

Table des matières

Remerciements.....	3
Résumé.....	5
Summary	6
Table des matières.....	7
Nomenclature.....	11
Chapitre 1 Introduction.....	17
1.1 Contexte.....	17
1.1.1 L'élaboration de l'acier.....	17
1.1.2 La propreté inclusionnaire ²	18
1.1.3 Le procédé de traitement en poche des aciers	19
1.2 Projet CIREM ²	21
1.3 Démarche adoptée dans cette étude	22
1.3.1 Aérosols et hydrosols.....	22
1.3.2 Notre approche	23
1.3.3 Organisation du mémoire	24
Chapitre 2 Équations de transport et mécanismes de dépôt.....	25
2.1 Couplage fluide/particule	25
2.2 Différentes échelles de temps et d'espace	26
2.2.1 L'écoulement porteur	26
2.2.2 Temps de relaxation de la particule et nombre de Stokes.....	29
2.3 Phase porteuse : équation de Navier Stokes	31
2.4 Suivi lagrangien : équation de la dynamique des particules.....	31
2.4.1 Équation de la dynamique de particules isolées dans un fluide infini.....	31
2.4.2 Forces en volume.....	32
2.4.3 Forces hydrodynamiques	32
2.5 Choix des forces pour l'étude d'une particule isolée dans un fluide infini.....	37
2.6 Dépôt de particules	38
2.6.1 Mécanismes de dépôt.....	38
2.6.2 Modèle semi-empirique de Wood pour les aérosols.....	40
2.6.3 Modèles physiques du dépôt de particules inertielles	41

Chapitre 3 Dépôt turbulent en canal plan.....	43
3.1 Description de la configuration étudiée	43
3.2 Présentation du modèle de Cleaver et Yates.....	44
3.2.1 Écoulement turbulent en proche paroi solide.....	44
3.2.2 Approche d'Ahmadi : Modèle de Cleaver et Yates	46
3.3 Description du modèle utilisé	47
3.3.1 Modélisation du champ fluide.....	48
3.3.2 Suivi lagrangien des particules et évaluation du flux déposé	48
3.4 Cas de l'aérosol et validation du code	51
3.5 Cas de l'hydrosol	54
3.5.1 Mécanismes de capture	54
3.5.2 Effets de la lubrification	61
3.6 Résumé	65
Chapitre 4 Dépôt de particules sur une surface libre	67
4.1 Description de la configuration étudiée	67
4.2 Méthode numérique de résolution de l'équation de Navier Stokes.....	68
4.2.1 Différents choix possibles.....	68
4.2.2 Présentation de la méthode choisie pour la résolution du champ fluide.....	70
4.2.3 Méthode de calcul des moyennes temporelles et spatiales	76
4.3 Présentation de la phase fluide.....	77
4.3.1 Configuration étudiée	77
4.3.2 Validation de l'écoulement fluide.....	78
4.3.3 Caractéristiques de la phase fluide.....	82
4.4 Suivi Lagrangien.....	93
4.4.1 Couplage entre la phase fluide et la phase dispersée	93
4.4.2 Moyennes temporelles et spatiales conditionnées par la présence des particules solides	95
4.5 Étude du dépôt de particules non soumises aux effets de la gravité.....	96
4.5.1 Caractéristiques des simulations	96
4.5.2 Influence de l'inertie sur la vitesse de dépôt des particules	97
4.5.3 Influence de l'intensité turbulente de l'écoulement sur la vitesse de dépôt des particules	97
4.5.4 Nombre de Reynolds particulaire	99
4.5.5 Évolution de la concentration en inclusions à l'approche de la surface libre	99
4.5.6 Évaluation de la direction des particules	101

4.5.7	Variances de la vitesse du fluide et des particules	103
4.5.8	Étude qualitative du poids des différentes forces	105
4.5.9	Dispersion et coefficient de dispersion des particules	110
4.6	Étude du dépôt de particules soumises à la sédimentation	113
4.6.1	Influence de la sédimentation sur la vitesse de dépôt :	113
4.6.2	Nombre de Reynolds particulaire.....	114
4.6.3	Concentration des particules.....	114
4.6.4	Variance de la vitesse des particules et de la vitesse du fluide vu	117
4.6.5	Poids des forces dans le mouvement des particules	120
4.6.6	Dispersion et décorrélation temporelle des particules	121
4.7	Étude du dépôt de particules soumises aux effets de la lubrification.....	126
4.7.1	En l'absence de sédimentation.....	126
4.7.2	Avec sédimentation	128
4.8	Résumé	129
Conclusion		131
Bibliographie		135
Annexes.....		138

Nomenclature

Lettres latines

c_0	Concentration moyenne en particules dans l'écoulement ou loin de la surface
C_D	Coefficient de traînée
C_k^*	Concentration normalisée en particules dans le plan k
$C_{sens\ i\ k}^*$	Concentration normalisée en particules dans le plan k différenciée selon le sens de la vitesse de la particule ou de la vitesse du fluide vu
d_p	Diamètre d'une particule
D	Diamètre de la conduite
D_B	Coefficient de diffusion brownienne
D_i	Coefficient de diffusion dans la direction i
D_E	Coefficient de diffusion turbulente
DNS	Simulation numérique directe
E_f	Spectre du forçage
\mathbf{f}	Champ de force appliqué à l'écoulement fluide
$f_{ }, f_{\perp}, f^i$	Coefficient de frottement dans la direction parallèle et perpendiculaire à l'interface
f, g	Fonction d'autocorrélation longitudinale et transversale
\mathbf{F}_{Acc}	Force d'accélération en volume
\mathbf{F}_D	Force de traînée
$F_{D }, F_{D\perp}$	Composantes parallèle et perpendiculaire à l'interface de la force de traînée
\mathbf{F}_h	Résultante de forces hydrodynamiques
\mathbf{F}_H	Force d'histoire
\mathbf{F}_L	Force de portance
\mathbf{F}_{MA}	Force de masse ajoutée
\mathbf{F}_s	Résultante de forces surfaciques
\mathbf{F}_v	Résultante de forces volumiques
\mathbf{F}_{VdW}	Force de Van Der Waals
\mathbf{g}	Accélération gravitationnelle
H	Constante d'Hamaker
I_1, I_2	Fonction puissance d'interpolation du ratio de la vitesse de dépôt avec et sans lubrification en prenant en compte ou pas la sédimentation
I_{ω}	Facteur d'isotropie
J	Flux surfacique de particules déposées
$J_{\mathbf{f}(x)}$	Fonction monotone tendant vers zéro lorsque x tend vers zéro et 2,555 lorsque x tend vers l'infini
\bar{k}	Énergie cinétique moyenne du champ fluctuant
\mathbf{k}_d	Vecteur d'onde
\mathbf{k}_f	Vecteur d'onde centré du forçage de l'écoulement
k_x, k_y, k_z	Composantes du vecteur d'onde
l	Échelle intégrale de la turbulence
l_{ref}	Longueur caractéristique de référence
l^*	Longueur caractéristique en proche paroi solide
l_{τ}	Échelle de longueur associée à la vitesse de frottement pariétale du fluide

L	Épaisseur de surface
LES	Simulation des grandes échelles
L_x, L_y, L_z	Longueur du domaine de simulation dans les directions $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$
m_p	Masse d'une particule
\mathbf{n}	Normale à l'interface de capture
n_i	Nombre d'inclusions
N	Nombre de noeuds du maillage
N_x, N_y, N_z	Nombre de noeuds du maillage dans les directions $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$
p	Pression du fluide
P	Puissance injectée dans le domaine
Pdf	Densité de probabilité d'une force i sur la force de traînée
R_{ij}^E	Corrélation temporelle eulérienne
R_{ij}^L	Corrélation temporelle lagrangienne
Re	Nombre de Reynolds
Re_D	Nombre de Reynolds d'un écoulement en conduite
Re_l	Nombre de Reynolds définie à l'aide de l'échelle intégrale de la turbulence
Re_p	Nombre de Reynolds particulaire
Re_s	Nombre de Reynolds de la surface libre
Re_η	Nombre de Reynolds formé à l'aide des échelles de Kolmogorov
S	Surface d'un plan dans le domaine de simulation
S^+, S^-	Surface occupée par les éjections et les impacts
Sc	Nombre de Schimidt
t_0	Temps de début des calculs des corrélations
t_τ	Échelle temporelle associée à la vitesse de frottement pariétale du fluide
T_{diff}	Temps de diffusion de la turbulence
T_{ij}	Échelle temporelle de décorrélation
u_d	Vitesse de dépôt particulaire
u_d^{lub}	Vitesse de dépôt des particules soumises à la lubrification
$u_d^{sans lub}$	Vitesse de dépôt des particules non soumises à la lubrification
$u_d^{sans sed}$	Vitesse de dépôt des particules non soumises à la sédimentation
u_d^{sed}	Vitesse de dépôt des particules soumises à la sédimentation
\mathbf{u}_f	Vecteur vitesse du fluide
u_f, v_f, w_f	Composantes de vitesse du fluide selon les directions $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$
\mathbf{u}_{f0}	Vecteur vitesse du fluide à la position de la particule lors de l'introduction de celle-ci dans le domaine de simulation
$u_{fluc}^{'2}, u^{'2}, \overline{u_f^{'2}}$	Fluctuation quadratique de la vitesse du fluide
$u_{f\parallel}, u_{f\perp}$	Composante de la vitesse du fluide parallèle et tangente à l'interface
$u_{f,p}, v_{f,p}, w_{f,p}$	Vitesse du fluide vu par la particule
\mathbf{u}^m	Composante de la vitesse du fluide induite par la présence de la particule
\mathbf{u}_{NS}	Vitesse du fluide calculée à l'aide de l'équation de Navier Stokes
\mathbf{u}_p	Vecteur vitesse d'une particule
u_p, v_p, w_p	Composantes de vitesse de la particule selon les directions $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$
\mathbf{u}_{p0}	Vecteur vitesse d'une particule lors de son introduction dans le domaine
$u_{p\parallel}, u_{p\perp}$	Composante de la vitesse de la particule parallèle et tangente à l'interface
\mathbf{u}_r	Vitesse relative entre le fluide porteur et la particule
\mathbf{u}^r	Composante de la vitesse du fluide induite par la rotation de la particule
\mathbf{u}^t	Composante de la vitesse du fluide induite par la translation de la particule

u_τ	Vitesse de frottement pariétale du fluide
u_0, u_1, u_2	Décomposition de la vitesse du fluide (terme uniforme, terme linéaire et terme parabolique)
U_D	Vitesse de débit
\overline{U}_0	Vitesse moyenne du fluide parallèlement à la paroi solide
v_{ref}	Vitesse caractéristique de référence
v_{sed}	Vitesse de sédimentation
V	Volume de la phase fluide
V_i	Volume occupée par une inclusion
w_d	Vitesse de dépôt des particules évaluée à l'aide de la trajectoire limite
$(w_{py})_{o_lim}$	Composante normale à la paroi de la vitesse initiale de la particule introduite sur la trajectoire limite
$x(t_0)$	Position de la particule lors du début des calculs des corrélations
x_b	Distance du point de formation de la couche limite
x_p, y_p, z_p	Coordonnées de la particule dans les directions x, y, z
$x_{i,p}^2$	Dispersion des particules dans la direction i
y_{p0}	Coordonnée d'introduction de la particule
y_{p0}^{depot}	Lors du processus dichotomique, dernière position d'introduction de la particule ayant mené au dépôt de celle-ci
$y_{p0}^{sans depot}$	Lors du processus dichotomique, dernière position d'introduction de la particule n'ayant pas mené au dépôt de celle-ci
y_{p0_lim}	Trajectoire limite de la particule
z_B	Épaisseur de la couche limite de l'écoulement
z_c	Plan central du domaine
z_f	Plan de la position de la zone de forçage
z_s	Plan de la position de la surface libre

Lettres grecques

α_p	Fraction volumique d'occupation en particules
α_r	Coefficient de retard de la force de Van Der Waals
δ	Distance entre la surface de la particule et la position de l'interface de capture
Δ	Pas d'espace du maillage
$\Delta_x, \Delta_y, \Delta_z$	Pas d'espace du maillage dans les directions x, y, z
\mathcal{E}	Taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente, pseudo-dissipation
ε	Dans le chapitre 2, hauteur équivalente d'une aspérité du mur (au sens hydraulique du terme)
ε_p	Pseudo dissipation de l'énergie cinétique turbulente
ξ	Distance entre le centre de la particule et la position de l'interface de capture
η	Longueur de Kolmogorov
$\lambda_{li}, \lambda_{tij}$	Micro-échelle de Taylor longitudinale et transversale
Λ	Macro échelle de Taylor
μ	Viscosité dynamique du fluide
ν	Viscosité cinématique de la phase fluide
ν_t	Viscosité turbulente
ρ_f	Masse volumique du fluide
ρ_p	Masse volumique de la particule

τ_p	Nombre de Stokes particulaire
τ_{paroi}	Contrainte pariétale moyenne du fluide
τ_η	Échelle temporelle de Kolmogorov
ϕ	Champ d'écoulement périodique
$\omega_x, \omega_y, \omega_z$	Composante du champ de vorticité du fluide

Autres symboles

$\frac{d}{dt}$	Dérivée temporelle le long de la trajectoire de la particule
$\frac{\partial}{\partial t}$	Dérivée partielle temporelle le long de la trajectoire de la particule
$\frac{D}{Dt}$	Dérivée temporelle en suivant le mouvement du fluide
$\langle . \rangle$	Moyenne d'un ensemble de réalisations
$\ . \ $	Norme de la grandeur
$.*$	Grandeurs relatives à l'écoulement à proximité d'une paroi solide
$.v$	Moyenne volumique
$.s$	Moyenne surfacique
$\bar{.}$	Moyenne statistique
$.\prime$	Fluctuation de la grandeur
$.+$	Grandeur adimensionnée par les échelles de longueur et de temps

Chapitre 1

Introduction

Dans ce mémoire, nous étudions le transport turbulent et le dépôt de particules solides à une interface liquide/solide puis à une interface liquide/liquide. Ce problème scientifique est soulevé dans le contexte particulier de la métallurgie en poche dont l'un des objectifs est la purification de l'acier liquide et l'élimination d'impuretés solides en suspension appelées inclusions. Le travail a été réalisé dans le cadre du projet CIREM (Comportement des Inclusions dans les Réacteurs Métallurgiques) labellisé et soutenu par l'Agence Nationale de la Recherche.

Le premier chapitre est une introduction dans laquelle nous développons brièvement le contexte général de l'étude puis nous présentons le projet CIREM cadre de ce travail. Nous donnons les grandes lignes de la démarche scientifique que nous avons adoptée. Enfin, nous explicitons le plan de ce mémoire.

1.1 Contexte

1.1.1 L'élaboration de l'acier

L'acier est un alliage fer-carbone avec une proportion de carbone inférieure à 2% massique. Il existe deux grandes filières d'élaboration de l'acier, une filière dite *fonte* à partir du minerai de fer et une filière dite *ferrailles* à partir du recyclage des déchets ferrailles¹. Ces deux voies sont représentées ici par commodité sur le même schéma (Figure 1). Dans le cas de la filière fonte, on trouve successivement l'usine à fonte, l'aciérie, la coulée continue et le laminage à chaud. L'aciérie comprend (i) une étape de métallurgie primaire réalisée dans un convertisseur (où on transforme la fonte liquide issue du haut-fourneau en fer liquide presque pur) et (ii) une étape de métallurgie secondaire (intitulée station d'affinage sur la Figure 1) qui permet de passer du fer presque pur à l'acier ayant la pureté optimale (élimination d'impuretés) et la composition recherchée (par addition d'éléments d'alliage). Dans le cas de la filière ferrailles, il n'y a pas d'usine à fonte et l'étape de métallurgie primaire de l'aciérie consiste en une fusion des ferrailles en four électrique.

Le contexte particulier de notre étude est la métallurgie secondaire appelée également métallurgie en poche. Le métal liquide sortant du convertisseur ou du four électrique est affiné en poche chauffante (APC). A ce stade on réalise la désoxydation du métal, son réchauffage pour le maintenir à une température suffisante avant la coulée et une grande partie des additions pour la mise à nuance. Le métal subit ensuite un traitement sous vide, qui peut être réalisé par dégazage RH ou par un traitement en cuve. L'opération de dégazage permet d'éliminer les éléments gazeux dissous (azote, oxygène, hydrogène), de désulfurer l'acier et a aussi comme effet l'élimination d'une grande partie des inclusions, des impuretés solides ou liquides en suspension dans l'acier liquide. Cette opération est suivie, dans certains cas, d'une phase de brassage-décantation permettant de prolonger l'élimination des inclusions.

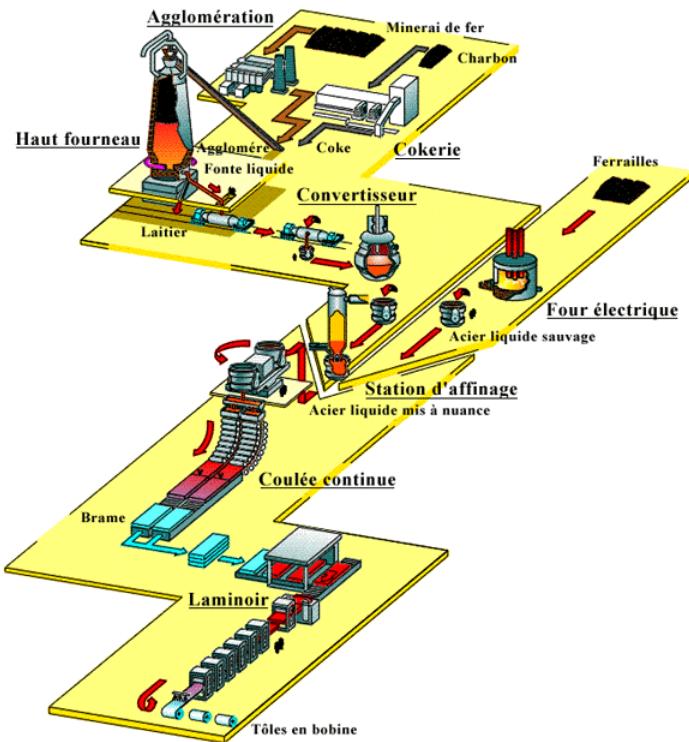


Figure 1 : Présentation schématique d'une usine sidérurgique intégrée.

1.1.2 La propreté inclusionnaire²

L'état inclusionnaire demeure un critère de qualité essentiel des aciers, et les exigences associées sont de plus en plus sévères au fur et à mesure que les objectifs d'allègement des structures, de performance des produits et de réduction des coûts de production sont poursuivis. Dans le cas spécifique des aciers spéciaux faiblement alliés (qui intéresse le projet CIREM), la maîtrise de l'état inclusionnaire (en termes de densité, de taille et de composition d'inclusions) représente un enjeu majeur pour les élaborateurs qui souhaitent (i) augmenter les caractéristiques mécaniques de leurs aciers spéciaux dans le but d'alléger les pièces dédiées en particulier au marché de l'automobile, (ii) optimiser les propriétés de tenue en fatigue, (iii) réduire l'occurrence des agrégats inclusionnaires provoquant l'apparition de défauts exfoliés sur les tôles d'acier, (iv) améliorer l'usinabilité des pièces pour des raisons de coût de production et (v) pour certaines nuances d'aciers spéciaux, atteindre la propreté inclusionnaire visée sans avoir recours aux opérations coûteuses de refusion d'électrode consommable.

Les opérations de traitement du métal liquide en poche génèrent, mais aussi éliminent, la plupart des inclusions d'oxydes : la poche est le réacteur métallurgique principalement responsable de la propreté inclusionnaire, même si les opérations de transport dans le répartiteur ou de solidification peuvent encore modifier cette propreté.

Dans le cas des aciers spéciaux faiblement alliés, les inclusions endogènes appartiennent typiquement au système Si-Ca-Al-Mg-O et ont une taille le plus souvent inférieure à 20µm (voir Figure 2).

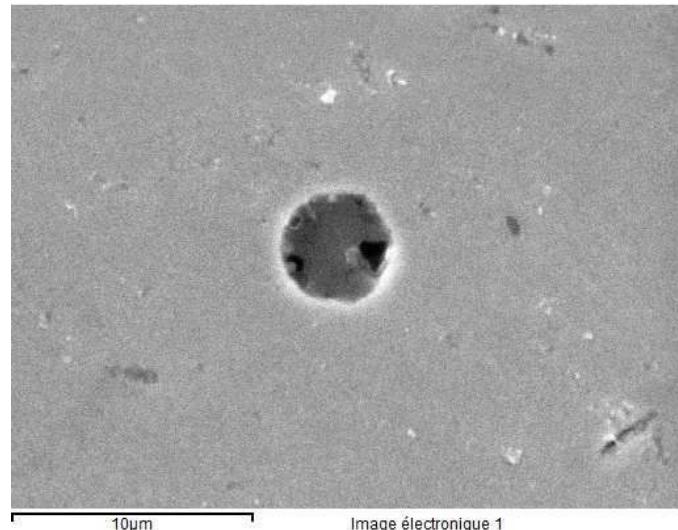


Figure 2 : Micrographie obtenue au microscope électronique à balayage : inclusion d'aluminate de chaux dans un acier élaboré au LGPM

1.1.3 Le procédé de traitement en poche des aciers

Un procédé pluridisciplinaire et multi-échelle

Le traitement en cuve de l'acier se situe juste avant la coulée de l'acier. C'est un réacteur métallurgique triphasique complexe dont un schéma est présenté Figure 3.

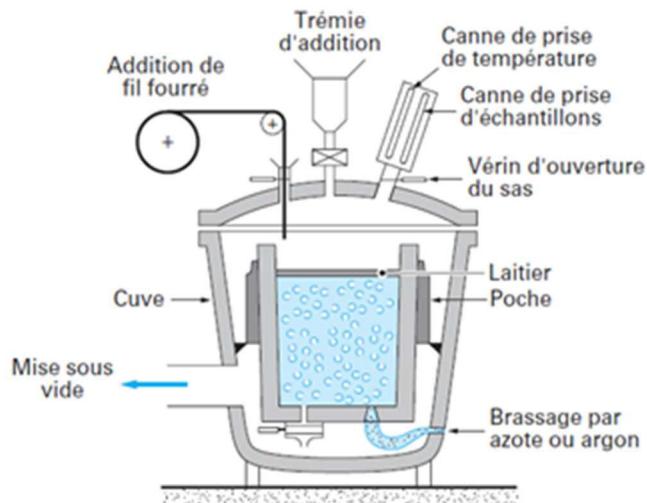


Figure 3 : Schéma du procédé de traitement en poche sous vide des aciers³

La poche est remplie de métal liquide au-dessus duquel surnage un mélange d'oxydes moins dense nommé laitier. Un système de mise sous vide et des capteurs de température et de composition chimique permettent de contrôler les conditions à l'intérieur de la poche, siège des réactions métallurgiques. Une rectification de la nuance du métal liquide peut aussi être effectuée par l'ajout d'éléments grâce à une trémie d'addition ou par l'intermédiaire de fils fourrés qui sont guidés directement dans le bain de métal.

L'homogénéisation et le brassage du métal liquide sont assurés par la présence d'un (ou de plusieurs) bouchons poreux situés au fond de la poche du réacteur. Un gaz neutre (type argon ou azote) est injecté à travers les bouchons poreux dans le bain de métal liquide et génère des bulles de gaz au sein

du métal liquide. En remontant à la surface du bain, les bulles produisent une agitation mécanique importante qui crée un écoulement turbulent liquide/bulles. Les inclusions se forment dans le bain de métal liquide et sont transportées du cœur du réacteur à l'interface métal liquide/laitier par les structures turbulentes présentes dans le mélange bulles/liquide.

Par sa complexité, le traitement en poche des aciers se situe à l'intersection de plusieurs disciplines scientifiques qui se retrouvent couplées entre elles à des échelles parfois très différentes. L'échelle macroscopique du réacteur (de l'ordre du mètre) peut être mise en regard avec l'échelle de la bulle de gaz (où se déroulent des phénomènes de coalescence, croissance et fragmentation) ou encore avec l'échelle de l'inclusion (où se déroulent la germination, la croissance et la capture aux interfaces). Du point de vue des disciplines mises en jeu, les caractéristiques thermodynamiques du système métal/laitier/inclusions impactent fortement la nature chimique, la densité numérique, la morphologie et la distribution en taille des inclusions formées. Or, la connaissance de l'état d'équilibre thermodynamique complet et des cinétiques de formation/réaction aux températures élevées de travail du réacteur est nécessaire mais non suffisante pour prédire l'équilibre local en tout point du bain. En effet, celui-ci peut, (par effet de ségrégation, de proximité d'une surface de réfractaire...), être très différent en composition, température et concentration d'inclusions que la moyenne du réacteur. De plus, le transfert de matière à l'interface métal liquide/laitier peut aussi induire une baisse locale de la concentration en certains éléments.

La problématique d'homogénéité du réacteur, notamment du point de vue de la dispersion inclusionnaire, nécessite la connaissance fine de l'écoulement complexe au sein du réacteur. Or, l'écoulement du système triphasique métal liquide/inclusions/bulles dépend notamment du mouvement des bulles de gaz, leur distribution en taille et leur concentration. À débit important d'argon, les bulles vont être à l'origine du brassage de la cuve. Le panache turbulent des bulles doit donc être décrit à l'échelle du réacteur tandis que les interactions avec les inclusions se déroulent à l'échelle de celles-ci.

On comprend que la description de l'écoulement dans le but d'étudier la dispersion des inclusions est un problème complexe puisque le mouvement des inclusions dispersées dans le bain de métal liquide est conditionné par les interactions multiples avec les bulles de gaz, les parois du réacteur et le laitier de couverture, ainsi qu'avec les inclusions elles-mêmes (collision, agglomération). Ces interactions dépendent en outre fortement de la physico-chimie des interfaces mises en jeu (gaz/liquide/solide).

La modélisation du procédé²

Aujourd'hui, la description du traitement en poche des aciers passe par un cadrage thermodynamique et physico chimique du système à l'aide de travaux expérimentaux ou numériques qui peuvent ensuite être intégrés à des modèles de simulation des procédés. En effet, les hautes températures atteintes, les dimensions des dispositifs industriels et le couplage fort entre les mécanismes physico-chimiques mis en jeu ne permettent pas à des études uniquement expérimentales d'aboutir.

Par nécessité de simplification des modèles, du fait de la complexité des phénomènes et des besoins très importants en temps de calcul qui en découlent, la description détaillée de chaque mécanisme ne peut être implémentée dans un modèle complet à l'échelle du réacteur.

Pour cette raison, les différents phénomènes, bien que rarement additifs et découpés entre eux, sont souvent étudiés indépendamment les uns des autres avant d'être intégrés à des modèles globaux du réacteur comme ceux qui seront cités ci-dessous. Dans ces modèles, les particules sont généralement supposées sphériques, les interfaces planes et la captation des inclusions par les parois ne fait appel qu'aux caractéristiques de la phase porteuse...

La résolution de l'écoulement au sein du réacteur a été l'objet des premières simulations avant que, pour des besoins inhérents à l'optimisation du procédé, ne soit intégré rapidement le suivi des inclusions. On peut citer par exemple les modèles k- ϵ de Miki *et al.*⁴, Sheng *al.*⁵, et les travaux de Hallberg⁶. Dans ces travaux, la capture des inclusions aux parois réfractaires ou à l'interface avec le laitier est prise en compte, ainsi que la diffusion turbulente et brownienne des inclusions. Dans le modèle de Shang *et al.*⁵ l'interface métal liquide/laitier est assimilée à une surface libre et plane et la capture des inclusions au niveau de cette interface, des bulles (phénomène appelé «flottation») et des réfractaires est étudiée. La capture des inclusions par les bulles a été étudiée par Arai *et al.*⁷ tandis que

l'influence de la forme des bulles et du taux de vide sur la capture des inclusions par les bulles a été mise en évidence par Bonometti *et al.*⁸.

En plus des études relatives à l'écoulement, d'autres axes de recherche se sont orientés vers la problématique de la germination des inclusions ainsi que de l'évolution de leur composition au sein du réacteur. Un bilan de population des inclusions au cours du temps a été effectué à l'aide de la méthode des classes et de la méthode de quadrature des moments par Daoud *et al.*⁹.

La liste des publications ci-dessus est loin d'être exhaustive. Pour plus d'informations on pourra se référer par exemple aux deux articles de synthèse publiés par Mazumdar et Guthrie¹⁰ et par Jönsson et Jonsson¹¹.

Aujourd'hui, la validation des modèles complets reste difficilement faisable directement, expérimentalement, sur le procédé et on suppose donc que les simplifications introduites, nécessaires à la mise en place du modèle complet, n'influence que peu le résultat, notamment pour le transfert et la capture des inclusions. Toutefois, la compréhension des mécanismes de transfert aux petites échelles reste importante pour pouvoir proposer les modèles de transfert les plus justes possibles. Au niveau du transport des inclusions, une des difficultés est liée à la différence d'échelle entre le transport des inclusions dans le bain qui est macroscopique et les interactions à petites échelles avec une interface (la paroi réfractaire, l'interface métal liquide/laitier, une bulle de gaz ou encore une autre inclusion). De ce fait, la mise en place de modèles globaux doit être effectuée en parallèle de l'étude des mécanismes élémentaires pouvant avoir lieu au sein du réacteur. Dans ce mémoire, nous nous sommes focalisés sur ce dernier axe d'étude.

1.2 Projet CIREM²

Du fait de la pluridisciplinarité du problème, l'étude du traitement en poche des aciers nécessite donc un recours à des compétences très différentes. C'est pourquoi, un projet interdisciplinaire, inter-entreprises et laboratoires, soutenu par l'Agence Nationale de la Recherche, a été mis en place et baptisé CIREM. D'une durée de 48 mois, ce projet de collaboration rassemble 3 partenaires industriels et 4 partenaires académiques dans le but de mettre au point, entre autre, un outil de simulation numérique du procédé qui puisse aider à :

- maîtriser la propreté inclusionnaire globale via la réduction de la densité numérale et de la taille des inclusions ou, dans certains cas, via la maîtrise de leurs caractéristiques physico-chimiques,
- comprendre les mécanismes de germination et d'élimination des inclusions endogènes des alliages métalliques,
- identifier les paramètres opératoires clefs du traitement en poche influant sur la propreté inclusionnaire.

Le projet CIREM a été mis en place pour permettre l'étude du procédé en menant parallèlement des études théoriques fondamentales, des simulations numériques et des travaux expérimentaux à l'échelle laboratoire et industrielle. Par exemple, pour alimenter le modèle numérique, des études théoriques portant sur l'identification des phases thermodynamiquement stables ont été effectuées. Elles ont été couplées à des études expérimentales en laboratoire de maintien et de trempe ainsi qu'à des comparaisons avec des prélevements effectués directement en usine.

L'aspect multi-échelle du problème n'a pas été négligé puisqu'une partie des travaux s'est focalisée principalement sur les phénomènes macroscopiques se déroulant à l'échelle du réacteur, tandis que d'autres se sont intéressés aux phénomènes interfaciaux.

Le projet a ainsi été dirigé par le Laboratoire de Science et Génie des Matériaux et de Métallurgie (LSG2M) de l'École des Mines de Nancy. Le laboratoire ayant une compétence forte dans la modélisation et la simulation des procédés de traitement du métal liquide, ils ont étudié l'hydrodynamique de la poche avant de développer et exploiter le modèle numérique à l'échelle du

réacteur. Le modèle numérique du réacteur complet constitue de fait le principal livrable du projet CIREM.

Ce modèle a pu être conforté par les études à la même échelle effectuées en usine par Aubert & Duval et Ascométal. Aubert & Duval élabore des aciers spéciaux principalement pour des domaines critiques comme l'aéronautique ou le biomédical ; dans ces domaines le contrôle des caractéristiques physiques des aciers est primordial et nécessite donc une connaissance fine des procédés. Ascométal, producteur d'aciers spéciaux pour l'automobile, est soumis lui aussi à ce type de problématique du fait entre autres, de l'évolution des normes européennes anti-pollution. Ils ont donc pu apporter leurs expériences sur les conditions opératoires et effectuer des campagnes de prélèvement et de caractérisation des inclusions. À la même échelle, c'est-à-dire celle du réacteur, l'étude de méthodes numériques pour la modélisation du comportement de la population des inclusions a été entreprise par le Laboratoire d'Énergétique et de Mécanique Théorique et Appliquée (LEMTA) de l'École supérieure des sciences et technologies de l'ingénieur de Nancy.

Arcelor, producteur mondial d'acier au carbone, a mené dans le cadre du projet CIREM des études aux deux échelles en effectuant des calculs thermodynamiques à l'échelle du réacteur et la modélisation de l'interface métal liquide/laitier et des interactions entre les bulles et les inclusions.

Ces interactions ont été expérimentalement étudiées par le Centre Sciences des Processus Industriels et Naturels (SPIN) de l'École des Mines de Saint Etienne qui possède des compétences dans la physico-chimie des processus d'agrégation et de sédimentation.

Enfin, et c'est dans ce cadre que se situe ce travail, le Laboratoire de Génie des Procédés et Matériaux (LGPM) de l'École Centrale Paris, s'est intéressé principalement au comportement inclusionnaire près de l'interface, via la mise au point d'une maquette froide pour étudier le comportement de particules à l'interface entre deux fluides immiscibles et aussi via la simulation numérique directe du comportement d'inclusions à proximité de l'interface métal liquide/laitier. Les travaux du LGPM ont été définis afin de déterminer une loi de dépôt des inclusions à l'interface métal liquide/laitier qui puisse être intégrée dans le modèle numérique du LSG2M.

L'ensemble des travaux du projet CIREM a été effectué à travers des échanges collaboratifs constructifs entre les différents partenaires. Le LGPM pour sa part, s'est appuyé, entre autres, sur les données du LSG2M, du LEMTA et du SPIN.

1.3 Démarche adoptée dans cette étude

Ce travail de thèse se focalise sur le transport turbulent et le dépôt des inclusions à l'interface métal liquide/laitier en examinant en particulier l'effet des interactions hydrodynamiques entre les inclusions et l'interface sur leur capture. Les objectifs de cette étude sont de (i) modéliser et simuler à l'échelle interfaciale le transport et le dépôt des inclusions (ii) quantifier les mécanismes de dépôt (iii) déterminer le flux d'inclusions déposées qui sera intégré sous forme de condition à la limite à l'interface métal liquide/laitier dans le modèle macroscopique de la poche de traitement, (iv) quantifier l'influence des paramètres physiques des inclusions et du métal liquide (densité et diamètre des inclusions, densité du fluide) ainsi que des paramètres de l'écoulement (nombre de Reynolds, structures turbulentes) sur le flux d'inclusions capturées au niveau du laitier.

Pour construire notre démarche, nous nous sommes appuyés sur la littérature abondante qui traite du dépôt de particules solides en suspension dans un gaz en l'adaptant à notre problématique.

1.3.1 Aérosols et hydrosols

Dans le cadre du traitement en poche des aciers, les inclusions sont en suspension dans un fluide constitué du métal liquide. De fait, ce système est appelé hydrosol et l'on nomme aérosol les systèmes dans lesquels les particules sont en suspension dans un gaz. Historiquement, la plupart des études de la littérature s'intéresse plutôt aux aérosols, ce qui induit donc nécessairement des différences importantes par rapport à notre situation. Des principales différences, on peut citer les

écart de densités importants qui existent entre une particule et un gaz (la particule est souvent 1000 fois plus dense que le gaz) à mettre en regard avec les densités du métal liquide et des inclusions qui sont du même ordre de grandeur. De même, les viscosités des gaz et des liquides sont très différentes.

On rapporte ici un court aperçu des études ayant pu être effectuées sur les aérosols. Cette bibliographie sera complétée dans les différents chapitres de ce mémoire. Dans le cadre des aérosols, les premières études expérimentales ont été entreprises très tôt, notamment par Liu et Agarval¹² ou par Kvasnak *et al.*¹³ tandis que les mécanismes de capture des particules sur une paroi solide ont été étudiés par Friedlander *et al.*¹⁴ ou Owen¹⁵.

Des modélisations analytiques du phénomène de dépôt de particules mettant en jeu les caractéristiques de l'écoulement turbulent le long de la paroi ont été mises au point par différents auteurs (Wood¹⁶, Davies¹⁷, Cleaver et Yates¹⁸) et elles ont été complétées au fil du temps par de nombreuses simulations numériques (Brooke *et al.*¹⁹, Narayanan *et al.*²⁰).

L'identification de grandeurs statistiques liant les caractéristiques de l'écoulement porteur à la dispersion des particules a été effectuée par Csanady²¹ et Simonin²². Squires et Eaton²³ ou Marchioli *et al.*²⁴ ont de leur côté mis en évidence une concentration préférentielle de certaines particules dans différentes zones de l'écoulement. D'autres études, portant sur le déplacement d'aérosols dans des canaux ont aussi été entreprises, notamment par Brooke *et al.*¹⁹ pour l'identification des structures turbulentes influant sur le dépôt des particules, et par Arcen, Tanière et Oesterlé²⁵ pour l'étude des forces agissant à proximité de la surface de dépôt.

Du fait du nombre important d'articles portant sur les aérosols, l'étude de l'hydrosol sera menée ici à travers le regard et les réflexions présentées au cours du temps par différents auteurs sur les aérosols. Le travail effectué sur les aérosols peut en effet être adapté, moyennant quelques modifications et précautions, à la problématique des hydrosols. En outre, même si généralement les particules d'aérosols sont beaucoup plus denses que le gaz porteur, des simulations numériques s'intéressant aux cas de particules de densité très proches du fluide (et donc finalement très proches de notre situation de travail), ont aussi été réalisées notamment par Pan et Banerjee²⁶.

1.3.2 Notre approche

Le but de cette étude est de pouvoir identifier les caractéristiques locales de l'écoulement et les mécanismes mésoscopiques qui contrôlent le dépôt des particules. Pour cela, nous avons choisi de coupler un suivi lagrangien des particules en suspension (c'est-à-dire un suivi de chaque particule individuellement) à une modélisation et une résolution de l'écoulement porteur fluide, à travers deux configurations distinctes.

La première configuration est constituée d'une paroi solide le long de laquelle l'écoulement du fluide est modélisé par un écoulement figé décrit analytiquement. L'écoulement est modélisé par une approximation des structures turbulentes qui, régulièrement, se créent et disparaissent le long d'une paroi solide soumise à un écoulement turbulent. Le modèle stationnaire de l'écoulement a été mis au point par différents auteurs justement pour l'étude du dépôt d'aérosols. La vitesse de dépôt des particules sur la paroi est estimée ensuite à l'aide de la méthode dite de la « trajectoire limite ». Outre la rapidité de temps de calcul, ce modèle présente l'avantage d'être un outil performant pour le développement du suivi lagrangien des particules. Il permet notamment d'identifier les différentes forces hydrodynamiques influençant la vitesse de dépôt des particules.

La deuxième configuration est un système dans lequel la particule se dépose sur une surface libre, indéformable. L'écoulement est résolu par simulation numérique directe de la turbulence qui résout l'ensemble des échelles turbulentes de l'écoulement et, contrairement au cas précédent, est instationnaire. Beaucoup plus précise (on nomme parfois ces simulations des « expériences numériques du fait de la précision de la résolution de l'écoulement du fluide porteur»), cette méthode est donc aussi beaucoup plus coûteuse en temps de calcul. Les propriétés physiques de l'écoulement et les interactions avec les particules calculées prennent en compte l'évolution temporelle du système, ce qui nécessite un cumul important des données pour pouvoir calculer les grandeurs statistiques de l'écoulement et de la phase dispersé. La vitesse de dépôt des particules est évaluée par le calcul du flux

déposé de particules au cours du temps. Contrairement à la première configuration, le suivi lagrangien nécessite ici le suivi d'un nombre très important de particules à la fois.

Cette deuxième étude a été possible grâce à la collaboration entre le LGPM et le Département aérodynamique, énergétique et propulsion (DAEP) de l'Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace à Toulouse. Elle a été effectuée à partir d'un code de simulation numérique directe de la turbulence développé par Campagne²⁷ lors de sa thèse de doctorat.

1.3.3 Organisation du mémoire

Enfin, ce paragraphe a pour but de donner le plan du mémoire qui sera divisé en trois chapitres et de donner brièvement une idée du contenu de chaque chapitre.

Dans le premier chapitre, nous présenterons un certain nombre de notions transverses qui permettent la compréhension générale du mémoire, à savoir les définitions de grandeurs clés qui permettent de décrire les phénomènes turbulents et les interactions fluide/particules, la présentation de l'équation de l'écoulement de la phase fluide et des forces mises en jeu dans les équations du mouvement de la phase dispersée. Les mécanismes généraux contrôlant la capture des particules sur une interface seront aussi présentés.

Dans le deuxième chapitre, on s'intéresse au dépôt des particules sur une paroi solide. Dans un premier temps, une étude de dépôt d'aérosols sera présentée et comparée à la littérature. Ensuite, une étude paramétrique du dépôt des hydrosols sera exposée. Elle s'intéressera à la hiérarchisation des forces mises en jeu dans le dépôt des particules ainsi qu'à l'identification des mécanismes de dépôt des hydrosols au niveau de la paroi solide. Les effets de la lubrification seront notamment étudiés. Une comparaison entre la vitesse de dépôt obtenue numériquement sera comparée avec deux modèles de la littérature (Davies¹⁷ et Hallberg⁶) dans l'optique de dériver un modèle de dépôt sur une paroi solide valable pour les hydrosols.

Dans le dernier chapitre, on présente les résultats relatifs au dépôt des particules sur une interface libre, indéformable. Une présentation des principales caractéristiques de l'écoulement fluide sera effectuée ainsi qu'une étude paramétrique du dépôt des particules. Les particules fluides pouvant être simulées à l'aide de traceurs fluides, elles serviront de point de comparaisons au comportement des particules « réelles » soumises aux effets de la sédimentation. Les effets de la lubrification et l'importance des différentes forces par rapport à la force de traînée du fluide sur la particule seront présentés. Enfin, un modèle de vitesse de dépôt des particules en fonction des caractéristiques de l'écoulement et des caractéristiques des particules sera présenté.

Chapitre 2

Équations de transport et mécanismes de dépôt

Dans ce chapitre, nous introduisons tout d'abord les différentes échelles associées au transport particulaire turbulent. Nous présentons ensuite les équations décrivant l'écoulement de la phase porteuse fluide puis celles associées à la phase dispersée particulaire. Nous explicitons entre autres les différentes forces subies par une particule en suspension. Enfin, nous exposons les mécanismes à l'origine du dépôt de particules sur une surface.

2.1 Couplage fluide/particule

Le taux d'occupation de la phase fluide par les particules peut être défini à l'aide de la fraction volumique α_p en inclusions :

$$\alpha_p = \frac{\sum_i n_i V_i}{V} \quad (2.1)$$

où n_i est le nombre d'inclusions de volume V_i présentes dans le volume V de la phase fluide.

Lorsque la phase dispersée est diluée (*i.e.* concentration des particules très faible), on peut supposer que la présence des particules n'influe pas sur l'écoulement de la phase fluide. Dans ce cas-là, on peut résoudre l'écoulement du fluide comme s'il n'était pas chargé en particules et utiliser les caractéristiques de l'écoulement pour calculer le déplacement des particules tout en négligeant les collisions entre particules. On parle alors de couplage *one-way*.

Quand la concentration de la phase dispersée n'est pas négligeable, on parle alors de couplage *two-way* et on étudie l'influence des particules sur l'écoulement de la phase porteuse en introduisant un terme source dans les équations de la phase fluide. L'influence des particules sur l'écoulement moyen ainsi que sur les caractéristiques de la turbulence est alors considérée. Lorsque l'on prend en compte la modification du champ fluide induite par la présence des particules, la vitesse du fluide nouvellement calculée est appelée vitesse du fluide perturbée (par la présence de la particule). *A contrario*, la vitesse du fluide non perturbée est donc la vitesse hypothétique du fluide que l'on aurait si l'écoulement n'était pas chargé de particules solides ou liquides.

Lorsqu'en plus de l'influence de la phase dispersée sur la phase porteuse les collisions inter-particulaires sont considérées, on parle alors de couplage *four-way*. Les fractions volumiques de la phase dispersée nécessitant un couplage *four-way* sont généralement supérieures à 10^{-3} . On peut résumer les différents modes de couplage dans le Tableau 1.

α_p	$10^{-8} \text{ à } 10^{-6}$	$10^{-6} \text{ à } 10^{-3}$	$> 10^{-3}$
Phase dispersée	Diluée	Diluée	Dense
Couplage à envisager	<i>one-way</i>	<i>two-way</i>	<i>four-way</i>
Interactions	<ul style="list-style-type: none"> ➤ Fluide sur les particules 	<ul style="list-style-type: none"> ➤ Fluide sur les particules ➤ Particules sur l'écoulement du fluide 	<ul style="list-style-type: none"> ➤ Fluide sur les particules ➤ Particules sur l'écoulement du fluide ➤ Particules entre elles

Tableau 1 : Couplage à envisager selon la teneur en particules dans le fluide

Le tableau précédent est donné à titre indicatif, une évaluation fine selon les conditions expérimentales est nécessaire pour connaître l'importance des interactions entre les particules et le fluide porteur. Dans le cadre du traitement en poche des aciers qui nous intéresse, la fraction volumique des inclusions est inférieure à $5 \cdot 10^{-5}$. En général, on suppose qu'un couplage *one-way* est correct jusqu'à une fraction volumique de l'ordre de 10^{-6} . Nous sommes donc au-dessus de ce critère dans le cas du traitement en poche des aciers. Cependant, les inclusions étant capturées au cours du temps dans le procédé, nous supposerons que leur concentration baisse suffisamment et qu'elles n'influencent donc pas l'écoulement de métal porteur.

2.2 Différentes échelles de temps et d'espace

2.2.1 L'écoulement porteur

2.2.1.1 Régime turbulent et nombre de Reynolds conventionnel

On étudie dans ce mémoire des écoulements en régime turbulent. Pour cela, nous introduisons ici différentes échelles de longueur et de temps relatives à ce régime.

Un écoulement est dit turbulent lorsque son champ de vitesse varie constamment au cours du temps à l'opposé d'un écoulement laminaire dans lequel l'écoulement présente un caractère régulier dans le temps. Le passage entre un régime d'écoulement laminaire et un régime d'écoulement turbulent a lieu lorsque l'énergie introduite dans le système est telle que les forces d'inertie associées au mouvement du fluide sont beaucoup plus élevées que les forces visqueuses qui s'opposent à son écoulement.

Les écoulements turbulents sont caractérisés par une apparence très désordonnée et une évolution temporelle fortement stochastique. Ils sont fortement dissipatifs et ont besoin d'une source importante d'énergie pour se maintenir. Si aucune énergie n'est injectée dans le système, le régime turbulent disparaît rapidement et laisse place à un écoulement laminaire. L'intensité d'un écoulement turbulent peut être caractérisée entre autres par le nombre de Reynolds qui représente le rapport des forces d'inertie aux forces visqueuses. D'une manière générale il est défini par

$$Re = \frac{v_{ref} l_{ref}}{\nu} \quad (2.2)$$

où v_{ref} et l_{ref} sont respectivement une vitesse et une longueur caractéristiques, et ν est la viscosité cinématique de la phase fluide. Le nombre de Reynolds permet d'identifier le passage du régime laminaire au régime turbulent.

