to a turbulent channel flow. *Phys. Fluids*, 11(9) :2632–2644, 1999.
- J.P. Minier, E. Peirano, and S. Chibbaro. Weak first- and second-order numerical schemes for stochastic differential equations appearing in lagrangian two-phase flow modeling. *Monte Carlo Methods and Appl.*, 9(2) :93–133, 2003.
- M. Moreau, P. Fede, O. Simonin, and P. Villedieu. Monte-carlo simulation of colliding particles suspended in gas-solid homogeneous turbulent shear flows. In *IXth Int. Symposium on Gas-particles Flows*. ASME FED, 2003.
- M. Moreau, P. Fede, O. Simonin, and P. Villedieu. Stochastic lagrangian modelling and monte-carlo simulation of collisions in gas-solid homogeneous shear turbulent flows. In *Vth Int. Conf. on Multiphase Flow*. ICMF'04, 2004.
- M. Muradoglu, P. Jenny, S.B. Pope, and D.A. Caughey. A consistent hybrid method finite-volume/particle method for the pdf equations of turbulent reactive flows. *J. Comp. Phys.*, 154 (2) :342–371, 1999.
- K. Nanbu. Stochastic solution method of the master equation and the boltzmann equation. *J. Phys. Soc. Japan*, 52 :2654–2658, 1983.
- X.B. Nie, S.Y. Chen, and M.O. Robbins. Hybrid continuum-atomistic simulation of singular corner flow. *Phys. Fluids*, 16 (10) :3579–3591, 2004.

- S.T. O'Connell and P.A. Thompson. Molecular dynamics-continuum hybrid computations : a tool for studying complex fluid flows. *Phys. Rev. E*, 52 :R5792–5795, 1995.
- B. Oesterlé and L.I. Zaichik. On lagrangian time scales and particle dispersion modeling in equilibrium shear flows. *Phys. Fluids*, 16 (9) :3374–3384, 2004.
- C. W. Oseen. *Neure Methoden und Ergebnisse in der Hydrodynamik*. Akademische Verlag, Leipzig, 1927.
- S.I. Pai. Fundamental equations of a mixture of a gas and small spherical solid particles from simple kinetic theory. *Rev. Roum. Sci. Tech. Mec. Appl.*, 19 :605–621, 1974.
- B. Perthame. Introduction to the theory of random particle methods for boltzmann equation. Technical report, INRIA Rocquencourt, 1994.
- X. Pialat, O. Simonin, and P. Villedieu. A hybrid eulerian lagrangian method to simulate the dispersed phase in turbulent gas-particle flows. *accepted in Int. J. Multiphase Flow*, 2007.
- S.B. Pope. Stochastic lagrangian models of velocity in homogeneous turbulent shear flow. *Phys. of Fluids*, 14(5) :1696–1702, 2002.
- S.B. Pope. Transport equation for the joint probability density function of velocity and scalar in turbulent flow. *Phys. of Fluids*, 4 :588–895, 1981.
- S.B. Pope. Consistent modeling of scalar in turbulent flows. *Phys. of Fluids*, 2 :404–408, 1983.
- S.B. Pope. Pdf methods for turbulent reactive flows. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 11 :119–192, 1985.
- S.B. Pope. Lagrangian PDF methods for turbulent flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, pages 23–63, 1994a.
- S.B. Pope. On the relationship between stochastic lagrangian models of turbulence and second-moment closures. *Phys. of Fluids*, 6(2) :973–985, 1994b.
- Y. Qiu. *Couplage Boltzmann-Boltzmann et Euler-Boltzmann*. PhD thesis, Paris VII, 1992.
- T.N. Randrianarivelo. *Etude Numérique des Interactions Hydrodynamiques Fluides/Solides : Application aux Lits Fluidisés*. PhD thesis, Université Bordeaux 1, 2005.
- M.W. Reeks. Eulerian direct interaction applied to the statistical motion of particle in a turbulent fluid. *J. Fluid Mech.*, 83 :529–546, 1980.
- M.W. Reeks. On a kinetic equation for the transport of particles in turbulent flows. *Phys. of Fluids*, 3(3) :446–456, 1991.
- M.W. Reeks. On the constitutive relations for dispersed particles in nonuniform flows. i : Dispersion in a simple shear flow. *Phys. of Fluids*, 5 :750–761, 1993.
- W.C. Reynolds. Computation of turbulent flows. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 8 :183–208, 1976.
- M.W. Richman. The source of second moment in dilute granular flows of highly inelastic spheres. *J. of Rheology*, 33(8) :1293–1306, 1989.
- H.C Rodean. The universal constant for the lagrangian structure function. *Phys. Fluids A*, 3 :1479, 1991.
- J. Rotta. Statistische theorie nichthomogener turbulenz i. *Zeitschrift für Physik*, 129 :547, 1951.
- P.G. Saffman and J.S. Turner. On the collision of drops in turbulent clouds. *Fluid. Mech.*, 1 :16–30, 1956.