Ainsi, dans le cas d'un écoulement de vitesse de débit U_D dans une conduite cylindrique de diamètre D , on peut écrire un nombre de Reynolds sous la forme :

$$Re_D = \frac{U_D D}{\nu} \quad (2.3)$$

Généralement on considère que le passage au régime turbulent est effectif lorsque le nombre de Reynolds Re_D ainsi défini est supérieur à 2000 – 2500. Cependant, ce seuil peut varier suivant les

caractéristiques des parois (lisses ou rugueuses), la présence de vibrations extérieures ou l'uniformité de l'écoulement d'alimentation²⁸.

2.2.1.2 Échelles des tourbillons

Le choix des échelles de référence d'un écoulement turbulent est difficile car, comme nous le verrons, les structures turbulentes d'un écoulement sont réparties sur une large gamme d'échelle spatiale, or une longueur et un temps caractéristiques peuvent être associés à chaque famille de tourbillons. En nous appuyant sur le livre de Comte-Bellot et Bailly²⁸, nous présentons ci-dessous les échelles que l'on peut définir dans tout écoulement turbulent, puis celles associées à la présence d'une interface libre ou solide.

Échelle des plus grandes structures de la turbulence :

La taille des plus gros tourbillons qui peuvent se former à l'intérieur d'un écoulement est limitée, par exemple dans le cas d'un écoulement en canal, par le diamètre de celui-ci. Cette dimension maximale d'un tourbillon définit une première échelle que l'on nomme échelle intégrale de la turbulence. On notera l cette échelle intégrale. On peut alors définir un nombre de Reynolds turbulent pour les grosses structures de la turbulence, à l'aide de l'échelle intégrale et de la fluctuation quadratique u'^2 de la vitesse du fluide, qui est la moyenne du carré des fluctuations du fluide (plus d'information sur ces notations figurent dans le chapitre 4). En turbulence homogène, on a $u'^2_{fluc} = \overline{u'^2_f} = \overline{v'^2_f} = \overline{w'^2_f}$ ce qui donne :

$$Re_l = \frac{l \sqrt{u'^2_{fluc}}}{\nu} \quad (2.4)$$

L'énergie cinétique moyenne du champ fluctuant \bar{k} est couramment appelée énergie cinétique turbulente moyenne et elle est calculée à l'aide de la relation suivante :

$$\bar{k} = \frac{\overline{u'^2_f} + \overline{v'^2_f} + \overline{w'^2_f}}{2} \quad (2.5)$$

En turbulence isotrope, le nombre de Reynolds associé aux grosses structures de la turbulence peut donc se réécrire : $Re_l = 2l\sqrt{\bar{k}}/3\nu$.

Lorsque la longueur intégrale de deux écoulements turbulents est la même mais que leur nombre de Reynolds est différent, cela se traduit par une taille différente des plus petits tourbillons qui se forment au sein de l'écoulement. Plus le nombre de Reynolds est élevé, plus la taille des plus petits tourbillons sera petite. L'échelle de longueur des plus petits tourbillons d'un écoulement se nomme longueur de Kolmogorov et sera notée η .

Échelle des plus petites structures de la turbulence :

Le lien entre la longueur intégrale et la longueur de Kolmogorov est très fort et est mis en avant dans une théorie formulée par Kolmogorov pour décrire la turbulence aux petites échelles de la turbulence. Dans cette théorie, les gros tourbillons, porteurs de l'énergie cinétique introduite dans le système, transmettent une grande partie de cette énergie directement aux structures de tailles intermédiaires qui elles-mêmes la transmettent à des tourbillons plus petits : la dissipation de l'énergie est seulement effectuée à l'échelle des tourbillons les plus petits. L'échelle des plus petits tourbillons est donc aussi l'échelle de la dissipation de l'énergie finale. C'est ce que l'on nomme la cascade d'énergie.

Le taux de dissipation ε de l'énergie cinétique turbulente \bar{k} se calcule par définition à l'aide de l'équation :

$$\rho_f \varepsilon = \mu \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \quad (2.6)$$

où les indices répétés sont des indices sommés, μ est la viscosité dynamique du fluide et ρ_f sa masse volumique.

Lorsque le nombre de Reynolds est élevé, on calcule la dissipation ε à l'aide de la pseudo-dissipation ε_p (en turbulence homogène la pseudo-dissipation est la valeur exacte de la dissipation)

$$\varepsilon \approx \varepsilon_p = \frac{\mu}{\rho_f} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \quad (2.7)$$

La dissipation de l'énergie cinétique au niveau des tourbillons de Kolmogorov a lieu par dissipation visqueuse moléculaire et les échelles de longueurs η et de temps τ_η permettant de décrire ces tourbillons mettent en jeu la viscosité cinématique ν du fluide et le taux de dissipation turbulent de l'écoulement ε :

$$\begin{aligned} \eta &= \nu^{3/4} \varepsilon^{-1/4} \\ \tau_\eta &= \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (2.8)$$

On peut par la suite construire une vitesse de Kolmogorov $v_\eta = (\nu \varepsilon)^{1/4}$ et si l'on forme le nombre de Reynolds à partir des échelles de Kolmogorov on obtient :

$$Re_\eta = \frac{\eta v_\eta}{\nu} \sim 1 \quad (2.9)$$

ce qui est cohérent avec le fait que l'énergie transmise aux plus petits tourbillons est directement dissipée par les forces visqueuses.

Échelles intermédiaires :

On note qu'il existe aussi une échelle de longueur associée au pic du spectre du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente, cette échelle se nomme micro échelle de Taylor et sa taille est comprise entre l'échelle intégrale et l'échelle de Kolmogorov.

Si l'on présente les différentes longueurs de la turbulence sur le même axe, on a ainsi :

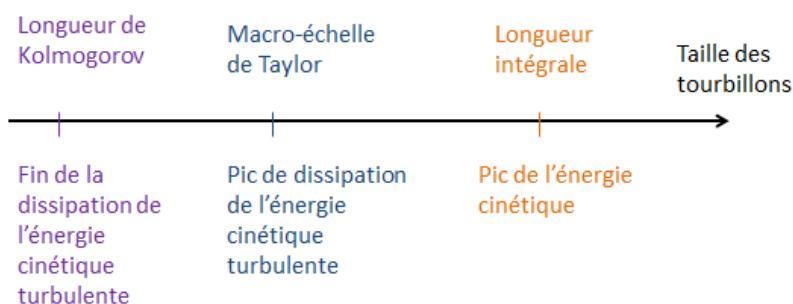


Figure 4 : Échelles de longueur associées à la turbulence

De façon générale, quelle que soit l'échelle de longueur (différente de η) avec laquelle le Reynolds est construit, plus l'intensité de l'écoulement turbulent est élevée, plus le nombre de Reynolds est élevé et plus la séparation d'échelle entre η et l est grande.

2.2.1.3 Unités de paroi

Lorsqu'une paroi solide ou une interface libre délimite le domaine fluide, l'écoulement du fluide est différent de celui qu'il aurait par rapport à un écoulement libre et deux cas de figure se présentent :

- soit la turbulence est générée près de la paroi via le cisaillement du fluide induit par la vitesse moyenne de débit du fluide
- soit la turbulence est générée loin de la paroi dans le cœur de l'écoulement (par exemple par agitation d'un mobile) et elle s'amortit à proximité de la surface de blocage.

Dans ce mémoire, nous allons nous intéresser à ces deux types de régime, c'est pourquoi il est utile de définir ici les échelles associées à l'écoulement dans ces configurations.

On trouve dans la littérature un certain nombre d'études portant sur un écoulement situé entre deux surfaces parallèles, configuration communément appelé écoulement en canal. Dans ces écoulements, si les deux surfaces sont des parois solides, la turbulence est générée sur chacune des deux parois^{29,30}. Par contre, lorsque l'une des surfaces est une surface libre (configuration d'un canal ouvert), la turbulence est générée par cisaillement sur la paroi solide avant de diffuser vers la surface libre^{26,31}.

Les caractéristiques de l'écoulement turbulent et notamment la structure des phénomènes turbulents sont différents de ceux en écoulement complètement libre. On nomme couche de surface la zone de l'écoulement affectée par la présence d'une paroi solide ou d'une interface libre. Différentes échelles de longueur sont là encore présentes au sein même de la couche de surface car, comme cela sera approfondi dans les chapitres suivants, la couche de surface peut se subdiviser en un ensemble de différentes sous-couches.

Proche de la paroi solide, on peut définir la vitesse de frottement pariétale u_f du fluide qui, dans un écoulement en canal, met en jeu la contrainte moyenne τ_{paroi} (aussi appelé la contrainte de cisaillement pariétale), qui existe dans la direction de l'écoulement.

$$u_\tau = \sqrt{\tau_{paroi}/\rho_f} \quad (2.10)$$

Les échelles temporelles et spatiales associées à la vitesse de frottement sont :

$$\begin{cases} t_\tau = \frac{\nu}{u_\tau^2} \\ l_\tau = \frac{\nu}{u_\tau} \end{cases} \quad (2.11)$$

Lorsque l'on s'intéresse à une surface libre, la contrainte pariétale est nulle au niveau de la surface libre. Certains auteurs utilisent les échelles de la paroi solide inférieure pour décrire la couche de surface au niveau de la surface libre, d'autres remplacent la vitesse de paroi du fluide par la racine carré de l'énergie cinétique turbulente pour définir les échelles de référence au niveau de la surface libre du canal ouvert.

Dans notre cas, nous suivrons Campagne²⁷ et nous utiliserons l'adimensionnement de Kolmogorov où τ_η et η seront évalués au niveau de la surface libre.

2.2.2 Temps de relaxation de la particule et nombre de Stokes

Lorsque des particules sont en suspension dans un écoulement fluide, les interactions entre la phase fluide et la phase dispersée peuvent être caractérisées à l'aide de grandeurs comparant les échelles de l'écoulement aux échelles des particules.

Par exemple, lorsque le diamètre de la particule d_p est inférieur à l'échelle de Kolmogorov η , la particule est susceptible de suivre parfaitement toutes les fluctuations du fluide alors que si elle est plus grande que l'échelle de Kolmogorov, elle ne pourra être contenue dans les plus petites structures turbulentes et elle passera donc d'un gros tourbillon à un autre gros tourbillon³².

On notera ici $\mathbf{u}_p = (u_p, v_p, w_p)$ la vitesse de la particule et $\mathbf{u}_f = (u_f, v_f, w_f)$ la vitesse du fluide non perturbée à l'emplacement de la particule. Le terme non perturbé signifie que l'on considère la vitesse qu'aurait le fluide en l'absence de la particule. Dans notre cas, comme le couplage que l'on étudie est un couplage *one-way* où seule est prise en compte l'influence de l'écoulement sur la particule, \mathbf{u}_f est donc strictement égale à la vitesse du fluide à la position de la particule.

Nombre de Reynolds de la particule :

Un nombre de Reynolds Re_p associé à la particule en suspension dans l'écoulement peut être défini à partir du diamètre particulaire et de la vitesse relative entre la particule et le fluide porteur $\mathbf{u}_r = \mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p$

$$Re_p = \frac{||\mathbf{u}_r||d_p}{\nu} \quad (2.12)$$

Le nombre de Reynolds particulaire caractérise l'écoulement du fluide autour de la particule. Il dépend de la viscosité du fluide porteur qui permet au fluide d'imposer sa vitesse aux particules. Dans notre cas, nous verrons que le nombre de Reynolds particulaire est très inférieur à l'unité ce qui traduit un écoulement dit écoulement de Stokes autour de la particule.

Temps de relaxation de la particule :

Lorsque la vitesse du fluide porteur vue par les particules change soudainement (ce qui arrive fréquemment en écoulement turbulent), l'adaptation de la vitesse des particules à la nouvelle vitesse du fluide est caractérisée par un temps caractéristique dépendant des propriétés du fluide et de la particule. Ce temps caractéristique, appelé temps de relaxation τ_p , est grossièrement le temps nécessaire à la mise en mouvement d'une particule initialement au repos par un fluide supposé en mouvement uniforme et constant. Lorsque le nombre de Reynolds particulaire est faible et que la densité ρ_p de la particule est très élevée par rapport à la densité ρ_f du fluide, le temps de relaxation est égal à :

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu} \quad (2.13)$$

où μ est la viscosité dynamique du fluide $\mu = \nu \rho_f$

Lorsque la densité des particules et celle du fluide sont du même ordre de grandeur, il faut aussi prendre en compte dans le calcul du temps caractéristique les particules de fluide qui sont mises en mouvement par la particule en suspension dans le fluide. Le temps de relaxation devient :

$$\tau_p = \frac{(\rho_p + \frac{1}{2}\rho_f)d_p^2}{18\mu} \quad (2.14)$$

Nombre de Stokes de la particule :

Une comparaison entre le temps de relaxation de la particule et le temps caractéristique de l'écoulement peut être effectuée en calculant le rapport des deux quantités. Cela revient ainsi à adimensionner le temps de relaxation particulaire. Le choix de l'échelle temporelle du fluide à prendre en compte pour l'adimensionnement dépend de la situation dans laquelle se trouve la particule. Lorsqu'une particule est à proximité d'une paroi solide, on pourra prendre le temps caractéristique t_τ défini précédemment à l'aide des unités de paroi.

Le temps de relaxation ainsi adimensionné par l'échelle temporelle caractéristique de l'écoulement fluide est communément appelé le nombre de Stokes de la particule et on le note τ_p^+ . Lorsque le nombre de Stokes est très petit devant un, cela signifie que la particule a la capacité d'adapter sa vitesse à toutes les fluctuations du fluide qu'elle rencontre, tandis qu'un nombre de Stokes très grand devant l'unité va induire un retard et un décalage important entre la vitesse du fluide vu par la particule et la vitesse de la particule.

D'autres possibilités pour adimensionner le temps de relaxation particulaire peuvent être envisagées comme par exemple l'utilisation des échelles lagrangienne de décorrélation du fluide³³. Chaque adimensionnement va donner des nombres de Stokes aux valeurs numériques différentes, mais l'analyse du comportement des particules n'en souffre pas tant que l'analyse porte sur l'évolution du rapport du temps de relaxation au temps caractéristique de l'écoulement.

2.3 Phase porteuse : équation de Navier Stokes

Lorsqu'un fluide est isotherme et newtonien (*i.e.* : la relation entre la contrainte et le taux de déformation du fluide est linéaire et isotrope), l'équation de conservation de la quantité de mouvement peut s'écrire sous la forme simple des équations de Navier Stokes (en ne tenant pas compte de la viscosité en volume).

$$\rho_f \frac{d\mathbf{u}_f}{dt} = -\nabla p + \rho_f \mathbf{g} + \mu \nabla^2 \mathbf{u}_f + \frac{\mu}{3} \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}_f) \quad (2.15)$$

où p représente la pression du fluide.

De gauche à droite, cette équation relie l'accélération d'un élément fluide aux forces de pression, aux forces volumiques et aux forces visqueuses (les deux derniers termes).

Lorsque le fluide est incompressible, l'équation de conservation de la masse s'écrit

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_f = 0 \quad (2.16)$$

et l'équation de Navier Stokes devient :

$$\rho_f \frac{d\mathbf{u}_f}{dt} = \rho_f \left(\frac{\partial \mathbf{u}_f}{\partial t} + \mathbf{u}_f \cdot \nabla \mathbf{u}_f \right) = -\nabla p + \rho_f \mathbf{g} + \mu \nabla^2 \mathbf{u}_f \quad (2.17)$$

Les deux termes non linéaires de l'équation de Navier Stokes, qui sont les termes d'accélération convective $\mathbf{u}_f \cdot \nabla \mathbf{u}_f$ et le terme de pression, sont les sources de production des phénomènes turbulents. Le transport de matière, de chaleur ou de quantité de mouvement à travers un fluide est bien plus efficace lorsque l'écoulement du fluide porteur est en régime turbulent^{34,28}.

2.4 Suivi lagrangien : équation de la dynamique des particules

Le dépôt d'une particule sur une surface peut être décomposé en deux étapes. Tout d'abord le transport de la particule jusqu'à la proximité de la surface de dépôt, et ensuite le dépôt de la particule qui dépend notamment de l'interaction entre la surface de dépôt et la particule.

Nous présentons dans ce paragraphe les forces régissant le transport des particules et qui permettent de décrire le mouvement de celles-ci lorsque leur mouvement n'est pas sensible aux conditions aux limites du domaine. Cela revient à considérer des particules isolées qui n'interagissent ni directement, ni indirectement via le fluide porteur, avec l'interface (solide ou libre) et qui sont donc en suspension dans un domaine infiniment grand par rapport à leur taille. Ensuite nous présentons les modifications à apporter aux premières équations pour prendre en compte l'influence de la proximité d'une paroi solide ou d'une interface libre sur le mouvement des particules.

2.4.1 Équation de la dynamique de particules isolées dans un fluide infini

L'équation de la dynamique régissant le mouvement d'une particule a tout d'abord été établie pour une particule en suspension dans un fluide au repos par Basset, Boussinesq et Oseen. Différents auteurs, notamment Tchen et Maxey et Riley³⁵ ont travaillé à l'étendre au cas d'une particule en mouvement dans un fluide uniforme non stationnaire ainsi que dans un fluide stationnaire non-uniforme, dans le but d'obtenir une équation du mouvement applicable pour un fluide en régime turbulent.

Pour une particule sphérique de masse m_p et de vitesse \mathbf{u}_p , l'équation du mouvement fait intervenir trois forces résultantes : une résultante des forces volumiques \mathbf{F}_v , une résultante d'origine hydrodynamique \mathbf{F}_h et une résultante des forces surfaciques \mathbf{F}_s .

$$m_p \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \mathbf{F}_v + \mathbf{F}_h + \mathbf{F}_s \quad (2.18)$$

Nous détaillons ci-dessous les trois termes de droite en présentant les expressions généralement utilisées aujourd’hui lors de l’étude d’un fluide turbulent transportant une particule solide et sphérique de diamètre d_p petit devant l’échelle de Kolmogorov η (i.e. : $d_p \ll \eta$) ce qui permet de nous placer dans le cadre de forces ponctuelles. La description ci-dessous des forces est basée principalement sur le cours de Legendre³⁶ et les livres de Tien³⁷ et d’Oesterlé³³

2.4.2 Forces en volume

Dans le cas de particules en suspension dans un liquide, la force d’Archimède n’est en général pas négligeable devant le poids de la particule puisque la densité du fluide porteur est du même ordre de grandeur que celles des particules. La résultante des forces en volume s’écrit :

$$\mathbf{F}_v = \frac{\pi d_p^3}{6} (\rho_p - \rho_f) \cdot \mathbf{g} \quad (2.19)$$

où ρ_p et ρ_f sont les masses volumiques respectives de la particule et du fluide, et \mathbf{g} est l’accélération de la pesanteur.

2.4.3 Forces hydrodynamiques

2.4.3.1 Force de traînée

La force de traînée est la force la plus importante puisque c’est elle qui permet à des particules en suspension dans un fluide d’être entraînées par le mouvement de celui-ci. Lorsque l’on considère une particule qui se déplace dans un écoulement uniforme stationnaire, la force de traînée est égale à la résultante des forces (en excluant la poussée d’Archimède d’origine hydrostatique) exercée par le fluide sur la particule. Cette résultante est dirigée selon la vitesse relative $\mathbf{u}_r = \mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p$ et s’écrit en fonction d’un coefficient de traînée C_D , qui dépend des conditions hydrodynamiques caractérisées par Re_p dans lesquelles se trouve le fluide autour de la particule (avec \mathbf{u}_p , vitesse de la particule, \mathbf{u}_f , vitesse du fluide non perturbée calculée au centre de la particule).

$$\mathbf{F}_D = C_D (Re_p) \rho_f \frac{\pi d_p^2}{8} \cdot |\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p| (\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p) \quad (2.20)$$

La force de traînée découle du fait que la viscosité du fluide est non nulle. Pour une particule rigide isolée (éloignée de toute surface), lorsque le nombre de Reynolds particulaire Re_p est très inférieur à l’unité et que le fluide est newtonien et incompressible, on se trouve dans les conditions de Stokes pour lesquelles la force de traînée est linéaire et C_D s’écrit alors :

$$C_D = \frac{24}{Re_p} \quad (2.21)$$

Il faut noter que la force de traînée de Stokes est inférieure à la traînée réelle mais l’erreur alors effectuée reste en dessous de 1% lorsque Re_p est inférieur à 0,1. Pour un nombre de Reynolds particulaire égal à 1, l’erreur est de l’ordre de 10%³³. Nous supposerons que la force de traînée de Stokes est applicable dans notre cas et le vérifierons au cours des calculs.

L’adaptation de la vitesse d’une particule à une modification soudaine de la vitesse du fluide porteur se fait via la force de traînée et, comme nous l’avons vu précédemment, on peut la caractériser par le temps de relaxation de la particule τ_p . Lorsque l’équation de la dynamique ne met en jeu que la force de traînée quasi stationnaire de Stokes et la force inertielle, elle peut être réécrite en fonction de τ_p :

$$\frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \frac{(\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p)}{\tau_p} \quad (2.22)$$

2.4.3.2 Force de traînée au voisinage d'une interface

Lorsqu'une particule est en présence d'une interface liquide/solide ou liquide/fluide, la force de traînée qu'elle subit s'écarte de la force de traînée de Stokes. En effet, avant de pouvoir atteindre l'interface, la particule doit drainer le film de liquide qui l'en sépare ce qui la ralentit ; c'est le phénomène de lubrification. Cet effet est souvent négligé lors de l'étude des aérosols parce que les gaz sont généralement beaucoup moins visqueux que les liquides.

Goldman *et al*³⁸, Goren et O'Neill³⁹ et Happel et Brenner⁴⁰ dans leurs travaux rapportés par Tien³⁷, ont déterminé les corrections à introduire dans l'expression de la force de traînée pour prendre en compte les effets de la lubrification au voisinage d'une surface solide. Ces corrections, appelés coefficients de frottement f^i , dépendent de la direction du mouvement (perpendiculaire à l'interface \perp , ou tangent à celle-ci \parallel) et de la distance entre la particule et la surface δ :

$$\begin{cases} F_{D\parallel} = 3\pi\mu d_p (f_{\parallel}^2 \cdot u_{f\parallel} - f_{\parallel}^1 \cdot u_{p\parallel}) \\ F_{D\perp} = 3\pi\mu d_p (f_{\perp}^2 \cdot u_{f\perp} - f_{\perp}^1 \cdot u_{p\perp}) \end{cases} \quad (2.23)$$

Ces coefficients sont calculés à partir d'une décomposition de la vitesse du fluide en trois composantes : une composante \mathbf{u}^t issue de la modification de la vitesse du fluide due à la translation de la particule, une composante \mathbf{u}^r due à la rotation de la particule et une dernière \mathbf{u}^m due à la présence de la particule de telle sorte que :

$$\mathbf{u}_f = \mathbf{u}^t + \mathbf{u}^r + \mathbf{u}^m \quad (2.24)$$

Ainsi, la modification de la force de traînée selon Goldman *et al.*³⁸, Goren et O'Neill³⁹ et Happel et Brenner⁴⁰ prend en compte ces trois effets supposés ici être additifs. Dans cette étude on conserve uniquement les deux termes \mathbf{u}^t et \mathbf{u}^m ce qui revient à négliger, comme c'est souvent le cas^{41,42}, la rotation de la particule.

Les coefficients de frottement calculés par Goldman *et al.*³⁸, Goren et O'Neill³⁹ et Happel et Brenner⁴⁰ sont rapportés en Annexe 1. Ces coefficients ont été calculés pour différentes valeurs de la distance particule-paroi, nous effectuerons une interpolation linéaire pour l'estimation des coefficients à des distances intermédiaires.

Se basant sur la même démarche que Goldman *et al.*³⁸, Goren et O'Neill³⁹ et Happel et Brenner⁴⁰, Nguyen *et al.*^{42,43,44} ont déterminé les expressions analytiques exactes des coefficients de frottement pour une particule s'approchant d'une surface libre, en l'occurrence la surface d'une bulle de gaz. Ils donnent également des approximants que l'on utilise ici. Dans la limite des grands rayons de courbure de la bulle de gaz, on peut réécrire les approximants de Nguyen *et al.* sous la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} f_{\perp}^1 = \left[1 + \left(\frac{d_p}{8\delta^+} \right)^{0,719} \right]^{1/0,719} \\ f_{\perp}^2 = \frac{1,707 + \delta^+}{0,836 + \delta^+} \\ f_{\parallel}^1 = \frac{1,106 + \delta^+}{1,501 + \delta^+} \\ f_{\parallel}^2 = \frac{u_0 \frac{1,107 + \delta^+}{1,502 + \delta^+} + u_1 \frac{3,676 + \delta^+}{4,304 + \delta^+} + u_2 \frac{0,166 + \delta^+}{0,136 + \delta^+}}{u_0 + u_1 + u_2} \end{array} \right. \quad (2.25)$$

où δ est la distance entre la surface de la particule et la surface de capture. Les notations sont précisées Figure 5. Nous noterons ξ le terme $\delta + 0,5d_p$. La particule entre en contact avec la surface libre lorsque la condition $\xi - 0,5d_p = 0$ est satisfaite. On peut adimensionner δ par le diamètre de la particule : $\delta^+ = 2\delta/d_p$. u_0, u_1, u_2 forment une décomposition des composantes de la vitesse du fluide

tangente à la surface ($u_{||} = u_0 + u_1 + u_2$) dans laquelle on a respectivement le terme uniforme u_0 , le terme linéaire $u_1 \propto \xi$ et le terme parabolique $u_2 \propto \xi^2$ de la décomposition de la vitesse $u_{||}$.

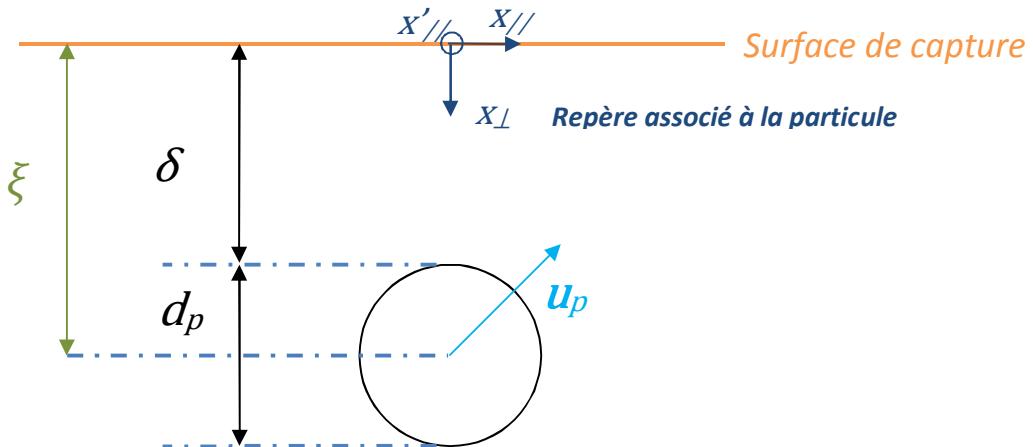


Figure 5 Notations intervenants dans le calcul des coefficients de lubrifications

Certains de ces coefficients divergent lorsque la distance particule-paroi diminue et ils s'opposent fortement au mouvement de la particule. La Figure 6 illustre en effet le fait que les coefficients f_{\perp}^1 qui s'opposent à la vitesse de la particule augmentent beaucoup plus vite que les coefficients f_{\perp}^2 qui jouent sur l'importance de la vitesse du fluide dans la force de traînée, et cela, que l'on se place dans le cas d'une paroi solide ou d'une surface libre.

Dans la réalité, le contact entre l'interface et la particule est possible :

- soit via la présence d'une aspérité à la surface de la particule ou de la paroi solide qui va rompre le film de fluide séparant la particule de la surface de dépôt
- soit via l'action de forces de surface qui, lorsqu'elles sont attractives vont compenser les effets de lubrification.

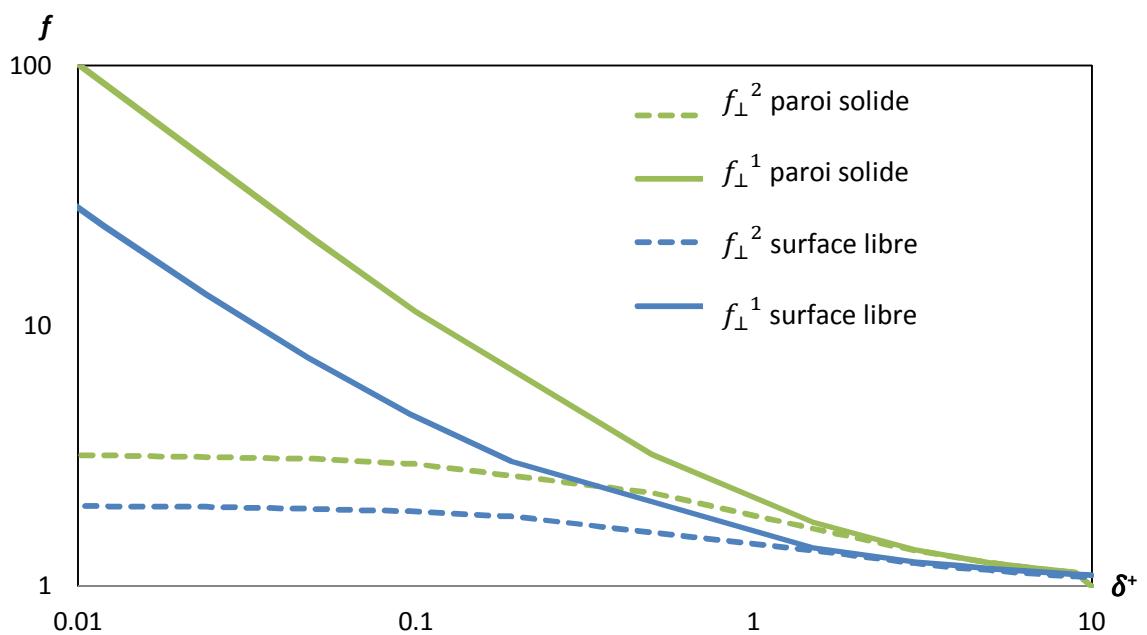


Figure 6 : Coefficients de frottement dans la direction normale à la paroi (f_{\perp}^i) pour une paroi solide^{38,39,40} et une surface libre^{43,44,45}

2.4.3.3 Forces associées au caractère non uniforme et non stationnaire de l'écoulement

Force de masse ajoutée :

Quand une particule est en accélération par rapport à la vitesse du fluide environnant, elle va mettre en mouvement une partie des particules fluides qui lui sont proches. Cet effet, lié à l'inertie de l'écoulement, se traduit dans l'équation de la dynamique par la force de masse ajoutée ou de masse virtuelle \mathbf{F}_{MA} . Pour une particule sphérique en suspension dans un écoulement non uniforme, l'expression de la force de masse ajoutée a été déterminée par Taylor⁴⁶.

$$\mathbf{F}_{MA} = \frac{1}{2} \rho_f \frac{\pi d_p^3}{6} \left(\frac{D\mathbf{u}_f}{Dt} - \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} \right) \quad (2.26)$$

où $d(.)/dt$ représente la dérivée temporelle le long de la trajectoire de la particule solide et $D(.)/Dt$ est la dérivée particulaire en suivant le mouvement du fluide.

Cette expression est aussi valable pour une particule sphérique non solide et peut se réécrire en faisant intervenir la masse de fluide m_f contenu dans un volume équivalent au volume de la particule :

$$\mathbf{F}_{MA} = \frac{1}{2} m_f \left(\frac{D\mathbf{u}_f}{Dt} - \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} \right) \quad (2.27)$$

L'accélération de la particule engendre donc l'accélération d'une masse de fluide égale à $0,5m_f$. Cette force aura donc d'autant plus d'influence sur la trajectoire de la particule que la densité du fluide est grande devant la densité des particules. Si l'on déplace le terme $0,5m_f d\mathbf{u}_p/dt$ à gauche de l'équation de la dynamique, on note que la nouvelle masse prise en compte dans la force inertielle est égale à m_p augmentée de $0,5m_f$ d'où le nom de force de masse ajoutée.

Force d'accélération en volume :

Lorsque l'écoulement du fluide porteur dans lequel évolue la particule est instationnaire et/ou non uniforme, le gradient de pression au sein du fluide exerce une force dite force d'accélération en volume (\mathbf{F}_{Acc}) ou force de gradient de pression du fluide. Elle est aussi parfois appelée force de Tchen.

Pour une particule petite devant l'échelle de Kolmogorov, la valeur de la force d'accélération en volume est égale à celle qui agirait sur le même volume de fluide lorsqu'aucune particule solide n'est présente. Elle met en jeu la masse de fluide contenue dans le volume de la particule m_f et l'accélération du fluide non perturbée par la présence de la particule. L'expression la plus communément utilisée est celle proposée par Riley et rapportée par Maxey³⁵.

$$\mathbf{F}_{Acc} = \rho_f \frac{\pi d_p^3}{6} \cdot \frac{D\mathbf{u}_f}{Dt} = m_f \left(\frac{\partial \mathbf{u}_f}{\partial t} + \mathbf{u}_f \cdot \nabla \mathbf{u}_f \right) \quad (2.28)$$

On note que la force d'accélération en volume est aussi appelée force de masse déplacée.

Force d'histoire :

En écoulement instationnaire et/ou non uniforme, une autre force importante est la force de Basset ou force d'histoire. Lorsque la vitesse relative entre le fluide et la particule change, la vorticité à la surface de la particule change aussi et le fluide environnant met un temps non nul pour s'adapter à ce nouveau champ de vitesse. La force d'histoire est liée au fait que la diffusion de la vorticité n'est pas instantanée et dépend de la viscosité du fluide. Il y a donc un écart entre la force visqueuse subit par la particule et celle qu'elle devrait subir si le fluide s'adaptait immédiatement à toute modification de vorticité. Cette force est appelée force d'histoire car elle dépend de toutes les modifications de vitesse qu'aura subi la particule depuis le début de sa trajectoire et une de ses expressions dans les conditions de Stokes est :

$$\mathbf{F}_H = \mu d_p \int_0^t \frac{3}{2} \left(\pi \frac{d_p^2}{v(t-\tau)} \right)^{1/2} \left(\frac{\partial \mathbf{u}_f}{\partial \tau} - \frac{d\mathbf{u}_p}{d\tau} \right) d\tau \quad (2.29)$$

Cette expression, souvent utilisée aux temps courts, surestime la force d'histoire aux temps longs ; comme le rapporte Magnaudet⁴⁷, la mémoire du fluide aux temps longs est plus courte que celle prédicta par cette expression.

2.4.3.4 Force de portance

La force de portance (F_L) est une force inertielle induite par la présence d'un gradient de vitesse dans l'écoulement, ou par la rotation de la particule ou bien encore par la présence d'une paroi solide. Son existence a été mise en évidence expérimentalement par Segré et Silberberg⁴⁸. Saffman⁴⁹ a, le premier, proposé une formule pour prendre en compte l'effet du gradient de l'écoulement sur le mouvement de la particule. Les conditions de validité de sa formule étaient très restrictives, McLaughlin⁵⁰ a par la suite proposé une nouvelle formule valable lorsque Re_p et $(Re_p A_\omega)^{1/2}$ sont très inférieurs à l'unité (avec $A_\omega = d_p |\nabla u_f| / |u_f - u_p|$) pour un écoulement uniforme unidirectionnel cisaillé loin d'une paroi⁴⁷ :

$$F_L = \frac{27}{2\pi^2 (Re_p A_\omega)^{1/2}} J_f \left((A_\omega / Re_p)^{0.5} \right) m_f (\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p) \cdot (\nabla \mathbf{u}_f) \quad (2.30)$$

où $J_f(x)$ est une fonction monotone tendant vers zéro lorsque x tend vers zéro et 2,555 lorsque x tend vers l'infini⁴⁷.

La formulation de la force de portance est plus compliquée lorsque l'écoulement n'est pas un écoulement unidirectionnel et que la rotation et le confinement interviennent. Différentes formulations existent pour la force de portance.

Dans le cas de l'étude de la capture de particules sur une paroi solide qui se base ici sur les travaux de Ahmadi⁵¹⁻⁵³, nous utiliserons la force de portance qu'eux même utilisent, c'est-à-dire :

$$F_L = \frac{9\pi^2 \mu d_p^2}{\nu^2} \frac{\frac{\partial u_f}{\partial z}}{\left| \frac{\partial u_f}{\partial z} \right|^2} \begin{pmatrix} 0,0501 & 0,0329 & 0 \\ 0,0182 & 0,0173 & 0 \\ 0 & 0 & 0,0373 \end{pmatrix} (\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p) \quad (2.31)$$

Pour l'étude portant sur le dépôt de particules sur une surface libre, l'écoulement du fluide porteur qui est étudié est un écoulement non cisaillé. Nous supposerons donc que le gradient de vitesse joue peu sur le dépôt de nos particules solides et négligerons donc la force de portance.

2.4.3.5 Forces de surface

Lorsque des particules arrivent à proximité d'une interface entre deux liquides, elles subissent des forces dites de surface qui peuvent être de nature attractives ou répulsives. Le plus souvent, les forces attractives sont associées aux forces de Van Der Waals et les forces répulsives aux forces de double couche d'origine électrostatique.

Dans un métal liquide, les forces de double couche ont une influence négligeable sur le mouvement des inclusions à l'approche de l'interface. En effet, les champs électrostatiques sont écrantés et annulés à des distances de l'ordre de la distance de Thomas-Fermi c'est-à-dire de l'Angstrom⁵⁴. Dans ces conditions, à toute distance, l'effet des charges électriques d'excès comme celles mises en évidence par Paik *et al.*^{55,56} aux interfaces oxyde/métal liquide, est largement dominé par les forces de Van der Waals.

La force attractive de courte portée de Van Der Waals pour deux atomes proches l'un de l'autre résulte de la disposition instantanée des électrons autour des noyaux positifs des atomes^{37,57}. Un atome n'a pas de moment dipolaire permanent, cependant il possède à chaque instant un moment dipolaire instantané. Ce bref dipôle crée un champ électrique qui polarise les atomes avoisinants, engendrant ainsi une force attractive de courte distance entre les atomes concernés. Une particule d'oxyde présente dans un métal liquide sera ainsi sujette à la force de Van Der Waals engendrée par l'interaction des électrons de la particule avec les électrons de l'interface. Cette force s'exprime en

fonction de la constante d'Hamaker H , de la normale à la paroi \mathbf{n} et de la séparation réduite de la particule à la paroi³⁷ ($\delta^+ = 2\delta/d_p$) : H est fonction de la nature des trois milieux mis en jeu qui sont dans notre cas l'inclusion, le métal liquide et le laitier ou un matériau réfractaire.

$$\mathbf{F}_{VdW} = -\frac{4}{3} \frac{(H/d_p)}{\delta^{+2}(\delta^+ + 2)^2} \mathbf{n} \quad (2.32)$$

L'expression de la force de Van Der Waals ainsi écrite est valable lorsque la séparation δ^+ entre l'interface et la particule est très faible. Quand cette séparation grandit, le temps entre l'émission du champ électrique par le premier atome et son retour modifié par le deuxième atome, peut être parfois plus grand que la durée de vie du premier dipôle ; l'interaction attractive résultante est alors surestimée par (2.32) si le premier dipôle a eu le temps de changer de sens. Pour traduire ce phénomène, on évalue une force de Van Der Waals retardée en introduisant un coefficient de retard α_r , qui, lorsqu'il vaut 1, donne l'expression première de la force de Van Der Waals.

$$\mathbf{F}_{VdW} = -\alpha_r \frac{4}{3} \frac{(H/d_p)}{\delta^{+2}(\delta^+ + 2)^2} \mathbf{n} \quad (2.33)$$

Il n'y a pas à notre connaissance d'équation simple permettant le calcul de la force de Van Der Waals à toutes les distances. Pour cette étude, nous reprendrons l'approximation de Patayakes rapportée par Tien³⁷ pour le calcul de α_r .

2.5 Choix des forces pour l'étude d'une particule isolée dans un fluide infini

D'après l'équation (2.22), plus le temps de relaxation de la particule est élevé, moins l'accélération de la particule $d\mathbf{u}_p/dt$ sera sensible aux fluctuations de vitesse du fluide transmises via la force de traînée. Le nombre de Stokes renseigne donc aussi sur le poids de l'inertie de la particule par rapport au poids de la force de traînée. De plus, par construction, il permet aussi d'évaluer le temps nécessaire à une particule pour s'adapter à la nouvelle vitesse du fluide par rapport à, généralement, la durée de vie de ladite fluctuation.

Pour les mêmes caractéristiques de particules solides ou liquides, le temps de relaxation est généralement 1000 fois plus élevé dans le cas d'un aérosol que dans celui d'un hydrosol à cause de la grande différence qui existe entre les viscosités dynamiques d'un gaz et d'un liquide ($\mu_{air} \sim 10^{-5}$ Pa.s contre $\mu_{liquide} \sim 10^{-3}$ Pa.s). Ainsi, les forces inertielles seront souvent beaucoup plus importantes dans le cas des aérosols que dans celui des hydrosols, ce que doit traduire le choix des forces à prendre en compte dans l'équation du suivi lagrangien.

Une étude de Armenio et Fiorotto⁵⁸ a montré que lorsque la densité des particules est très grande devant celle du fluide ($\rho_p/\rho_f > 1000$) et que ces particules sont petites devant l'échelle de Kolmogorov, la force de masse ajoutée, la force d'accélération en volume et la force d'histoire peuvent être négligées devant la force de traînée. Cette condition est généralement satisfaite lors de l'étude des aérosols, c'est pourquoi ces trois forces ne sont alors pas prises en compte.

De plus, Armenio et Fiorotto⁵⁸ montrent aussi que pour des particules dont le rapport de densité est faible, bien que les forces d'histoire et de masse déplacée soient de l'ordre de grandeur de la force de traînée, leur influence sur la dispersion particulaire reste très faible. En effet, pour des rapports de densités petits, $\rho_p/\rho_f \approx 1$ et des valeurs du nombre de Stokes faibles, les particules réagissent quasiment comme des traceurs dans le fluide, elles sont donc peu sensibles aux forces autres que la force de traînée.

Dans une étude traitant de particules de même densité que le fluide porteur en présence d'une paroi solide, Pan et Banerjee²⁶ ont montré que tant que le diamètre des inclusions adimensionné par l'échelle de longueur caractéristique de l'écoulement en proche paroi ($l_\tau = \nu/u_\tau$) était inférieur à l'unité

$(d^+ = d/l_\tau = O(1))$, la force de masse ajoutée et la force d'histoire pouvaient être négligées devant la force de traînée. Par contre, la force d'accélération en volume n'est pas négligée dans leur étude.

Ainsi, on voit que l'étude de particules de densité proche de la densité du fluide porteur est effectuée différemment selon les auteurs. Le choix des forces prises en compte résulte d'un compromis entre le coût de calcul et le gain de précision attendu dans la description des phénomènes que l'on veut étudier. La force d'histoire est très coûteuse en temps de calcul et comme il n'existe pas à notre connaissance de consensus sur une formulation de cette force valable aux temps longs et que nous nous intéressons principalement au dépôt des particules à l'interface (donc après un temps de parcours long), nous considérerons dans cette thèse l'ensemble des forces présentées ci-dessus hormis la force d'histoire.

2.6 Dépôt de particules

Nous nous intéressons maintenant aux mécanismes qui interviennent lorsque la particule a été transportée très près d'une interface solide ou liquide et qu'elle va se déposer sur celle-ci. On appelle vitesse de dépôt u_d le rapport entre le flux surfacique de particules déposées J et une concentration caractéristique des particules dans le fluide c_0 qui peut être la concentration moyenne dans l'écoulement où la concentration loin de la surface, $u_d = J/c_0$.

Quand l'écoulement du fluide porteur ressent les effets des conditions aux limites du domaine (surface libre ou paroi solide), son écoulement est modifié sur une certaine distance par rapport à un écoulement complètement libre. C'est ce qu'on nomme la couche de surface. L'écoulement du fluide proche de l'interface change par rapport à un écoulement libre, le dépôt des particules à la surface peut se faire selon différents mécanismes mettant en jeu les caractéristiques de la particule, celles de la phase porteuse et parfois aussi les caractéristiques de l'interface. Du fait de la complexité des mécanismes mis en jeu, le dépôt de particules sur une paroi solide en régime turbulent a fait l'objet de différentes théories. En effet, la condition de nullité de la vitesse du fluide normale à l'interface, nécessaire pour la description d'une paroi solide et d'une interface libre indéformable, entraîne un effet de blocage de la turbulence au niveau de cette interface. Les fluctuations de la vitesse normale du fluide sont fortement diminuées dans une zone située à proximité de l'interface ce qui peut parfois changer l'importance relative des mécanismes influant sur le mouvement des particules. La description des écoulements à proximité d'une paroi solide ou d'une surface libre sera effectuée lors des chapitres suivants.

2.6.1 Mécanismes de dépôt

D'une manière générale, différents mécanismes peuvent intervenir simultanément pour induire le dépôt d'une particule mais nous les présenterons chacun individuellement pour plus de clarté et nous les illustrerons dans le cas d'un écoulement figé. De plus, nous supposerons qu'il y a dépôt dès lors que la particule entre en contact avec l'interface et que les particules, une fois capturées, ne sont jamais ré-entrainées par le fluide. Le rebond qui intervient lorsque l'énergie cinétique de la particule est élevée, ne sera pas pris en compte car *a priori* l'inertie des hydrosols étant faible, elles sont fortement ralenties dans la zone de l'écoulement très proche de la surface de dépôt.

Lorsque les forces extérieures qui agissent sur la trajectoire d'une particule sont négligeables devant la force de traînée, la particule suit parfaitement les lignes de courant du fluide et le dépôt dépend du diamètre de la particule et de la distance qui sépare la ligne de courant de la surface. En effet, pour une même ligne de courant, plus la particule est grosse, plus elle aura une chance de rentrer en contact avec l'interface (Figure 7). Ce mécanisme est appelé interception directe de la particule.

Lorsque le fluide porteur s'écoule en régime turbulent, la contribution de l'interception directe peut être explicitée en s'appuyant sur le concept de diffusion turbulente. Par analogie avec la diffusion moléculaire, Davies¹⁷ définit un coefficient de diffusion turbulente de telle sorte que le flux J de particules selon l'axe x s'écrit (ici pour des particules non-browniennes):

$$J = -D_E \frac{d\bar{c}}{dx} \quad (2.34)$$

où D_E est le coefficient de diffusion turbulente (en anglais « eddy diffusivity ») et \bar{c} est la moyenne temporelle locale de la concentration en particules. D_E a pour but de modéliser le transport turbulent de particules associé aux fluctuations turbulentes du fluide. Quand on se rapproche d'une surface de blocage (paroi solide ou surface libre), on note que les fluctuations turbulentes de la vitesse du fluide normale à la surface diminuent fortement, il en sera donc de même pour le coefficient de diffusion turbulente.

Si l'inertie de la particule est importante -ce qui arrive par exemple lorsque $\rho_p/\rho_f \gg 1$ et que le rayon de la particule est suffisamment grand- alors la capture de la particule peut se faire suivant un mécanisme appelé impact inertiel. Dans ce cas, lorsque la ligne de courant suivie par la particule change de direction, par exemple à l'approche d'une surface solide, la trajectoire de la particule s'adapte aussi mais ne suit pas exactement la ligne de courant du fait de son inertie. L'écart entre la trajectoire de la particule entraînée par son inertie et la ligne de courant peut alors mener à un dépôt de la particule qui n'aurait pas eu lieu dans le cas d'une particule peu inertielle (Figure 7).

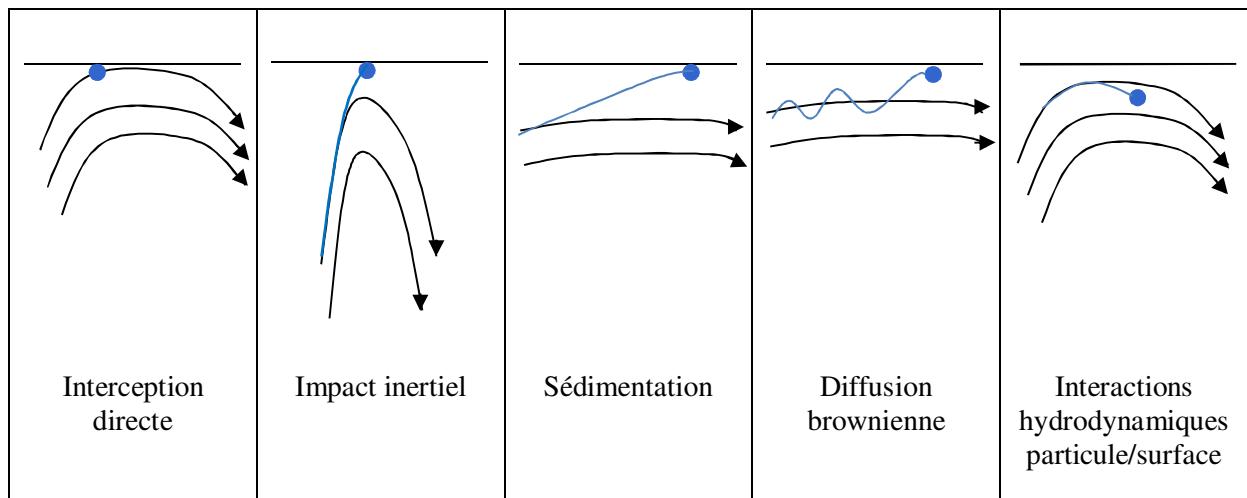


Figure 7 : Mécanismes de capture des particules à l'interface

Lorsque les densités du fluide et des particules sont différentes, les forces d'origine gravitationnelle peuvent être non négligeables. La vitesse limite atteinte par une particule soumise aux forces de gravité et à la force de traînée est appelée vitesse de sédimentation ou vitesse de chute des particules. La vitesse de sédimentation v_{sed} de petites particules peut être calculée dans les conditions de Stokes en fonction de μ la viscosité dynamique du fluide :

$$v_{sed} = \frac{1}{18\mu} d_p^2 g |\rho_p - \rho_f| \quad (2.35)$$

Près de la surface, si la vitesse de sédimentation est très importante devant la vitesse du fluide, la trajectoire de la particule peut être contrôlée exclusivement par la vitesse de chute, c'est le dépôt par sédimentation. Dans le cadre de nos simulations sur les oxydes métalliques, la vitesse de sédimentation varie de $3,5 \cdot 10^{-5} \text{ m.s}^{-1}$ pour les particules de diamètre $1 \cdot 10^{-5} \text{ m}$ à $9 \cdot 10^{-4} \text{ m.s}^{-1}$ pour les particules de diamètre $5 \cdot 10^{-5} \text{ m}$ ($\rho_p = 3500 \text{ kg.m}^{-3}$, $\rho_f = 2\rho_p$, $\nu = 7,8 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2 \text{s}^{-1}$).

D'autres mécanismes que l'on n'étudiera pas dans ce mémoire peuvent aussi induire le dépôt. On parle par exemple de dépôt brownien lorsque l'agitation brownienne des particules n'est pas négligeable. Dans ce cas, suivant Davies, le flux de particules s'écrit :

$$J = -(D_B + D_E) \frac{d\bar{c}}{dx}$$

où $D_B = k_B T / 3\pi\mu d_p$ est le coefficient de diffusion brownienne.

Enfin, il existe des mécanismes qui au contraire retardent le dépôt de particules. Citons par exemple les interactions hydrodynamiques (lubrification) entre les particules et la surface, solide ou libre, qui peuvent jouer un rôle non négligeable dans le cas des hydrosols.

2.6.2 Modèle semi-empirique de Wood pour les aérosols

Nous nous intéressons ici à l'écoulement d'un aérosol dans un canal en régime turbulent. Le nombre de Stokes ($\tau_p^+ = \tau_p / t_\tau$) construit avec les échelles de paroi (l_τ , t_τ et u_τ) caractérise l'inertie des particules constituant l'aérosol et permet de distinguer trois régimes de dépôt : pour les particules très petites, $\tau_p^+ \lesssim 1$, le dépôt est induit par la diffusion brownienne et turbulente. Lorsque $1 \lesssim \tau_p^+ \lesssim 10$, un mécanisme alliant diffusion turbulente et impact inertiel contrôle le dépôt alors que pour les particules les plus grosses, le dépôt est dominé par l'inertie de la particule. Les deux premiers régimes sont bien décrits par un modèle semi empirique proposé par Wood¹⁶ qui exprime la vitesse de dépôt (adimensionnée par les vitesses u_τ caractéristiques de l'écoulement) u_d^+ en fonction de nombres adimensionnels caractérisant le fluide et les particules :

$$u_d^+ = \frac{u_d}{u_\tau} = 0,057 \text{ Sc}^{-\frac{2}{3}} + 4,5 \cdot 10^{-4} \tau_p^{+2} + \tau_p^+ g^+ \quad (2.36)$$

où Sc est le nombre de Schimdt ($\text{Sc} = \nu / D_B$) et g^+ est la composante normale à l'interface de l'accélération de la pesanteur adimensionnée. Le premier terme de droite est issu d'une simplification de la vitesse de dépôt turbulent et brownien théorique dérivée par Davies⁵⁹ tandis que le deuxième terme est une adaptation du modèle de Owen¹⁵.

Lorsque le dépôt est contrôlé par l'inertie de la particule, $\tau_p^+ \gtrsim 10$, la vitesse de dépôt est alors caractérisée par un plateau pour un écoulement en canal vertical :

$$u_d^+ = 0.13 \quad (2.37)$$

La Figure 8 présente le modèle de Wood et les résultats expérimentaux de Liu et Agarwal¹² pour un écoulement en canal vertical. La valeur du plateau est la même entre le modèle de Wood et les résultats de Liu et Agarwal, ce qui est logique puisque cette valeur a été fixée sur la base de leurs résultats expérimentaux. Pour le régime d'impact inertiel et turbulent, les constantes du modèles ont été ajustées à l'aide des résultats expérimentaux de Liu et Agarwal¹², Wells et Chamberlain⁶⁰ et Friedlander et Johnstone¹⁴.

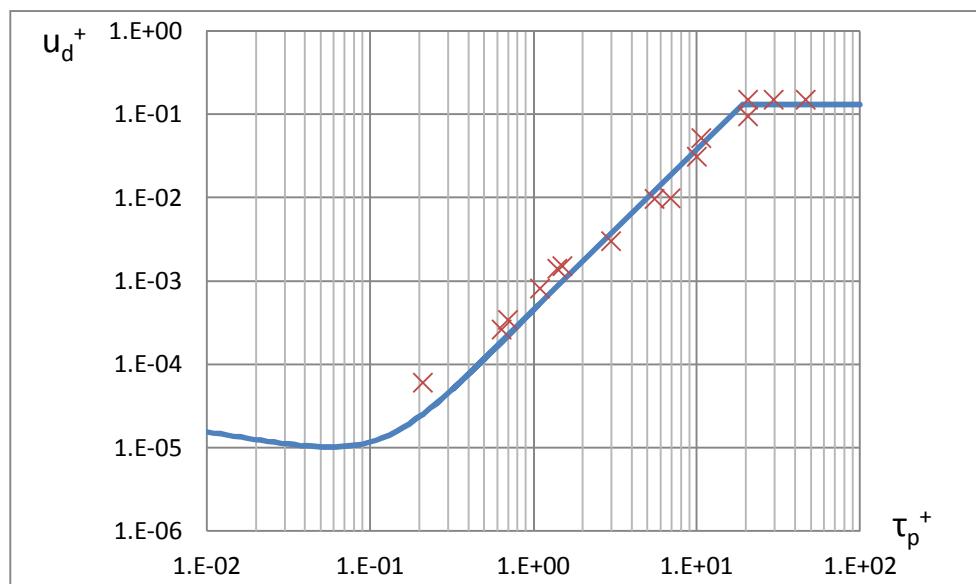


Figure 8 : Modèle de Wood¹⁶ (traits pleins) et résultats expérimentaux de Liu et Agarwal¹² (croix ; $Re \sim 10000$) dans le cas d'un canal vertical

Cependant, du fait de la faible inertie (et donc du faible nombre de Stokes) des hydrosols, ainsi que du plus faible écart entre la densité du fluide et la densité des particules, il est difficile de prédire à partir du cas des aérosols le poids des différents mécanismes de capture des hydrosols. Notons que dans la littérature des hydrosols, les particules étudiées sont en général browniennes. Dans ces conditions, le dépôt est contrôlé par la diffusion brownienne^{61,62} et éventuellement par les forces de double couche⁶³.

2.6.3 Modèles physiques du dépôt de particules inertielles

Le dépôt turbulent d'aérosols a aussi fait l'objet d'études physiques ou mécanistiques pour comprendre en particulier le rôle joué par les structures turbulentes de l'écoulement sur le dépôt. Pour les particules inertielles, non soumises à la diffusion brownienne, l'un des premiers scénarii a été proposé par Friedlander et Johnstone¹⁴. Ainsi, ils proposèrent le modèle de « free-flight » ou modèle de vol libre, dans lequel une particule située à une certaine distance en dehors de la sous-couche visqueuse de paroi acquière grâce aux fluctuations de vitesse du fluide, une vitesse suffisamment élevée (vitesse de vol libre) pour lui permettre de traverser d'une traite la distance qui la sépare de la paroi solide. Les auteurs supposent que la particule est en vol libre pendant un temps égal à son temps de relaxation (τ_p). La distance parcourue par la particule pendant son vol libre est appelée distance d'arrêt (« stopping distance »). Friedlander et Johnstone¹⁴ estiment la vitesse de vol libre égale à $0,9u_\tau$.

Ce modèle a été remis en cause par plusieurs auteurs. Owen¹⁵ avance par exemple que supposer que le temps de réponse de la particule est suffisamment court pour qu'elle acquière sa vitesse de vol libre par l'intermédiaire des fluctuations rapides du fluide est en contradiction avec l'hypothèse selon laquelle la particule est capable de conserver sa vitesse de vol dans la sous couche visqueuse. En effet, à faible temps de relaxation, une particule s'adapte rapidement aux modifications du champ fluide environnant et devrait donc ralentir rapidement lorsqu'elle se trouve dans une zone où les vitesses du fluide sont très faibles. De plus, Cleaver et Yates^{14,18} critiquent le fait que le modèle de Friedlander et Johnstone¹⁴ ne tient pas compte des structures de l'écoulement dans la zone de proche paroi pour expliquer le dépôt de particules. Une alternative au modèle de « free flight » étudiée par Cleaver et Yates^{14,18}, Ounis *et al.*^{64,65} ou Soltani et Ahmadi⁶⁶ et émise dans un premier temps par Owen se rapproche du mécanisme d'interception directe et prend justement en compte ces structures, c'est le modèle qui sera présenté au chapitre suivant.

Chapitre 3

Dépôt turbulent en canal plan

Il n'y a que très peu d'études portant sur les hydrosols et encore moins d'études portant sur le dépôt des hydrosols sur une surface libre. C'est pourquoi dans un premier temps, nous avons préféré étudier le dépôt de particules sur une paroi solide pour pouvoir comparer nos résultats à ce que l'on pouvait trouver dans la littérature. Cette étude revient donc à étudier le dépôt turbulent d'inclusions dans une conduite de transport de métal liquide.

Des différentes études portant sur le dépôt de particules sur une paroi solide, nous avons choisi de nous intéresser à des études effectuées à l'aide d'un modèle stationnaire décrivant les phénomènes turbulents dans la sous couche visqueuse située le long d'une paroi solide. L'écoulement fluide est décrit de façon analytique ce qui nous a permis de développer plus facilement (et valider) le module de suivi lagrangien des particules, notamment l'interpolation de la vitesse du fluide à la position de la particule ainsi que le schéma de résolution de l'équation de la dynamique des particules. Nous avons ainsi pu retrouver avec notre code les résultats de la littérature sur le dépôt d'aérosols.

Ensuite, nous avons adapté les paramètres d'entrée du code pour nous placer dans la configuration du dépôt des hydrosols sur une paroi solide. Les résultats obtenus sont comparés aux résultats que l'on a pu trouver sur les hydrosols. Une étude des mécanismes contrôlant le dépôt des particules est aussi présentée.

3.1 Description de la configuration étudiée

La configuration étudiée est une configuration de canal plan dans laquelle les deux surfaces du canal sont des parois sans glissement. La turbulence est générée par cisaillement du fluide au niveau de la paroi solide. L'écoulement moyen du fluide porteur est dirigé dans la direction x tandis que la direction normale aux parois solides est la direction z . Dans le modèle, seul l'écoulement très près d'une des deux parois solides est considéré.

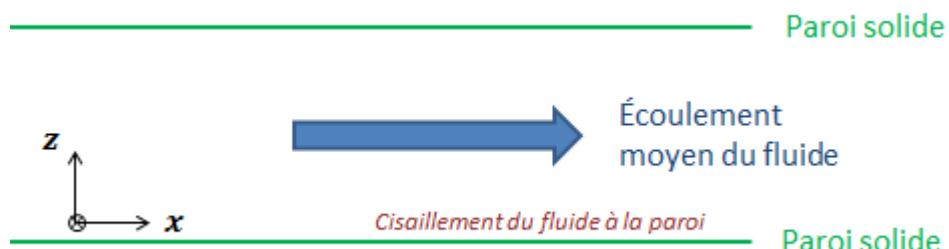


Figure 9 : Configuration du canal plan

3.2 Présentation du modèle de Cleaver et Yates

Nous présentons ici le modèle de Cleaver et Yates¹⁸ qui a été repris par différents auteurs au cours du temps. Ce modèle est basé sur une description de la structure d'un écoulement turbulent à proximité immédiate d'une paroi solide. Les différentes grandeurs sont adimensionnées par les unités de paroi présentées précédemment et seront indiquées ⁺. On rappelle ici les unités de paroi qui seront utilisées (2.11) :

$$\begin{cases} t_\tau = \frac{v}{u_\tau^2} \\ l_\tau = \frac{v}{u_\tau} \end{cases}$$

Ainsi, quel que soit le nombre de Reynolds de l'écoulement, la description des structures turbulentes est inchangée et nous pouvons utiliser la description de Cleaver et Yates en faisant varier l'intensité turbulente de l'écoulement.

3.2.1 Écoulement turbulent en proche paroi solide

Les études expérimentales et numériques sur la turbulence de paroi sont nombreuses et ont permis de mettre en évidence la structure de l'écoulement turbulent dans la couche de surface.

On considère ici un écoulement dans un canal qui se fait suivant l'axe x^+ , et dont l'axe normal à la paroi est l'axe z^+ . Selon la distance à la paroi solide, trois zones peuvent être identifiées :

- Une première zone, loin de la paroi, est appelée zone logarithmique car la vitesse de l'écoulement présente un profil logarithmique dans cette partie de l'écoulement ($z^+ > 30$).
- La zone la plus proche de la paroi solide dans laquelle les fluctuations de la vitesse normale du fluide sont très faibles et dans laquelle la dissipation est fortement contrôlée par la dissipation due au frottement visqueux le long de la paroi solide, est appelée sous-couche visqueuse ($z^+ < 10$).
- Entre la sous-couche visqueuse et la zone logarithmique, se trouve une zone tampon (appelée en anglais « buffer layer »).

La zone tampon est le siège d'une production intense d'énergie cinétique turbulente tandis que la sous-couche visqueuse est, relativement à la production d'énergie cinétique turbulente, beaucoup plus calme, ce qui fait que la sous couche visqueuse a longtemps été supposée exempte de phénomènes turbulents (d'où un premier nom trompeur de « sous couche laminaire »³⁴ pour désigner la sous couche visqueuse).

De fait, la sous couche visqueuse le long d'une paroi solide en écoulement turbulent n'est ni exempt de phénomènes turbulents (Kline *et al.*⁶⁷, Corino et Brodkey⁶⁸, Kim, Kline et Reynolds⁶⁹) et de plus, contre intuitivement, ces phénomènes turbulents ne sont pas complètement aléatoires : en écoulement turbulent le long d'une paroi solide, l'écoulement est structuré (spatialement et temporellement) et a pu être décrit de façon systématique par différents auteurs.

Comme le rapporte Smith et Metzler⁷⁰, les premières structures qui furent identifiées sont des zones étirées dans la direction de l'écoulement et dans lesquelles la vitesse du fluide est inférieure à la vitesse moyenne de l'écoulement. Après diverses études qui montrèrent que la distance entre chaque traînée de fluide ralenti (structure ainsi nommée par Comte-Bellot et Bailly²⁸) pouvait être quantifiée et corrélée à l'écoulement turbulent, Kline, Reynolds, Schraub, et Runstadler⁶⁷ avancèrent l'idée que la présence de ces structures, régulièrement espacées dans la direction transverse de l'écoulement, sont caractéristiques de tout écoulement turbulent le long d'une paroi solide. Kline *et al.*⁶⁷ et d'autres auteurs ont pu évaluer quantitativement la répartition spatiale et la taille des traînées de fluide ralenti. Il en ressort qu'elles peuvent être très étirées dans le sens de l'écoulement (jusqu'à $1000l_f$) et qu'elles sont séparées dans la direction transverse d'une distance de l'ordre de $100l_f$. Cette période augmente avec la distance z^+ à la paroi solide et aucune traînée de fluide ralenti n'est présente au-dessus de 40-

$50 l_\tau$ ⁷¹. Ces structures se forment continuellement dans la sous couche visqueuse et sont extrêmement persistantes (si elles rencontrent un obstacle, elles se reforment rapidement derrière).

Kline *et al.*⁶⁷ émirent l'hypothèse que ces traînées de fluide ralenti seraient liées à la production d'énergie cinétique turbulente hors de la sous couche visqueuse. Ils observèrent que les filaments de fluide, initialement parallèles à la paroi, sont progressivement détachés de la paroi et transportés dans la zone tampon et forment une structure en U (ou en fer à cheval) transverse à l'écoulement et inclinée par rapport à la paroi solide. Ce U devient alors instable car il se trouve dans une zone où la vitesse du fluide selon l'axe de l'écoulement x^+ est plus élevée que sa propre vitesse. Il oscille et se décompose en engendrant d'importants mouvements de fluide dirigés vers le centre du canal (on les nomme éjections) et en direction de la paroi solide (qui sont appelés apports) et qui traversent la sous couche visqueuse.

Ce processus est appelé processus de « *burst* » en anglais et a notamment été étudié par Kim, Kline et Reynolds⁶⁹ qui montrent qu'il est à l'origine de la majorité de la production d'énergie cinétique turbulente dans la couche de paroi (sous-couche visqueuse, zone tampon et zone logarithmique). De façon générale, chaque branche du U encadre une traînée de fluide ralenti, ce qui fait que les mouvements d'éjections et d'impacts se produisent eux aussi selon la période spatiale $y^+ = 100$. Le maximum de production d'énergie cinétique turbulente est situé à $z^+ = 12$ comme le rapporte Panton⁷¹.

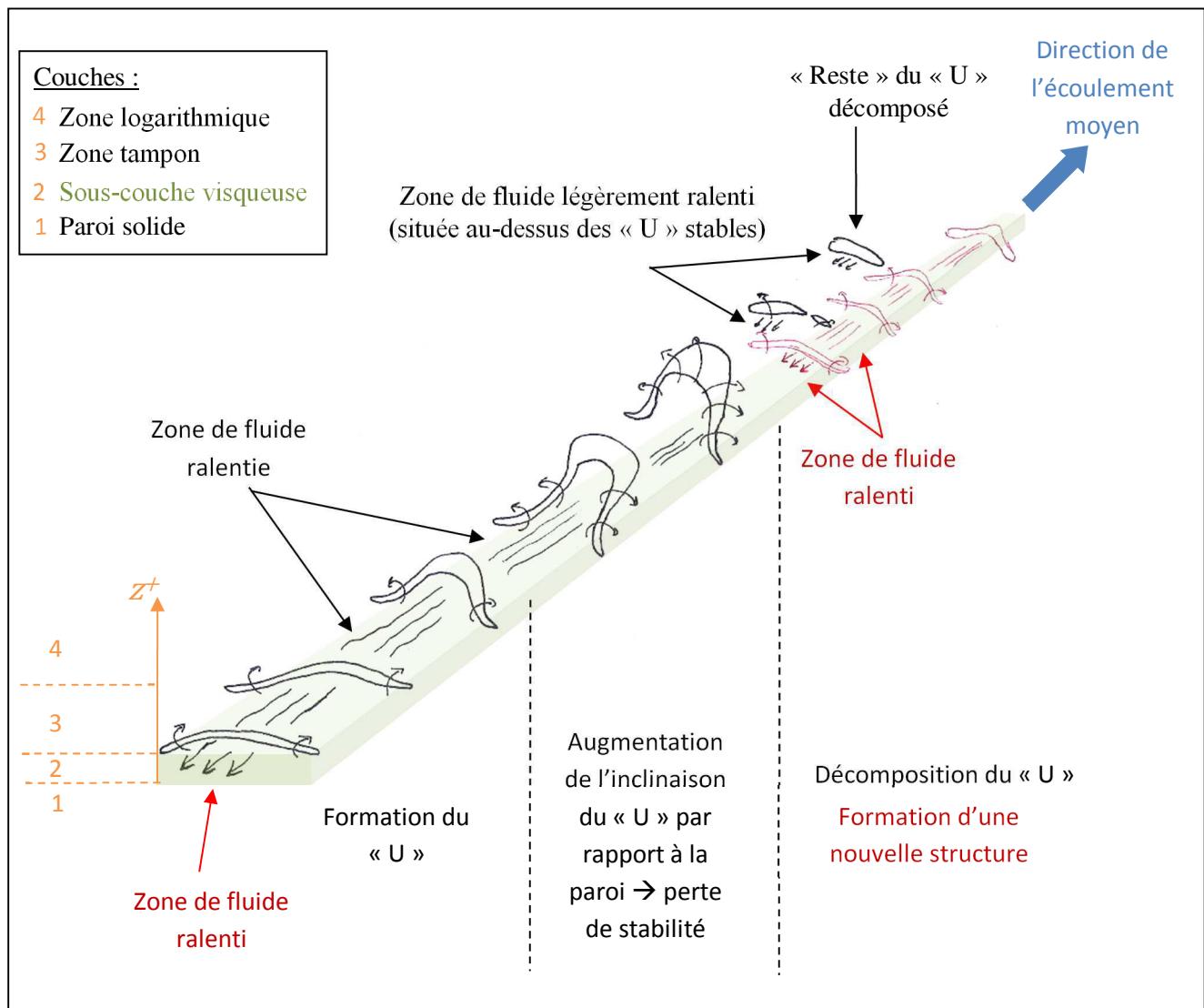


Figure 10 : Structures turbulentes en proche paroi solide

3.2.2 Approche d'Ahmadi : Modèle de Cleaver et Yates

Nous présentons dans ce paragraphe un aperçu rapide de différentes études portant sur le dépôt de particules sur une paroi solide effectuées à l'aide d'une modélisation simplifiée de l'écoulement le long de la surface de dépôt. Cleaver et Yates ont été à l'origine de ce modèle ensuite largement repris par Ahmadi aux cours de nombreux travaux.

Présentation globale du modèle :

Comme présenté précédemment, dans un écoulement en canal, à proximité de la sous couche visqueuse, coexistent des structures turbulentes allongées dans le sens de l'écoulement ainsi que des structures perpendiculaires à l'écoulement. Ces dernières dont la forme est souvent décrite comme ressemblant à un fer à cheval, engendrent d'importants mouvements de fluide en direction de la paroi solide qui traversent la sous couche visqueuse. Les mouvements de fluide très intenses dirigés vers la paroi solide sont appelés *sweeps* en anglais et correspondent à des apports de fluide vers la paroi, tandis que les mouvements de fluide partant de la paroi sont appelés éjections (*burst* en anglais). Owen propose donc un modèle dans lequel les particules sont convectées en direction de la paroi par les structures cohérentes turbulentes (Figure 11).

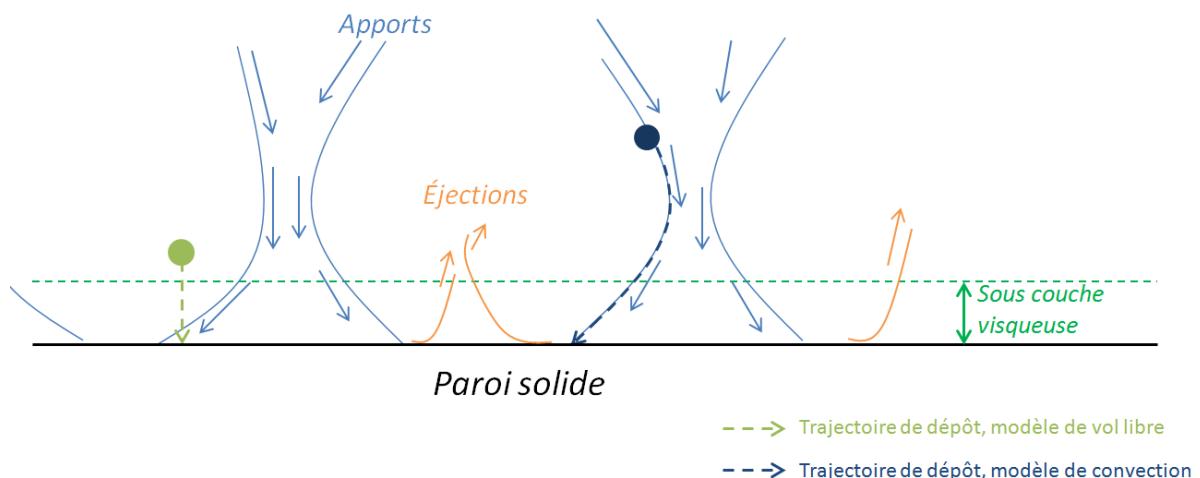


Figure 11 : Modèle de dépôt en proche paroi solide

Le modèle de Cleaver et Yates¹⁸ est basé sur la description de l'écoulement très près de la paroi faite précédemment. Le transfert des particules à la paroi solide est supposé être dû aux impacts turbulents du fluide vers la paroi, ce qui a été confirmé depuis par des simulations numériques directes effectuées par exemple par Brooke *et al.*¹⁹ ou Soltani *et al.*⁶⁶.

La structure de l'écoulement issu du processus de « *burst* » est modélisée par un point de stagnation statique dans le plan ($y^+ 0 z^+$) ce qui revient à supposer que l'écoulement vue à l'échelle de la particule est stationnaire. La direction x^+ est la direction de l'écoulement moyen.

Ce modèle a été développé pour une paroi solide, lisse et la trajectoire de la particule est alors évaluée analytiquement dans les premières études puis par résolution numérique dans les études les plus récentes.

Quelques études ayant fait appel au modèle ci-dessus :

Dans ce paragraphe, nous présentons quelques phénomènes qui ont pu être étudiés grâce au modèle de Cleaver et Yates. L'équation de la dynamique, puisqu'elle est appliquée à l'étude d'aérosols (donc de particules potentiellement inertielles), comporte toujours le terme inertiel $m_p d\mathbf{u}_p/dt$ en plus des autres forces qui ont été ajoutées au cours du temps.

Cleaver et Yates¹⁸ ont calculé la vitesse de dépôt de particule en prenant en compte seulement la force de traînée de Stokes et la diffusion brownienne (la gravité n'étant pas prise en compte), ce qui leur permet d'étudier le dépôt diffusif et le dépôt par impact inertiel et turbulent. Ils montrent que le flux de particules déposées dépend du nombre de Stokes de la particule ainsi que du rapport entre la densité

des particules et la densité du fluide porteur. Pour les petites particules, lorsque le dépôt est contrôlé par diffusion brownienne, leurs résultats concordent bien avec les résultats expérimentaux ce qui n'est pas le cas pour les particules plus grosses pour lesquelles l'ajustement du calcul a été effectué par l'introduction d'un terme de convection dans la direction x^+ de l'écoulement.

Fichman, Gutfinger et Pnueli⁷² ont repris le modèle de Cleaver et Yates en prenant en compte la force de portance qui avait été négligée par ces derniers dans le calcul de la trajectoire de la particule. Les résultats mettent en lumière l'importance de la force de portance dans le dépôt des particules lorsque le nombre de Stokes est supérieur à l'unité et ils sont en bon accord avec les résultats expérimentaux sans l'introduction du terme convectif ajouté par Cleaver et Yates dans leur modélisation.

Fan et Ahmadi⁵² ont repris l'idée de Cleaver et Yates pour l'étude du dépôt de particules sur une surface rugueuse. Ils ont inclus la force de traînée de Stokes, la force de portance ainsi que la gravité qui agit parallèlement à la paroi (le canal étant vertical). Le champ fluide est aussi approximé par un point de stagnation, mais l'origine du champ de vitesse est légèrement décalé de la paroi solide pour prendre en compte l'influence de la rugosité sur le champ de l'écoulement. Leurs résultats montrent que la rugosité augmente fortement le dépôt des particules et qu'elle augmente essentiellement les contributions par impact inertiel et par interception directe. La force de portance est très importante et bien que le canal soit vertical, le sens de la gravité a une influence sur la vitesse de dépôt des particules : via la force de portance, la gravité augmente la vitesse de dépôt lorsqu'elle est dirigée dans le même sens que l'écoulement moyen et elle le diminue lorsque son sens est opposé à l'écoulement moyen. L'effet sur le flux de dépôt du rapport de densités particules/fluide est plus important pour les particules en suspension dans un canal lisse que dans un canal rugueux. Leurs résultats sont en bon accord avec les résultats expérimentaux et ils montrent également l'importance du nombre de Reynolds à travers la variation de la vitesse de frottement pariétale.

Wu, Davidson et Russell⁷³ ont adapté le modèle à l'étude des particules qui rebondissent sur la paroi. En effet, une des hypothèses de chacun des modèles précédents était de considérer qu'une fois que la particule touchait la paroi solide, elle restait accrochée à celle-ci définitivement. Wu *et. al.*⁷³ ont intégré une composante stochastique dans la description du fluide et le rebond est estimé via une probabilité dépendant de la vitesse de la particule lors du contact. Leurs résultats sont en accord avec les résultats expérimentaux lorsque le nombre de Stokes des particules est supérieur à 2. Pour des particules moins inertielles, la vitesse de dépôt est sous-estimée ce qui peut être expliqué par le fait que la diffusion brownienne n'a pas été prise en compte. Kvasnak *et. al.*¹³ ont eux aussi étudié le rebond des particules.

Shams, Ahmadi et Rahimzadeh⁵³ ont aussi appliqué le modèle à l'étude du dépôt de particules nanométriques et micro-métriques, dans des canaux verticaux et horizontaux lisses. La force de portance, la force de traînée et le poids sont inclus dans l'équation de la dynamique. Le dépôt brownien est pris en compte en ajoutant une composante aléatoire lors de la résolution de cette équation et différentes valeurs du nombre de Reynolds de l'écoulement sont testées. Les résultats obtenus sont comparés au modèle semi-empirique de Wood¹⁶.

Enfin, on peut noter que le modèle de Cleaver et Yates a aussi été repris par Shams, Ahmadi et Rahimzadeh⁷⁴ pour l'étude du dépôt de fibres flexibles sur une paroi solide ce qui montre que ce modèle au premier abord très simple, permet d'étudier toute une gamme de phénomènes divers.

3.3 Description du modèle utilisé

Dans cette étude, nous reprenons le modèle de Cleaver et Yates¹⁸ repris par Shams *et. al.*⁵³ pour l'étude du dépôt d'aérosols dans un canal.

3.3.1 Modélisation du champ fluide

Les structures turbulentes sont assimilées à des jets de fluides dirigés vers la paroi solide et qui forment des points de stagnation venant s'ajouter à l'écoulement moyen dans le canal. La durée de vie de ces structures est supposée être plus longue que le temps de parcours des particules jusqu'à la paroi.

Ainsi, le fluide est modélisé analytiquement sans variation temporelle. Pour l'étude effectuée dans ce chapitre, nous avons utilisé la formulation analytique du champ de vitesse en tous points du domaine. Par contre, pour le Chapitre 4, ne connaissant que le champ de vitesse aux nœuds du maillage, nous avons dans un premier temps testé et validé un schéma d'interpolation du champ de vitesse sur le champ analytique ci-dessous, avant de le transposer au champ de vitesse résolu par simulation numérique directe.

Les équations utilisées dans ce travail sont issues de la modélisation de Shams *et. al.*⁵³ et leurs formules sont rapportées en Annexe 2.

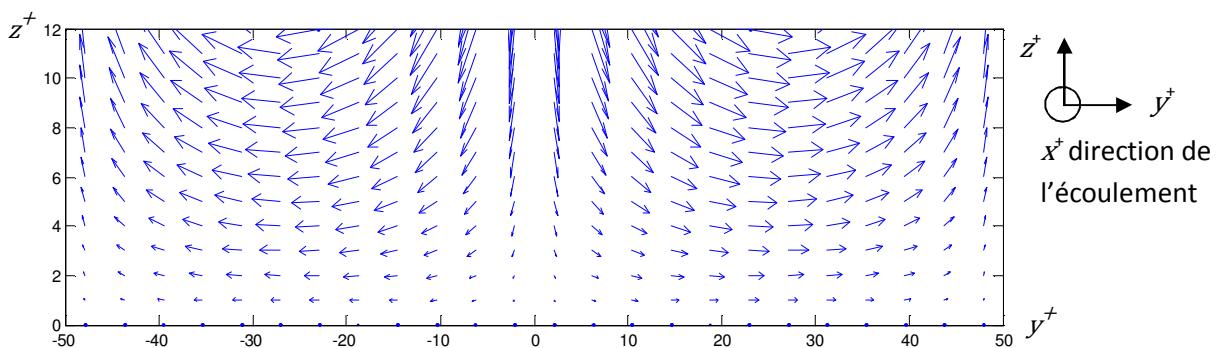


Figure 12 : Structure turbulente dans le plan (y^+0z^+) perpendiculaire à la direction de l'écoulement en proche paroi solide ($z^+ = 0$).

La Figure 12 présente le champ analytique décrit par le modèle. On rappelle que les grandeurs adimensionnées par les échelles de longueur et de vitesse de la paroi solide sont notées avec un $^+$. La direction de l'écoulement moyen est parallèle à la direction x^+ tandis que la direction normale à la paroi solide est portée par l'axe z^+ . Comme le mouvement convectif des structures turbulentes est principalement situé dans le plan $y0z$ c'est celui-ci que nous représentons ici. Le champ de vitesse du fluide est symétrique par rapport au plan $y^+ = 0$, et ce plan est également un plan de symétrie pour le mouvement des particules puisque la gravité est aussi perpendiculaire à la paroi, ainsi l'étude du comportement des particules sur une paroi horizontale sera effectuée dans le demi-domaine $y^+ = [0 ; 50]$.

Ce modèle permet de représenter un écoulement en canal horizontal ou vertical simplement en modifiant la direction de la gravité dans l'équation de la dynamique des particules. On suppose que les particules sont diluées et qu'elles ne modifient pas l'écoulement du fluide. De plus, on suppose qu'il y a capture de la particule dès qu'elle touche la paroi solide.

3.3.2 Suivi lagrangien des particules et évaluation du flux déposé

L'équation du mouvement de la particule est résolue pour l'analyse de la trajectoire de la particule dans le domaine de simulation. On peut l'écrire en fonction du nombre de Stokes de la particule sous la forme adimensionnée suivante :

$$\begin{aligned} \tau_p^+ \frac{d\mathbf{u}_p^+}{dt^+} &= \tau_p^+ \left(1 - \frac{\rho_f}{\rho_p} \right) \mathbf{g}^+ + \mathbf{u}_f^+ - \mathbf{u}_p^+ + \tau_p^+ \frac{\rho_f}{\rho_p} \left(\frac{\partial \mathbf{u}_f^+}{\partial t^+} + \mathbf{u}_f^+ \cdot \nabla \mathbf{u}_f^+ \right) \\ &+ \tau_p^+ \frac{\rho_f}{2\rho_p} \left(\frac{D\mathbf{u}_f^+}{Dt^+} - \frac{d\mathbf{u}_p^+}{dt^+} \right) + \mathbf{F}_L^+ \end{aligned} \quad (3.1)$$

où l'on reconnaît de gauche à droite la sédimentation, la force de traînée de Stokes, la force d'accélération en volume, la force de masse ajoutée et la force de portance. On a choisi d'écrire le nombre de Stokes à partir du temps de relaxation $\tau_p = \rho_p d_p^2 / (18\mu)$ de la particule. Il est ici adimensionné à l'aide des échelles de l'écoulement définies à l'aide de la contrainte parietale ($t_\tau = v/u_\tau^2$; $l_\tau = v/u_\tau$).

Lorsque la lubrification est prise en compte, les coefficients de frottement définis dans le chapitre précédent ($f_{\parallel}^i, f_{\perp}^i$) sont introduits dans la force de traînée qui s'écrit :

$$\begin{cases} F_{D\parallel}^+ = f_{\parallel}^2 \cdot u_{f\parallel}^+ - f_{\parallel}^1 \cdot u_{p\parallel}^+ \\ F_{D\perp}^+ = f_{\perp}^2 \cdot u_{f\perp}^+ - f_{\perp}^1 \cdot u_{p\perp}^+ \end{cases} \quad (3.2)$$

Pour la force de portance, nous prendrons ici la force de portance induite par le cisaillement du fluide dans la direction de l'écoulement qui a été développée par Harper et Chang⁷⁵ et reprise par Fan et Ahmadi⁵¹.

$$\mathbf{F}_L^+ = 9\sqrt{2} \left(\frac{\rho_f}{\rho_p} \tau_p^+ \right)^{1/2} \frac{\partial u_{f/x}^+}{\partial z^+} \left| \frac{\partial u_{f/x}^+}{\partial z^+} \right|^{-1/2} \begin{bmatrix} 0.0501 & 0.0329 & 0.00 \\ 0.0182 & 0.0173 & 0.00 \\ 0.00 & 0.00 & 0.0373 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u_{f/x}^+ - u_{p/x}^+ \\ u_{f/y}^+ - u_{p/y}^+ \\ u_{f/z}^+ - u_{p/z}^+ \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

Lorsqu'on résout l'équation du mouvement (3.1) on prend donc en compte l'inertie de la particule. Lorsque l'inertie de la particule est nulle, seules la force de traînée et les forces gravitationnelles ont une influence sur la trajectoire de la particule. Dans ce cas, la vitesse de la particule peut être évaluée sans résoudre l'équation complète de la dynamique mais simplement à l'aide de la vitesse du fluide et de la vitesse de chute adimensionnée \mathbf{u}_{sed}^+ de la particule, qui peut s'écrire en fonction du nombre de Stokes particulaire et de l'accélération de la gravité adimensionnée ($\mathbf{u}_{sed}^+ = \tau_p^+ \left(1 - \rho_f / \rho_p \right) \mathbf{g}^+$) :

$$\mathbf{u}_p^+ = \mathbf{u}_f^+ + \tau_p^+ \left(1 - \frac{\rho_f}{\rho_p} \right) \mathbf{g}^+ \quad (3.4)$$

Comme précédemment, lorsque les effets de la lubrification sont pris en compte, les coefficients de frottement sont introduits dans l'équation (3.4).

L'équation du mouvement (3.1) est résolue par le schéma prédicteur correcteur d'Adams Moulton à l'ordre 3 pour pouvoir intégrer correctement les effets de lubrification près de la paroi solide. Ce schéma, rapporté en Annexe 3, est un schéma implicite-explicite qui permet de travailler plus facilement avec des équations raides.

Une étude d'indépendance au pas de temps a été effectuée et nous avons donc choisi un pas de temps de $0,1\tau_p^+$ pour résoudre les équations (3.1) et (3.4) sans les coefficients de frottement. Lorsque la lubrification est prise en compte, le pas de temps choisi est égal à $0,001\tau_p^+$ pour résoudre (3.1) et $0,01\tau_p^+$ pour (3.4).

Le pic d'intensité turbulente est située à $z^+ = 12$. Suivant Ahmadi⁵², on suppose donc que la concentration en particule est homogène à cette distance de la paroi solide. Cette distance est aussi celle qui sera utilisée pour introduire les particules dans le domaine (Figure 13) et, lors de leur introduction, on suppose que la vitesse initiale (indice 0) des particules \mathbf{u}_{p0}^+ est égale à la somme de la vitesse du fluide \mathbf{u}_{f0}^+ à l'emplacement initiale de la particule ($x_{p0}^+, y_{p0}^+, z_{p0}^+$) et de la vitesse de chute adimensionnée de la particule \mathbf{u}_{sed}^+ :

$$\mathbf{u}_{p0}^+ = \mathbf{u}_{f0}^+ + \mathbf{u}_{sed}^+ \quad (3.5)$$

Ainsi, on obtient par exemple en notation indicelle pour un canal horizontal avec un champ gravitationnel suivant la direction \mathbf{z}^+ :

$$\begin{cases} u_{p0}^+ = u_{f0}^+ \\ v_{p0}^+ = v_{f0}^+ \\ w_{p0}^+ = w_{f0}^+ + u_{sed}^+ \end{cases} \quad (3.6)$$

Si l'on ne s'intéresse qu'à la partie du domaine des y^+ positifs, plus la particule est introduite loin de l'axe $y^+ = 0$ (ce qui correspond à la particule bleue de la Figure 13), moins elle a de chance de se déposer à la paroi par rapport à une particule introduite près de l'axe (particule verte).

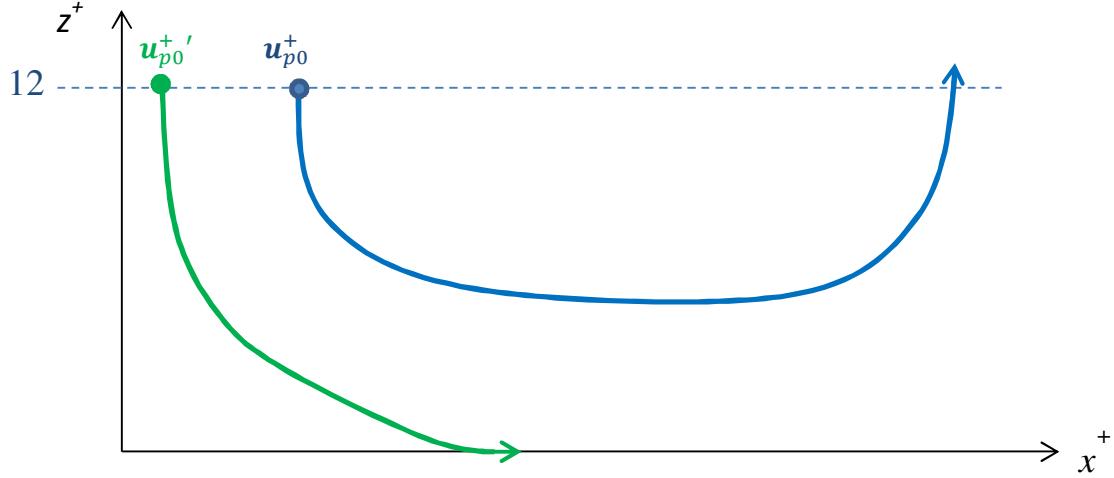


Figure 13 : Introduction des particules à $z^+ = 12$. En bleu, trajectoire d'une particule qui sort de la sous-couche visqueuse, en vert trajectoire d'une particule qui se dépose à la paroi solide.

On suppose que la particule est capturée dès qu'il y a contact entre elle et la surface de la paroi du canal, ce qui revient à négliger le rebond des particules à la paroi. La particule est donc capturée lorsque la condition suivante est satisfaite :

$$z_p^+ \leq \frac{d_p^+}{2} \quad (3.7)$$

Dans le cas des hydrosols, les effets de la lubrification seront pris en compte. Nous supposons ici que le film qui sépare la particule de la paroi se rompt sous l'effet des aspérités présentes en surface de la paroi de dépôt ou sous l'influence des forces attractives de Van Der Waals.

Pour la prise en compte de la rugosité, nous reprenons la démarche présentée par Fan et Ahmadi⁵² pour adapter le modèle de Cleaver et Yates¹⁸ : ils définissent tout d'abord une hauteur équivalente de rugosité (au sens hydraulique du terme, c'est-à-dire des expériences originelles de Nikuradse réalisées sur des tuyaux rendus artificiellement rugueux en cimentant des grains de sable) que nous notons ici ε . Les effets de la rugosité se traduisent par une translation de l'écoulement à partir de la paroi. Dans le cas où la hauteur équivalente de rugosité est faible ($\varepsilon^+ < 5$), le régime d'écoulement est dit hydrauliquement lisse et le déplacement de l'origine de l'écoulement (par rapport à la paroi) est estimé par les auteurs à $0,53\varepsilon^+$. En outre, ils estiment que l'écart-type de la rugosité (au sens de la tribologie) est de l'ordre de $0,17\varepsilon^+$. Dans ces conditions, la condition de capture complète⁵² s'écrit :

$$z_p^+ \leq \frac{d_p^+}{2} + \varepsilon^+ - 0,53\varepsilon^+ + 0,17\varepsilon^+ \quad (3.8)$$

Soit :

$$z_p^+ \leq \frac{d_p^+}{2} + 0,64\varepsilon^+ \quad (3.9)$$

où z_p^+ est pris par rapport au plan horizontal où la vitesse du fluide s'annule.

Pour un jeu de conditions données (rapport de densité fluide/particule, diamètre des particules, ...), il existe une valeur seuil $y_{p0_lim}^+$ au-dessus de laquelle toutes les particules introduites dans le domaine à $z_{p0}^+ = 12$ sont convectées en dehors du domaine sans avoir atteint la paroi tandis que toutes les particules introduites dans l'intervalle $[0 ; y_{p0_lim}^+]$ se déposent à la paroi. C'est ce qu'on nomme la trajectoire limite de dépôt de la particule. En intégrant le flux de particules qui se déposent entre 0 et $y_{p0_lim}^+$, on peut calculer la vitesse de dépôt des particules qui s'écrit en première approximation :

$$w_d^+ = \frac{1}{y_{tot}^+} \left| (w_{py}^+)_{o_lim} \right| y_{p0_lim}^+ \quad (3.10)$$

où $(w_{py}^+)_{o_lim}$ est la composante normale à la paroi de la vitesse initiale de la particule introduite en $y_{p0}^+ = y_{p0_lim}^+$ et y_{tot}^+ est la dimension du demi-domaine. Pour plus de clarté, la Figure 14 synthétise les différentes notations.