- M. Sakiz. *Simulation numérique lagrangienne et modélisation Eulérienne d'écoulement diphasique gaz-particules en canal vertical*. PhD thesis, EDF-DRD, 1999.
- B.L. Sawford. Reynolds number effects in lagrangian stochastic models of turbulent dispersion. *Phys. of Fluids*, 3(6) :1577–1586, 1991.
- L. Schiller and A. Nauman. A drag coefficient correlation. *V.D.I. Zeitung*, 77 :318–320, 1935.
- J. Schneider. Direct coupling of fluid and kinetic equations. *Trans. Theoret. Stat. Phys.*, 25 (6), 1996.
- T.E. Schwartzenbacher and I.D. Boyd. A hybrid particle-continuum method applied to shock waves. *J. Comp. Phys.*, 215 (2) :402–416, 2006.
- O. Simonin. Prediction of the dispersed phase turbulence in particle-laden jets. In *Proc. 1st Int. Symp. Gas-Solid Flows*, pages 197–206. ASME, 1991a.
- O. Simonin. Second-moment prediction of dispersed phase turbulence in particle-laden flows. In *Rapport EDF*, 1991b.
- O. Simonin. Combustion and turbulence in two-phase flows. In *Lecture Series 1996-02*. Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1996.
- O. Simonin, E. Deutsch, and J.P. Minier. Eulerian prediction of the Fluid/Particle correlated motion in turbulent two-phase flows. *App. Sci. Res.*, 51 :275–283, 1993.
- 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 *9th Symp. On Turbulent Shear Flows*, pages 85–115. ASME, 1995.
- K. Singh, K.D. Squires, and O. Simonin. Evaluation using an les database of constitutive relations for fluid-particle velocity correlations in fully-developed gas-particle channel flows. In *5th Int. Conf. on Multiphase Flow, ICMF'04*, Yokohama, Japan, 2004. ICMF.
- M. Sommerfeld. Validation of a stochastic lagrangian modelling approach for inter-particle collisions in homogeneous isotropic turbulence. *Int. J. Multiphase Flow*, 27 :1829–1858, 2001.
- M. Sommerfeld. Inter-particle collisions in turbulent flows : A stochastic lagrangian model. In *Proc. Turbulence and Shear Flow Phenomena -1*, pages 265–270, Santa Barbara, 1999.
- M. Sommerfeld and G. Zivkovic. Recent advances in the numerical simulation of pneumatic conveying through pipe systems. In *In : Hirsch et al. (Eds.), Computational Methods in Applied Science First European Computational Fluid Dynamics Conference*, pages 201–212, Brussels, Belgium, 1992.
- K.D. Squires and J.K. Eaton. Particle response and turbulence modification in isotropic turbulence. *Phys. of Fluids*, 7 :1191–1203, 1990.
- K.D. Squires and J.K. Eaton. Preferential concentration of particles by turbulence. *Phys. of Fluids*, 5 :1169–1178, 1991.
- G.G. Stokes. *On the Effect of the Inertial Friction of Fluids on the Motion of Pendulums*. Trans. Cambridge Phil. Soc., 1851.
- S. Sundaram and L.R. Collins. Collision statistics in an isotropic particle-laden turbulent suspension. part 1. direct numerical simulations. *J. Fluid. Mech.*, 335 :75–109, 1997.