En jaune on représente la trajectoire d'une particule qui ne se dépose pas à la paroi solide. La courbe verte est la trajectoire de la particule introduite à la valeur seuil. On retrouve le même type de trajectoire que celle présentée par Shams *et al.*⁵³. Les courbes bleues et noires illustrent deux trajectoires de particules qui se déposent à la paroi solide.

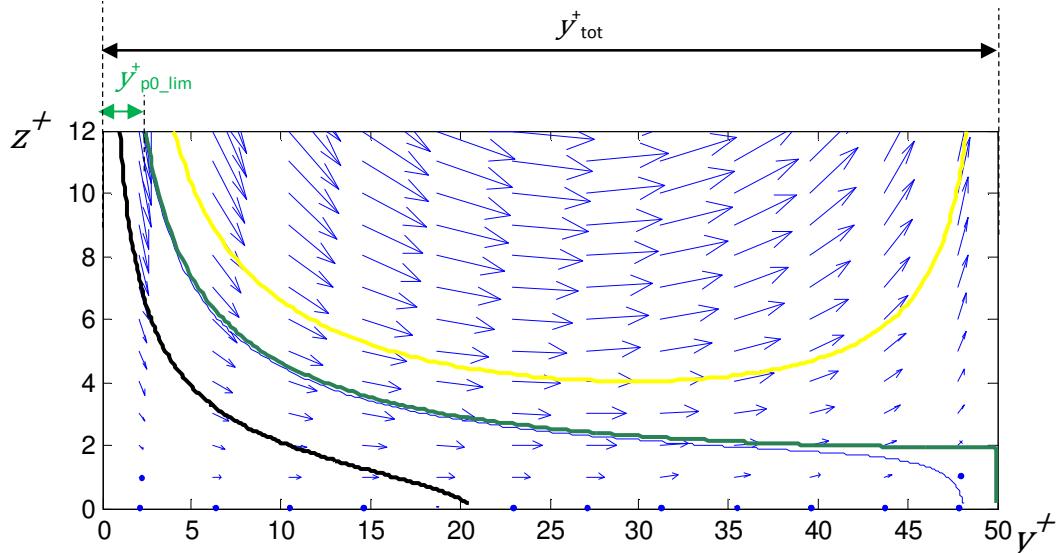


Figure 14 : Évaluation de la trajectoire limite (jaune : trajectoire d'une particule qui ne se dépose pas à la paroi, vert : trajectoire limite pour laquelle la particule se dépose à la paroi, noir et bleu : trajectoire d'une particule qui se dépose à la paroi)

L'évaluation de la trajectoire limite se fait suivant un processus de dichotomie. Dans un premier temps, on effectue des tests de trajectoires pour trouver une condition initiale (par exemple $y_{p0}^+ = 10^{-11}$) pour laquelle la particule se dépose à la paroi et une condition initiale pour laquelle la particule ne se dépose pas à la paroi (par exemple $y_{p0}^+ = 25$). Nous noterons ces deux conditions respectives $y_{p0}^{+sans depot}$ et y_{p0}^{+depot} . Commence ensuite le processus de dichotomie qui consiste à introduire la particule numéro k en

$$y_{p0}^{+k} = \frac{(y_{p0}^{+depot} - y_{p0}^{+sans depot})}{2} \quad (3.11)$$

À chaque itération, selon le dépôt ou non de la particule, on réactualise y_{p0}^{+k} , $y_{p0}^{+sans depot}$ ou y_{p0}^{+depot} .

Le processus dichotomique s'arrête lorsque la condition suivante est respectée :

$$\frac{|y_{p0}^{+k} - y_{p0}^{+k-1}|}{y_{p0}^{+k}} \leq 10^{-5} \quad (3.12)$$

3.4 Cas de l'aérosol et validation du code

Dans un premier temps, nous avons effectué des simulations avec les mêmes paramètres d'entrée qu'Ahmadi pour permettre une comparaison directe de nos résultats. Les conditions de tests sont des particules solides en suspension dans l'air et circulant dans un canal horizontal. Le dépôt s'effectue sur la paroi du bas, la sédimentation est donc favorable au dépôt.

	ρ_f (kg.m ⁻³)	ρ_p (kg.m ⁻³)	v (m ² .s ⁻¹)	u_τ (m.s ⁻¹)	τ_p^+	d_p^+
Aérosol	1,293	1293	$1,56 \cdot 10^{-5}$	0,3	0,1 à 10	0,01 à 0,42

Tableau 2 : Conditions des simulations de l'aérosol

Dans cette étude, la diffusion brownienne n'est pas simulée, c'est pourquoi nous ne considérerons pas de particules de diamètres inférieurs à $d_p^+ = 0,01$. Nous comparerons donc systématiquement tous les résultats au modèle de Wood écrit sans le terme de diffusion brownienne.

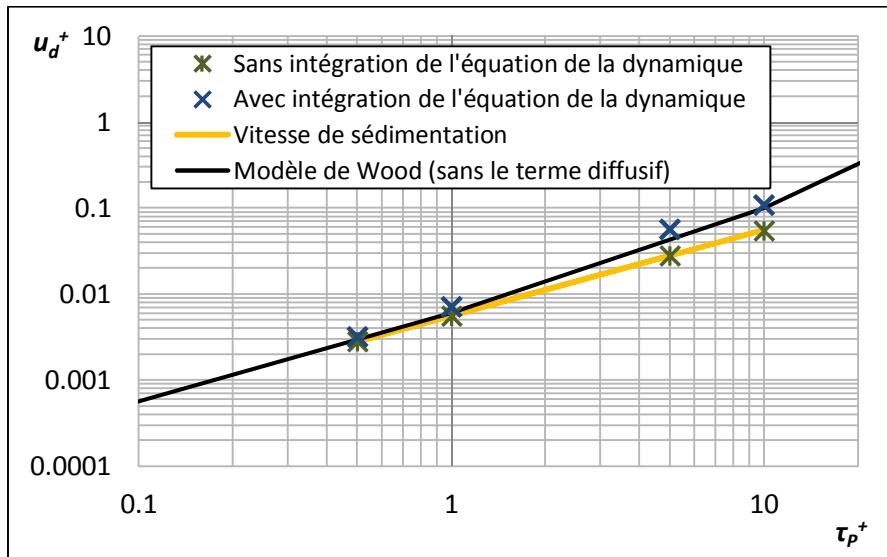


Figure 15 : Influence de l'inertie sur la vitesse de dépôt

La Figure 15 présente la vitesse de dépôt des particules en fonction du nombre de Stokes particulaire obtenu d'une part en intégrant l'équation de la dynamique (3.1), c'est-à-dire avec les effets inertIELS, d'autre part en utilisant l'équation (3.4), c'est-à-dire sans intégration et donc sans effet inertiel. Il apparaît que les résultats obtenus avec effets inertIELS sont en bon accord avec le modèle semi-empirique de Wood (lui-même calé sur les résultats expérimentaux de Liu et Agarwal), ce qui constitue une validation partielle de notre code de calcul.

En outre, nous observons que les effets inertIELS semblent négligeables lorsque le nombre de Stokes est inférieur à 1 puisque la vitesse de dépôt avec effet inertiel est très proche de la vitesse de chute des particules : le dépôt est contrôlé par la gravité. Lorsque le nombre de Stokes est supérieur à 1, la vitesse de dépôt avec effet inertiel est significativement supérieure à celle calculée sans effet inertiel (égale à la vitesse de chute) : la contribution de l'inertie des particules devient importante.

Sur la Figure 16 nous présentons les résultats de simulations obtenues pour des parois rugueuses. Le domaine de variation de la hauteur équivalente de rugosité est identique à celui fixé pour l'étude des hydrosols (la rugosité doit être suffisamment petite devant la taille des particules pour que les expressions des coefficients de frottement soient applicables).

Nous n'observons pas un effet important de la rugosité sur la vitesse de dépôt des particules, ce qui peut s'expliquer par les faibles valeurs de rugosité que l'on a prises en compte ($\varepsilon^+ < 2 \cdot 10^{-3}$). En revanche, à des valeurs plus élevées de rugosité ($\varepsilon^+ > 0,2$), Fan et Ahmadi observent une augmentation de la vitesse de dépôt due à la rugosité.

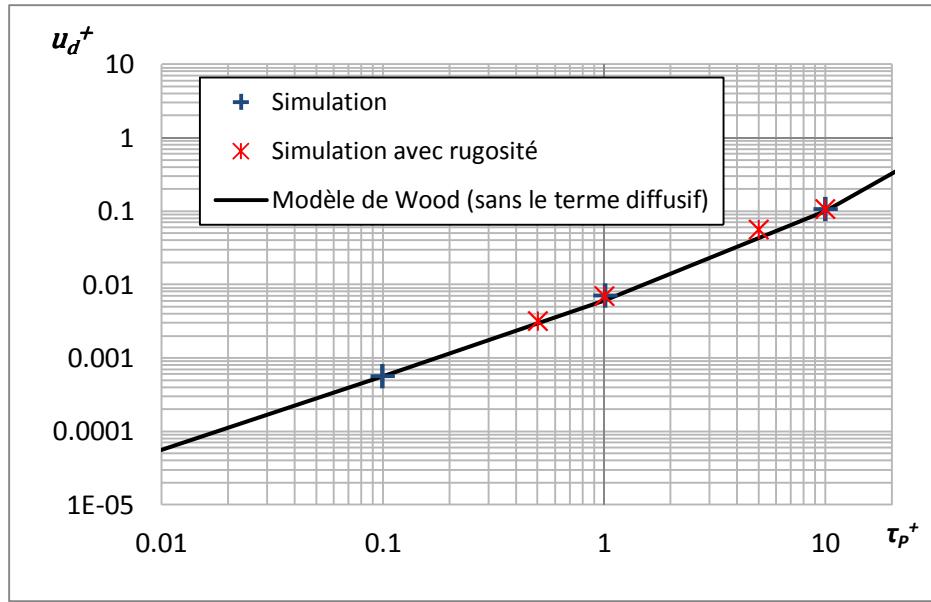


Figure 16 : Comparaison du modèle de Cleaver et Yates avec le modèle de Wood – effet de la rugosité

Enfin, nous avons aussi étudié l'influence des effets de la lubrification sur la capture des aérosols. Pour cela, nous avons résolu l'équation du mouvement (3.1) en introduisant les coefficients de frottement. Nous pouvons voir Figure 17 que l'influence de la lubrification sur le dépôt des particules est négligeable. Ce résultat est cohérent avec le fait que la viscosité de l'air étant très inférieure à celle d'un liquide, le « film » d'air qui sépare la particule de la paroi solide est plus facile à drainer qu'un film de liquide. Cela justifie qu'aucun des modèles cités précédemment ne prenne les effets de lubrification en compte, puisque les auteurs s'intéressent de la même façon que Fan et Ahmadi, à des particules en suspension dans un gaz.

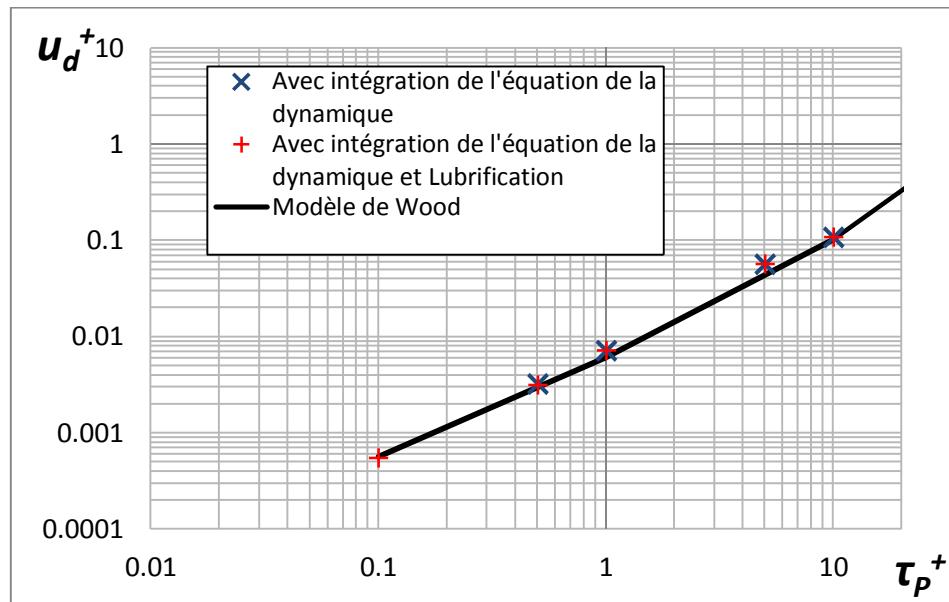


Figure 17 : Effet de la lubrification sur la vitesse de dépôt

Remarque

Nous avons montré que, dans le cas d'un aérosol en conduite horizontale, pour des valeurs de nombre de Stokes comprises entre 0,1 et 10, les mécanismes de capture principaux sont la sédimentation et la capture par impact inertiel et turbulent, en accord avec le modèle de Wood. La contribution de la sédimentation étant relativement importante (et évidente), il aurait été en fait plus judicieux et plus discriminant (pour valider le code) de simuler l'écoulement d'un aérosol dans une

conduite verticale afin de s'affranchir des effets gravitaires sur le dépôt. Ce travail a été effectué plus tard par Magali Dupuy dans le cadre d'un post-doctorat au LGPM : il apparaît que les résultats fournis par le code sont en très bon accord avec les données expérimentales de la littérature. Notons que dans ce cas, la loi de Wood pour la vitesse s'écrit :

$$u_d^+ = 4,5 \cdot 10^{-4} \tau_p^{+2} \quad (3.13)$$

3.5 Cas de l'hydrosol

3.5.1 Mécanismes de capture

3.5.1.1 Résultats du modèle

Nous adaptons maintenant le modèle de Cleaver et Yates¹⁸ au cas de particules d'alumine en suspension dans de l'acier liquide, dans le but de simuler la capture des inclusions dans une conduite horizontale.

Une étude paramétrique sur la vitesse de frottement pariétale et le nombre de Stokes particulaire a été entreprise dans le cas de l'hydrosol. Les valeurs utilisées sont résumées dans le Tableau 3. Du fait du faible rapport des densités entre le fluide et les particules, nous sommes limités au niveau des nombres de Stokes avec lesquels nous pouvons travailler, puisque pour $\tau_p^+ = 0,1$ le diamètre adimensionné de la particule vaut déjà 1,9 unité de paroi.

Le sens de la gravité est orienté de telle sorte que le bilan des forces en volume soit favorable au dépôt à la paroi solide.

	ρ_f (kg.m ⁻³)	ρ_p (kg.m ⁻³)	ν (m ² .s ⁻¹)	u_τ (m.s ⁻¹)	τ_p^+	d_p^+	l_τ (m)
Hydrosols	7000	3500	$7,85 \cdot 10^{-7}$	0,3 à 0,03	10^{-3} à 10^{-1}	0,19 à 1,9	$2,6 \cdot 10^{-5}$ à $2,6 \cdot 10^{-4}$

Tableau 3 Paramètres de l'étude de l'hydrosol

La poussée d'Archimède étant non négligeable dans le cas du métal liquide, il faut donc l'inclure dans la vitesse de dépôt semi-empirique proposée par Wood, ce qui donne :

$$u_d^+ = 4,5 \cdot 10^{-4} \tau_p^{+2} - \tau_p^+ g^+ \left(1 - \frac{\rho_f}{\rho_p} \right) \quad (3.14)$$

Évolution de la vitesse de dépôt en fonction du nombre de Stokes

La Figure 18 présente les variations de la vitesse de dépôt (calculées avec notre code de calcul) en fonction du nombre de Stokes particulaire. À une valeur de la vitesse de frottement pariétale fixée, la vitesse de dépôt augmente avec le nombre de Stokes de la particule. En effet, à vitesse de frottement donnée, quand le nombre de Stokes croît, le diamètre des particules croît, ce qui conduit à une augmentation de la sédimentation (et donc de la vitesse de chute de la particule) et de l'interception directe.

Influence de la vitesse pariétale :

Pour un même nombre de Stokes, on observe une baisse de la vitesse de dépôt lorsque la vitesse de frottement augmente. Ce phénomène s'explique par le fait que le diamètre de la particule permettant d'obtenir un nombre de Stokes donné est plus grand lorsque la vitesse de frottement diminue. À même nombre de Stokes, la vitesse de chute est donc plus faible lorsque la vitesse de frottement augmente, ce qui diminue la vitesse de dépôt. Shams *et al.*⁵³ ont observé le même phénomène dans le cadre de leur étude portant sur le dépôt des aérosols.

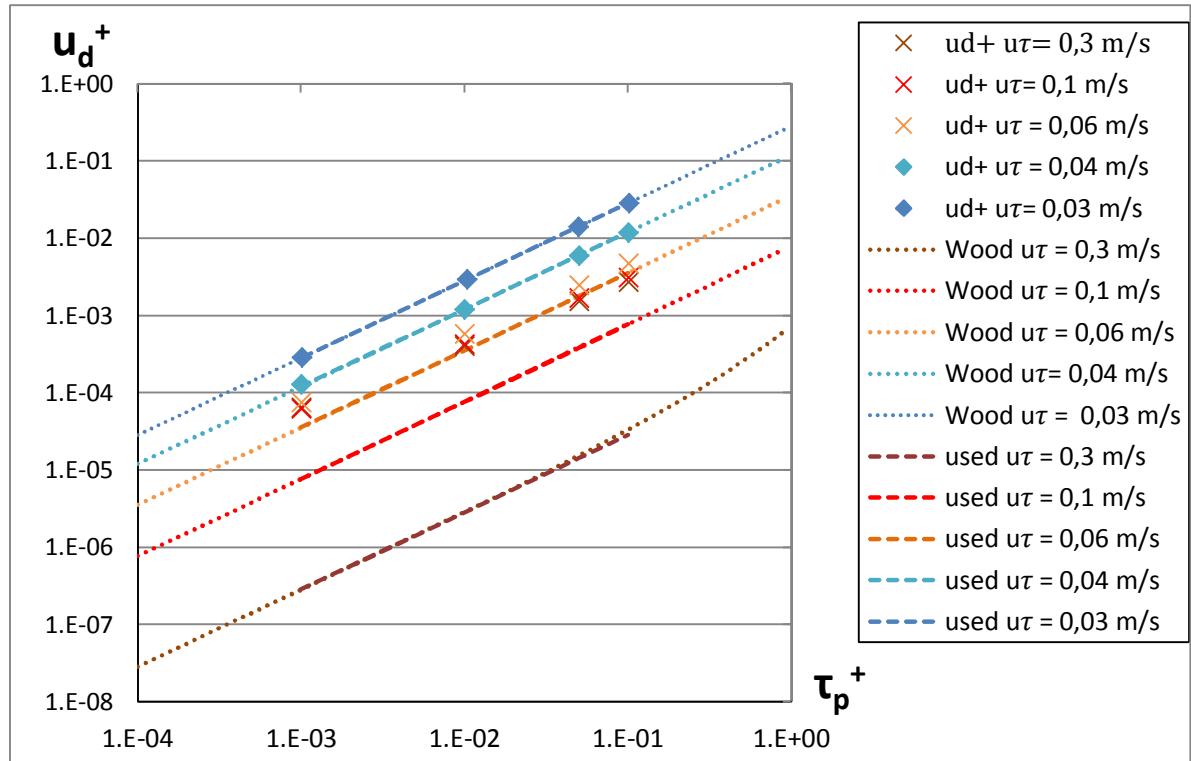


Figure 18 : Influence de la vitesse de frottement sur le dépôt. Comparaisons avec le modèle de Wood, la rugosité est fixée à $2,5.10^{-8}$ m

Comparaison avec le modèle de Wood

Lorsque l'échelle de vitesse u_τ est inférieure à 0,04m/s, la vitesse de dépôt est en bon accord avec le modèle de Wood : le dépôt est contrôlé par la sédimentation des particules comme le montre la comparaison avec la vitesse de chute des particules.

Par contre, pour des vitesses supérieures à 0,06m/s on observe un écart entre les vitesses de dépôt particulaire calculées par notre modèle d'une part et le modèle de Wood et la vitesse de chute d'autre part : le dépôt n'est donc pas contrôlé par la vitesse de chute des particules bien qu'elle soit présente et induise un changement de la pente de la vitesse de dépôt en fonction du nombre de Stokes de la particule.

Pour essayer d'analyser cela, nous rappelons dans le Tableau 4 quelques différences entre l'aérosol et l'hydrosol.

		Aérosol	Hydrosol
Viscosité dynamique du fluide μ (Pa.s)		$2,0.10^{-5}$	$5,5.10^{-3}$
Rapport de densité ρ_p/ρ_f		1000	0,5
Pour $\tau_p^+ = 0,1$ et $u_\tau = 0,3$ m/s	$4,5.10^{-4} \tau_p^{+2}$ (Modèle de Wood)	$4,5.10^{-6}$	$4,5.10^{-6}$
	u_{sed}^+	$\tau_p^+ g^+ = 5,7.10^{-4}$	$\tau_p^+ g^+ \left(1 - \rho_f/\rho_p\right) = 1,4.10^{-5}$

Tableau 4 Quelques différences entre les aérosols et les hydrosols

Pour une même valeur du nombre de Stokes, la valeur du terme $4,5.10^{-4} \tau_p^{+2}$ est identique quelle que soit la valeur de la vitesse de frottement. En revanche, à valeur donnée du nombre de Stokes, le terme $\tau_p^+ g^+ \left(1 - \rho_f/\rho_p\right)$ est proportionnel à u_τ^{-3} : lorsque u_τ diminue, l'importance de la capture par sédimentation diminue donc aussi. Cependant, comme on peut le voir sur l'exemple présenté dans le Tableau 4, l'effet de la sédimentation dans le cas de l'aérosol pour $u_\tau = 0,3$ m/s et $\tau_p^+ = 0,1$ (ce qui

correspond au cas extrême de nos simulations pour l'hydrosol) est 100 fois plus grand que l'impact inertiel et turbulent, tandis qu'il n'est que 2 fois plus grand dans le cas de l'hydrosol.

Le terme d'impact inertiel et turbulent du modèle de Wood gagne donc en importance et le fait que la vitesse de dépôt soit sous-estimée est peut-être dû au fait que le modèle de Wood ne décrirait pas de façon correct ce mécanisme dans le cas des hydrosols. Or, la vitesse de chute des hydrosols est relativement faible lorsque la vitesse de frottement augmente et donc une mauvaise description de l'impact inertiel et turbulent peut influer fortement sur le dépôt.

On rappelle que le terme de Wood d'impact inertiel et turbulent comprend aussi l'interception directe. Les simulations suivantes ont été effectuées dans le but d'identifier l'importance de chacun des mécanismes de capture.

Influence de la sédimentation :

Des simulations sans gravité ont été effectuées, les résultats sont présentés Figure 19. Quelle que soit la vitesse de frottement appliquée, on remarque que la vitesse de dépôt est la même pour un nombre de Stokes fixé et qu'elle augmente avec celui-ci.

Pour les différentes vitesses de frottement, la vitesse de dépôt est bien inférieure à la vitesse de sédimentation. De plus, pour les simulations effectuées à l'aide d'une vitesse de frottement élevée, la vitesse de dépôt est très proche de la vitesse de dépôt obtenue dans les mêmes conditions avec la sédimentation en plus. De ce fait, lorsque la capture par sédimentation est absente, les mécanismes de capture principaux sont les mêmes que ceux contrôlant le dépôt des particules soumises à une vitesse de frottement élevée et ils deviennent importants aussi pour les simulations effectuées à faible vitesse de frottement. Cela peut être l'impact inertiel et turbulent et/ou l'interception directe.

De plus, on compare l'écart entre le modèle de Wood sans sédimentation (en ne prenant que le terme d'impact inertiel et turbulent) et les simulations : cet écart est non négligeable. Ce résultat va dans le sens d'une mauvaise adéquation, dans le cas des hydrosols, du terme d'impact inertiel et turbulent développé pour les aérosols.

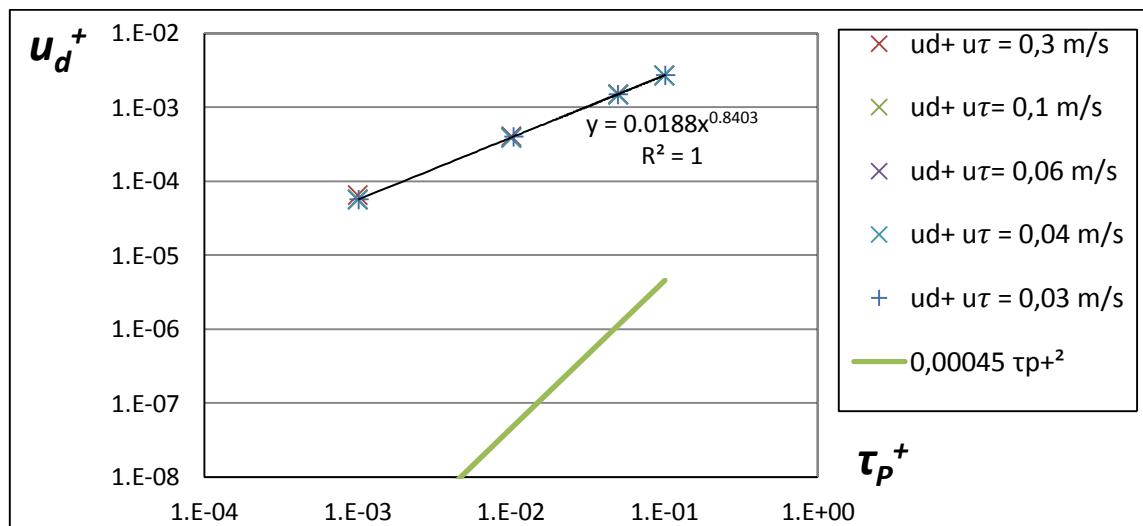


Figure 19 : Simulations sans sédimentation

Importance de l'interception directe, étude de l'inertie :

On peut distinguer le mécanisme d'interception directe de l'impact inertiel en étudiant le dépôt de particules qui suivent parfaitement les lignes de courant, pour cela on néglige l'inertie de la particule. Quand on compare les vitesses de dépôt avec inertie et sans inertie (Figure 20), on observe que l'impact inertiel est bien négligeable (ici $\rho_p/\rho_f = 1$).

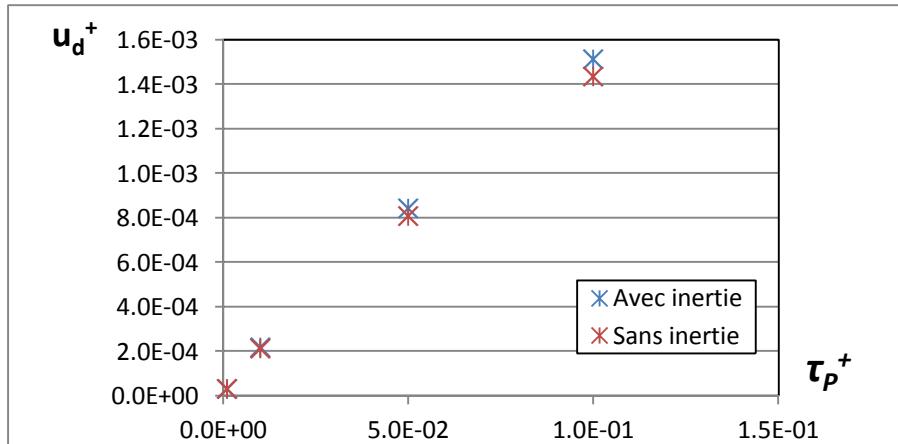


Figure 20 : Influence de l'inertie lors des simulations de particules de même densité que le fluide ($u^* = 0,03\text{m/s}$)

Ce résultat est cohérent avec le fait que le nombre de Stokes des particules étant très faible, les particules ont très peu d'inertie et réagissent donc très vite à toute modification du champ de vitesse du fluide. Pour les particules ayant le nombre de Stokes le plus élevé, l'écart entre les deux vitesses de dépôt est inférieur à 6%.

Ainsi, les particules suivent bien les lignes de courant lorsque la sédimentation n'est pas prise en compte, et le seul mécanisme de dépôt est l'interception directe.

D'après la Figure 19, la contribution de l'interception directe peut être décrite à l'aide de la loi :

$$u_d^+ = 0,0188 (\tau_p^+)^{0,84} = 9,3 \times 10^{-4} (d_p^+)^{1,68} \quad (3.15)$$

Influence de la diffusion brownienne :

Dans les résultats présentés ci-dessus pour l'hydrosol, le terme de dépôt du modèle de Wood par diffusion brownienne et turbulente n'a pas été pris en compte car nous ne modélisons pas le dépôt par diffusion brownienne. On choisit de vérifier ici cette hypothèse.

Pour les diamètres de particules considérées, la diffusion brownienne est *a priori* négligeable et ceci est confirmé par la comparaison de nos vitesses de dépôt avec les vitesses de dépôt par diffusion turbulente et brownienne de Wood issues des calculs de Davies :

$$u_d^+ = 0,057 \text{ Sc}^{-\frac{2}{3}} \quad (3.16)$$

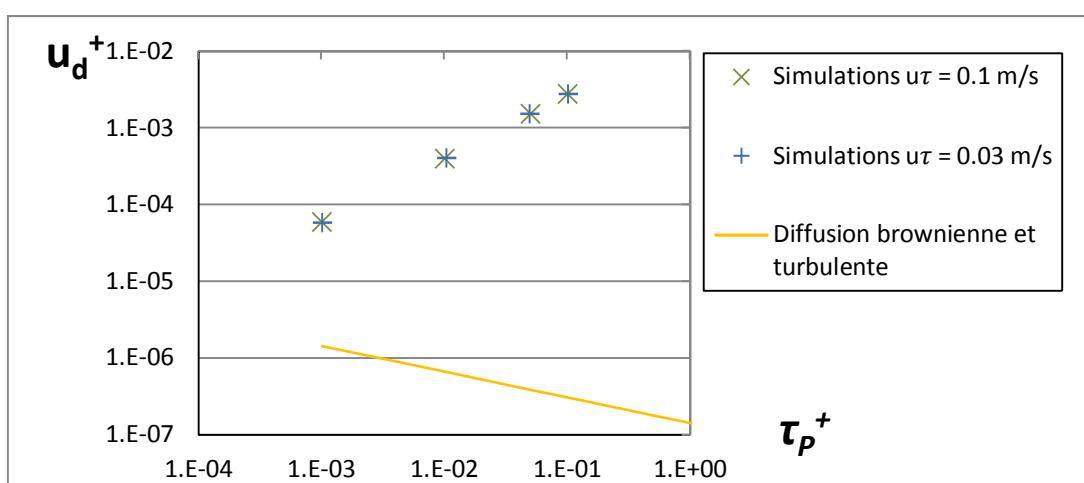


Figure 21 : Comparaison du dépôt sans sédimentation avec le dépôt par diffusion turbulente et brownienne

Ainsi, on a vérifié dans ce paragraphe que la capture par diffusion brownienne des particules est bien négligeable dans notre domaine d'étude.

En résumé, lorsque la sédimentation est prise en compte, deux domaines peuvent être définis en fonction de la vitesse de frottement pariétale du fluide. Lorsque la vitesse de frottement est faible, le dépôt de la particule est contrôlé par la vitesse de sédimentation de celle-ci. Par contre, lorsque la vitesse de frottement est élevée, le dépôt de la particule est contrôlé par l'interception directe.

Lorsque la sédimentation n'est pas prise en compte, il n'y a par contre pas d'influence de la vitesse de frottement sur les mécanismes de dépôt ; quelle que soit la vitesse de frottement, le mécanisme principal de capture est l'interception directe. L'inertie de la particule est négligeable.

3.5.1.2 Comparaison avec la théorie

Hallberg *et al.*⁶ proposent un modèle de dépôt turbulent de particules d'oxydes sur les parois d'un réacteur métallurgique. La méthodologie qu'ils ont utilisée est très proche de celle de Davies qui a été reprise par Wood.

Nous avons voulu comparer leur modèle à nos simulations. Pour cela nous avons introduit les données numériques relatives à notre cas dans la formule de la vitesse de dépôt calculée par Hallberg *et al.*⁶. Étonnement, lorsque l'on compare leur modèle à nos simulations, les vitesses de dépôts sont assez proches de nos simulations comme on peut le voir Figure 22.

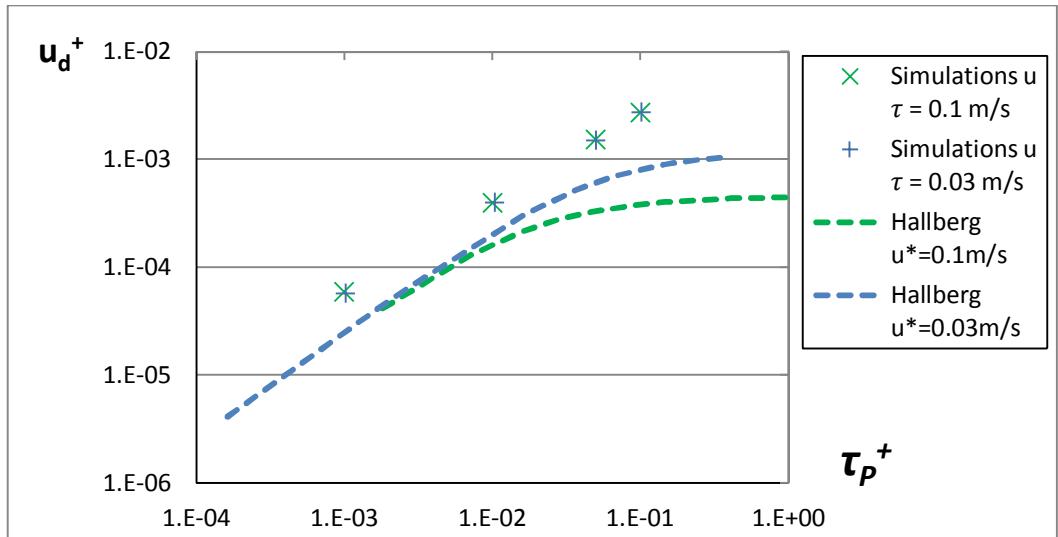


Figure 22 : Comparaison des vitesses de dépôt des simulations avec le modèle de Hallberg *et al.*

Pour trouver une explication à cela il nous faut revenir aux calculs effectués par Davies⁵⁹ et par Hallberg *et al.*⁶. Les calculs sont très similaires dans les deux cas et suivent la même méthodologie.

La vitesse de dépôt adimensionnée de la particule peut s'écrire :

$$u_d^+ = \left(\frac{D_B}{\nu} + \frac{D_E}{\nu} \right) \frac{dC^+}{dz^+} \quad (3.17)$$

où D_B est le coefficient de diffusion brownien de la particule, D_E est le coefficient de diffusion turbulente de la particule, C^+ est la concentration en particules normalisée par la concentration en particules C_0 loin de la paroi ($C^+ = C/C_0$) et z^+ est la distance à la paroi solide. C^+ est égale à 1 loin de la paroi solide.

Davies⁵⁹ et Hallberg *et al.*⁶ calculent donc la vitesse de dépôt en intégrant l'équation (3.17) ce qui donne :

$$u_d^+ = \frac{\int_0^1 dC^+}{\int_{z_0^+}^{z_\infty^+} \frac{\nu}{(D_B + D_E)} dz^+} \quad (3.18)$$

où z_0^+ est la distance à la paroi solide où l'on suppose qu'il n'y a plus de particules (elles se sont déposées et leur concentration est nulle). z_∞^+ est la distance à la paroi solide où la concentration en particules est supposée égale à la concentration loin de la paroi solide (dans le centre du canal).

Ils partent d'une description simplifiée de la variation du coefficient de diffusion turbulente ν_t du fluide au voisinage d'une paroi solide lisse de canal.

La première hypothèse est de supposer que le coefficient de diffusion turbulente de la particule D_E est égal à la viscosité turbulente ν_t du fluide ($D_E = \nu_t$), ainsi la description de la diffusion turbulente du fluide permet la description de la diffusion turbulente des particules. Cette hypothèse revient à dire que les particules sont très peu inertielles et qu'elles réagissent donc très rapidement aux fluctuations turbulentes du fluide porteur, ce qui, pour des particules de petites tailles, est tout à fait envisageable.

Les hypothèses qui différencient les deux approches de Davies et d'Hallberg sont :

- le choix des bornes d'intégration z_0^+ et z_∞^+
- le choix de la description du coefficient de diffusion turbulente choisi
- la prise en compte de la diffusion brownienne

Comme on l'a rappelé précédemment, la zone de paroi peut se diviser en trois sous couches. En partant de la paroi solide, on a la sous couche visqueuse, la zone tampon et la zone logarithmique.

Davies⁵⁹ suppose qu'à l'entrée de la sous couche visqueuse, à $z^+ = 5$, la concentration adimensionnée C^+ de la particule est égale à 1. De plus, il suppose que la concentration C^+ est exactement nulle à la paroi : dans ces conditions il ne prend pas en compte l'interception directe.

Il effectue donc le calcul de la vitesse de dépôt de $z_0^+ = 0$ à $z_\infty^+ = 5$. Pour cela, il utilise la description suivante de Lin *et al.*⁷⁶ du coefficient de diffusion turbulente du fluide, dans la sous couche visqueuse :

$$\frac{\nu_t}{\nu} = \left(\frac{z^+}{14,5} \right)^3 \quad ; \quad z^+ < 5 \quad (3.19)$$

Ce qui donne après calcul de (2.27) :

$$u_d^+ = \frac{(D_B/\nu)^{2/3}}{14,5 \left(\frac{1}{6} \ln \frac{(1 + \phi_5)^2}{1 - \phi_5 + \phi_5^2} + \frac{1}{\sqrt{3}} \operatorname{Arctan} \left(\frac{2\phi_5 - 1}{\sqrt{3}} \right) + \frac{\pi}{6\sqrt{3}} \right)} \quad (3.20)$$

avec

$$\phi_5 = \frac{1}{2,9^3 \sqrt{D_B/\nu}}$$

La vitesse de dépôt selon Davies fait intervenir la taille de la particule dans le terme de diffusion brownienne seulement à travers D_B tandis que le diamètre de la particule n'apparaît pas dans le calcul du dépôt par diffusion turbulente.

Hallberg *et al.*⁶, de leur côté, supposent que la concentration C^+ est égale à 1 seulement jusqu'à la frontière de la couche limite, et qu'elle est égale à 0 lorsque la particule se trouve à un rayon de la paroi solide : ils prennent donc en compte l'interception directe. Ainsi, leur intervalle d'intégration est $z_0^+ = d_p^+/2$ à $z_\infty^+ = z_B^+$ où z_B^+ est l'épaisseur de la couche limite. Le coefficient de diffusion turbulente du fluide doit donc être estimé dans chacune des zones de la couche limite et les estimations de Davies¹⁷ et Mukai *et al.*⁷⁷ sont les suivantes :

$$\frac{\nu_t}{\nu} = \left(\frac{z^+}{8,9} \right)^3 \quad ; \quad z^+ < 5 \quad (3.21)$$

$$\frac{\nu_t}{\nu} = \left(\frac{z^+}{11} \right)^2 \quad ; \quad 5 \leq z^+ \leq 30 \quad (3.22)$$

$$\frac{\nu_t}{\nu} = 0,4z^+ \quad ; \quad 30 \leq z^+ \leq 100 \quad (3.23)$$

$$\frac{\nu_t}{\nu} = 19,04 \quad ; \quad 100 < z^+ \quad (3.24)$$

Ils ne prennent pas en compte la diffusion brownienne donc l'équation qu'ils intègrent se simplifie de la façon suivante :

$$u_d^+ = \frac{v_t}{v} \frac{dC^+}{dz^+} \quad (3.25)$$

et l'intégration de (3.25) à l'aide des équations (3.21) à (3.24) donne⁶ :

$$u_d^+ = \frac{1}{3,825 + \frac{8,9^3}{(d_p^+)^2/2} + \frac{z_B^+}{19,04}} \quad (3.26)$$

L'épaisseur de la couche limite est estimée à partir de l'équation suivante⁷⁸ :

$$z_B = 0,376x \left(\frac{v_t}{\bar{U}_0} x \right)^{1/5} \quad (3.27)$$

où \bar{U}_0 est la vitesse moyenne du fluide parallèlement à la paroi solide, et x est la distance au bord d'attaque. En première approximation, x a été choisi égal à la hauteur de la cuve du réacteur. Les conditions hydrodynamiques de l'écoulement (notamment u_τ) ayant été ici fixées à partir des conditions hydrodynamiques en haut d'une cuve d'Ascométal modélisée par le LSG2M.

On remarque que la vitesse de dépôt proposée par Hallberg *et al.*⁶ fait intervenir directement la taille de la particule dans le calcul du dépôt par diffusion turbulente dans l'équation (3.26). Cependant, lorsque la taille de la particule devient importante, le terme $2 * 8,9^3 / d_p^{+2}$ diminue fortement et la vitesse de dépôt tend alors vers une constante :

$$u_d^+ = \frac{1}{3,825 + \frac{z_B^+}{19,04}} \quad (3.28)$$

D'où le palier que l'on observe dans les vitesses de dépôt Figure 22. L'erreur provient du fait que la formulation d'Hallberg *et al.* n'est valable que pour des particules de diamètre d_p^+ inférieur à 5 (l'hypothèse de capture par la paroi solide et donc la distance à la paroi où la concentration C^+ est supposée nulle par Hallberg *et al.*⁶ n'est située que dans la sous couche visqueuse). Or ils utilisent leur formule en dehors du domaine de validité. Les particules plus grandes que la longueur de la sous-couche visqueuse ont donc une concentration supposée nulle à une distance de la paroi inférieure à leur rayon.

Différentes modifications aux modèles précédents peuvent être apportées. Après avoir testées plusieurs modifications, nous trouvons (Figure 23) que le modèle présenté par Hallberg *et al.*⁶ est beaucoup plus proche de nos résultats si la couche limite est considérée sur l'intervalle [0 ; 12] (*i.e.* en intégrant le coefficient de diffusion turbulente à partir de $z^+ = 12$) :

$$(u_d^+)^{-1} = \frac{8,9^3}{2} \left(\left(\frac{2}{d_p^+} \right)^2 - \frac{1}{25} \right) + \frac{847}{60} \quad (3.29)$$

Soit :

$$u_d^+ \cong 7 \cdot 10^{-4} d_p^{+2}$$

si le diamètre des particules vérifie la condition $d_p^+ < 10$.

La vitesse de dépôt réelle serait probablement plus élevée du fait de l'intervention dans la limite des petits diamètres, de la diffusion brownienne. Toutefois, on remarque que la vitesse de dépôt évolue donc en d_p^{+2} . L'exposant obtenu en interpolant les vitesses de dépôt des particules sur la Figure 19 est égal à 1,68, légèrement inférieur à 2 du fait que les particules simulées ne sont probablement pas suffisamment petites.

Ce modèle modifié consiste à supposer :

- que les particules ont une concentration $C^+ = 1$ à l'entrée de la sous couche visqueuse en $z^+ = 12$, et une concentration nulle $C^+ = 0$ à un rayon de la paroi solide
- la diffusion brownienne est négligeable pour les tailles de particules considérées
- le coefficient de diffusion turbulente utilisé est celui présenté par Davies¹⁷ et non pas celui proposé par Lin *et al.*⁷⁶.

Le palier, pour les tailles de particules considérées, a ainsi disparu. On remarque que lorsque l'équation (3.29) est calculée seulement entre $z^+ = [0 ; 5]$, les vitesses de dépôt varient peu, ce qui signifie *a priori* qu'entre $z^+ = 12$ et $z^+ = 5$, la concentration en particules varie faiblement.

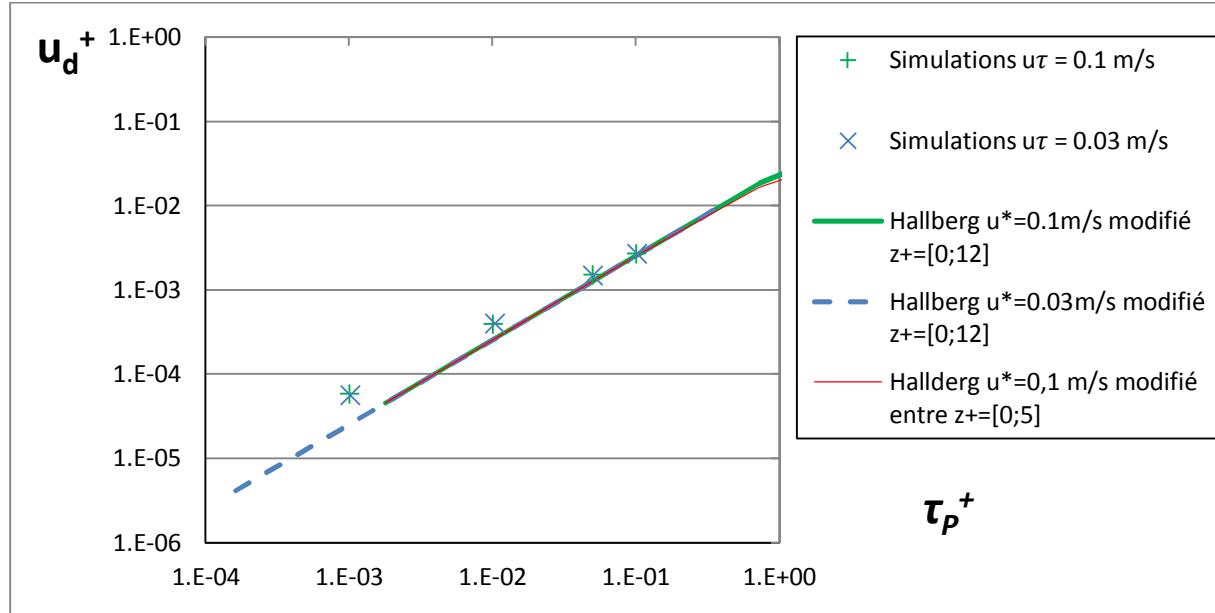


Figure 23 : Modèle de Hallberg *et al.* modifié et comparé à nos simulations

On compare sur la Figure 23 les résultats obtenus sur les vitesses de dépôt entre les différents modèles. Les modifications apportées au modèle permettent de mieux approcher les simulations obtenues dans notre cas à l'aide du modèle de Cleaver et Yates mais il faut garder à l'esprit que cela peut induire un biais dans l'analyse. Par exemple, dans le modèle de Cleaver et Yates, on suppose que $C^+ = 1$ à $z^+ = 12$. Le fait que le modèle modifié de Hallberg donne des résultats proches de ceux de Cleaver et Yates ne prouve nullement qu'entre $z^+ = 12$ et $z^+ = z_B^+$, il n'y ait pas de baisse significative de la concentration dans la réalité.

3.5.2 Effets de la lubrification

On s'intéresse maintenant aux effets de la lubrification sur le dépôt des hydrosols. Pour simplifier l'analyse des mécanismes de capture, nous présentons dans un premier temps des simulations dans lesquelles la sédimentation n'est pas prise en compte. Le dépôt avec lubrification et sédimentation fera l'objet de la deuxième partie. Les particules auront une densité égale à la moitié de celle du fluide, sauf indication contraire.

Dans chacun des cas, différentes valeurs de rugosité ont été prises en compte ainsi que différentes vitesses de frottement.

Vitesse de frottement u_τ (m/s)	Rugosité ϵ (m)
$0,03 ; 0,06 ; 0,1 ; 0,3$	$3,9 \cdot 10^{-8} ; 11,7 \cdot 10^{-8} ; 3,9 \cdot 10^{-7}$

Tableau 5 : Valeurs étudiées pour le dépôt des hydrosols sur une paroi solide

3.5.2.1 Sans sédimentation

Sur la Figure 24 et la Figure 25, nous présentons la vitesse de dépôt adimensionnée en fonction de la vitesse de frottement pariétale. Les résultats sont donnés pour une hauteur équivalente de rugosité égale à $7,5 \cdot 10^{-8}$ m, sachant que l'évolution des vitesses est la même pour les deux autres hauteurs testées.

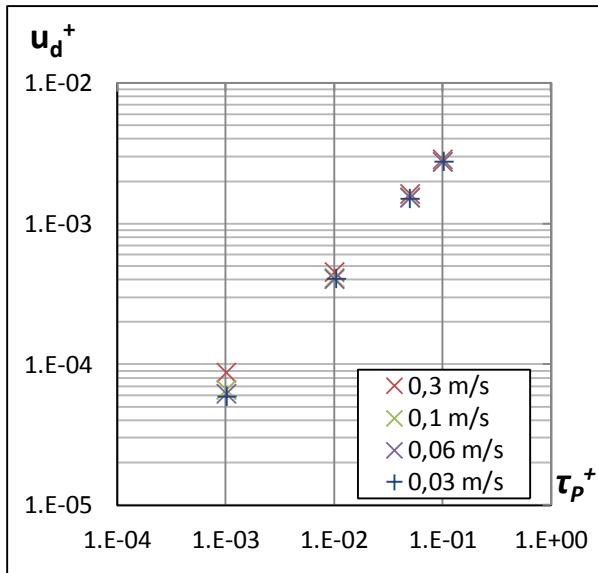


Figure 24 : Vitesse de dépôt adimensionnée pour une rugosité égale à $11,7 \cdot 10^{-8}$ m sans prendre en compte la lubrification

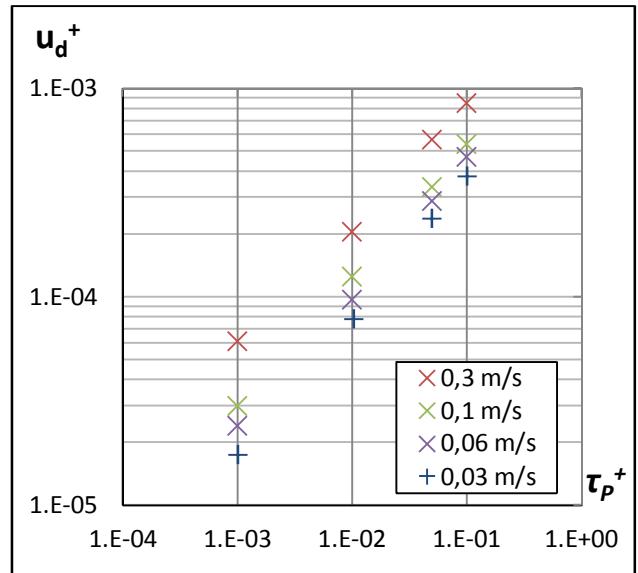


Figure 25 : Vitesse de dépôt adimensionnée pour une rugosité égale à $11,7 \cdot 10^{-8}$ m en prenant en compte la lubrification

Influence de la rugosité :

Lorsque la lubrification n'est pas prise en compte, les vitesses de dépôt varient peu en fonction de la vitesse de frottement. Pour la vitesse de frottement la plus grande et le temps de relaxation le plus bas, la vitesse de dépôt est plus élevée que pour les autres vitesses de frottement, ce qui s'explique par le fait que dans ce cas-là, la rugosité est de taille importante par rapport au diamètre de la particule. Le dépôt par interception directe est donc plus important.

Influence de la lubrification :

Par contre, lorsque la lubrification est prise en compte, on observe une baisse importante de la vitesse de dépôt, et une différence de comportement plus marquée selon la vitesse de frottement. Contrairement aux aérosols, la vitesse de dépôt des hydrosols diminue fortement lorsque la lubrification est prise en compte.

Sur la Figure 26, on représente l'évolution du rapport de la vitesse de dépôt sans lubrification $u_d^{sans lub}$ sur la vitesse de dépôt avec lubrification u_d^{lub} , $u_d^{sans lub}/u_d^{lub}$. Pour un diamètre donné, la rugosité va influer sur le dépôt de la particule, c'est pourquoi nous présentons le rapport des vitesses de dépôt en fonction du diamètre de la particule adimensionné par la valeur de la rugosité à la paroi.

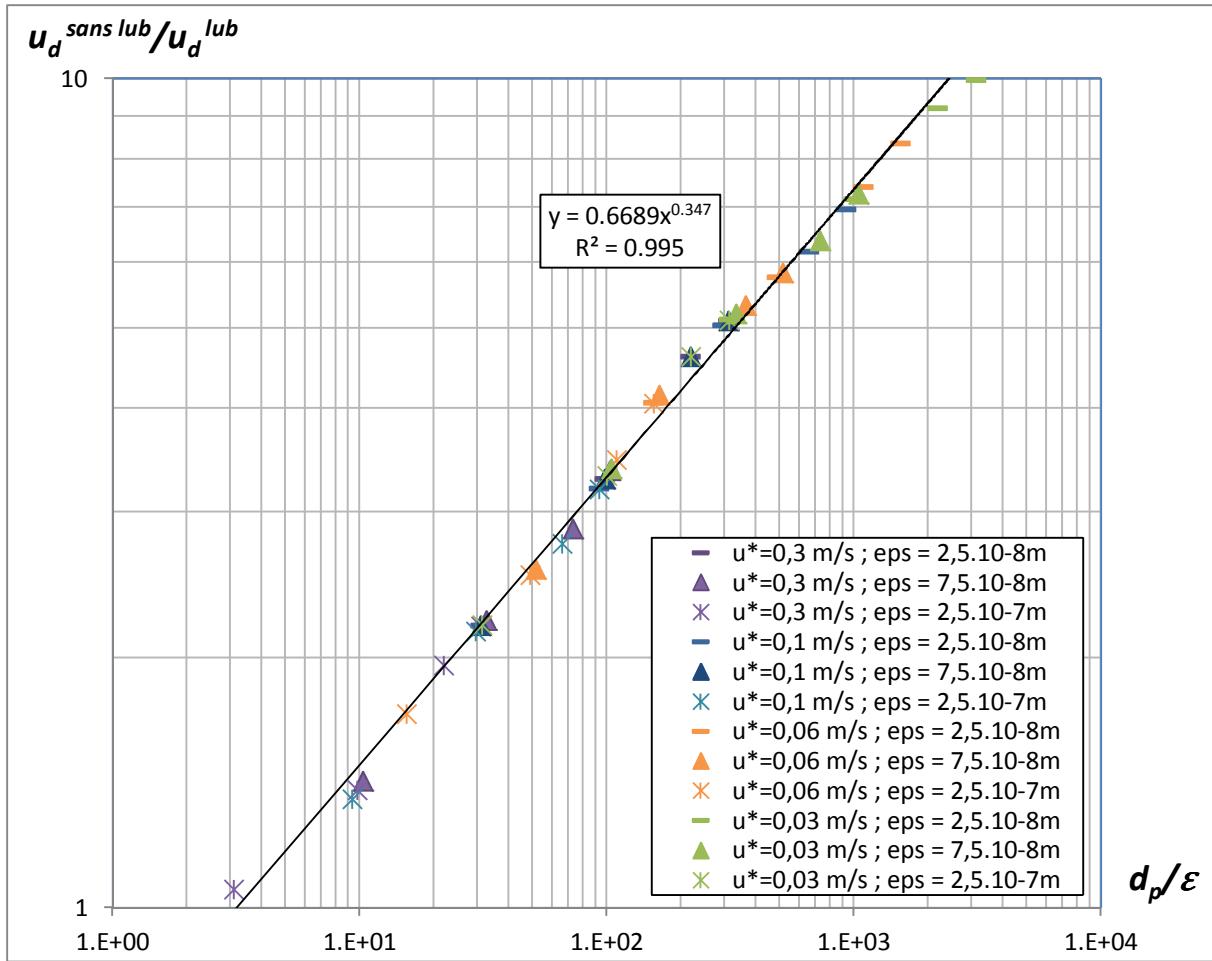


Figure 26: Évolution du rapport entre la vitesse de dépôt sans lubrification sur la vitesse de dépôt avec lubrification, en fonction du diamètre de la particule adimensionnée par la taille de l'aspérité à la paroi. Sans sédimentation.

Une étude de sensibilité sur la vitesse de frottement pariétale ainsi que la rugosité à la paroi a été effectuée. On remarque que les points sont relativement bien alignés. L'interpolation de l'ensemble des points par une fonction puissance conduit à :

$$\frac{u_d^{\text{lub}}}{u_d^{\text{sans lub}}} \cong \frac{3}{2} \left(\frac{\varepsilon}{d_p} \right)^{0,35} \quad (3.30)$$

3.5.2.2 Avec sédimentation

Pour étudier l'effet de la lubrification et de la rugosité sur la vitesse de dépôt avec sédimentation, nous définissons la grandeur Δ_d comme le rapport entre la contribution de la sédimentation sans lubrification et celle avec lubrification (nous supposons implicitement ici que les contributions de l'interception directe et de la sédimentation sont additives). Nous représentons les variations de Δ_d en fonction de d_p / ε sur la Figure 27.

$$\Delta_d = \frac{(u_d - u_d^{\text{sans sed}})^{\text{sans lub}}}{(u_d - u_d^{\text{sans sed}})^{\text{lub}}} \quad (3.31)$$

On observe que les points correspondant à la vitesse de frottement la plus basse, $u_\tau = 0,03 \text{ m/s}$, ne sont pas alignés avec les autres. On peut donc en conclure que lorsque la sédimentation affecte fortement le dépôt de la particule, les effets de la lubrification sur les vitesses de dépôt ne permettent pas d'additionner directement les mécanismes d'interception directe et de sédimentation.

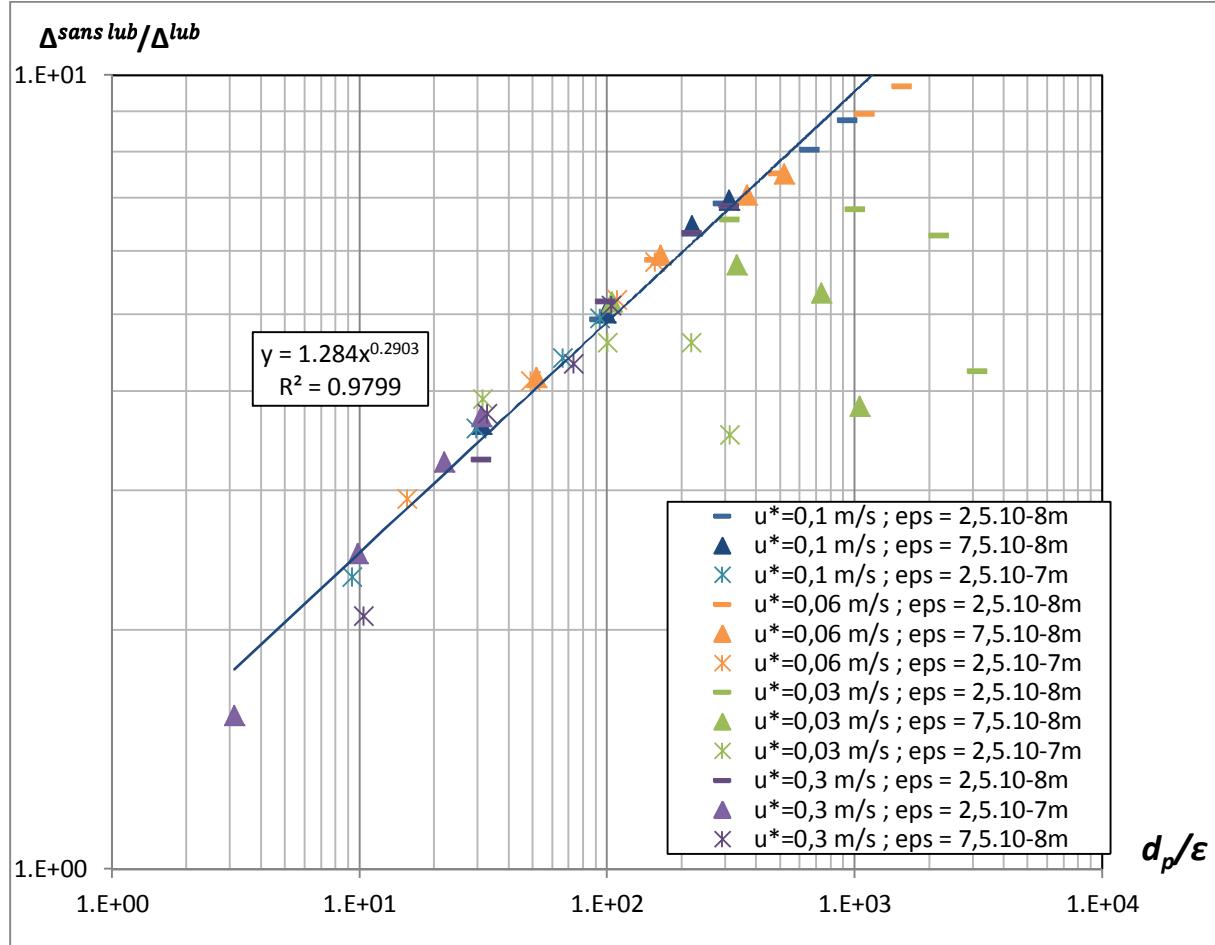


Figure 27 : Évolution du rapport entre la vitesse de dépôt sans lubrification sur la vitesse de dépôt avec lubrification, en fonction du diamètre de la particule adimensionnée par la taille de l'aspérité à la paroi. Avec sédimentation.

Les autres points de la Figure 27 sont bien décrits par la loi suivante :

$$\Delta_d = 1,284 \left(\frac{d_p}{\varepsilon} \right)^{0.29} \quad (3.32)$$

Nous proposons donc la corrélation suivante pour la vitesse de dépôt avec sédimentation et lubrification :

$$u_d^+ \cong \frac{3}{2} \left(\frac{\varepsilon}{d_p} \right)^{0.35} \left[9,3 \times 10^{-4} (d_p^+)^{1.68} \right] + 0,78 \left(\frac{\varepsilon}{d_p} \right)^{0.29} v_{\text{sed}}^+ \quad (3.33)$$

où le premier terme du membre de droite représente la contribution de l'interception directe et le second terme représente celle de la sédimentation. Le terme $9,3 \times 10^{-4} (d_p^+)^{1.68}$ correspond à la contribution de l'interception directe en l'absence de lubrification et v_{sed}^+ est la vitesse de chute. Les termes $\frac{3}{2} \left(\frac{\varepsilon}{d_p} \right)^{0.35}$ et $0,78 \left(\frac{\varepsilon}{d_p} \right)^{0.29}$ sont les facteurs correctifs identifiés précédemment pour prendre en compte la lubrification.

3.6 Résumé

Dans ce chapitre, nous avons étudié les mécanismes de capture qui interviennent lors du dépôt de particules sur une paroi solide. L'écoulement est modélisé par un écoulement figé décrit analytiquement qui est une représentation des structures turbulentes présentes le long de la paroi solide dans le cas d'un écoulement turbulent en canal. Nous avons utilisé le modèle de Cleaver et Yates. Le flux de particules déposées est évalué à l'aide de la méthode dite de la « trajectoire limite ». On s'est intéressé dans un premier temps au dépôt d'aérosols dans des conditions permettant une comparaison directe avec la littérature. Ensuite, nous avons étendu le modèle à l'étude du dépôt d'hydrosols dont les caractéristiques physiques correspondent au système inclusion/métal liquide typique du traitement en poche des aciers ou de tout autre écoulement en conduite d'acier liquide.

Dépôt des aérosols :

Nous avons retrouvé les valeurs de vitesse de dépôt ainsi que les trajectoires de particules rapportées dans la littérature. En particulier, nos résultats concordent avec le modèle de Wood qui a été ajusté sur des données expérimentales de dépôt d'aérosols :

$$u_d^+ = 4,5 \cdot 10^{-4} \tau_p^{+2} + \tau_p^+ g^+$$

Cela nous a donc permis de valider le module de suivi lagrangien des particules.

L'étude des mécanismes de dépôt a été effectuée dans un domaine se limitant à des particules de grandes tailles, non soumises à la diffusion brownienne. Nous avons pu vérifier que, dans ces conditions, les mécanismes principaux de capture sont le dépôt par sédimentation et le dépôt inertiel, ce qui est en accord avec les articles traitant des aérosols.

Le poids de l'interception directe est faible par rapport au poids de la sédimentation puisque la vitesse de dépôt décroît d'un ordre de grandeur lorsque les effets gravitationnels ne sont pas pris en compte. De plus, comme attendu, la lubrification ne modifie pas la vitesse de dépôt des particules du fait de la très faible viscosité des gaz.

Dépôt des hydrosols :

Comme pour les aérosols, la sédimentation joue souvent un rôle important dans la capture des particules. Cependant, lorsque l'intensité turbulente de l'écoulement augmente fortement, la sédimentation n'est plus le mécanisme principal de capture : l'interception directe devient prépondérante. De plus, quelle que soit l'intensité turbulente de l'écoulement, les effets inertiels n'influencent que très peu le dépôt des hydrosols. Ces aspects diffèrent le comportement des hydrosols de celui des aérosols.

Pour ces raisons, le modèle de Wood n'est pas adapté au dépôt des hydrosols, même en y intégrant la poussée d'Archimède à sa formulation :

$$u_d^+ = 4,5 \cdot 10^{-4} \tau_p^{+2} - \tau_p^+ g^+ \left(1 - \frac{\rho_f}{\rho_p} \right)$$

En nous appuyant sur les travaux de Hallberg *et al.* et de Davies, nous avons calculé analytiquement la contribution de l'interception directe à la vitesse de dépôt :

$$(u_d^+)^{-1} = \frac{8,9^3}{2} \left(\left(\frac{2}{d_p^+} \right)^2 - \frac{1}{25} \right) + \frac{847}{60}$$

Soit :

$$u_d^+ \cong 7 \cdot 10^{-4} d_p^{+2}$$

si le diamètre des particules vérifie la condition $d_p^+ < 10$.

Cette loi est en bon accord avec la contribution de l'interception directe identifiée à partir de nos simulations numériques (en l'absence de lubrification) :

$$u_d^+ = 0,0188 (\tau_p^+)^{0,84} = 9,3 \times 10^{-4} (d_p^+)^{1,68}$$

Enfin, lorsque les effets de la lubrification sont introduits dans l'équation de la dynamique des particules, nous avons pu observer que, contrairement aux aérosols, la vitesse de dépôt des hydrosols

s'en trouve fortement diminuée. En nous basant sur nos résultats numériques, nous avons proposé une loi de dépôt prenant en compte les effets de lubrification :

$$u_d^+ \cong \frac{3}{2} \left(\frac{\varepsilon}{d_p} \right)^{0,35} \left[9,3 \times 10^{-4} (d_p^+)^{1.68} \right] + 0,78 \left(\frac{\varepsilon}{d_p} \right)^{0,29} v_{sed}^+$$

où le premier terme du membre de droite représente la contribution de l'interception directe et le second terme représente celle de la sédimentation. Le terme $9,3 \times 10^{-4} (d_p^+)^{1.68}$ correspond à la contribution de l'interception directe en l'absence de lubrification et v_{sed}^+ est la vitesse de chute. Les termes $\frac{3}{2} \left(\frac{\varepsilon}{d_p} \right)^{0,35}$ et $0,78 \left(\frac{\varepsilon}{d_p} \right)^{0,29}$ sont les facteurs correctifs associés à la lubrification. Cette loi a été établie pour des vitesses de frottement u_τ comprises entre $0,06 \text{ m.s}^{-1}$ et $0,3 \text{ m.s}^{-1}$, des diamètres de particule adimensionnés d_p^+ compris entre 0,19 et 1,9 (unités de paroi) et une hauteur équivalente de rugosité ε comprise entre $3,9 \text{ } 10^{-8} \text{ m}$ et $3,9 \text{ } 10^{-7} \text{ m}$.

Chapitre 4

Dépôt de particules sur une surface libre

Ce chapitre s'intéresse au dépôt sur une surface libre de particules solides en suspension dans un liquide. L'écoulement est résolu par simulation numérique directe de la turbulence et les particules sont suivies par suivi lagrangien.

Dans un premier temps, une description des principales caractéristiques de l'écoulement du fluide porteur et de son comportement à l'approche de la surface libre sera présentée. Nous basons cette description principalement sur le travail de Campagne²⁷ qui a effectué en premier la description de l'écoulement étudié.

Dans un second temps, l'interaction entre le fluide et les particules sera étudiée à travers l'évaluation de grandeurs telles que les vitesses de dépôt des particules sur la surface libre et leurs dispersions dans le domaine fluide. On s'intéressera tout d'abord à des particules de même densité que le fluide. Ensuite, l'influence de la sédimentation sur des particules plus légères que le fluide, ainsi que l'influence des forces d'inertie et des effets de la lubrification seront étudiées.

4.1 Description de la configuration étudiée

La configuration étudiée dans ce chapitre est celle d'une turbulence isotrope qui vient s'amortir sur une interface libre indéformable. Elle est présentée Figure 28. Contrairement aux écoulements en canal, il n'y a pas ici d'écoulement moyen au sein du domaine de travail. Loin de la surface libre, l'écoulement possède un régime turbulent isotrope qui diffuse jusqu'à la surface libre indéformable qui simule ici l'interface entre deux fluides. Cette surface libre sera aussi appelée « surface de blocage » dans ce manuscrit car un de ses effets sur l'écoulement est de bloquer la diffusion de la turbulence.

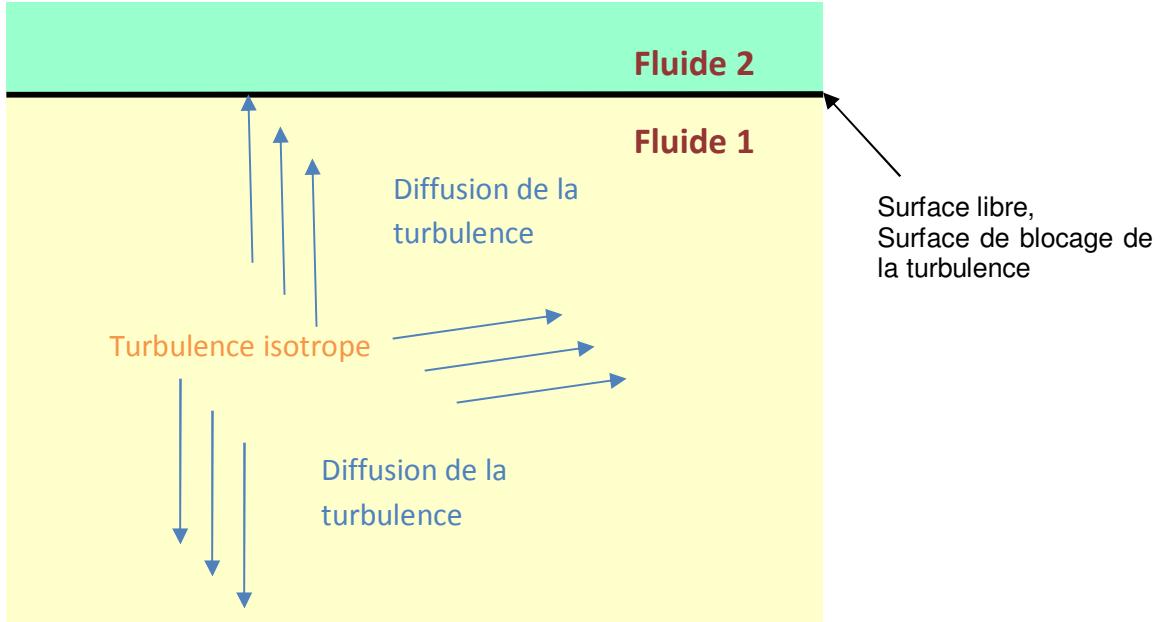


Figure 28 : Configuration étudiée : une turbulence isotrope est générée au centre du domaine (fluide 1) et vient s'amortir sur une interface libre. L'écoulement moyen est nul

4.2 Méthode numérique de résolution de l'équation de Navier Stokes

4.2.1 Différents choix possibles

Nous présentons ici rapidement quelques méthodes de résolution permettant de simuler un écoulement turbulent. Du fait de la complexité des phénomènes turbulents et de leur importance dans les écoulements industriels, différents modèles ont été mis au point très tôt et affinés avec les progrès des outils de calculs.

On rappelle ici l'équation de Navier Stokes (2.17) pour un fluide incompressible newtonien à masse volumique constante :

$$\rho_f \left(\frac{\partial \mathbf{u}_f}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{u}_f \mathbf{u}_f \right) = -\nabla p + \rho_f \mathbf{g} + \mu \nabla^2 \mathbf{u}_f \quad (4.1)$$

On peut l'écrire par exemple en projection sur l'axe x et en introduisant la décomposition de Reynolds (4.25) appliquée à la vitesse du fluide $\mathbf{u}_f = (u_f, v_f, w_f)$ et à la pression p dans l'écoulement :

$$\begin{aligned} \rho_f \left(\frac{\partial(\bar{u}_f + u_f')}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{u}_f + u_f')^2}{\partial x} + \frac{\partial(\bar{u}_f + u_f')(\bar{v}_f + v_f')}{\partial y} + \frac{\partial(\bar{v}_f + v_f')(\bar{w}_f + w_f')}{\partial z} \right) \\ = -\frac{\partial(\bar{p} + p')}{\partial t} + g_x + \mu \nabla^2 (\bar{u}_f + u_f') \end{aligned} \quad (4.2)$$

On moyenne l'équation précédente et en regroupant les termes de fluctuations à droite on obtient une équation très proche de (2.17) et qui se différencie par les trois termes de fluctuations à droite :

$$\begin{aligned} \rho_f \left(\frac{\partial \bar{u}_f}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_f^2}{\partial x} + \frac{\partial \bar{u}_f \bar{v}_f}{\partial y} + \frac{\partial \bar{u}_f \bar{w}_f}{\partial z} \right) \\ = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + g_x + \mu \nabla^2 \bar{u}_f - \rho_f \frac{\partial \bar{u}_f'^2}{\partial x} - \rho_f \frac{\partial \bar{u}_f' v_f'}{\partial y} - \rho_f \frac{\partial \bar{u}_f' w_f'}{\partial z} \end{aligned} \quad (4.3)$$

Ces trois nouveaux termes peuvent s'écrire de façon générale (lorsque la densité du fluide n'est pas constante) $-\rho_f \bar{u'^2}$, $-\rho_f \bar{u'v'}$ et $-\rho_f \bar{u'w'}$ et ils représentent le transfert de quantité de mouvement via les fluctuations du champ de vitesse. On les appelle les contraintes de Reynolds et elles sont donc des inconnues supplémentaires à calculer lors d'un traitement statistique de l'écoulement. La modélisation des contraintes de Reynolds est donc nécessaire puisqu'il y a alors plus d'inconnues que d'équations. Les premières simulations d'écoulement turbulent ont utilisé des modèles de turbulence comme moyen de fermeture du système d'équations.

La fermeture du système d'équation est effectuée à l'aide de la résolution d'équations supplémentaires. Le modèle $\bar{k} - \varepsilon$ donc nous avons parlé lors de l'introduction, et qui est souvent utilisé pour la résolution de calculs portant sur des procédés industriels, tire son nom du fait que les équations de transports relatives à l'énergie cinétique turbulente \bar{k} et au transport du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulent ε sont résolues en plus de l'équation de Navier Stokes et servent de fermetures au problème. Les modèles nécessitant la résolution de deux équations supplémentaires sont les plus utilisés, on peut citer aussi par exemple le modèle $k - \omega$ qui fait intervenir les équations de transport de l'énergie cinétique turbulente et de la fréquence de turbulence ω . Les modèles de turbulence peuvent être rangés selon le nombre d'équations nécessaires à résoudre pour fermer le système. Lorsque la viscosité turbulente est estimée algébriquement sans l'aide d'une nouvelle équation, le modèle est appelé « modèle de longueur de mélange » ou modèle à zéro équation.

Outre ces approches statistiques très répandues, se développent de plus en plus des simulations dans lesquelles tout ou une partie des équations de Navier Stokes sont résolues sans l'aide de modèle. Dans la simulation des grandes échelles (Large Eddy Simulation ou LES), les équations de Navier Stokes sont filtrées et sont résolues de façon différenciée : les grandes échelles de la turbulence sont résolues directement tandis que les plus petites échelles (celles liées à la dissipation de l'énergie) sont modélisées par des modèles de turbulence. Cela permet une amélioration de la précision de résolution des grandes échelles de la turbulence, tout en optimisant les temps de calcul. Avec l'augmentation des puissances des calculateurs la simulation des grandes échelles est devenue une alternative envisageable au modèle $\bar{k} - \varepsilon$ utilisé industriellement.

Plus précise mais plus coûteuse en ressources que les méthodes LES, la simulation numérique directe (Direct Numerical Simulation ou DNS) résout directement toutes les échelles de la turbulence sans l'aide de modèle. Des valeurs de nombre de Reynolds élevées sont très lourdes à atteindre car la gamme d'énergie à couvrir augmente avec l'intensité turbulente. En pratique, le nombre de points de maillage N nécessaires pour décrire toutes les échelles de turbulence est lié au nombre de Reynolds Re_l^{28} :

$$N \propto Re_l^{9/4} \quad (4.4)$$

où $Re_l = u'l/\nu$ est défini par l'échelle intégrale l et u' valeur efficace des fluctuations de vitesse pour une turbulence isotrope ($u' = \sqrt{2\bar{k}/3}$).

A l'heure actuelle, le nombre de points N des maillages que l'on peut simuler est trop petit pour permettre l'étude de cas pratiques industriels qui restent hors de portée. Pour diminuer la taille physique des domaines à résoudre, les auteurs ne simulent parfois pas toutes les échelles mais s'arrêtent à des échelles de l'ordre de 10 à $20l_\eta$. En effet, le spectre d'énergie conditionne la valeur de la plus petite échelle à résoudre, or il peut arriver des cas où le pic de dissipation d'énergie se produit à des échelles égales à 15 fois la valeur de la longueur de Kolmogorov⁷⁹. Le choix de la plus petite échelle résolue est un compromis pour atteindre une valeur élevée du nombre de Reynolds et une précision suffisante pour la résolution des équations.

Par contre, l'avantage principal de la DNS est de permettre l'accès à un certain nombre de grandeurs non accessibles par les autres modèles ou par les expérimentations. Et, de ce fait, la DNS (et la LES dans certains cas) permettent de valider les modèles de turbulences mis au point théoriquement et implémentés dans les études macroscopiques des écoulements turbulents. Le fait de n'utiliser aucun modèle de turbulence dans la DNS, permet de générer une base d'expériences numériques de référence très utile pour l'étude des interactions entre la turbulence et d'autres domaines de la physique.

Dans notre cas, ce sont les interactions entre le fluide et la dispersion de particules solides qui nous intéressent. Comme ces interactions agissent à la plus petite échelle de turbulence, nous avons donc privilégié l'étude de ce phénomène via la DNS, seule méthode numérique résolvant sans simplification presque toutes les échelles de turbulences d'un écoulement donné.

4.2.2 Présentation de la méthode choisie pour la résolution du champ fluide

La méthode de résolution de l'équation de Navier Stokes retenue est une résolution par simulation numérique directe. Le code utilisé a été développé par Campagne²⁷ dans le but d'étudier les phénomènes turbulents à proximité d'une interface libre. Les explications qui suivent et qui portent sur la résolution de l'équation de Navier Stokes sont largement issues du travail de Campagne²⁷. Le lecteur pourra s'y référer pour des informations complémentaires.

La méthode de résolution est dite pseudo spectrale puisqu'une partie des étapes de calculs est effectuée dans le domaine dual spectral, tandis que l'autre partie est effectuée dans le domaine physique.

4.2.2.1 Description du domaine de calcul et de la résolution de l'équation de Navier Stokes choisie

Le domaine réel de calcul est légèrement différent de la configuration présentée Figure 28. Comme on peut le voir Figure 29 le haut et le bas du domaine de calcul sont délimités par la présence de deux surfaces libres indéformables.

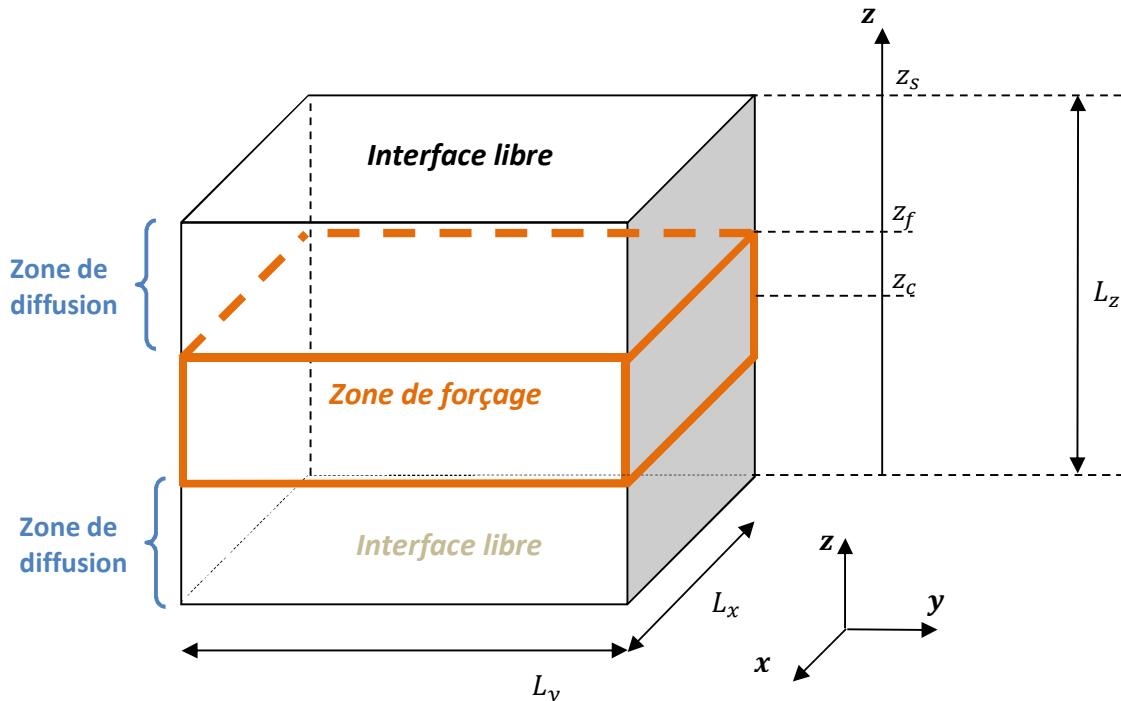


Figure 29 : Description de la configuration étudiée

La direction normale à ces interfaces libres est la direction **z**. Les directions parallèles aux surfaces libres, **x** et **y**, sont homogènes. Les propriétés statistiques sont invariantes par translation dans les plans $z = \text{constante}$ et par rotation autour de l'axe **z**. En **x** et **y**, les conditions aux limites du domaine sont des conditions de périodicité de période $L_x = L_y$.

Le maillage du domaine est choisi régulier pour éviter tout biais numérique, ainsi $\Delta_x = \Delta_y = \Delta_z = \Delta$. Le nombre de noeuds en **x**, **y** et **z**, respectivement N_x , N_y et N_z est fixé par l'utilisateur. Cependant, pour respecter l'homogénéité des directions **x** et **y**, on impose l'égalité $N_x = N_y$.

Nous avons fixé ici la taille du domaine dans les directions x et y égale à $L_x = L_y = 5,362 \cdot 10^{-2}$ m. Dans ces conditions, dans la gamme de nombres de Reynolds étudiée, les diamètres de particule d'intérêt sont toujours inférieurs à l'échelle spatiale de Kolmogorov, permettant ainsi l'utilisation de la formulation des forces ponctuelles⁴¹.

Dans le code, les grandeurs sont adimensionnées et L_x et L_y sont fixés égaux à la valeur 2π . Lorsque N_x , N_y et N_z ont été fixés, la dernière dimension L_z est complètement définie et vaut :

$$L_z = (N_z - 1)\Delta \quad (4.5)$$

Le domaine est divisé en trois parties : une zone de forçage et deux zones de diffusion. Nous noterons z_s le plan de la surface libre, z_f le plan situé à la sortie de la zone de forçage ($z_f = L_z/3$) et z_c le plan centrale, situé au centre de la zone de forçage et au centre du domaine de simulation. On fera le plus souvent référence à ces plans seulement à l'aide des indices s , f et c sans le z .

La zone de forçage correspond à une zone dans laquelle la turbulence est générée artificiellement à l'aide d'un terme source. Nous reviendrons plus tard sur le forçage de la turbulence. En haut et en bas de cette zone de forçage, se trouvent deux zones de diffusion dans lesquelles il y a auto diffusion de la turbulence vers les surfaces libres.

Pour chaque simulation, ces zones de diffusion seront traitées comme deux simulations différentes simulant la configuration présentée Figure 28.

Le schéma temporel choisi par Campagne²⁷ est un schéma en trois sous pas de temps semi implicite dans lequel les termes convectifs sont traités par un schéma de type Runge Kutta d'ordre trois tandis que les termes visqueux sont traités par un schéma de Crank Nicholson. Plus de détails sur la méthode utilisée peuvent être trouvés en annexe ou dans la thèse de Campagne²⁷.

Une partie des calculs pour la résolution de l'équation de Navier Stokes est effectuée dans l'espace spectrale, espace dual de l'espace physique qui discrétise spatialement le domaine de calcul. Cela permet de calculer les dérivées de l'écoulement de manière exacte.

Le nombre de courant choisi pour assurer la stabilité du schéma numérique vaut 1 chez Campagne. Nous avons préféré opter pour la valeur plus faible de 0,8 pour gagner en robustesse suite à un changement de librairies mathématiques.

4.2.2.2 À quoi correspond une turbulence forcée ? Analogie et description de la méthode utilisée

La particularité de l'écoulement simulé dans le code de Campagne est l'absence d'un écoulement moyen. Lorsque l'on étudie un écoulement en canal, le fluide s'écoule dans une direction moyenne donnée et la turbulence est notamment générée par cisaillement du fluide le long des parois solides du canal. Ici, la turbulence est forcée artificiellement dans une zone confinée du domaine, et elle diffuse jusqu'à la surface libre.

Un tel forçage peut à première vue paraître très éloigné d'une turbulence « réelle ». Il part du constat que les plus petites échelles de la turbulence présentent un caractère universel : lorsque la turbulence est bien développée et que le nombre de Reynolds est élevé, la dynamique des petites échelles de la turbulence est indépendante de la façon dont est produite l'énergie turbulente aux grandes échelles de la turbulence³⁴. De ce fait, pour les petites échelles de la turbulence, les résultats des études portant sur une configuration simple sont théoriquement les mêmes que ceux que l'on pourrait obtenir dans des écoulements complexes fortement turbulents⁸⁰. Calmet et Magnaudet⁸¹ ont par exemple récemment effectué des simulations LES d'un écoulement dans un canal avec une surface libre grâce auxquelles ils montrent que plus le nombre de Reynolds est élevé, plus l'écoulement à proximité de la surface libre est isotrope. L'étude des petites échelles de la turbulence peut donc être effectuée dans un cadre d'étude simplifié, comme celui défini par une turbulence homogène isotrope.

Un des moyens de générer une turbulence homogène isotrope est de « forcer » l'écoulement en rajoutant artificiellement une énergie dans le système (plus d'informations sur la méthode de forçage seront données dans le paragraphe suivant), c'est ce qui est effectué ici.

Campagne montre que l'écoulement généré par son code de simulation numérique directe s'apparente aux écoulements générés lors des expériences de turbulence de grille. Dans de telles expériences, une grille est mise en mouvement dans un bac de liquide et elle génère des structures turbulentes qui diffusent dans tout le bac. La fréquence du déplacement de la grille ainsi que ses dimensions et la distance à laquelle elle se trouve par rapport à l'interface, déterminent l'écoulement turbulent qui vient s'amortir à l'interface libre⁸². Cependant, à proximité de la surface libre, les grandeurs statistiques décrivant l'amortissement de la turbulence à l'interface, une fois adimensionnées à des échelles de surfaces, sont comparables pour les trois études suivantes :

- Campagne pour le code qui nous intéresse où la turbulence est forcée
- Calmet et Magnaudet⁸¹ où la turbulence est générée par cisaillement au fond du canal
- Brumley et Jirka⁸² en turbulence de grille.

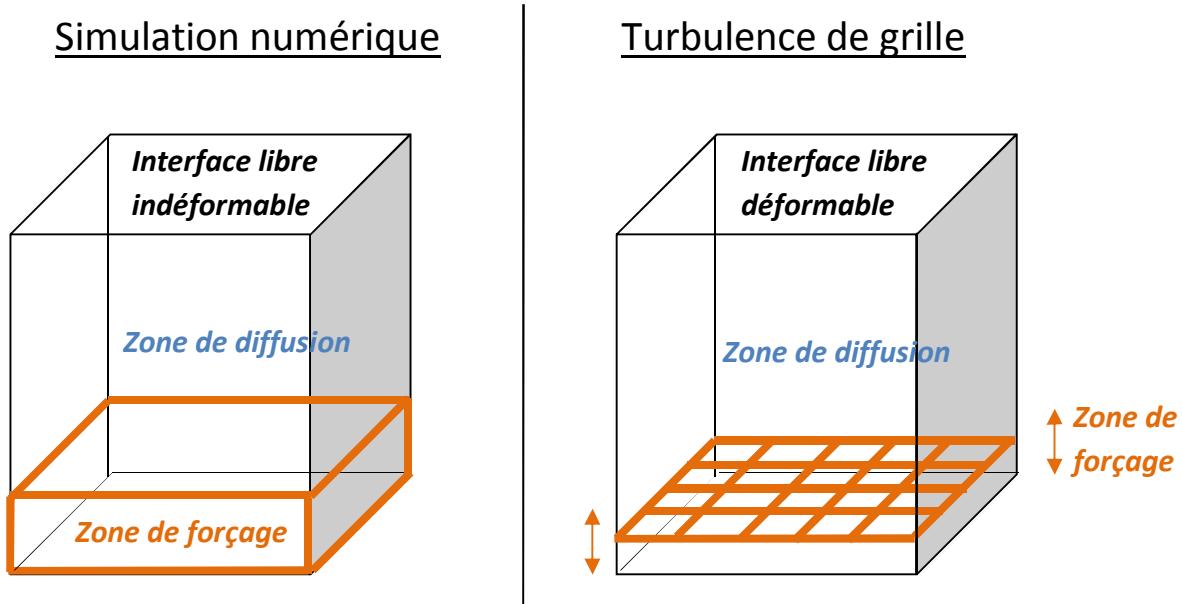


Figure 30 : Domaine de la simulation numérique et comparaison à la turbulence de grille

Ainsi, le forçage généré artificiellement dans le code de simulation numérique joue le rôle de la grille mise en mouvement dans le bac. L'interface libre est indéformable dans le code de calcul tandis que dans les expériences de turbulence de grille elle est déformable, ce qui n'empêche pas la comparaison entre les lois d'évolution de la turbulence à l'approche des deux surfaces libres.

4.2.2.2.1 Discrétisation spatiale de l'écoulement pour la résolution de Navier Stokes

Le forçage introduit dans le domaine de simulation doit répondre à plusieurs caractéristiques pour permettre la comparaison à une turbulence « réelle ». L'énergie est injectée dans la zone de forçage via une méthode proposée par Alvelius⁸³. Dans cette méthode, l'accélération du champ de vitesse $\partial \mathbf{u}_f / \partial t$ du fluide réagit à une force \mathbf{f} aléatoire de divergence nulle.

Le forçage intervient après les étapes de résolution des équations de Navier Stokes qui permettent de calculer un champ de vitesse avant forçage $\mathbf{u}_{NS}(\mathbf{x}, t)$ à l'instant t . Pour obtenir le champ de vitesse final à l'instant t , un champ de force $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$ est calculé et appliqué au champ de vitesse $\mathbf{u}_{NS}(\mathbf{x}, t)$.

$$\mathbf{u}_f(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}_{NS}(\mathbf{x}, t) + \Delta t \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) \quad (4.6)$$

Le calcul du champ de force est effectué par étapes. Nous présentons ici les fonctions proposées par Alvelius et qui ont été implémentées par Campagne.

Pour comprendre la méthode de forçage, il est important de présenter un peu plus la méthode de résolution du champ fluide. Des informations complémentaires sur la méthode de résolution utilisée sont disponibles dans la thèse de Campagne.

Une partie des calculs pour la résolution de l'équation de Navier Stokes est effectuée dans l'espace spectral, espace dual de l'espace physique. À partir d'un champ périodique $\phi(\mathbf{x}, t)$ dont les valeurs sont situées dans l'espace physique, on peut calculer une représentation $\hat{\phi}(\mathbf{k}, t)$ dans l'espace dual grâce à la transformation de Fourier discrétisée spatiale. Les équations de transformation reliant les deux fonctions s'écrivent :

$$\hat{\phi}(\mathbf{k}, t) = \sum_{\mathbf{x} \in M} \phi(\mathbf{x}, t) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \quad (4.7)$$

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k} \in \hat{M}} \hat{\phi}(\mathbf{k}, t) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \quad (4.8)$$

Les équations précédentes sont en fait des approximations des fonctions $\phi(\mathbf{x}, t)$ et $\hat{\phi}(\mathbf{k}, t)$ continues. Le passage du domaine physique au domaine dual de la fonction $\phi(\mathbf{x}, t)$ par la transformation de Fourier discrétisée, nécessite la définition de cette fonction sur un maillage régulier M de dimension $\mathbf{N} = (N_x, N_y, N_z)$ où N_x, N_y et N_z sont des entiers. En accord avec les algorithmes numériques, nous considérerons des entiers pairs. Les coordonnées $\mathbf{x}_M = (x_p, y_p, z_p)$ d'un point M sont définies par

$$\begin{cases} x_p = \frac{p_x L_x}{N_x} \text{ où } p_x \in [0, \dots, N_x] \\ y_p = \frac{p_y L_y}{N_y} \text{ où } p_y \in [0, \dots, N_y] \\ z_p = \frac{p_z L_z}{N_z} \text{ où } p_z \in [0, \dots, N_z] \end{cases} \quad (4.9)$$

où $\mathbf{L} = (L_x, L_y, L_z)$ est le vecteur des périodes spatiales du champ ϕ .

Dans l'espace de Fourier, les points sont situés de la même façon sur une grille de nombres d'onde \hat{M} . Tout point $\mathbf{k}_d = (k_x, k_y, k_z)$ de \hat{M} est défini par :

$$\begin{cases} k_x = \frac{2\pi q_x}{L_x} \text{ où } q_x \in [-\frac{N_x}{2}, \dots, \frac{N_x}{2} - 1] \\ k_y = \frac{2\pi q_y}{L_y} \text{ où } q_y \in [-\frac{N_y}{2}, \dots, \frac{N_y}{2} - 1] \\ k_z = \frac{2\pi q_z}{L_z} \text{ où } q_z \in [-\frac{N_z}{2}, \dots, \frac{N_z}{2} - 1] \end{cases} \quad (4.10)$$

Le module du vecteur d'onde du point de coordonnées $\mathbf{k}_d = (k_x, k_y, k_z)$ est $|\mathbf{k}_d| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$.