- T. Tanaka and Y. Tsuji. Numerical simulation of gas-solid two-phase flow in a vertical pipe : On the effect of inter-particle collision. In *4th Int. Symp. on Gas-Solid Flows*, pages 123–128, ASME FED, vol. 121, 1991.
- G.I. Taylor. Diffusion by continuous movements. In *Proc. Royal Society London A 151*, pages 421–478, 1921.
- C.M. Tchen. *Mean value and correlation problems connected with the motion of small particles suspended in a turbulent fluid*. PhD thesis, Delft, Martinus Nijhoff, The Hague, 1947.
- M.D. Tidriri. *Couplage d'Approximations et de Modèles de Type Différents dans le Calcul d'Ecoulements Externes*. PhD thesis, Paris Dauphine, 1992.
- S. Tiwari. Coupling of the boltzmann and euler equations with automatic domain decomposition. *J. Comp. Phys.*, 144 :710–726, 1998.
- L.B. Torobin and W.H. Gauvin. Drag coefficients of single spheres moving in steady and accelerated motion in a turbulent field. *AICHE J.*, 7 :615, 1961.
- C. Truesdell and R.G. Muncaster. *Fundamentals of Maxwell's Kinetic Theory of a Simple Monoatomic Gas (treated as a branch of rational mechanics)*. Academic Press, Cambridge, 1980.
- P.H.T Uhlherr and C.G Sinclair. The effect of freestream turbulence on the drag coefficients of spheres. In *Proc. CHEMCA 1*, page 1, 1970.
- M.W. Vance, K.D. Squires, and O. Simonin. Properties of the particle velocity field in gas-solid turbulent channel flow. *Phys. Fluids*, 18 :063302, 2006.
- O. Vermorel. *Etude Numérique et Modélisation de la Modulation de la Turbulence dans un Ecoulement de Nappe Chargée en Particules*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2003.
- C. Villani. A review of mathematical topics in collisional kinetic theory. *Handbook of Mathematical Fluid Dynamics Volume 1*, Elsevier, 2000.
- P. Villedieu. *Approximations de type cinétique du système de la dynamique des gaz hors équilibre thermochimique*. PhD thesis, ENSAE, 1994.
- I. Vinkovic, C. Aguirre, and S. Simoëns. Large-eddy simulation and lagrangian stochastic modeling of scalar dispersion in a turbulent boundary layer. *J.of Turbulence*, 7 (30) :1–14, 2006.
- O.R. Walton. Granular solid flow project. *Quaterly report, January-March*, UCID-20297-88-1, Lawrence Livermore National Laboratory, 1988.
- Q. Wang, K.D. Squires, and O. Simonin. Large eddy simulation of turbulent gas-solid flows in a vertical channel and evaluation of second-order models. *Int. J. Heat and Fluid Flow*, 19 :505–511, 1998.
- M.R. Wells and D.E. Stock. The effects of crossing trajectories on the dispersion of particles in a turbulent flow. *J. Fluid Mech.*, 136 :31–62, 1983.
- T. Werder, J.H Walther, and P. Koumoutsakos. Hybrid atomistic-continuum method for the simulation of the dense fluid flows. *J. Comp. Phys.*, 205 :373390, 2005.
- M.I. Yudine. Physical considerations on heavy particles diffusion. In *Proceedings of the Int. Symp. on Atmospheric Diffusion and Air Pollution, Adv. Geophys.* 6, page 185, 1959.

S. Yuu, N. Yasukouchi, Y. Hirosawa, and T. Jotaki. Particle turbulent diffusion in dust laden round jet. *AIChE Journal*, 24 :509–519, 1978.

L. I. Zaichik and A. A. Vinberg. Modelling of particle dynamics and heat tranfer in turbulent flows using equations for first and second moments of velocity and temperature fluctuations. In *8th Int. Symp. on Turbulent Shear Flows*, volume 1, pages 1021–1026, Munich, 1991.