L'avantage principal des calculs dans le domaine spectral est la facilité avec laquelle les dérivées des fonctions peuvent être calculées. Pour un signal monodimensionnel, on montre que :

$$\begin{cases} \frac{\partial \hat{\phi}(\mathbf{k}, t)}{\partial x} = ik\hat{\phi}(\mathbf{k}, t) \\ \frac{\partial^2 \hat{\phi}(\mathbf{k}, t)}{\partial x^2} = -k^2\hat{\phi}(\mathbf{k}, t) \end{cases} \quad (4.11)$$

Ainsi, dans le domaine spectral, le calcul des dérivées spatiales devient donc un calcul local en nombre d'onde, ce qui simplifie considérablement les calculs et permet un calcul précis des dérivées spatiales.

4.2.2.2 Paramètres du forçage et choix de fonctions

Le champ de force $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$ introduit dans le domaine est une force volumique aléatoire appliquée au champ de vitesse du fluide dans le domaine dual. Sa distribution spectrale est fixée pour

permettre une concentration de l'énergie introduite dans le système aux faibles nombres d'onde (et par conséquent, aux grande échelles de la turbulence). La forme du spectre du forçage $E_f(|\mathbf{k}_d|)$ est choisie égale à :

$$E_f(|\mathbf{k}_d|) = A \exp\left(-\frac{(|\mathbf{k}_d| - |\mathbf{k}_f|)^2}{c}\right) \quad (4.12)$$

Ce qui permet d'avoir une force concentrée autour de $|\mathbf{k}_f|$ avec un degré de concentration défini par c . Pour $A = 1$, $|\mathbf{k}_f| = 4$ et $c = 0,05$ cela donne par exemple le spectre d'énergie de la Figure 31.

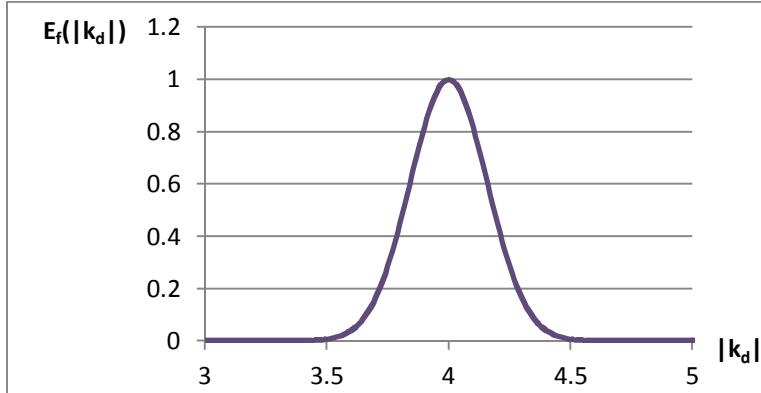


Figure 31 : Cas A : Exemple de spectre de forçage en fonction du module du vecteur d'onde (pour $c=0,05$; $A = 1$; $|\mathbf{k}_f| = 4$)

Pour permettre le contrôle de la puissance P injectée dans le domaine, la constante A est en fait évaluée à l'aide de

$$A = \frac{P}{\Delta t} \frac{1}{\int_{k_{min}}^{k_{max}} \exp\left(-\frac{(|\mathbf{k}_d| - |\mathbf{k}_f|)^2}{c}\right)} \quad (4.13)$$

Les valeurs de P , c , k_{min} , k_{max} , $|\mathbf{k}_f|$ sont fixées par l'utilisateur, ce qui permet de définir complètement le spectre de la force pour chaque module du vecteur d'onde $|\mathbf{k}_d|$.

Deux vecteurs \mathbf{e}_1 et \mathbf{e}_2 orthogonaux entre eux et orthogonaux à \mathbf{k}_d sont nécessaires pour l'évaluation du forçage. Plusieurs possibilités pour définir \mathbf{e}_1 et \mathbf{e}_2 existent, Alvelius propose d'utiliser les vecteurs suivants (on rappelle que $\mathbf{k}_d = (k_x, k_y, k_z)$) :

$$\begin{cases} \mathbf{e}_1(\mathbf{k}) = \left(\frac{k_y}{(k_x^2 + k_y^2)^{0,5}} ; -\frac{k_x}{(k_x^2 + k_y^2)^{0,5}} ; 0 \right) \\ \mathbf{e}_2(\mathbf{k}) = \left(\frac{k_x k_z}{|\mathbf{k}_d|(k_x^2 + k_y^2)^{0,5}} ; \frac{k_y k_z}{|\mathbf{k}_d|(k_x^2 + k_y^2)^{0,5}} ; -\frac{(k_x^2 + k_y^2)^{0,5}}{|\mathbf{k}_d|} \right) \end{cases} \quad (4.14)$$

Deux fonctions $g_A(\phi)$ et $g_B(\phi)$ sont aussi choisies en amont pour les prochaines étapes de calcul :

$$g_A(\phi) = \sin(2\phi) ; \quad g_B(\phi) = \cos(2\phi) \quad (4.15)$$

4.2.2.2.3 Étapes de calcul du forçage

Pour un vecteur d'onde donné, deux nombres aléatoires ϕ et ψ uniformément distribués sur les intervalles respectifs $[0; \pi]$ et $[0; 2\pi]$ sont générés à l'aide d'une bibliothèque mathématique (Intel® MKL).

Avec les fonctions définies précédemment, on peut calculer l'angle θ_1 qui est solution de :

$$\tan(\theta_1) = \frac{g_A(\phi)Re(\sum_i u_i e_{1i}) + g_B(\phi)(\sin(\psi)Im(\sum_i u_i e_{2i}) + \cos(\psi)Re(\sum_i u_i e_{2i}))}{-g_A(\phi)Im(\sum_i u_i e_{1i}) + g_B(\phi)(\sin(\psi)Re(\sum_i u_i e_{2i}) - \cos(\psi)Im(\sum_i u_i e_{2i}))} \quad (4.16)$$

où $Re(\cdot)$ et $Im(\cdot)$ sont les parties réelles et imaginaires des nombres complexes considérés.

Ensuite, on peut calculer $A_{ran}(\mathbf{k}_d, t)$ et $B_{ran}(\mathbf{k}_d, t)$, qui sont donc des nombres aléatoires définis par :

$$\begin{aligned} A_{ran} &= \left(\frac{E_f(|\mathbf{k}_d|)}{2\pi|\mathbf{k}_d|^2} \right)^{0,5} \exp(i\theta_1) g_A(\phi) \\ B_{ran} &= \left(\frac{E_f(|\mathbf{k}_d|)}{2\pi|\mathbf{k}_d|^2} \right)^{0,5} \exp(i(\psi + \theta_1)) g_B(\phi) \end{aligned} \quad (4.17)$$

Et finalement, $\mathbf{f}(\mathbf{k}_d, t)$ est évaluée à l'aide de :

$$\mathbf{f}(\mathbf{k}_d, t) = A_{ran}(\mathbf{k}_d, t) \mathbf{e}_1(\mathbf{k}) + B_{ran}(\mathbf{k}_d, t) \mathbf{e}_2(\mathbf{k}) \quad (4.18)$$

Le forçage est introduit seulement dans la zone centrale du domaine de calcul. Pour éviter des irrégularités au niveau des frontières entre la zone de forçage et le reste du domaine de calcul, le forçage obtenu grâce à (4.18) est lissé par une fonction sinus qui varie selon l'axe normal à la surface libre.

À la suite de ces étapes, on applique alors l'équation (4.6) pour obtenir le champ de vitesse forcé de l'écoulement.

4.2.2.2.4 Caractéristiques du forçage généré

Avec les choix effectués en amont des étapes de forçage ainsi que des étapes de calcul de la force, le champ de force présente différentes caractéristiques.

Gardant les configurations de Campagne, on utilise dans ce travail les mêmes paramètres :

$ \mathbf{k}_f $	k_{min}	k_{max}	c	P
4	2	6	0,05	0,025

Tableau 6 : Caractéristique du forçage

Cela permet d'avoir une injection de l'énergie cinétique concentrée autour des vecteurs d'onde de module faible, situé entre 2 et 6. Le forçage est donc ainsi concentré sur les grandes échelles de la turbulence.

La définition de la force à partir des deux vecteurs \mathbf{e}_1 et \mathbf{e}_2 orthogonaux à \mathbf{k}_d , permet d'obtenir un champ de force de divergence nulle. En effet, dans le domaine spectral, la divergence nulle du champ de force est équivalente à satisfaire la condition :

$$\mathbf{k}_d \cdot \mathbf{f}(\mathbf{k}_d, t) = 0 \quad (4.19)$$

La nullité de la divergence de la force permet aussi de s'assurer que celle-ci n'influe pas directement sur le champ de pression du fluide.

De plus, on peut montrer que l'énergie cinétique turbulente Δk injectée dans le domaine durant un pas de temps est égale à :

$$\Delta k = \Delta t \left(\frac{1}{2} \overline{\mathbf{f}(\mathbf{k}_d, t) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{k}_d, t)} + \overline{\mathbf{u}_k(\mathbf{k}_d, t) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{k}_d, t)} \right) \quad (4.20)$$

L'énergie cinétique est donc fonction d'un terme de corrélation force-force et d'un terme de corrélation force-vitesse. Si l'on veut que la force injectée dans le domaine soit complètement aléatoire, le terme de corrélation force-vitesse moyen sur un grand nombre de résolution du champ doit être très inférieur au premier terme.

On peut montrer que le champ de force décrit par les équations (4.16)-(4.18) permet bien au second terme d'être nul ce qui facilite notamment un meilleur contrôle de la puissance injectée dans le domaine puisque la force injectée est indépendante du champ fluide. De plus, cela permet au forçage de générer la turbulence et donc de s'affranchir des conditions initiales, ce qui n'est pas possible dans les écoulements où le forçage est seulement utilisé pour compenser la dissipation turbulente.

L'isotropie du forçage peut aussi être montrée par le calcul des termes $\overline{\mathbf{f}(\mathbf{k}_d, t) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{k}_d, t)}$ projetés sur $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$.

Eswaran et Pope⁸⁰ ont montré que les nombres de Reynolds atteignables en simulation numérique directe sont suffisamment grands pour que les petites échelles soient indépendantes de la façon dont le forçage est effectué (la séparation des échelles est suffisamment élevée malgré la limitation sur le nombre de Reynolds due au temps de calcul). Avec une mise à l'échelle appropriée de leurs résultats, ils parviennent à mettre en lumière un comportement similaire de l'écoulement quel que soit le nombre d'onde \mathbf{k}_f utilisé pour le forçage ou la valeur du nombre de Reynolds.

C'est la méthode qui est utilisée ici : l'énergie cinétique turbulente est introduite au niveau des grandes échelles de la turbulence pour que les grandeurs statistiques évaluées sur les petites échelles de la turbulence ne soient pas influencées par la méthode de forçage utilisée.

4.2.3 Méthode de calcul des moyennes temporelles et spatiales

Comme on l'a vu lors des chapitres précédents les écoulements turbulents sont fortement aléatoires et une approche statistique est nécessaire pour étudier ce type d'écoulement. Pour une variable $\phi(\mathbf{x}, t)$ donnée, il existe différentes façons de calculer sa moyenne⁴².

Lorsque le processus étudié est statistiquement stationnaire, on peut évaluer une moyenne temporelle $\langle \phi(\mathbf{x}, t) \rangle_T$ de $\phi(\mathbf{x}, t)$ à l'aide de :

$$\langle \phi(\mathbf{x}, t) \rangle_T = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} \phi(\mathbf{x}, t) dt \quad (4.21)$$

où T est la période d'intégration et doit être très supérieurs au temps caractéristique des fluctuations $\phi'(\mathbf{x}, t)$ de la variable $\phi(\mathbf{x}, t)$.

On peut aussi définir des moyennes spatiales instantanées pour des variables calculées dans un volume donné ou sur un plan donné, et qui définissent des moyennes volumiques ou surfaciques :

$$\langle \phi(\mathbf{x}, t) \rangle_V = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \iiint_V \phi(\mathbf{x}, t) dV \quad (4.22)$$

$$\langle \phi(\mathbf{x}, t) \rangle_S = \lim_{S \rightarrow \infty} \frac{1}{S} \iint_S \phi(\mathbf{x}, t) dS \quad (4.23)$$

En combinant les définitions de la moyenne temporelle et des moyennes spatiales instantanées, on peut définir une moyenne spatio-temporelle $\bar{\phi}_V$ qui s'écrit par exemple à partir d'une moyenne volumique :

$$\bar{\phi}_V = \langle \langle \phi(\mathbf{x}, t) \rangle_V \rangle_T \quad (4.24)$$

La moyenne spatio-temporelle dans un plan $z = \text{constante}$ est la moyenne qui sera la plus souvent utilisée au cours de ce mémoire pour les calculs dans les plans, car elle permet d'illustrer les mêmes caractéristiques statistiques de la turbulence que la moyenne temporelle, tout en permettant un meilleur niveau de convergence.

Nous noterons par la suite $\bar{\phi}_{V=V_i}$ la moyenne spatio temporelle d'une grandeur moyennée sur un volume V_i et $\bar{\phi}$ la moyenne spatio temporelle d'une grandeur moyennée sur un plan. $\bar{\phi}_{z_i}$ représentera la moyenne spatio temporelle de $\phi(\mathbf{x}, t)$ évaluée dans le plan $z = z_i$.

D'une façon générale, toute grandeur $\phi(\mathbf{x}, t)$ peut être décomposée comme la somme de sa moyenne temporelle (ici spatio-temporelle) et de sa fluctuation $\phi'(\mathbf{x}, t)$:

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \bar{\phi} + \phi'(\mathbf{x}, t) \quad (4.25)$$

Cette décomposition est appelé décomposition de Reynolds²⁸ et elle est très souvent utilisée lors des études portant sur les écoulements turbulents. Nous verrons par la suite que la décomposition de Reynolds de la vitesse permet notamment une approche statistique de la turbulence qui est la base de nombreux modèles de turbulences.

L'opérateur moyenne (spatiale, temporelle ou spatio-temporelle) est linéaire et commute avec l'opérateur différentiel. Il obéit ainsi aux règles de calculs suivantes (exprimées par exemple pour l'opérateur moyenne spatio-temporelle) :

$$\begin{cases} \forall(\phi_1, \phi_2), \forall(\alpha, \beta) & \overline{\alpha\phi_1 + \beta\phi_2} = \alpha\bar{\phi}_1 + \beta\bar{\phi}_2 \\ \forall(\phi_1, \phi_2) & \overline{\phi_1\phi_2} = \overline{\phi_1}\overline{\phi_2} + \overline{\phi_1'}\overline{\phi_2'} \\ \forall \varepsilon \in (x, y, z, t) & \frac{\partial \overline{\phi(\mathbf{x}, t)}}{\partial \varepsilon} = \overline{\frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial \varepsilon}} \end{cases} \quad (4.26)$$

Enfin, lorsque le processus étudié est instationnaire (par exemple en régime transitoire), on peut calculer une moyenne d'un ensemble de réalisations $\{\phi^k(\mathbf{x}, t)\}$ de la variable $\phi(\mathbf{x}, t)$, différente de la moyenne temporelle :

$$\langle \phi(\mathbf{x}, t) \rangle_E = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \phi^k(\mathbf{x}, t) \quad (4.27)$$

Du fait des symétries du domaine, les grandeurs statistiques évaluées selon l'axe \mathbf{x} seront additionnées à celles évaluées selon l'axe \mathbf{y} pour permettre une convergence plus rapide des statistiques. De la même façon, les résultats statistiques évalués dans chaque demi-domaine seront sommés. Ainsi, sauf indication contraire, le domaine que nous considérerons ne prendra en compte qu'une seule des deux surfaces libres et de la même façon, pour une variable $\phi(\mathbf{x}, t)$ donnée sa moyenne sera évaluée à l'aide de

$$\overline{\phi_x} = \frac{1}{2} \left[\frac{\langle\langle \phi_x(\mathbf{x}, t) \rangle_S \rangle_T + \langle\langle \phi_y(\mathbf{x}, t) \rangle_S \rangle_T}{2} \right]_{haut} + \frac{\langle\langle \phi_x(\mathbf{x}, t) \rangle_S \rangle_T + \langle\langle \phi_y(\mathbf{x}, t) \rangle_S \rangle_T}{2} \right]_{bas} \quad (4.28)$$

$$\overline{\phi_z} = \frac{1}{2} [\langle\langle \phi_z(\mathbf{x}, t) \rangle_S \rangle_T]_{haut} + \langle\langle \phi_z(\mathbf{x}, t) \rangle_S \rangle_T]_{bas} \quad (4.29)$$

Comme le domaine est invariant par rotation autour de l'axe \mathbf{z} , la moyenne évaluée pour l'axe \mathbf{x} désignera donc aussi la moyenne évaluée selon l'axe \mathbf{y} .

4.3 Présentation de la phase fluide

4.3.1 Configuration étudiée

Pour permettre une étude paramétrique de l'influence de l'intensité turbulente sur le dépôt des inclusions à l'interface métal liquide/laitier, nous avons fait varier le nombre de nœuds du maillage. En effet, comme on l'a vu à l'aide de l'équation (4.4), les nombres de Reynolds que l'on peut atteindre dans le domaine sont directement corrélés au nombre de nœuds utilisés dans les simulations et une des premières étapes de la simulation est de déterminer l'intensité turbulente maximale qui peut être considérée pour que le maillage puisse permettre de résoudre les petites échelles de la turbulence. On présente Tableau 7 les différentes simulations effectuées. Pour chaque simulation, le nombre de nœuds suivant l'axe \mathbf{x} est égal à celui suivant l'axe \mathbf{y} ($N_x = N_y$). La zone de forçage occupe un tiers de la hauteur du domaine suivant l'axe \mathbf{z} . Lorsque l'on fait varier le rapport N_x/N_z , on diminue la distance qui se trouve entre la zone de forçage et la surface libre.

À maillage donné, la valeur de l'énergie injectée dans le domaine est fixée de manière à satisfaire le critère $k_{max}\eta = 1,5$ où k_{max} est ici le plus grand nombre d'onde résolu (dont la valeur est liée à N_x , N_y et N_z) et η est la longueur de Kolmogorov basée sur le taux de dissipation moyen sur tout le domaine. Nous présentons ce critère au paragraphe (4.3.2.3).

Pour chaque simulation, le niveau de l'intensité turbulente à proximité de la surface libre dépend de l'énergie injectée dans le domaine et de la distance entre la surface libre et la zone de forçage. On présente ici pour les simulations effectuées les valeurs du nombre de Reynolds évalué dans le plan de la surface libre à l'aide de l'énergie cinétique turbulente, du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente et de la viscosité cinématique :

$$Re_s = \bar{k}_s^2 / (v\epsilon_s) \quad (4.30)$$

Elles sont comparées à celles obtenues par Campagne. On remarque qu'elles diffèrent légèrement de celles de Campagne, ce qui peut s'expliquer par la différence dans le nombre de simulations indépendantes utilisées pour évaluer les statistiques.

Cas	A	B	D	E
$N_x \times N_y \times N_z$	$192^2 \times 168$	$192^2 \times 112$	$288^2 \times 252$	$384^2 \times 336$
Re_s évalué par Campagne	76	85	-	230
Re_s	68	103	148	235
ϵ_s ($m^2.s^{-3}$)	$8,7.10^{-6}$	$2,4.10^{-5}$	$3,6.10^{-5}$	$9,9.10^{-5}$
k_s ($m^2.s^{-2}$)	$2,1.10^{-5}$	$4,4.10^{-5}$	$6,5.10^{-5}$	$1,3.10^{-4}$
η_s (m)	$4,8.10^{-4}$	$3,8.10^{-4}$	$3,4.10^{-4}$	$2,6.10^{-4}$

Tableau 7 : Caractéristiques des simulations étudiées

4.3.2 Validation de l'écoulement fluide

Le code que nous utilisons est légèrement différent de celui développé par Campagne. Les versions des librairies mathématiques et les transformées de Fourier rapides ont été changées pour prendre en compte leur évolution et permettre de faire fonctionner le code sur des processeurs Intel (tandis que Campagne utilisait des processeurs IBM). Toutefois, pour les mêmes paramètres d'entrée, les écoulements simulés à l'aide du code modifié ne devraient pas être différents de ceux de Campagne. Nous présentons dans un premier temps les résultats de simulations effectuées pour une taille fixe du domaine, le Cas A qui est le cas qui a été le plus étudié par Campagne et qui nous permettra de vérifier que les modifications apportées au code de calcul n'ont pas changé les caractéristiques de l'écoulement obtenu.

De la même façon que Campagne, nous avons vérifié à l'aide du calcul des variances des composantes de la vitesse du fluide les différentes symétries du domaine. Ainsi, la symétrie par rapport au plan $z = z_c$ des statistiques de l'écoulement permet de cumuler les statistiques obtenues de part et d'autre de la zone de forçage. L'invariance par rotation autour de l'axe \mathbf{z} permet quant à elle de cumuler les statistiques obtenues suivant l'axe \mathbf{x} avec celles obtenues suivant l'axe \mathbf{y} .

4.3.2.1 Identification de la fin du régime transitoire

Comme présenté précédemment, puisqu'un écoulement turbulent est fortement aléatoire, la plupart des résultats qui vont être présentés sont des grandeurs statistiques moyennées sur le temps. Pour cela, il est nécessaire d'attendre que le régime transitoire de l'écoulement soit terminé et que la turbulence soit pleinement développée au sein du domaine. La question est de pouvoir identifier

clairement le moment où le régime transitoire est terminé. Pour cela, nous comparons ici les deux approches de Campagne²⁷ et de Bodart⁸⁴.

Campagne se base sur l'évolution temporelle de la moyenne volumique de l'énergie cinétique turbulente ainsi que du taux de dissipation de l'énergie cinétique volumique. Ces deux grandeurs sont normalisées par la valeur de leur moyenne volumique finale :

$$k_V(t)/\bar{k}_V \quad ; \quad \varepsilon_V(t)/\bar{\varepsilon}_V \quad (4.31)$$

Lorsque l'on introduit le forçage dans un écoulement au repos, ces deux grandeurs croissent fortement en début de simulation et se stabilisent ensuite autour de l'unité. Campagne considère que le moment où elles sont stabilisées correspond au moment où la turbulence a diffusé dans l'ensemble du domaine de calcul. On présente Figure 32 l'évolution au cours du temps des trois rapports $\varepsilon_V(t)/\bar{\varepsilon}_V$, $\varepsilon_s(t)/\bar{\varepsilon}_s$ et $Re_s(t)/Re_s$ pour le Cas A. Le rapport mettant en jeu le taux de dissipation calculé dans le plan de la surface libre met un temps bien plus élevé avant d'atteindre l'unité que celui calculé dans tout le domaine, ce qui est logique puisqu'il faut que la turbulence générée dans la zone de forçage diffuse jusqu'à la surface libre et que le processus de dissipation de l'énergie se mette en place. Le rapport $Re_s(t)/Re_s$ met un temps encore plus élevé à atteindre l'unité puisqu'il dépend de l'énergie cinétique turbulente et du taux de dissipation.

Toutefois, l'observation de ces courbes peut paraître subjective et être peu satisfaisante. De ce fait, on peut utiliser un critère présenté par Bodart qui consiste à évaluer un temps de diffusion basé sur les termes de diffusion turbulente de l'équation de Navier Stokes. À l'aide des symétries de l'écoulement qui sont similaires à notre cas, il obtient :

$$T_{diff} = \frac{2}{L_z} \int_{z_c}^{z_s} \frac{1}{\left| \frac{1}{\bar{u}_i u_i} \frac{d\bar{u}_i u_i w}{dz} \right|} dz \quad (4.32)$$

En comparant ce temps de diffusion à l'énergie cinétique turbulente moyennée dans un volume restreint à proximité de la surface libre, Bodart estime que la turbulence s'est pleinement développée au bout d'environ $2T_{diff}$. Pour le Cas A, on obtient $2T_{diff} \approx 7s$, ce qui correspond à un temps au bout duquel on peut supposer que le régime transitoire est achevé (Figure 32).

Dans nos simulations, pour identifier la fin du régime transitoire et commencer le cumul des données statistiques, nous avons utilisé le critère basé sur le nombre de Reynolds de surface. En outre, nous avons *a posteriori* évalué $2T_{diff}$ pour vérifier si le critère de Bodart était également satisfait.

Il s'avère que pour les Cas A à D, nous avons bien attendu au moins la durée de $2T_{diff}$. Le seul cas pour lequel nous avons attendu moins de $2T_{diff}$ est le Cas E pour lequel les temps de calculs sont très lourds. Pour le Cas E, la durée qui a précédé le début du calcul des statistiques est de l'ordre de T_{diff} , durée de temps qui est toutefois plus élevée que celui qu'on aurait pu obtenir par l'observation du critère basé sur $k_V(t)/\bar{k}_V$ ou sur $\varepsilon_V(t)/\bar{\varepsilon}_V$.

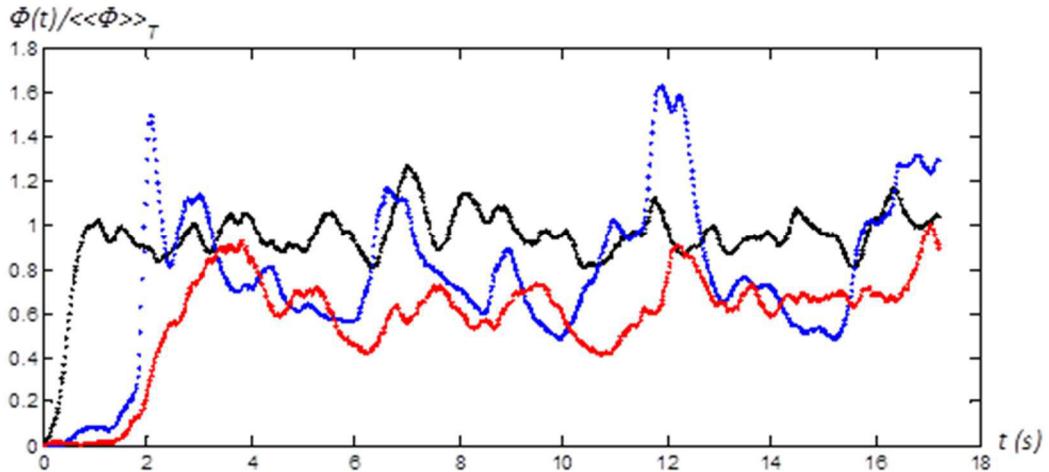


Figure 32 : Cas A : Évolution temporelle de la moyenne volumique du taux de dissipation normalisé par sa moyenne volumique finale $\varepsilon_V(t)/\overline{\varepsilon_V}$ (points noirs), du taux de dissipation moyen à la surface libre et normalisé par sa moyenne surfacique finale $\varepsilon(t, nz)/\overline{\varepsilon(nz)}$ (points bleus) et du nombre de Reynolds turbulent moyen à la surface libre et normalisé par sa valeur moyenne finale $Re(t, nz)/\overline{Re(nz)}$ (points rouges)

Pour finir, nous précisons que le temps qui sépare la prise de deux statistiques est choisi, dans chaque simulation, supérieur à l'échelle de temps de Kolmogorov τ_η la plus élevée, évaluée à la surface libre. Ceci assure que les champs pris en compte sont bien différenciés au niveau des petites échelles de la turbulence. Pour les grandes échelles de la turbulence, il faudra simplement garder à l'esprit que le nombre de valeurs réellement indépendantes est obtenu en divisant le nombre d'échantillons pris en compte par le rapport entre l'échelle temporelle des tourbillons les plus grands τ et celle des tourbillons les plus petits, τ/τ_η .

4.3.2.2 Spectre de l'énergie volumique de l'écoulement

Nous pouvons observer la distribution de l'énergie turbulente en fonction du module du vecteur d'onde sur la Figure 33. Le spectre est non moyenné dans le temps, cependant, comme attendu, il est très proche de celui moyenné dans le temps que présente Campagne²⁷ pour ses propres simulations. Ce spectre est aussi très proche de celui présenté par Bodart⁸⁴ alors que le forçage dans le code de Bodart est effectué dans le domaine physique.

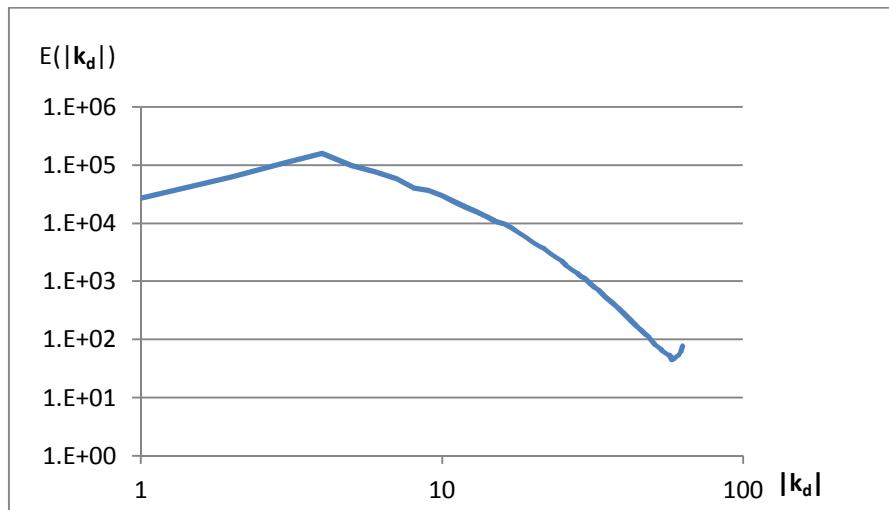


Figure 33 : Cas A : Spectre d'énergie volumique instantané moyen sur l'ensemble du domaine

Le pic d'énergie est situé au niveau des grandes structures de la turbulence, à $|k| = 4$ comme attendu puisque ce pic est directement lié au forçage injecté dans le domaine. Lorsque l'on se place à droite du

pic d'énergie, le spectre présente principalement trois zones. La première zone, de décroissance légère est due au transfert d'énergie des tourbillons les plus grands aux tourbillons plus petits. Ensuite, la pente diminue fortement : on rentre dans la partie dissipative du spectre où les forces visqueuses sont très présentes. Enfin, on observe une remontée de l'énergie pour les modules d'onde les plus élevés. Cette remontée est en fait un artefact numérique issus du fait que les plus petites échelles de turbulence ne sont pas complètement résolues^{27,84}.

Du fait de la présence d'un forçage aléatoire au centre du domaine seulement, on peut supposer (et cela sera vérifié par la suite), que les plus petites structures de la turbulence dans notre domaine sont situées dans la zone de forçage de la turbulence. De ce fait, les échelles de la turbulence qui sont sous résolues sont situées dans la zone de forçage, qui n'est pas la zone qui nous intéresse dans cette étude.

4.3.2.3 Évaluation de la résolution des petites échelles de la turbulence

En simulation numérique directe, la résolution spatiale doit permettre de simuler toutes les échelles de la turbulence. Les plus petites échelles résolues lors d'une simulation sont de l'ordre de $1/k_{max}$ tandis que les plus petites échelles de la turbulence sont de l'ordre de l'échelle de Kolmogorov η . Ainsi, le critère de résolution $k_{max}\eta$ permet d'évaluer la finesse de la résolution spatiale choisie. D'après Eswaran et Pope⁸⁰ lorsque ce critère est inférieur à l'unité, la précision de la simulation se dégrade fortement.

Sur la Figure 34, on présente le critère de résolution $k_{max}\eta$. Dans toute la zone de diffusion jusqu'à l'interface libre, on peut donc vérifier que le critère est supérieur à 1. On remarque notamment que près de la surface libre, $k_{max}\eta$ est supérieur à 3, ce qui nous assure de la très bonne résolution des échelles de la turbulence très près de la surface libre.

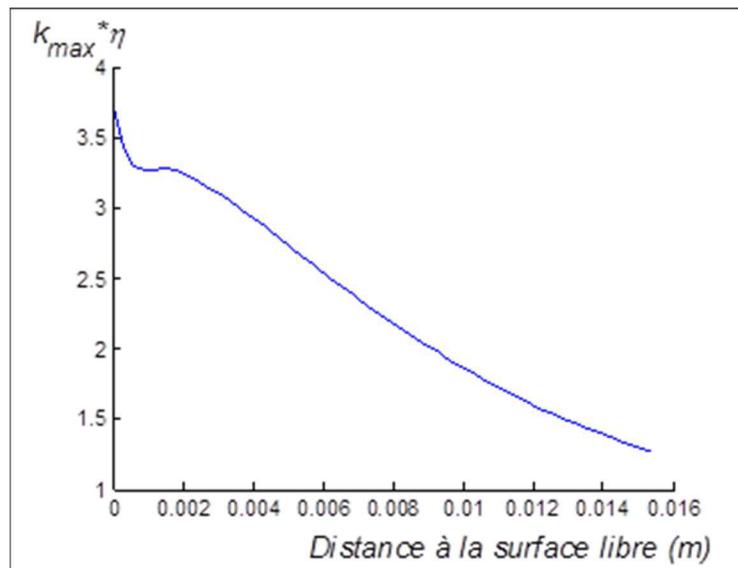


Figure 34 : Cas A : Évolution du critère $k_{max}\eta$ en fonction de la distance à la surface libre

4.3.2.4 Validation des conditions périodiques

Sur la Figure 35 nous présentons les fonctions d'auto-corrélation longitudinales $f(x)$ et transversales $g(y)$ des vitesses tangentielles du fluide. Ces fonctions permettent de vérifier que le niveau de corrélation entre deux points situés à une demi-longueur du domaine de taille $L_x = L_y$ est faible, et donc de vérifier que la période spatiale dans les directions tangentielles à la surface libre est suffisamment grande par rapport à la taille des structures turbulentées. Elles sont définies par :

$$f(x) = \frac{\overline{u(0)u(x)}}{\overline{u^2}} \quad (4.33)$$

$$g(y) = \frac{\overline{u(0)u(y)}}{\overline{u^2}} \quad (4.34)$$

Sur la Figure 35 on représente la fonction d'auto-corrélation longitudinale sur le graphique de gauche, et la fonction d'auto-corrélation transversale sur le graphique de droite.

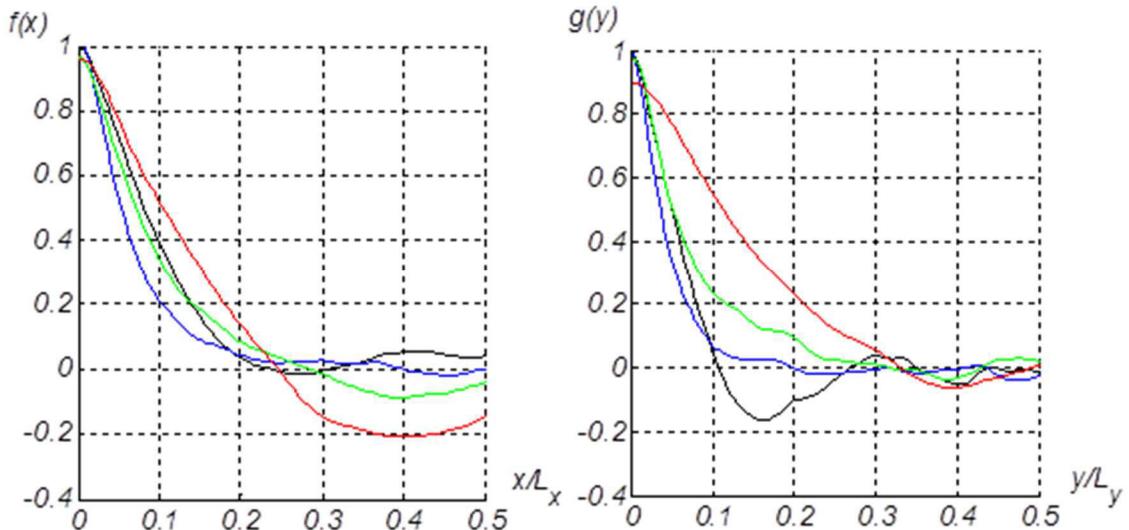


Figure 35 : Cas A : Fonction d'auto-corrélation longitudinale (à gauche) et transversale (à droite) de la vitesse tangentielle évaluée à différentes distances de la surface libre. Noir : $Lz/2$, bleu : $Lz/3$, vert : $Lz/6$, rouge : 2Δ .

Les variances de la vitesse du fluide, $\overline{u^2}$ ayant été calculées au cours d'autres simulations que celle ayant permis d'évaluer le terme au numérateur des corrélations, on remarque que la valeur des corrélations n'est pas exactement égale à l'unité en $x = 0$ et $y = 0$ ce qui signifie que le degré de convergence des deux termes n'est pas identique. Le calcul des termes au numérateur, ajouté après les autres dans notre code de calcul, nécessiterait donc un peu plus de statistiques, surtout à proximité de la surface libre. Près de la zone de forçage, les statistiques ont suffisamment convergées pour que $f(x)$ et $g(y)$ soient égales à 1 en $x = 0$ et $y = 0$. Lorsqu'on se rapproche de la surface libre, la corrélation entre deux points proches spatialement augmente du fait de l'augmentation des échelles de longueur dans la zone de diffusion.

D'après la Figure 35, on peut déduire que la période spatiale de notre domaine est suffisamment grande puisque les deux fonctions s'annulent avant d'atteindre la moitié du domaine.

4.3.3 Caractéristiques de la phase fluide

4.3.3.1 Isotropie de la turbulence

À partir des composantes de la vitesse du fluide, on peut évaluer la micro échelle de Taylor longitudinale $\overline{\lambda_{li}^2}$ et transversale $\overline{\lambda_{tij}^2}$.

$$\frac{1}{\overline{\lambda_{li}^2}} = \frac{1}{2\overline{u_i^2}} \overline{\left(\frac{\partial u_i'}{\partial x_i}\right)^2} \quad (4.35)$$

$$\frac{1}{\overline{\lambda_{tij}^2}} = \frac{1}{2\overline{u_i^2}} \overline{\left(\frac{\partial u_i'}{\partial x_j}\right)^2} \quad (4.36)$$

Cette micro-échelle n'est pas physiquement associée à une taille de tourbillon particulière, par contre elle donne des renseignements sur l'isotropie de l'écoulement puisqu'en turbulence isotrope, le rapport de la micro-échelle de Taylor longitudinale à la micro-échelle de Taylor transversale est égale à $\sqrt{2}$.

On a tiré profit de l'homogénéité des directions x et y pour évaluer les micro-échelles, ainsi on a :

$$\overline{\lambda_{lx}} \equiv \frac{1}{2}(\overline{\lambda_{lx}} + \overline{\lambda_{ly}}) ; \quad \overline{\lambda_{txy}} = \frac{1}{2}(\overline{\lambda_{txy}} + \overline{\lambda_{tyx}}) ; \quad \overline{\lambda_{tzx}} = \frac{1}{2}(\overline{\lambda_{tzx}} + \overline{\lambda_{tzy}}) \quad (4.37)$$

On n'a pas évalué les gradients de vitesse tangentielle dans la direction normale à la surface libre. En conséquence, la micro échelle associée n'est pas rapportée ici.

Sur la Figure 36 nous présentons l'évolution des micro-échelles de Taylor en fonction de la distance à la surface libre. On remarque qu'elles varient de façon non monotone : les micro-échelles augmentent tout d'abord à la sortie de la zone de forçage puis diminuent à l'approche de la surface libre. On note que les deux micro-échelles longitudinales sont très proches l'une de l'autre à la sortie de la zone de forçage, il en est de même pour les échelles transversales. À l'approche de la surface libre, les micro échelles associées aux fluctuations de vitesse normale diminuent plus tôt et plus fortement que les micro échelles correspondantes associées aux fluctuations tangentielles. Ceci s'explique par la condition de blocage (annulation de la vitesse normale) à la surface libre.

Campagne avait calculé le rapport des micro-échelles longitudinale et transversale à partir de $\overline{\lambda_{lx}}$ et $\overline{\lambda_{tzx}}$ et obtenu un rapport d'environ 1,30. Nous vérifions Figure 36 que les autres rapports sont légèrement supérieurs à $\overline{\lambda_{lx}}/\overline{\lambda_{tzx}}$ en sortie de la zone de forçage et très proches de $\sqrt{2}$.

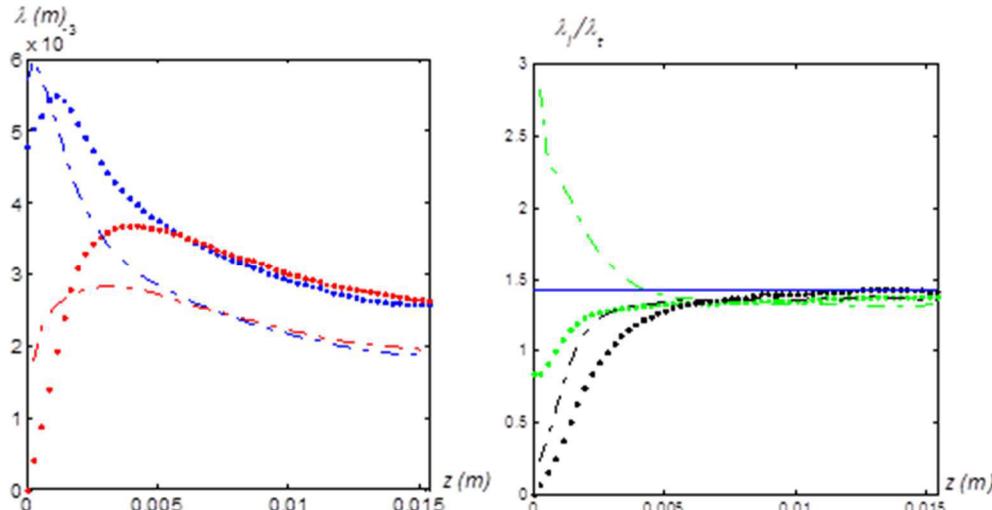


Figure 36 : Cas A : À gauche, évolution des micro-échelles de Taylor longitudinales et transversales en fonction de la distance à la surface libre, points bleus : $\overline{\lambda_{lx}}$, points rouges : $\overline{\lambda_{ly}}$, tirets bleus : $\overline{\lambda_{txy}}$, tirets rouges : $\overline{\lambda_{tzx}}$. À droite, rapport des micro-échelles en fonction de la distance à la surface libre. Points verts : $\overline{\lambda_{lx}}/\overline{\lambda_{txy}}$, points noirs : $\overline{\lambda_{lx}}/\overline{\lambda_{tzx}}$, tirets verts : $\overline{\lambda_{ly}}/\overline{\lambda_{txy}}$, tirets noirs : $\overline{\lambda_{ly}}/\overline{\lambda_{tzx}}$. La ligne bleue est la valeur de $\sqrt{2}$.

À partir des fonctions d'auto-corrélation longitudinale présentées Figure 35, nous pouvons calculer la macro-échelle de Taylor Λ , associée à la taille des structures porteuse de l'énergie cinétique, dans chaque plan parallèle à l'interface.

$$\Lambda = \int_0^{L_x/2} f(x) dx \quad (4.38)$$

On peut évaluer l'échelle intégrale transversale Λ_t de la même façon à partir de la fonction d'auto-corrélation transversale. Dans le cas d'une turbulence isotrope incompressible, cette échelle est égale à la moitié de l'échelle longitudinale²⁸ soit $\Lambda_t = \Lambda/2$.

L'écoulement n'est donc pas parfaitement isotrope à la sortie de la zone de forçage même s'il s'en rapproche fortement. L'anisotropie de l'écoulement malgré un forçage isotrope peut être dû au confinement du domaine et au fait que la zone de forçage n'est pas cubique mais est égale à $L_x \times L_y \times \frac{L_z}{3}$, avec $L_x = L_y \neq \frac{L_z}{3}$. De ce fait, les structures générées dans la zone de forçage peuvent être plus grandes suivant les axes x et y que suivant l'axe z .

4.3.3.2 Zone de surface et mise à l'échelle

4.3.3.3 Échelles associées à la surface libre

Sur la Figure 37 on présente l'évolution de l'échelle de longueur turbulente l^* en fonction de la distance à la surface libre. Cette longueur est évaluée en effectuant une moyenne dans des plans parallèles à la surface libre, à l'aide de

$$l^* = \frac{\bar{k}^{3/2}}{\bar{\varepsilon}} \quad (4.39)$$

L'échelle de longueur turbulente l^* ainsi que la macro échelle de Taylor, sont en général associées à la taille des tourbillons porteurs de l'énergie. Lorsque l'on sort de la zone de forçage, on observe une décroissance de l'échelle de longueur turbulente qui est aussi observée par Bodart. Elle se stabilise ensuite et croît légèrement à l'approche de la surface libre. Enfin, très près de la surface libre, l^* croît soudain de façon forte et atteint sa valeur maximale au niveau de la surface libre. Près de la surface libre, l'échelle de longueur est du même ordre de grandeur que la distance à la surface libre, ce qui rend difficile l'analyse de cette croissance soudaine.

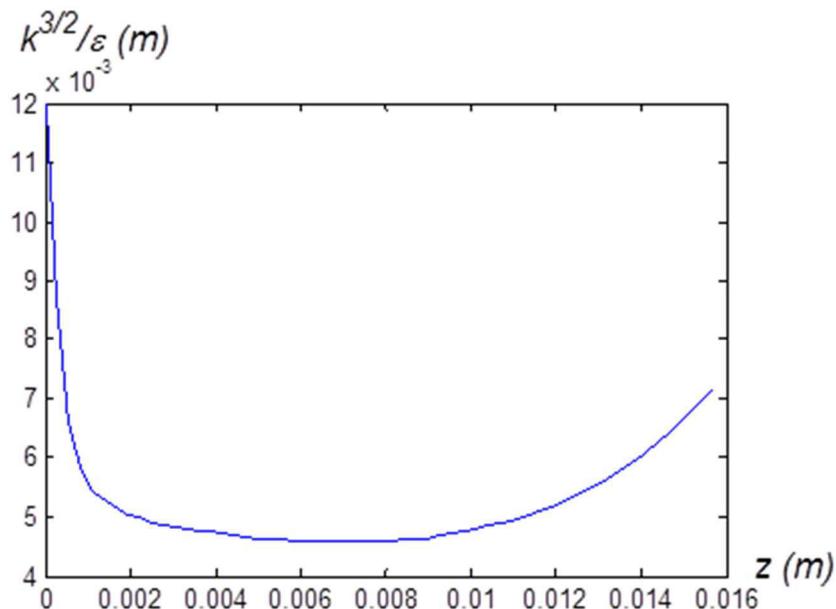


Figure 37 : Cas A : Évolution de l'échelle de longueur turbulente $k^{3/2}/\varepsilon$ en fonction de la distance à la surface libre

Campagne et Bodart identifient la zone dans laquelle l'échelle de longueur turbulente croît fortement à la sous couche de glissement.

Pour distinguer les différentes couches associées à la présence de la surface libre, on suit Campagne et Bodart et on utilise le facteur d'isotropie de la vorticité I_ω calculé de la façon suivante :

$$I_\omega = \left(\frac{\overline{\omega_x'^2}}{\overline{\omega_z'^2}} \right)^{1/2} \quad (4.40)$$

On représente Figure 38 l'évolution du facteur d'isotropie en fonction de la distance à la surface libre. Campagne et Bodart définissent une couche externe dite de blocage où I_ω augmente lorsque la distance à la surface libre diminue puis une sous couche interne dite de glissement où I_ω diminue de sa valeur de pic à zéro à la surface libre. D'après Campagne et Bodart, la pente à l'origine du facteur d'isotropie permet de définir une échelle de longueur L associée à la couche externe de blocage où la turbulence est anisotrope.

$$L = \frac{1}{\left. \frac{\partial I_\omega}{\partial z} \right|_{z=0}} \quad (4.41)$$

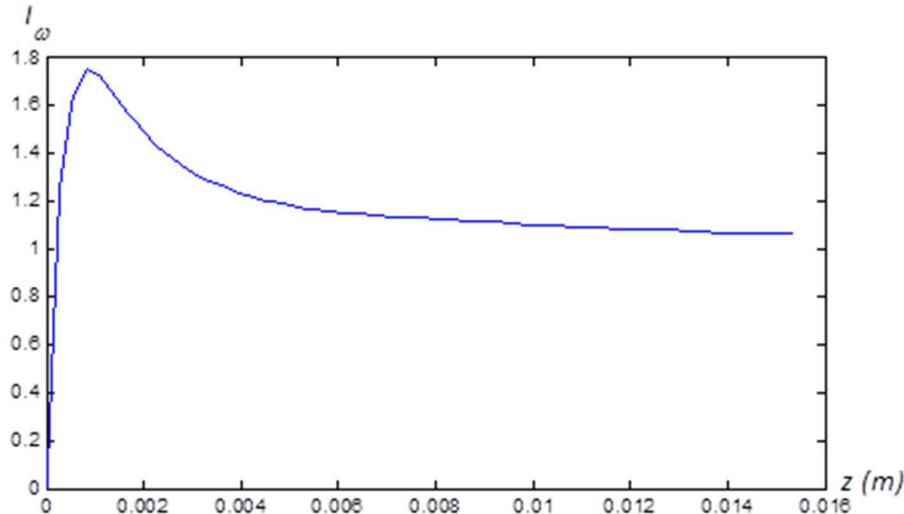


Figure 38 : Cas A : Évolution du facteur d'isotropie I_ω de la vorticité en fonction de la distance à la surface libre

Si l'on évalue la valeur de L à partir de nos simulations, on obtient les valeurs numériques présentées dans le Tableau 8.

Re_s	L (m)	L/l^*
68	$2,22 \cdot 10^{-3}$	0,193
103	$1,90 \cdot 10^{-3}$	0,157
148	$1,85 \cdot 10^{-3}$	0,129
235	$1,60 \cdot 10^{-3}$	0,101

Tableau 8 : Longueur L et l^*

Près de la surface libre, Campagne et Bodart identifient également une couche de Kolmogorov d'épaisseur égale à la taille des plus petits tourbillons (longueur de Kolmogorov).

L'existence de la couche de Kolmogorov à la surface libre implique que les échelles temporelles et spatiales pertinentes à proximité de la surface libre sont celles mettant en jeu l'énergie cinétique turbulente et le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente à la surface libre. Suivant l'approche de Campagne et Bodart, cela signifie que l'on peut trouver une valeur γ indépendante des simulations de telle sorte que L, l^* et Re_s satisfassent :

$$L/l^* = \gamma Re_s^{-0.5} \quad (4.42)$$

La valeur de γ calculée dans nos simulations vaut $\gamma = 1,577$, elle est située entre la valeur calculée par Campagne ($\gamma = 1,613$) et celle calculée par Bodart ($\gamma = 1,564$).

Sur la Figure 39 on présente l'évolution du rapport L/l^* en fonction du nombre de Reynolds évalué à la surface libre. On remarque que la loi présentée par Campagne est valable pour toutes les simulations, même celles pour lesquelles la zone de forçage a été rapprochée ou éloignée de la surface libre.

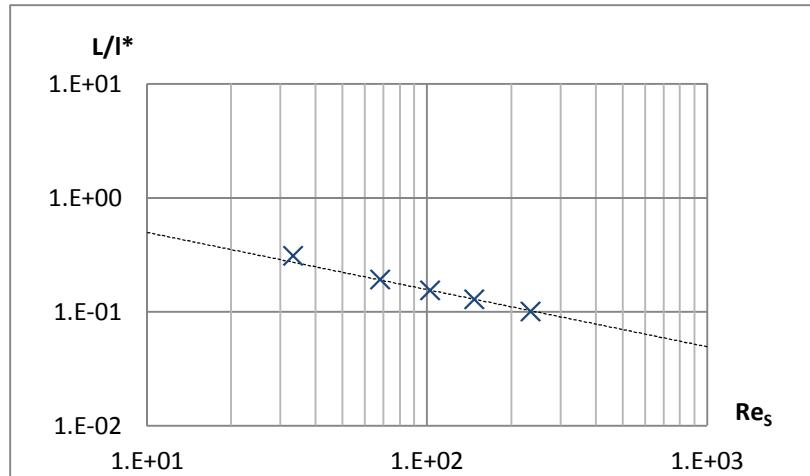


Figure 39 : Mesure de la zone de blocage et comparaison avec la loi d'échelle présenté par Campagne ($\gamma=1,577$)

Sur la Figure 40, nous présentons la variance des fluctuations de la vitesse du fluide en fonction de la distance à la surface libre (nous indiquons sur cette même figure la couche de surface qui comprend la sous-couche externe de blocage et la sous-couche interne de glissement).

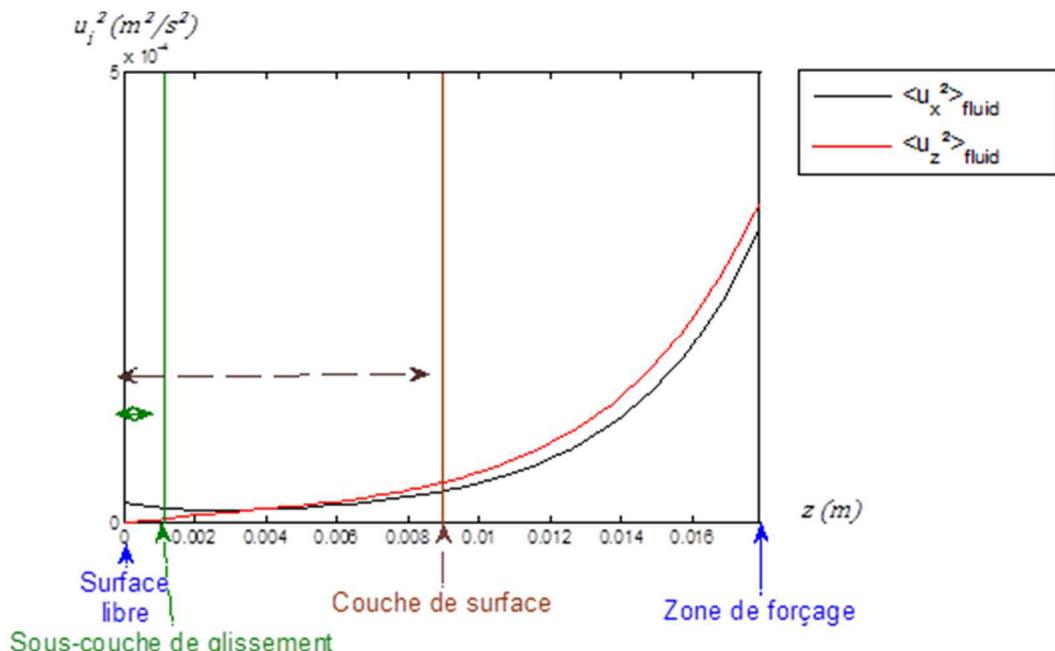


Figure 40 : Cas A : Évolution des variances des vitesses du fluide en fonction de la distance à la surface libre

On peut remarquer que très près de la surface libre, les fluctuations dans les directions parallèles à la surface libre augmentent tandis que celles normales à la surface libre diminuent et tendent vers zéro. Outre le fait que ce comportement n'est possible qu'en surface libre (car en surface solide sans glissement, les trois composantes de la vitesse du fluide sont nulles), il traduit aussi un mécanisme qui a été observé dans le cas de la surface libre. Ce mécanisme, qui se passe à proximité de la surface libre du fluide, est le transfert de l'énergie contenue dans la composante de vitesse du fluide normale à l'interface vers les composantes de la vitesse du fluide tangentielles à la surface libre.

Un des questionnements liés à ce transfert d'énergie est de connaître son impact sur l'écoulement du fluide dans le reste du domaine. Campagne montre que, dans le cadre de ses simulations, les événements turbulents dirigés vers la surface libre sont moins nombreux mais plus intenses en moyenne que les événements turbulents qui repartent en direction de la zone de forçage. Nous verrons dans le paragraphe suivant que ce mécanisme est très important sur le mouvement des particules.

Sur la Figure 41 nous présentons une vue instantanée de la surface libre. Les abscisses et ordonnées sont adimensionnées par le pas d'espace du maillage. Les vecteurs sont les vecteurs vitesses du fluide. En couleurs sont représentées les isovaleurs du gradient de la composante normale de la vitesse du fluide : celui-ci permet d'identifier quel type d'évènement à lieu à la surface libre. En rouge, on peut visualiser les évènements d'impact sur la surface libre tandis qu'en bleu, nous observons les éjections c'est-à-dire les mouvements de fluide repartant vers la zone de forçage. Les cercles pleins représentent des particules solides. On peut ainsi visualiser le transfert d'énergie des composantes normales (au niveau des impacts de fluide) vers les composantes tangentes à la surface libre (vecteurs du fluide), et l'on voit aussi qualitativement le déséquilibre entre la place occupée par les évènements d'impact par rapport aux évènements d'éjection.

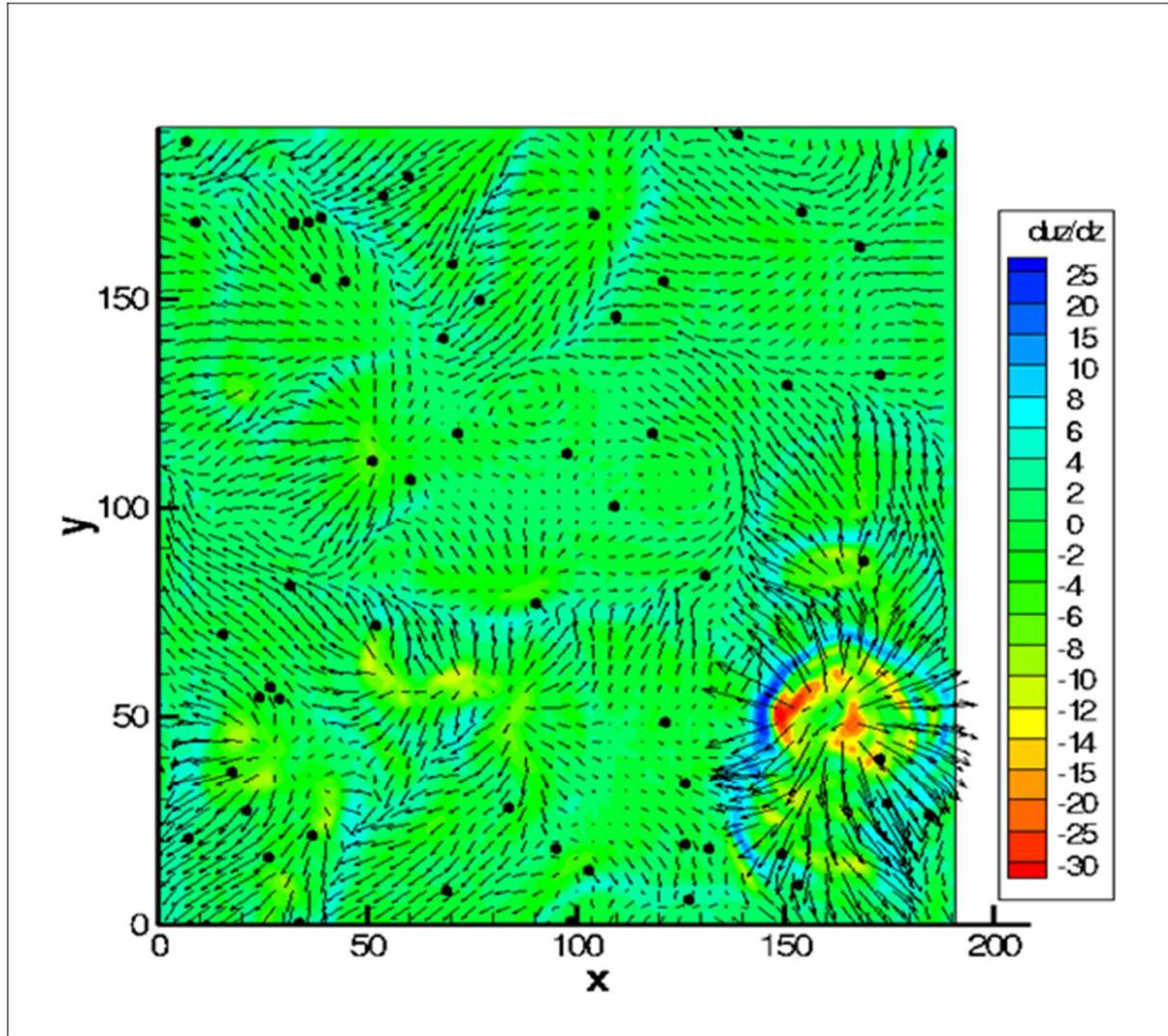


Figure 41 : Cas A : Illustration du transfert des composantes normales aux composantes tangentielles. Vue instantanée du plan de la surface libre située en haut du domaine. Les vecteurs représentent l'écoulement du fluide au niveau de la surface libre. Le champ des gradients de vitesse (en unités normalisé du code de calcul) par rapport à l'axe normal à la surface libre permet d'identifier la nature (impact ou éjection) des structures turbulentes. Les axes x et y sont discrétisés suivant le maillage du domaine. Des particules solides sont représentées par les cercles noirs pleins.

4.3.3.4 Corrélations temporelles

Un écoulement turbulent peut être caractérisé par ses échelles temporelles de corrélation. Différentes façons de calculer ces échelles existent, nous avons ici suivi la démarche employée par Arcen⁴² pour le calcul des corrélations et des échelles temporelles.

Corrélation temporelle eulérienne :

La corrélation eulérienne est évaluée dans un référentiel mobile qui évolue à la vitesse moyenne du fluide. Cette vitesse moyenne étant nulle dans notre cas, la corrélation eulérienne s'écrit simplement de la façon suivante⁴² :

$$R_{ij}^E(x(t_0), t) = \frac{\langle u'_i(x(t_0), t_0) u'_j(x(t_0), t_0 + t) \rangle}{\sqrt{\langle u'^2_i(x(t_0), t_0) \rangle \langle u'^2_j(x(t_0), t_0 + t) \rangle}} \quad (4.43)$$

où $x(t_0)$ est la position initiale de la particule lorsque l'on commence au temps t_0 l'évaluation de la corrélation eulérienne. t représente le décalage temporel par rapport au temps t_0 . Cette corrélation est évaluée ici dans des plans parallèles à la surface libre en utilisant les valeurs de la vitesse situées aux nœuds du maillage.

Comme on peut le voir sur les Figure 42 et Figure 43, près de la zone de forçage les corrélations des composantes tangentielles à la surface libre de la vitesse du fluide et celles de la composante normale, sont très proches et ont le même comportement. Du fait de la baisse de l'intensité turbulente lors de sa diffusion vers la surface libre, on observe une augmentation des corrélations de vitesse associée à l'augmentation des échelles de longueurs turbulentes. Lorsque l'on se rapproche de la surface libre, par contre, le comportement des deux corrélations se différencie : les composantes tangentielles de la vitesse du fluide se décorrèlent beaucoup plus lentement que les composantes normales.

Corrélation temporelle eulérienne du fluide :

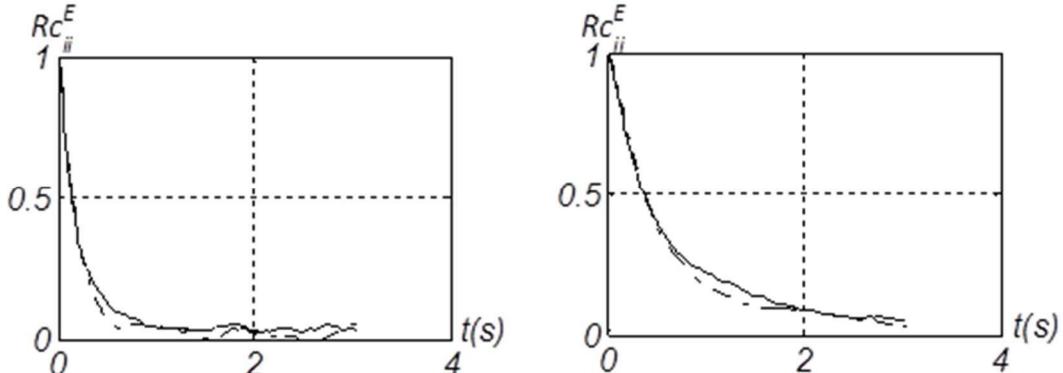


Figure 42 : Cas A : Corrélation temporelle eulérienne de l'écoulement évaluée dans un plan parallèle à la surface libre, à l'aide des vitesses tangentielles u_f du fluide (ligne continue) et des vitesses normales à la surface libre du fluide w_f (tirets).

À gauche : plan situé à $Lz/3 - \Delta$ de la surface libre. À droite : plan situé à $Lz/6$ de la surface libre.

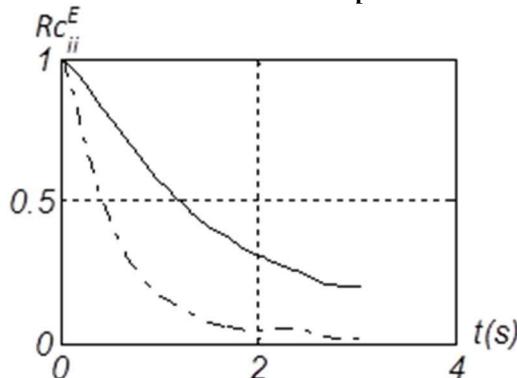


Figure 43 : Cas A : Corrélation temporelle eulérienne de l'écoulement évaluée dans un plan parallèle à la surface libre, à l'aide des vitesses tangentielles u_f du fluide (ligne continue) et des vitesses normales à la surface libre du fluide w_f (tirets). Plan situé à 4Δ de la surface libre.

Échelle temporelle eulérienne de décorrélation :

Pour une corrélation temporelle $R_{ij}(x(t_0), t)$, l'échelle temporelle de décorrélation est définie par :

$$T_{ij}(\mathbf{x}(t_0)) = \int_{t_0}^{\infty} R_{ij}(\mathbf{x}(t_0), t) dt \quad (4.44)$$

Du fait des fluctuations de $R_{ij}(\mathbf{x}(t_0), t)$ au cours du temps, l'estimation de l'échelle temporelle eulérienne de décorrélation par intégration des corrélations temporelles est délicate et nécessite de fixer arbitrairement une valeur pour la borne supérieure du calcul de l'intégral. Une autre solution, présentée par Arcen⁴² consiste à approximer la corrélation temporelle par une fonction décroissante exponentielle de la forme $\exp(-t/T_{ij})$ et à estimer l'échelle temporelle comme le temps nécessaire pour que la corrélation temporelle atteigne la valeur $\exp(-1)$. Dans notre cas, les corrélations temporelles ont été évaluées dans des plans parallèles à la surface libre, pour permettre de rendre compte de l'inhomogénéité de l'écoulement selon l'axe **z**. Or, au cours du temps, les particules fluides se déplacent dans le domaine et s'éloignent donc du plan initial dans lequel elles se situaient à l'instant $t = t_0$. Pour minimiser cet effet sur le calcul de l'échelle temporelle, nous avons donc choisi de privilégier la méthode utilisée par Iliopoulos et Hanratty⁸⁵ qui consiste à supposer que l'échelle temporelle est égale à deux fois le temps nécessaire pour que la corrélation temporelle atteigne la valeur $\exp(-0,5)$.

Les échelles temporelles sont importantes car elles sont directement dépendantes de la durée de vie des structures turbulentes qui permettent la dispersion des particules. Elles viennent en complément des échelles de décorrélation spatiale présentées précédemment qui permettent d'identifier la taille des structures turbulentes.

Nous présentons Figure 44 et Figure 45 les échelles temporelles eulériennes de décorrélation du fluide. On remarque qu'elles augmentent progressivement lorsque l'on s'éloigne de la zone de forçage, ce qui est cohérent avec une baisse de l'intensité turbulente avec la diffusion de celle-ci. Puis l'échelle temporelle eulérienne de décorrélation des fluctuations normales à la surface libre diminue alors que celle associée aux fluctuations tangentielles continue à augmenter. Enfin, très près de la surface libre, les deux échelles temporelles de décorrélation diminuent, l'échelle temporelle eulérienne de décorrélation des fluctuations tangentielles diminuant plus rapidement.

Des pistes pour expliquer le comportement des échelles temporelles de décorrélation du fluide peuvent être trouvées dans les travaux de Campagne et Bodard. Ils montrent en effet que la condition de surface libre impose une réorientation de l'axe des vortex : la direction de l'axe d'un vortex est aléatoire dans la zone de forçage alors qu'elle est nécessairement normale à la surface libre au niveau de la surface libre. Cela explique l'augmentation de l'échelle temporelle eulérienne de décorrélation des fluctuations tangentielles, simultanément à la diminution de l'échelle temporelle eulérienne de décorrélation des fluctuations de la vitesse normale du fluide. Cette diminution est associée à la couche de blocage. La longueur L introduite précédemment est caractéristique de la diminution de l'échelle temporelle eulérienne de décorrélation des fluctuations normales. D'après Campagne, la longueur de la couche de blocage est de l'ordre de 4 à $5L$; on remarque qu'en effet, dans le cas où $Re_s = 235$, les échelles temporelles eulériennes, tout d'abord confondues, se séparent à environ 4 à $5L$ de la surface libre.

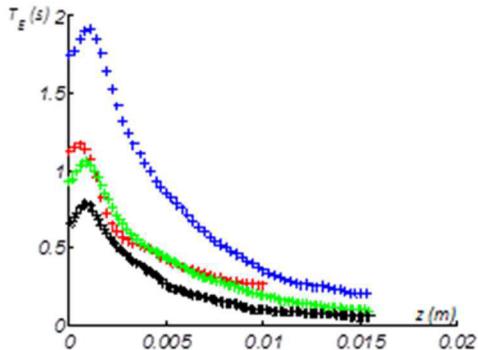


Figure 44 : Échelle temporelle de décorrélation eulérienne évaluée à l'aide des vitesses tangentielles à la surface libre du fluide en fonction de la distance à la surface libre.

Bleu : $Re_s=68$, rouge : $Re_s=103$, vert : $Re_s=148$, noir : $Re_s=235$

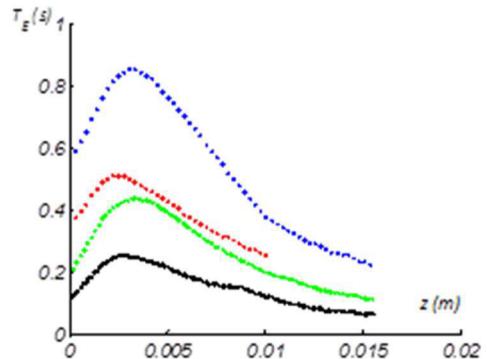


Figure 45 : Échelle temporelle de décorrélation eulérienne évaluée à l'aide des vitesses normales à la surface libre du fluide en fonction de la distance à la surface libre.

Bleu : $Re_s=68$, rouge : $Re_s=103$, vert : $Re_s=148$, noir : $Re_s=235$

Si l'on adimensionne les échelles temporelles eulériennes de décorrélation par l'échelle temporelle de Kolmogorov calculée à la surface libre (Figure 46), on remarque que les échelles temporelles eulériennes de décorrélation des fluctuations normales atteignent une valeur maximale commune à une même distance (adimensionnée par L) de la surface libre. Par contre, on n'observe pas de valeur maximale commune pour les échelles temporelles eulériennes de décorrélation des fluctuations tangentielles.

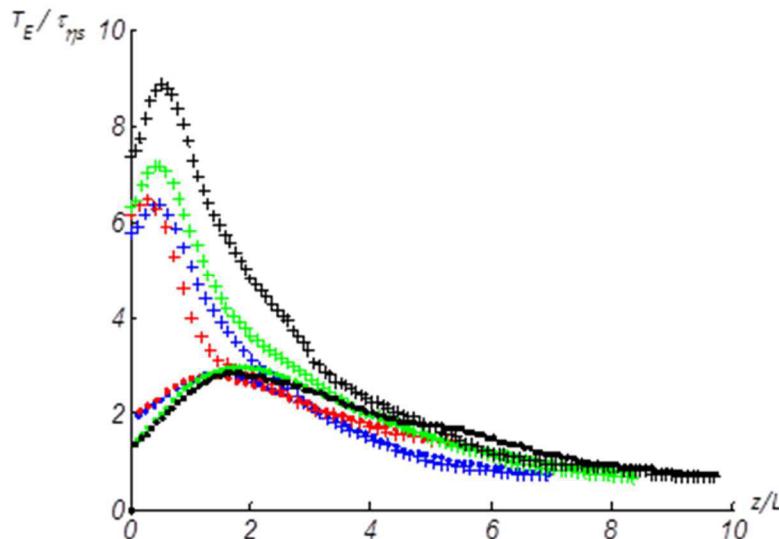


Figure 46 : Échelle temporelle de décorrélation eulérienne normalisée par le temps de Kolmogorov et évaluée à l'aide des vitesses tangentielles (croix) à la surface libre du fluide et des vitesses normales (points) à la surface libre du fluide en fonction de la distance à la surface libre adimensionnée par L . Bleu : $Re_s=68$, rouge : $Re_s=103$, vert : $Re_s=148$, noir : $Re_s=235$

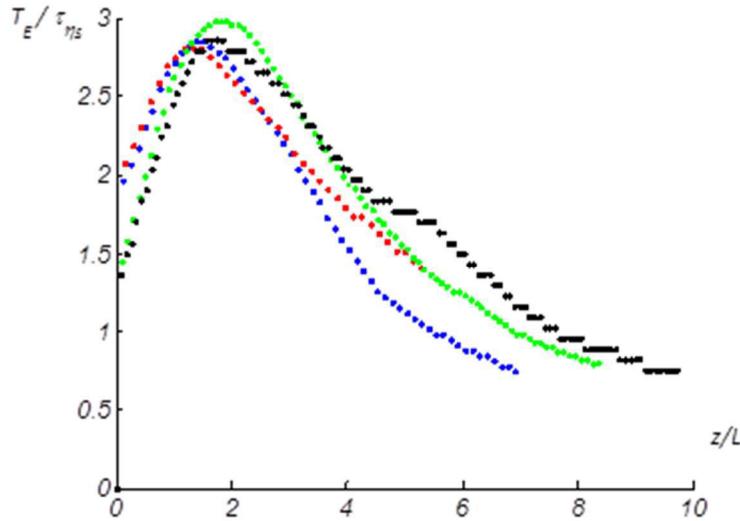


Figure 47 : Échelle temporelle de décorrélation eulérienne normalisée par le temps de Kolmogorov et évaluée à l'aide des vitesses normales à la surface libre du fluide en fonction de la distance à la surface libre adimensionnée par L . Bleu : $Re_s=68$, rouge : $Re_s=103$, vert : $Re_s=148$, noir : $Re_s=235$

Corrélation temporelle lagrangienne :

La corrélation lagrangienne est évaluée en suivant le mouvement d'une particule fluide⁴².

$$R_{ij}^L(\mathbf{x}_t(t_0), t) = \frac{\langle u'_i(\mathbf{x}_t(t_0), t_0) u'_j(\mathbf{x}_t(t_0 + t), t_0 + t) \rangle}{\sqrt{\langle (u'^2)_i(\mathbf{x}_t(t_0), t_0) \rangle \langle (u'^2)_j(\mathbf{x}_t(t_0 + t), t_0 + t) \rangle}} \quad (4.45)$$

où $\mathbf{x}_t(t_0)$ est la position occupée par un traceur à l'instant t_0 .

Du fait des méthodes numériques utilisées ici pour résoudre l'écoulement fluide, nous n'avons pas accès directement au mouvement des particules fluides. Pour calculer la corrélation lagrangienne, nous avons donc suivis des particules solides de densité égale à la densité du fluide et qui nous servent donc de traceurs.

On représente Figure 48 les corrélations lagrangiennes évaluées dans différents plans du domaine pour le cas A que l'on superpose aux corrélations eulériennes présentées précédemment. On observe très peu de différence entre les deux corrélations ; leur comportement et leurs valeurs sont très similaires. De même, Figure 49, on remarque que la différenciation marquée au niveau de la surface libre observée précédemment entre les corrélations évaluées avec les composantes normales à la surface libre et celles évaluées à l'aide des composantes tangentielles est aussi présente pour les corrélations lagrangiennes.

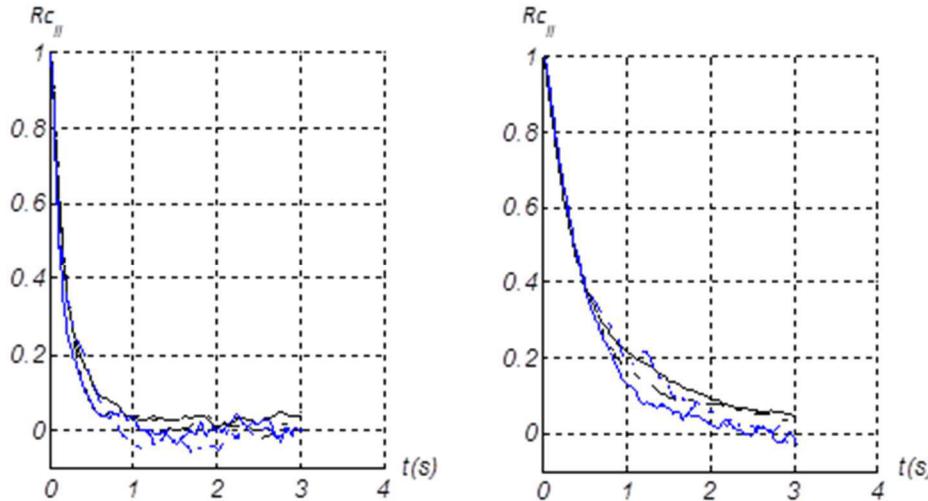


Figure 48 : Cas A : Corrélations temporelles eulérienne (noir) et lagrangienne (bleu) du fluide évaluées dans un plan parallèle à la surface libre à l'aide des vitesses tangentielles (ligne) des traceurs fluides et des vitesses normales à la surface libre (tirets) des traceurs fluides.

À gauche : plan situé à $Lz/3 - \Delta$. À droite : plan situé à $Lz/6$.

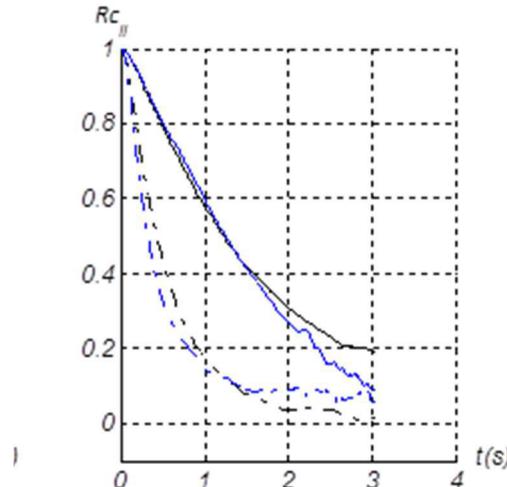


Figure 49 : Cas A : Corrélations temporelles eulérienne (noir) et lagrangienne (bleu) du fluide évaluées dans un plan parallèle à la surface libre à l'aide des vitesses tangentielles (ligne) des traceurs fluides et des vitesses normales à la surface libre (tirets) des traceurs fluides.

Plan situé à 4Δ de la surface libre.

Échelle temporelle lagrangienne de décorrélation :

On peut intégrer les corrélations lagrangiennes de la même façon qu'on l'avait fait pour les corrélations eulériennes pour calculer les échelles lagrangiennes de décorrélation.

Lorsqu'on compare les échelles eulériennes et les échelles lagrangiennes (Figure 50), on remarque que dans tout le domaine, l'échelle eulérienne est supérieure à l'échelle lagrangienne. Arcen fait le même constat sur ses simulations. Cela signifie que la décorrélation en un point donné du domaine est plus lente que la décorrélation subie le long de la trajectoire d'une particule fluide.

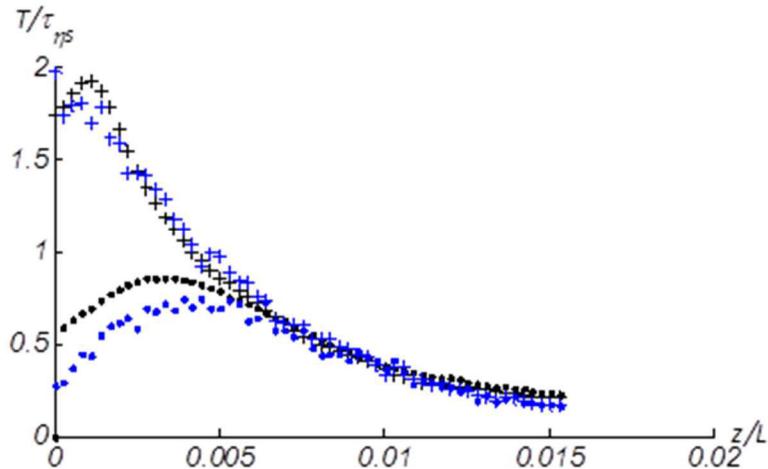


Figure 50: Échelles temporelles de décorrélation eulérienne (noir) et lagrangienne (bleu) normalisées par l'échelle temporelle de Kolmogorov et évaluées à l'aide des composantes tangentielles à la surface libre (croix) de la vitesse du fluide et des composantes normales à la surface libre (points) de la vitesse du fluide, en fonction de la distance à la surface libre normalisée par L .

Il est important de bien différencier ces différentes échelles car elles n'agissent pas de la même façon sur les particules solides qui sont en suspension dans un écoulement²¹. On peut par exemple s'intéresser aux deux cas extrêmes suivants, une particule très inertielle et donc très peu sensible aux petites fluctuations du fluide et une particule de même densité que le fluide et qui agit comme un traceur des particules fluides. Dans le premier cas, la particule très inertielle va de façon imagée traverser sur sa lancée les tourbillons de l'écoulement porteur : la façon dont la vitesse du fluide vu par la particule se décorrèle va donc être liée à la décorrélation spatiale de l'écoulement porteur. Au contraire, une particule traceur, agissant comme le fluide, va voir la vitesse du fluide vu se décorrérer par le phénomène qu'on nomme en anglais « eddy decay » et qui est lié à la durée de persistance d'un tourbillon, et donc à l'échelle temporelle lagrangienne de décorrélation du fluide.

4.4 Suivi Lagrangien

4.4.1 Couplage entre la phase fluide et la phase dispersée

Équation de la dynamique

L'équation de la dynamique qui sera utilisée dans les cas les plus complets prendra en compte les forces inertielles en plus des forces de pesanteur et la force de traînée :

$$m_p \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \mathbf{F}_v + \mathbf{F}_D + \mathbf{F}_{MA} + \mathbf{F}_{Acc} \quad (4.46)$$

Lorsque l'inertie de la particule sera négligée, on utilisera l'équation suivante :

$$\mathbf{u}_p = \mathbf{u}_f + \mathbf{v}_{sed} \quad (4.47)$$

Enfin, à l'approche de la surface libre, les effets de la lubrification peuvent être pris en compte. Dans ce cas, on ajoute dans l'expression de la force de traînée les coefficients de frottement proposés par Nguyen et on prend alors également en compte les interactions de Van Der Waals.

Comme le domaine est divisé en deux domaines distincts avec une surface libre en haut et une surface libre en bas, nous avons adapté la formulation des forces pour que l'évolution des particules ne dépende pas du domaine dans lequel le calcul est effectué. Ainsi, le sens de la pesanteur est toujours dirigé de telle façon que la vitesse de sédimentation entraîne la particule vers la surface libre la plus

proche de celle-ci, ce qui revient à changer le signe de la gravité entre le domaine haut et le domaine bas.

Pour que la transition entre les deux domaines ne soit pas trop brutale et que le changement de signe de la gravité n'entraîne pas de discontinuité dans le mouvement des particules, nous appliquons les conditions suivantes pour une particule de densité inférieure à la densité du fluide :

$$\begin{cases} v_{sed} < 0 \text{ si } z_p < \frac{4}{9}Lz \\ v_{sed} = 0 \text{ si } z_p \in \left[\frac{4}{9}Lz ; \frac{5}{9}Lz \right] \\ v_{sed} > 0 \text{ si } z_p > \frac{5}{9}Lz \end{cases} \quad (4.48)$$

Méthodes numériques

L'équation de la dynamique pour le suivi des particules est résolue à l'aide de la méthode prédicteur correcteur d'Adams-Bashforth d'ordre 3. L'erreur locale de cette méthode est $O(\Delta_t^4)$.

Le suivi lagrangien des inclusions nécessite de connaître la valeur de la vitesse du fluide à l'emplacement de chaque inclusion, c'est-à-dire la vitesse du fluide vu par la particule. Différents schémas d'interpolation sont possibles. Balanchadair et Maxey⁸⁶ comparent les méthodes d'interpolation utilisables dans les code spectraux et ils montrent que les interpolations polynomiales de Lagrange sont moins coûteuses en temps de calcul mais aussi moins précises que celles de type Hermite mixte spectrale, en particulier lorsque le nombre de Reynolds de l'écoulement augmente. Les interpolations les plus précises sont les interpolations spectrales (Direct Summation), mais elles sont aussi très gourmandes en temps de calcul, surtout lorsqu'un grand nombre de particules est suivi. Kontomaris, Hanratty et McLaughlin⁸⁷ de leur côté ont étudié la précision d'un schéma d'interpolation combinant polynômes d'Hermite (dans les directions tangentialles à la paroi solide) et polynômes de Tchebychev (dans la direction normale à la paroi) et l'ont comparé à une interpolation mixte Lagrange-Tchebychev. Dans ce cas aussi, l'interpolation utilisant en partie les polynômes d'Hermite s'avère plus précise mais exigeante en ressources mémoire. Pour gagner en temps de calcul sans perdre en précision, des schémas moins lourds peuvent être utilisés lorsque seules les grandeurs statistiques de la phase dispersée sont étudiées^{41,86}.

Les puissances de calcul ayant augmenté avec le temps, l'interpolation d'Hermite (mixte ou dans les trois directions) est aujourd'hui envisageable malgré son temps de calcul^{42,29}. Comme nous travaillons avec un nombre élevé de particule en parallèle, nous avons choisi ici l'interpolation par les polynômes d'Hermite dans les trois directions de l'espace car le coût de calcul de cette interpolation n'augmente pas énormément lorsque le nombre de particules suivies augmente (une grande partie des opérations de calculs n'ont pas besoin d'être répétées pour chaque particule). De plus, cette interpolation permet d'évaluer rapidement les dérivées spatiales de la vitesse du fluide à l'emplacement de la particule qui sont nécessaires pour le calcul de la force de masse ajoutée.

Les coefficients des polynômes d'interpolation sont déterminés en imposant l'égalité de la vitesse du fluide et de ses dérivées premières aux nœuds du maillage. L'interpolation a été écrite en se basant sur un code fourni par Anne Tanière (LEMTA) et les travaux de Boris Arcen. Deux méthodes de calcul des dérivées spatiales de la vitesse du fluide aux nœuds du maillage ont été implémentées : la première effectue le calcul dans le domaine spectral. Cette méthode est exacte mais nécessite un temps de calcul important lié à la transformation de Fourier inverse des dérivées. La deuxième méthode calcule les dérivées par un schéma aux différences finies centré à l'ordre quatre. Cette méthode est légèrement moins précise mais sept fois plus rapide.

Introduction et capture des particules :

Dans un premier temps, seul l'écoulement du fluide est résolu. Une fois que la turbulence est bien développée au sein de l'écoulement, les particules sont introduites aléatoirement dans la zone de forçage. Elles sont alors suivies individuellement jusqu'à ce qu'elles atteignent la surface libre.

L'inclusion est supposée être capturée lorsque la distance qui sépare son centre de la surface libre est inférieure à son rayon. Une fois capturée, on réintroduit une nouvelle particule aléatoirement dans la

zone de forçage, ce qui permet de travailler avec un nombre constant de particules à chaque pas de temps. Pour augmenter la vitesse de convergence des statistiques, on suit dans le domaine un nombre élevé d'inclusions présentant les mêmes caractéristiques physiques (diamètre, densité..). On a fixé leur nombre de façon arbitraire à 20 000 inclusions.

Comme on effectue un couplage « *one-way* », on ne prend pas en compte l'influence des particules sur l'écoulement et sur les autres particules. Cela permet donc, pour une même simulation d'écoulement, de pouvoir injecter plusieurs groupes de particules aux caractéristiques physiques différentes.

4.4.2 Moyennes temporelles et spatiales conditionnées par la présence des particules solides

Dans le cadre des écoulements multiphasiques, d'autres moyennes sont utilisées. On nomme distribution caractéristique de la phase i au point de coordonnées \mathbf{x} et à l'instant t la fonction $\chi_i(\mathbf{x}, t)$ définie par :

$$\chi_i(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1 & \text{si la phase } i \text{ est présente au point de coordonnées } \mathbf{x} \text{ à l'instant } t \\ 0 & \text{si elle est absente} \end{cases} \quad (4.49)$$

La somme de l'ensemble des $\chi_i(\mathbf{x}, t)$ divisée par le nombre de particules de la phase i vaut 1.

La moyenne spatiale d'une grandeur $\phi(\mathbf{x}, t)$ conditionnée par la présence de la phase i vaut :

$$\langle \phi(\mathbf{x}, t) \rangle_i = \frac{\langle \chi_i(\mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}, t) \rangle}{\langle \chi_i(\mathbf{x}, t) \rangle} \quad (4.50)$$

Un des enjeux des études sur les écoulements multiphasiques est justement de comprendre la façon dont s'agencent les particules par rapport au fluide. Remplaçons $\phi(\mathbf{x}, t)$ par la vitesse du fluide, $\mathbf{u}_f(\mathbf{x}, t)$, et calculons la vitesse moyenne du fluide conditionnée à la présence d'une inclusion i , si les particules ne sont pas distribuées de façon homogène alors cette valeur sera différente de la vitesse moyenne du fluide.

$$\langle \phi(\mathbf{x}, t) \rangle \neq \langle \phi(\mathbf{x}, t) \rangle_i \quad (4.51)$$

On peut aussi définir une moyenne temporelle conditionnée à la présence de la particule :

$$\overline{\phi(\mathbf{x}, t)}_i = \frac{\overline{\chi_i(\mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}, t)}}{\overline{\chi_i(\mathbf{x}, t)}} \quad (4.52)$$

De la même façon que pour les grandeurs statistiques introduites précédemment, les considérations de symétrie et d'invariance seront prises en compte lors du calcul des grandeurs statistiques conditionnées pour permettre une convergence plus rapide des prises de moyennes : on cumule donc les grandeurs statistiques situées en haut et en bas du domaine, ainsi que celles identiques par rotation autour de l'axe z.

Lorsque le régime statistiquement stationnaire est atteint, on peut évaluer les grandeurs statistiques des particules dans des tranches du domaine parallèles aux surfaces libres pour voir leur évolution par rapport à la distance à la surface libre. Pour faire cela, nous calculerons une grandeur $\overline{\phi(\mathbf{x}, t)}_{ik}$ en prenant en compte seulement les particules situées dans la tranche délimitée par les plans d'ordonnées $z = (k - 1)\Delta$ et $z = k\Delta$.

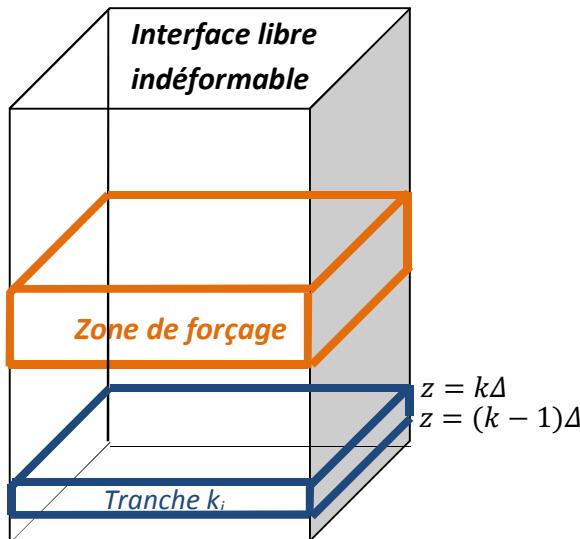


Figure 51: Évaluation des grandeurs statistiques dans une tranche k du domaine de simulation

4.5 Étude du dépôt de particules non soumises aux effets de la gravité

À partir des simulations A, B, D et E (Tableau 7) nous avons étudié l'évolution de différents types de particules. Comme on l'a vu dans le chapitre précédent, les effets de la sédimentation peuvent, sous certaines conditions, masquer l'influence de l'écoulement sur le dépôt des particules. Ainsi, pour approfondir l'étude du mouvement de particules dans un fluide résolu par simulation numérique directe, les auteurs négligent parfois la sédimentation quand bien même leurs simulations portent sur des aérosols très denses par rapport au fluide. Arcen⁴² par exemple néglige la gravité lors de son étude portant sur l'effet de l'inertie et de l'effet de croisement de trajectoire (effet qui sera défini plus loin). Brooke, Hanratty et McLaughlin⁸⁸ étudient le mécanisme de dépôt par « vol libre » dans un canal vertical et négligent la gravité tout en admettant que très près de la paroi solide, ce choix peut avoir une influence non négligeable sur le mouvement de la particule. De même, Haarlem *et al.*⁴¹ étudient le dépôt des particules en négligeant la gravité pour permettre de se concentrer sur les différences entre le dépôt sur une surface libre et le dépôt sur une surface solide. C'est pourquoi nous présenterons ici aussi des simulations effectuées sans prendre en compte la sédimentation. Ensuite, nous présenterons les résultats relatifs aux effets de la sédimentation et de la lubrification.

4.5.1 Caractéristiques des simulations

Nous résumons dans le tableau ci-dessous les caractéristiques des simulations étudiées. Nous complétons les caractéristiques de l'écoulement présentées précédemment (Tableau 7) avec les caractéristiques physiques du fluide et des particules.

ρ_f (kg.m ⁻³)	ν (m ² .s ⁻¹)	d_p (m)	ρ_p (kg.m ⁻³)
7000	$7,85.10^{-7}$	1.10^{-5} à 5.10^{-5}	3500 et 7000

Figure 52 : Caractéristiques des simulations

4.5.2 Influence de l'inertie sur la vitesse de dépôt des particules

Nous présentons Figure 53 les variations de la vitesse de dépôt des particules en fonction de leur diamètre pour deux valeurs de nombre de Reynolds, avec et sans prise en compte des effets inertIELS.

On observe que la vitesse de dépôt est une fonction croissante du diamètre des particules et du nombre de Reynolds de surface.

Les écarts de vitesse de dépôt avec et sans prise en compte des effets inertIELS sont au plus de l'ordre de 10% : ces écarts ne sont pas significatifs ici puisqu'ils se situent dans les barres d'incertitude de comptage. En effet, en l'absence de sédimentation, les vitesses de dépôt sont faibles et estimées à partir du dépôt d'environ une centaine de particules à l'interface libre soit $n_d \approx 100$. L'erreur statistique de comptage est approximativement $\sqrt{n_d}$ et l'incertitude sur la vitesse de dépôt est donc de l'ordre de $\sqrt{n_d}/n_d = 1/\sqrt{n_d} \cong 10\%$.

Ceci est en accord avec les faibles variations du temps de relaxation des particules, qui reste de l'ordre de 2.10^{-4} s pour les particules les plus grandes de même densité que le fluide, et de l'ordre de 9.10^{-5} s pour les particules plus légères que le fluide.

L'interception directe est ici l'unique mécanisme de capture des particules.

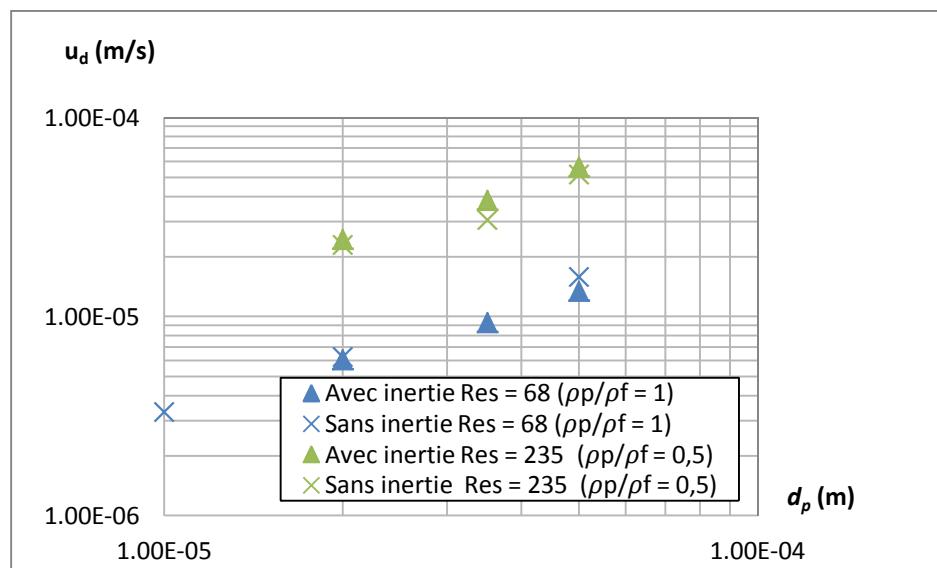


Figure 53: Vitesse de dépôt en fonction du diamètre de la particule

4.5.3 Influence de l'intensité turbulente de l'écoulement sur la vitesse de dépôt des particules

L'augmentation observée précédemment de la vitesse de dépôt des particules avec le nombre de Reynolds de l'écoulement indique une corrélation importante entre l'intensité turbulente de l'écoulement et le dépôt des particules.

Plus précisément, le dépôt des particules est lié aux fluctuations de vitesse normale du fluide à la distance $d_p/2$ de la surface libre. À cette distance, les particules sont situées dans la couche de Kolmogorov.

Pour les simulations A, B, D et E, nous avons donc adimensionné la vitesse de dépôt ainsi que le diamètre des particules à l'aide des échelles de Kolmogorov de surface, c'est à dire la longueur η_s et la vitesse v_{η_s} de Kolmogorov.

Comme on peut le voir sur la Figure 54, cet adimensionnement entraîne un alignement des points ce qui montre que la vitesse de dépôt des particules est très fortement corrélée aux échelles de l'écoulement au niveau de la surface libre. La corrélation entre les points est effective pour les quatre simulations présentées, c'est-à-dire en faisant varier le nombre de Reynolds de surface et en faisant varier (sur une simulation) la distance de la zone de forçage à la surface libre. Elle est en accord avec les lois d'échelles mises en avant par Campagne²⁷ pour l'écoulement du fluide.

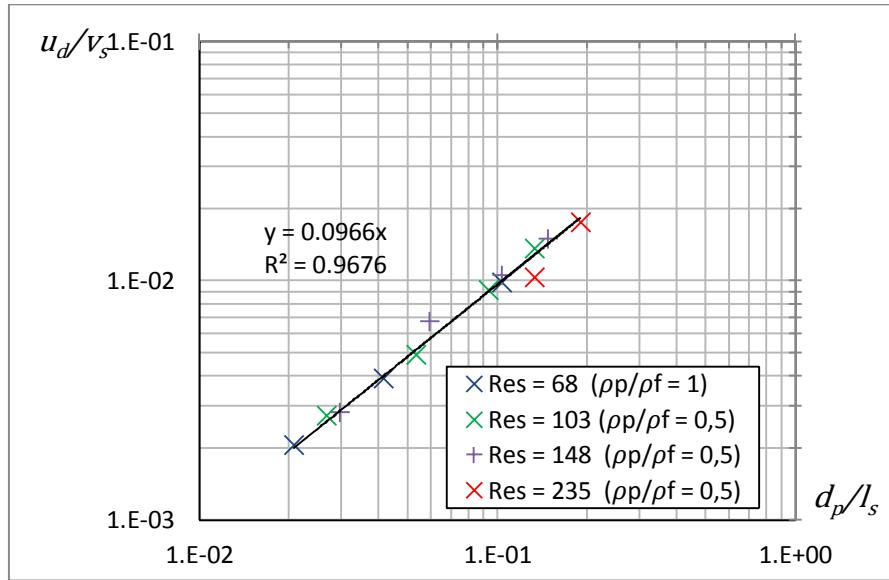


Figure 54 : Vitesses de dépôt des particules en fonction de leur diamètre, adimensionnés par les échelles de Kolmogorov de surface

On peut interpoler cette droite en imposant une ordonnée à l'origine nulle, on obtient ainsi la vitesse de dépôt suivante :

$$\frac{u_d \text{ sans lub}}{v_s} = 0,097 \left(\frac{d_p}{l_s} \right) \quad (4.53)$$

D'après Brooke *et al.*⁸⁸ la vitesse de dépôt de particules transportées par diffusion turbulente est de l'ordre de grandeur de l'écart-type de la vitesse normale du fluide estimé à la distance $d_p/2$ de la surface de dépôt. Pour la configuration que l'on étudie, Campagne *et al.*⁸⁹ trouvent que dans la couche de Kolmogorov, la moyenne quadratique de la vitesse normale suit la loi :

$$\frac{w'_f}{v_s} = 0,62 \left(\frac{z}{l_s} \right) \quad (4.54)$$

Pour une particule située à un rayon de la surface libre, la moyenne quadratique vaut :

$$\frac{w'_f}{v_s} = 0,31 \left(\frac{d_p}{l_s} \right) \quad (4.55)$$

Sachant que les fluctuations de la vitesse normale sont dirigées soit vers la surface libre (événements d'impact) soit vers la zone de forçage (événements d'éjections), une estimation de la vitesse de dépôt est donnée par la relation :

$$\frac{u_d}{v_s} \cong 0,155 \left(\frac{d_p}{\eta_s} \right)$$

Ceci est en bon accord avec la loi obtenue par suivi lagrangien : l'écart entre les coefficients numériques est lié au fait que la moyenne du module est toujours inférieure ou égale à la moyenne quadratique.

4.5.4 Nombre de Reynolds particulaire

Nous présentons Figure 55 par des points (.) le nombre de Reynolds particulaire évalué pour les particules non soumises à la sédimentation. Le nombre de Reynolds calculé pour les particules soumises aux effets de la sédimentation (signe plus + et signe étoilée *) sera commenté dans le paragraphe suivant.

Le nombre de Reynolds particulaire a été évalué à l'aide des composantes de la vitesse relative des particules tangentes à la surface libre et à l'aide de la composante normale de la vitesse relative des particules. Le graphique que nous présentons est une évaluation instantanée du nombre de Reynolds particulaire ; nous avons vérifié que les valeurs du nombre de Reynolds particulaire calculées dans les autres cas (B, D et E) varient de façon analogue avec la distance à la surface libre et sont du même ordre de grandeur.

Comme on peut le vérifier sur la Figure 55, le nombre de Reynolds des particules reste très inférieur à l'unité sur tout le domaine quel que soit le choix de la composante (tangentielle ou normale) de vitesse relative pour l'évaluer. Les conditions sont donc bien satisfaites pour pouvoir utiliser la force de traînée de Stokes.

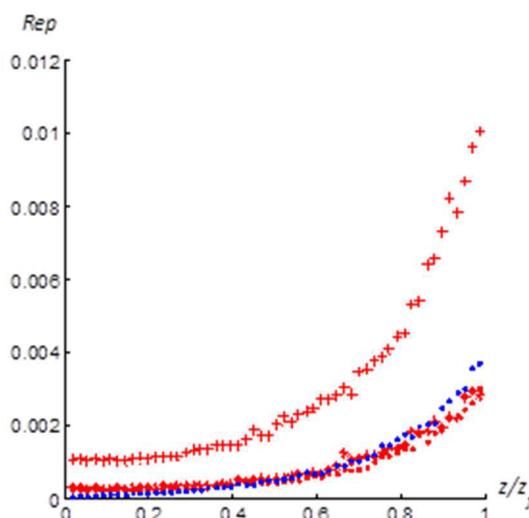


Figure 55 : Cas A : nombre de Reynolds particulaire instantané, évalué à l'aide de la vitesse tangentielle à la surface libre (en rouge) et à l'aide de la vitesse normale à la surface libre (en bleu) en fonction de la distance à la surface libre.
 (signe point .) : $\rho_p/\rho_f = 1$; $d_p = 2 \cdot 10^{-5}$ m particules non soumises aux effets de la gravité
 (signe étoile *) : $\rho_p/\rho_f = 10$; $d_p = 2 \cdot 10^{-5}$ m particules soumises aux effets de la gravité
 (signe plus +) : $\rho_p/\rho_f = 0,5$; $d_p = 5 \cdot 10^{-5}$ m particules soumises aux effets de la gravité

On remarque que le nombre de Reynolds augmente lorsque l'on s'approche de la zone de forçage, ce qui est dû à l'augmentation des fluctuations de la vitesse du fluide. Une baisse du nombre de Reynolds est observée à l'approche de la surface libre.

Le nombre de Reynolds calculé à l'aide de la vitesse normale a le même comportement que celui calculé à l'aide des vitesses tangielles. Très près de la surface libre, il diminue par contre plus fortement du fait de l'annulation des fluctuations de la vitesse normale du fluide à la surface libre.

4.5.5 Évolution de la concentration en inclusions à l'approche de la surface libre

Le nombre de particules n dans le domaine est constant au cours des simulations puisque chaque particule capturée à la surface libre est réintroduite dans la zone de forçage.

On peut calculer la concentration normalisée en particules C_k^* dans des tranches du domaine de calcul délimitées par des plans parallèles à la surface libre suivant la méthode de calcul présenté paragraphe 4.4.2 :

$$C_k^* = \frac{C_k}{n/(N_z - 1)} \quad (4.56)$$

On rappelle que N_z est le nombre de nœuds du maillage suivant la direction \mathbf{z} . La concentration calculée sera placée à l'abscisse $(k - 0,5)\Delta$ qu'on normalise par le diamètre des particules.

La concentration en particules a aussi été évaluée dans des plans perpendiculaires à la surface libre (Annexe 5) ce qui nous a permis de valider l'homogénéité du comportement des particules suivant les deux directions parallèles à la surface libre.

Nous présentons Figures 55 et 56 l'évolution de la concentration en particules en fonction de la distance à la surface libre. On observe que dans la zone de diffusion et dans la sous-couche externe de blocage, la concentration en particule normalisée est uniforme et égale à l'unité : dans ces régions, les fluctuations de vitesse normale sont suffisamment grandes devant la vitesse de dépôt pour homogénéiser la concentration en particules. En revanche, près de la surface libre, on observe que la concentration chute brutalement. L'adimensionnement de la distance à la surface libre par le diamètre de la particule permet de superposer les profils de concentration en particules pour les trois tailles de particules étudiées. Ce résultat est en accord avec le mécanisme d'interception directe responsable du dépôt.

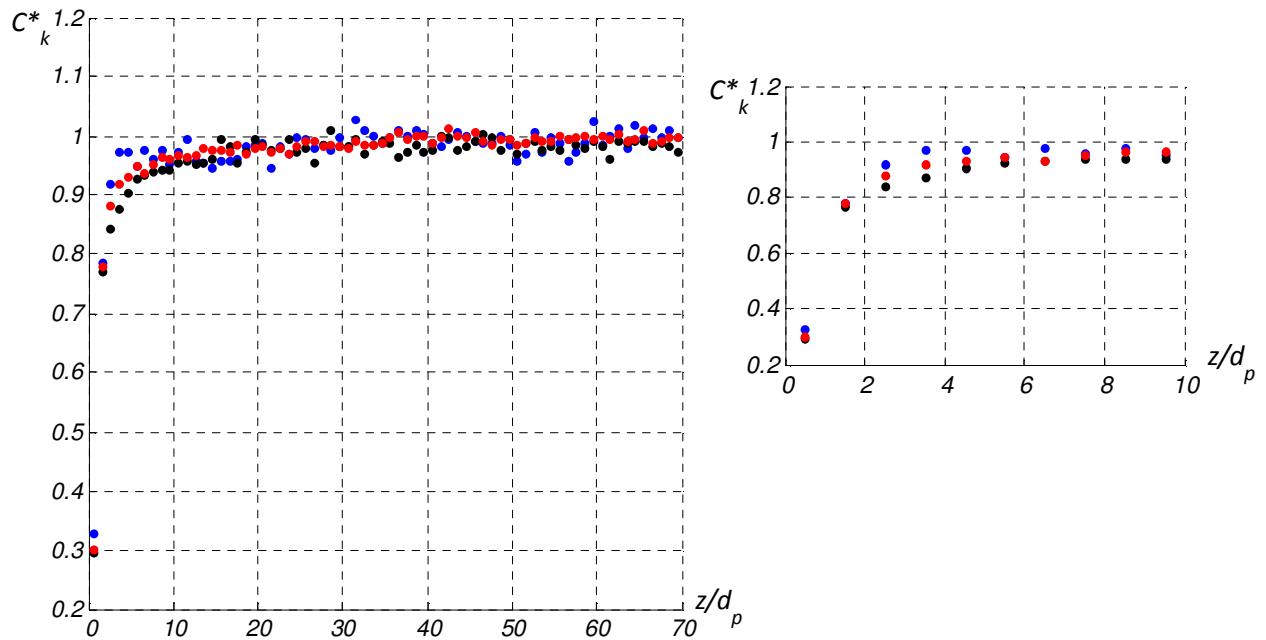


Figure 56 : Cas A ($\rho_p/\rho_f = 1$) : Concentration normalisée des particules en fonction de la distance à la surface libre adimensionnée par d_p sur les intervalles [0; 70] (à gauche) et [0; 10] (à droite). (Bleu) : $d_p=1.10^{-5}\text{m}$, (Noir) : $d_p=2.10^{-5}\text{m}$, (Rouge) : $d_p=5.10^{-5}\text{m}$

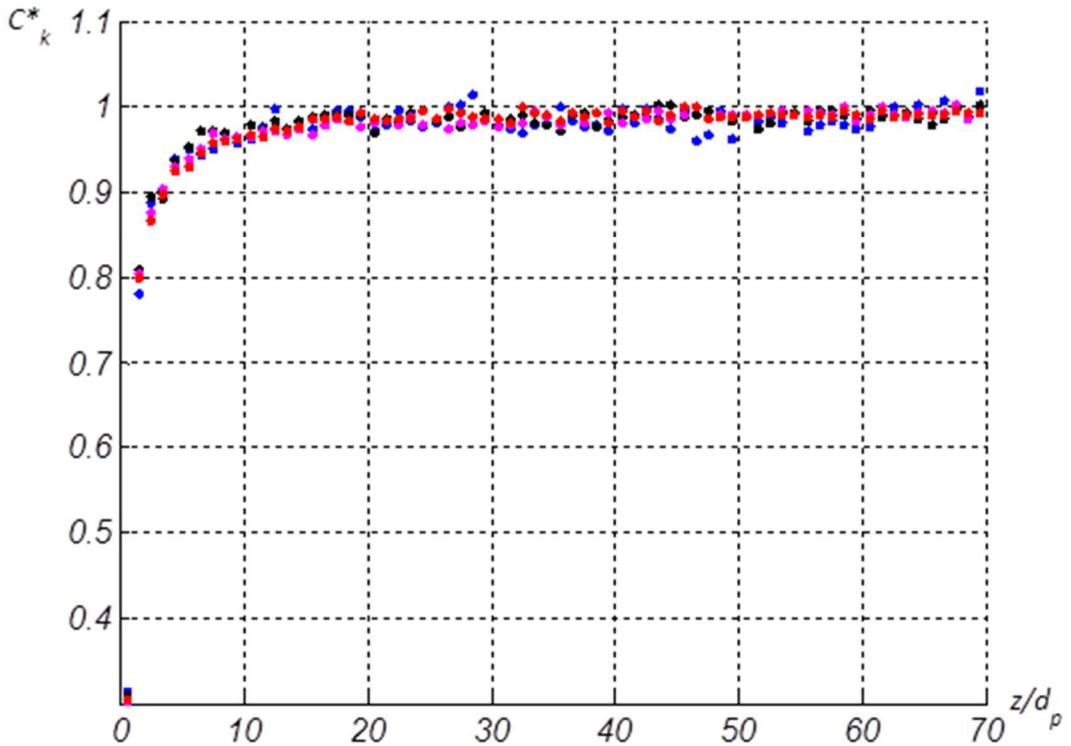


Figure 57 : Cas B ($\rho_p/\rho_f = 1$) : Concentration normalisée des particules en fonction de la distance à la surface libre adimensionnée par d_p . (Bleu) : $d_p=1.10^{-5}$ m, (Noir) : $d_p=2.10^{-5}$ m, (Magenta) : $d_p=3.5.10^{-5}$ m, (Rouge) : $d_p=5.10^{-5}$ m

On peut comparer ces résultats aux travaux menés par Van Haarlem⁴¹ sur le dépôt de particules sur une surface libre en canal. Ils observent de leur côté une augmentation de la concentration en particules au niveau de la surface libre et l'expliquent par le phénomène de turbophorèse. Ce phénomène a été étudié par Reeks⁹⁰ et Caporaloni *et al.*⁹¹; il apparaît lorsque la turbulence est non isotrope et consiste en la création d'un flux de dérive engendré par le gradient des tensions de Reynolds³³. Près d'une couche limite, la turbophorèse est fortement présente du fait de l'anisotropie de l'écoulement et les particules sont entraînées en direction de la surface de blocage (qui peut être une surface libre ou une surface solide). Dans le cas de Van Haarlem, une fois à proximité de la surface libre, l'inertie des particules permet à celles-ci de se détacher suffisamment du comportement du fluide pour ne pas repartir en direction du milieu du canal.

Dans notre cas, l'inertie des particules est très faible et de ce fait elles ont un comportement très proche de celui du fluide. Ainsi, les particules transportées vers la surface libre auront principalement deux comportements : soit elles se déposent à la surface libre par interception directe, soit elles s'éloignent de la surface libre en suivant la trajectoire des particules fluides environnantes puisque le fluide ne s'accumule pas au niveau de la surface libre. C'est pourquoi nous n'observons pas d'accumulation des particules au niveau de la surface libre et au contraire une baisse de la concentration des particules. Nous apportons dans le paragraphe suivant une explication plus précise pour la baisse de concentration observée.

4.5.6 Évaluation de la direction des particules

On peut regarder un cliché de la concentration des particules évaluée par plan parallèle à la surface libre, en fonction du signe de la vitesse normale des particules.

$$C_{sens\ ik}^* = \frac{n_{sens\ ik}}{n_k} \quad (4.57)$$

où n_k est le nombre de particules situées entre les plans d'ordonnées $[(k-1)\Delta ; k\Delta]$ et $n_{sens\ iz}$ est la nombre de particules dont la vitesse normale est dirigée selon le sens i : en direction de la surface libre ou à l'opposé de la surface libre.

$C_{sens\ ik}^*$ permet d'avoir une vue instantanée du comportement des particules dans le domaine.

On remarque sur la Figure 58 (qui a été obtenue une fois que le régime est statistiquement établi) que dans chaque tranche du domaine située en dehors de la zone de forçage, il y a plus de particules qui se dirigent vers la zone de forçage que de particules qui se dirigent vers la surface libre. Ce résultat peut paraître surprenant à première vue car l'on pourrait s'attendre à ce que ce que la capture des particules au niveau de la surface libre et leur réintroduction dans la zone de forçage conduise à une concentration en particules dirigées vers la surface libre plus grande. Or, comme on a pu le voir sur les vitesses de dépôt des particules, très peu de particules sont effectivement capturées au cours du temps ce qui fait que la capture des particules ne change pas énormément leur comportement global qui reste donc très proche de celui du fluide.

Campagne²⁷ a mis en avant qu'au niveau de la surface libre et de façon un peu moins marquée dans le reste du domaine, les événements turbulents dirigés vers la surface libre étaient très intenses et peu nombreux tandis que ceux dirigés vers la zone de forçage sont beaucoup moins intenses et plus nombreux. Les particules agissant comme des traceurs au sein de l'écoulement, leur répartition dans un plan parallèle à la surface libre est une répartition homogène et leur vitesse est égale à la vitesse du fluide vu, ainsi, le déséquilibre entre la concentration de particules dirigées vers la zone de forçage et la concentration de particules dirigées vers la surface libre est simplement la conséquence de ce même déséquilibre qui existe au sein des structures turbulentes de l'écoulement porteur.

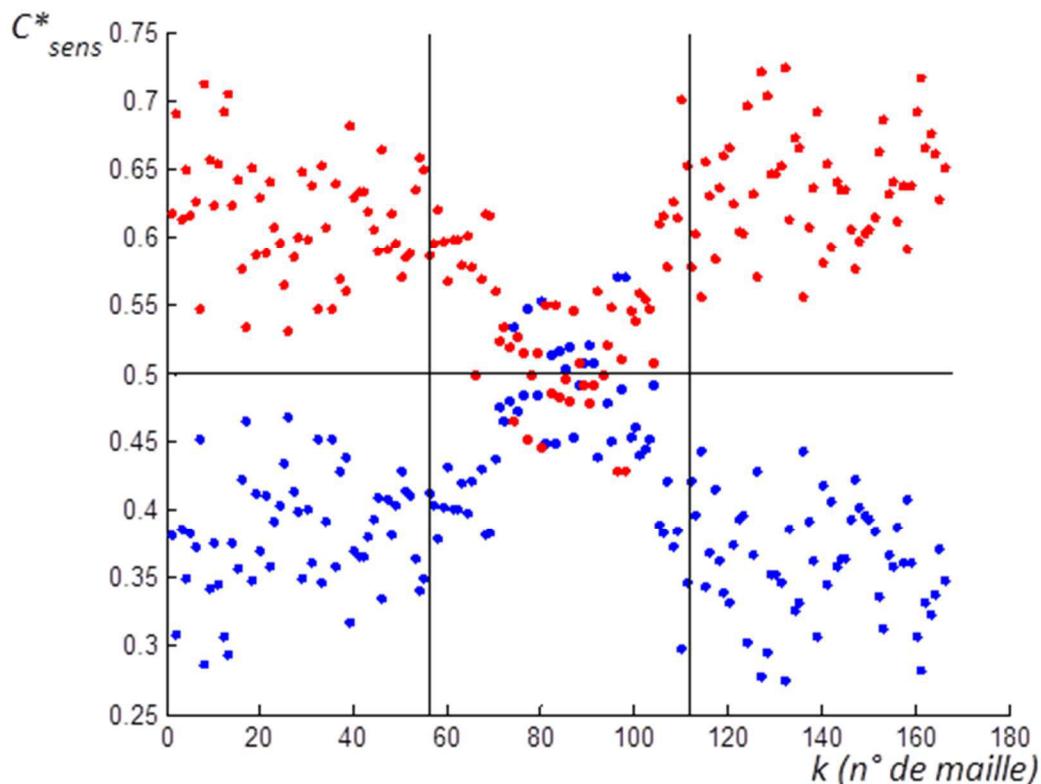


Figure 58 : Cas A ($d_p = 1.10^{-5}$ m) : Concentration instantanée des particules. En bleu : concentration des particules dirigées vers la surface libre, en rouge : concentration des particules dirigées vers la zone de forçage

Si on note w_f^+ et w_f^- la moyenne des fluctuations normales dirigées respectivement vers la surface libre et vers la zone de forçage, on a donc : $|w_f^+| > |w_f^-|$. La surface occupée par les impacts (S^-) est plus faible que celle occupée par les éjections (S^+) puisque nécessairement : $w_f^+ S^+ + w_f^- S^- = 0$. Ainsi, si on note S la surface entière du plan, on a bien l'inégalité :

$$C_{sens+k}^* = \frac{S^+}{S} C_k^* \leq C_{sens-k}^* = \frac{S^-}{S} C_k^* \quad (4.58)$$

La baisse de concentration observée près de la surface libre sur les Figures 55 et 56 (à l'échelle de quelques diamètres de particules) est liée au fait que les particules qui voient les fluctuations de vitesse normale dirigées vers la surface libre (de moyenne w_f^+) sont capturées.

En l'absence de dépôt, ces particules seraient renvoyées en direction de la zone de forçage sous l'effet des fluctuations de vitesse normale dirigées vers la zone de forçage (de moyenne w_f^-), ce qui permettraient alors de maintenir une concentration particulaire constante jusque très près de la surface libre.

Ceci est illustré de façon très schématique sur la Figure 59 qui présente une ligne de courant dans un champ turbulent figé s'approchant à moins d'un rayon particulaire de la surface libre. La branche de droite, associée aux fluctuations dirigées vers la surface libre, est alimentée en particules qui se déposent ensuite à la surface libre. La branche de gauche, associée aux fluctuations dirigées vers la zone de forçage ne présente pas de particule (contrairement au cas où la ligne de courant passerait plus loin de la surface libre).

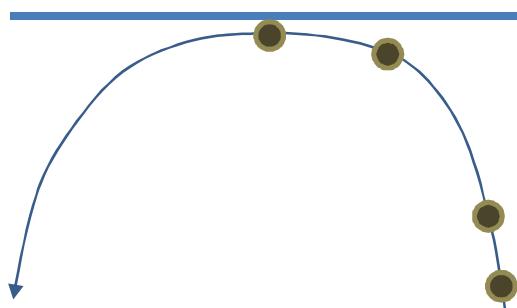


Figure 59 : Particules se déplaçant le long d'une ligne de courant dans un champ turbulent figé. La ligne de courant s'approche de moins d'un rayon particulaire de l'interface libre.

4.5.7 Variances de la vitesse du fluide et des particules

Pour mieux comprendre le comportement des particules en suspension, il est intéressant de comparer la variance de leur vitesses à la variance de la vitesse du fluide ainsi qu'à la variance de la vitesse du fluide conditionnée par la présence des particules $\overline{u_{f,p}^{1/2}}$.

Pour calculer la variance centrée de la vitesse des particules, il faut ôter à la vitesse instantanée des particules la valeur moyenne des vitesses particulières. Nous avons effectué le calcul en supposant que, comme les particules agissent en traceurs avec une vitesse de dépôt très faible et que la vitesse moyenne du fluide dans chaque direction est nulle, la vitesse moyenne des particules est nulle dans les trois directions comme le fluide. Ainsi on évalue la variance des particules en calculant simplement la variance des vitesses instantanées des particules. Nous effectuerons la même hypothèse pour la vitesse du fluide vu. Les résultats suivants montrent que ces hypothèses étaient fondées.

Les Figure 60 et Figure 61 présentent l'évolution des variances du fluide (ligne continue), des variances de la vitesse des particules (cercle plein) et de la vitesse du fluide vu par les particules (cercle vide) en fonction de la distance à la surface libre de la tranche de domaine considérée. Les composantes de vitesse tangentes à la surface libre sont en bleu tandis que celles normales à la surface libre sont en rouge. La Figure 61 présente les mêmes données que la Figure 60 en échelle logarithmique pour permettre d'étudier plus précisément ce qui se passe au voisinage de la surface libre, là où les fluctuations turbulentes sont moins importantes. La zone de forçage n'est pas représentée.

Si les particules sont réparties de façon homogène dans le domaine, les vitesses du fluide vu par les particules sont théoriquement égales aux vitesses du fluide. De plus, différentes études DNS³³ effectuées à l'aide de petites particules de densité proche de la densité du fluide, ont montré que les fluctuations de la vitesse du fluide vu par les particules sont généralement égales aux fluctuations de la vitesse du fluide dans le domaine de calcul (i.e. : $u'_{if,p} \approx u'_{if}^2$) ce qui traduit là aussi une faible concentration préférentielle des particules³³.

Pour les particules étudiées ici, cela semble donc être le cas puisque les différentes variances calculées sont égales dans l'ensemble du domaine étudié. Comme expliqué précédemment, les particules ont donc le comportement de traceurs et présentent ainsi un comportement similaire aux particules fluides. Lorsque nous évaluerons des statistiques relatives à l'écoulement du fluide porteur qui nécessitent le suivi de particules fluides, nous nous servirons donc des particules étudiées ici en les assimilant à des traceurs.

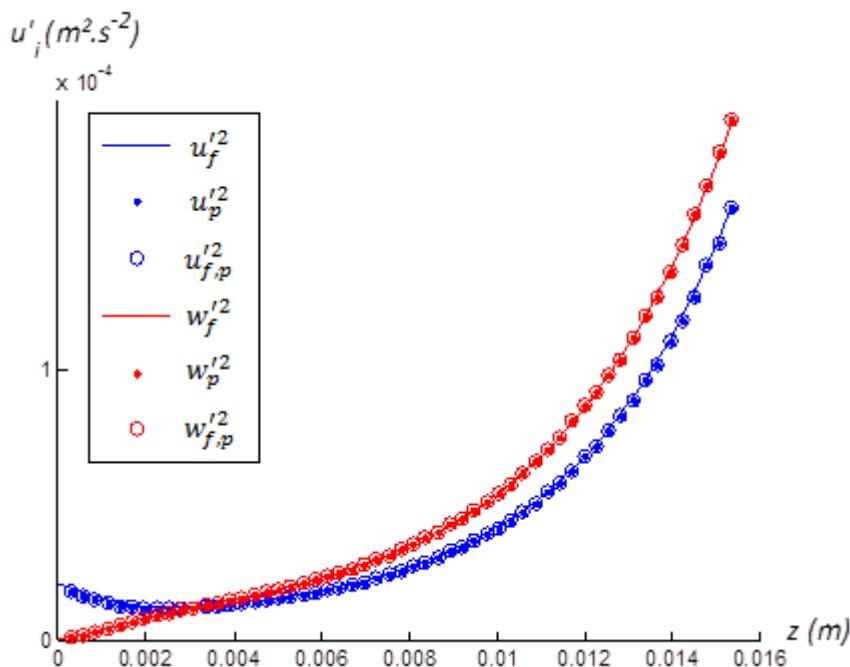


Figure 60 : Cas A ($d_p = 1.10^{-5} m, \rho_p/\rho_f = 1$) : Variances de la vitesse du fluide (ligne continue), de la vitesse des particules (cercle plein) et de la vitesse du fluide conditionnée à la présence des particules (cercle vide).
Bleu : composante tangente à la surface libre, rouge : composante normale à la surface libre

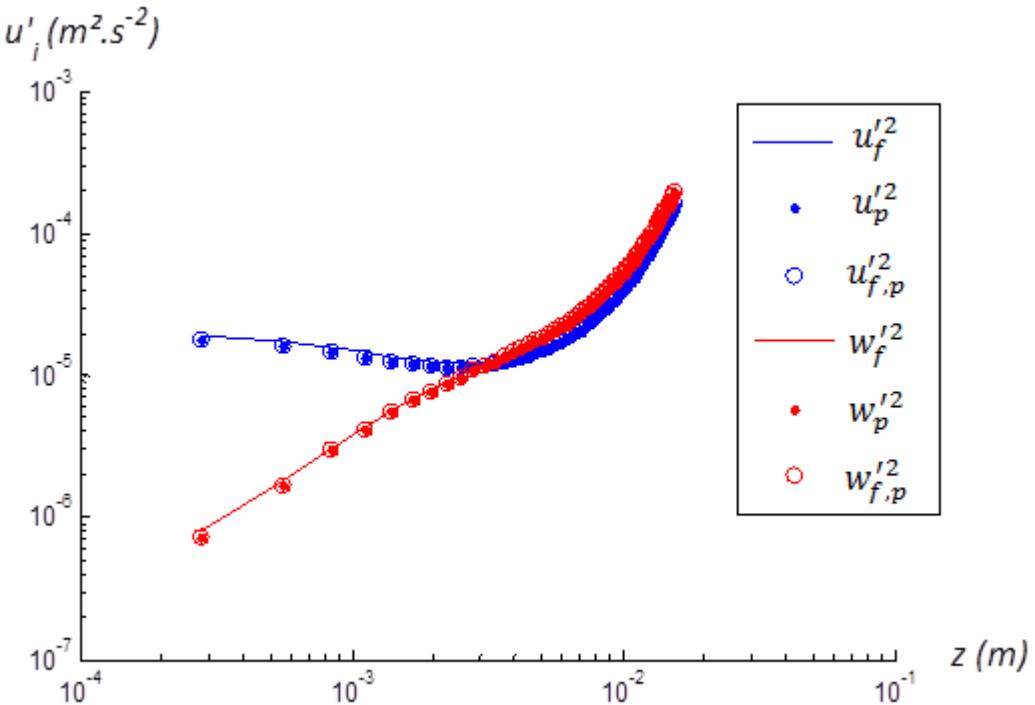


Figure 61 : Cas A ($d_p = 1.10^{-5} \text{ m}$, $\rho_p/\rho_f = 1$) : Variances de la vitesse du fluide (ligne continue), de la vitesse des particules (cercle plein) et de la vitesse du fluide conditionnée à la présence de la particule (cercle vide).
Bleu : composantes tangentes à la surface libre, rouge : composante normale à la surface libre

4.5.8 Étude qualitative du poids des différentes forces

Pour étudier l'importance des forces agissant sur le mouvement de la particule, nous avons choisi de comparer leur poids par rapport à celui de la force de traînée.

Pour cela, aux pas de temps de calcul des statistiques, nous avons gardé en mémoire la valeur des forces évaluées pour la résolution de l'équation de la dynamique présentée précédemment (4.45)

$$m_p \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \mathbf{F}_v + \mathbf{F}_D + \mathbf{F}_{MA} + \mathbf{F}_{Acc}$$

Nous avons calculé le rapport de chaque force à la force de traînée. Par la suite, nous appelons *force inertielle* la force correspondant au terme de gauche de l'équation précédente. Elle est calculée au signe près en sommant les forces qui apparaissent dans le membre de droite de l'équation.

Comme la force de traînée était *a priori* très importante par rapport aux autres forces, nous avons supposé que le rapport d'une force F_i sur la force de traînée F_D serait proche de zéro. Nous avons définies 40 classes de largeur 0,15 comprises entre -2,85 et 2,85.

Lorsque le rapport F_i/F_D est inférieur à -2,85, on le comptabilise dans la classe $j = 1$ et lorsqu'il est supérieur à 2,85, on le comptabilise dans la classe $j = 40$. Enfin, le rapport F_i/F_D est situé dans la classe j s'il appartient à l'intervalle $I_j = [-2,85 + 0,15(j - 2); -2,85 + 0,15(j - 1)]$ pour j comprit entre 2 et 39.

Nous avons ainsi évalué la densité de probabilité (qui sera noté Pdf) du rapport de chaque force i sur la force de traînée située dans chaque classe j .

$$Pdf_{F_i/F_D})_j = \frac{\overline{n_{F_i/F_D} \in I_j}}{0,15 n_{F_i/F_D}} \quad (4.59)$$

où n_{F_i/F_D} est le nombre total d'évaluation du rapport F_i/F_D et $n_{F_i/F_D \in j}$ est le nombre d'évaluations dont les valeurs sont situées dans l'intervalle I_j . Les Pdf ont été évaluées sur l'ensemble du domaine situé en dehors de la zone de forçage (et non par tranche de domaine). L'intégrale des Pdf sur toutes les classes j est égale à l'unité.

Les Pdf ont été évaluées à l'aide des composantes des forces tangentes à la surface libre et des composantes normales à la surface libre. Lorsque les effets de la gravité ne sont pas pris en compte, les Pdf des composantes des forces tangentes à la surface libre sont très proches des Pdf des forces normales à la surface libre. Nous présentons un exemple Figure 62 des Pdf des forces normales et tangentes à la surface libre.

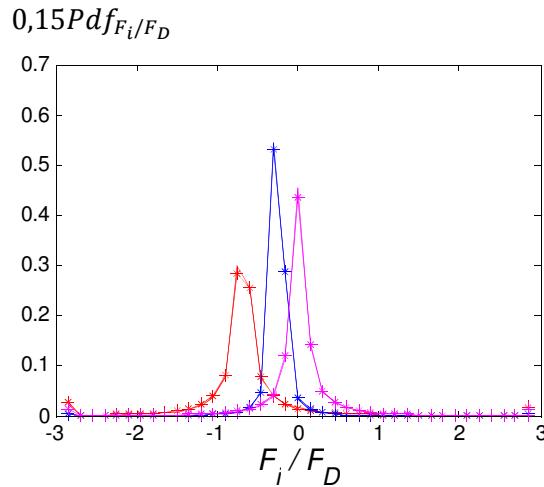


Figure 62 : Cas A ($d_p = 5.10^{-5} \text{ m}$, $\rho_p/\rho_f = 0,5$) : Fonction de densité de probabilité du rapport de la force i à la force de traînée. Rose : force inertielle, rouge : force d'accélération en volume, bleu : force de masse ajoutée. (Trait continu -) : Composantes des forces tangentes à la surface libre. (Marqueurs étoiles *): Composantes des forces normales à la surface libre

C'est pourquoi nous ne présenterons dans ce paragraphe que les densités de probabilité des composantes tangentielles des forces.

Influence du diamètre de la particule

Le cas de référence que nous considérons est le Cas A, pour lequel le nombre de Reynolds à la surface libre vaut 68. Nous observons que la Pdf de la force d'accélération en volume est centrée autour de -0,5 tandis que les Pdf de la force de masse ajoutée et de la force inertielle sont plus proches de 0 (Figure 63). Lorsque le diamètre de la particule augmente, la force d'accélération en volume devient du même ordre de grandeur que la force de traînée tandis que les forces de masse ajoutée et inertielle restent moins importantes.

Influence de l'intensité turbulente

Lorsque l'intensité turbulente augmente (Figure 63 et Figure 64), le poids de la force inertielle et de la force d'accélération en volume devient non négligeable dans le cas des particules les plus grosses (de diamètre 3,5 et 5 μm). Cela est dû au fait que l'accélération du fluide est plus grande à intensité turbulente plus élevée, ce qui joue directement sur l'accélération de la particule et sur la force d'accélération en volume de la particule (liée à l'accélération que subirait le fluide occupant le même volume que la particule). En revanche, la contribution de la force de masse ajoutée reste négligeable, ce qui est en accord avec Oesterlé³³.

Influence du rapport de densité ρ_p/ρ_f

Nous avons aussi effectué des simulations dans lesquelles les rapports de densité ρ_p/ρ_f étaient très différents du cas industriel du traitement en poche des aciers. Nous avons ainsi maintenu le diamètre de la particule constant et égal à 2 μm , diamètre pour lequel les trois forces étudiées ici sont

négligeables devant la force de traînée, et nous avons placé les particules dans le domaine d'intensité turbulent le plus élevé (Figure 65 et Figure 66).

Le rapport de densité $\rho_p/\rho_f = 0,01$ permet d'étudier des particules beaucoup plus légères que le fluide : dans cette configuration, la force de traînée et la force d'accélération en volume restent prépondérantes. Cependant, on note que la contribution de la masse ajoutée croît (elle n'est pas centrée autour de 0) et qu'au contraire, celle de la force inertielle diminue (Pdf centrée en 0) : ce qui est accord avec les masses volumiques du fluide et des particules qui interviennent respectivement dans ces forces.

Pour le rapport de densité égale à $\rho_p/\rho_f = 10$, les forces prépondérantes sont la force d'inertie de la particule et la force de traînée. La force d'accélération en volume et la force de masse ajoutée ont une contribution négligeable (Pdf centrée autour de 0) devant la force d'inertie, en accord avec les masses volumiques respectives du fluide et des particules.

On peut comparer ces résultats à ceux obtenus par Armenio et Fiorotto⁵⁸ qui étudient des particules non soumises aux effets gravitationnels et dont le rapport de densité ρ_p/ρ_f varie de 2,65 à 2650. Ils étudient le rapport de la force d'accélération en volume, de la force de masse ajoutée et de la force d'histoire à la force de traînée. Pour les particules de densité plus proche de celle du fluide (2,65 et 26,5), ils observent que la force de masse ajoutée est négligeable devant la force de traînée, contrairement à celle de la force d'accélération en volume. Ils n'étudient pas l'évolution de l'inertie de la particule. Les résultats qu'ils obtiennent sont donc cohérents avec les résultats obtenus ici pour les nombres de Reynolds élevés.

Pour les simulations numériques sans effet gravitaire avec $\rho_p/\rho_f = 0,5$ ou 1, il apparaît que la force d'accélération en volume est souvent du même ordre de grandeur que la force de traînée. Ceci ne vient pas contredire les conclusions émises précédemment selon lesquelles (1) les effets inertiels contribuent de façon négligeable au dépôt de particules, (2) il n'est pas nécessaire de résoudre l'équation de la dynamique, intégrer l'équation $\mathbf{u}_p = \mathbf{u}_f + \mathbf{v}_{sed}$ suffit. En effet, en l'absence de force d'origine gravitaire (poids et poussée d'Archimède), la force de traînée est nécessairement compensée par une force d'origine inertielle (force d'inertie de la particule, force d'accélération en volume ou force de masse ajoutée) de même poids.

Le fait que les vitesses de dépôt avec et sans effets inertiels soient très proches montre que les effets inertiels n'affectent pas la trajectoire des particules (en outre, dans le chapitre 3 dédié au dépôt de particules sur une paroi solide, nous avons pu vérifier que les trajectoires avec et sans effet inertiel étaient identiques). Ceci est d'ailleurs d'autant plus vrai près de la surface libre où les fluctuations de la vitesse du fluide baissent fortement.

Ces résultats sont en accord avec les conclusions de Armenio et Fiorotto⁵⁸ : les auteurs montrent en effet dans leurs simulations numériques que, même si la force d'accélération en volume est non négligeable devant la force de traînée, son influence sur la dispersion des particules est quasiment nulle puisque les particules réagissent comme des traceurs dans le fluide.

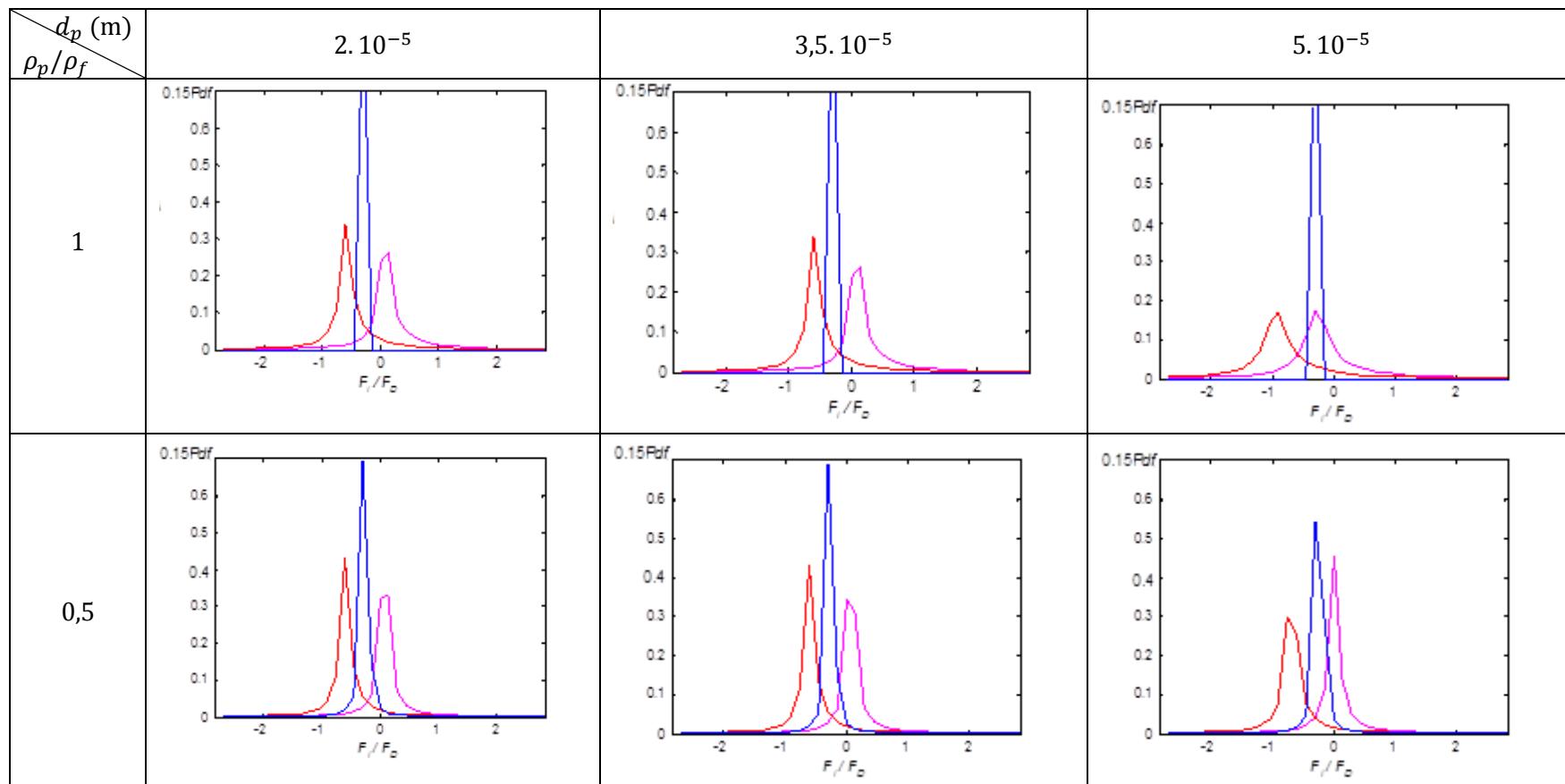


Figure 63 : Cas A : Fonction de densité de probabilité du rapport de la force i à la force de traînée. Rose : force inertuelle, rouge : force d'accélération en volume, bleu : force de masse ajoutée

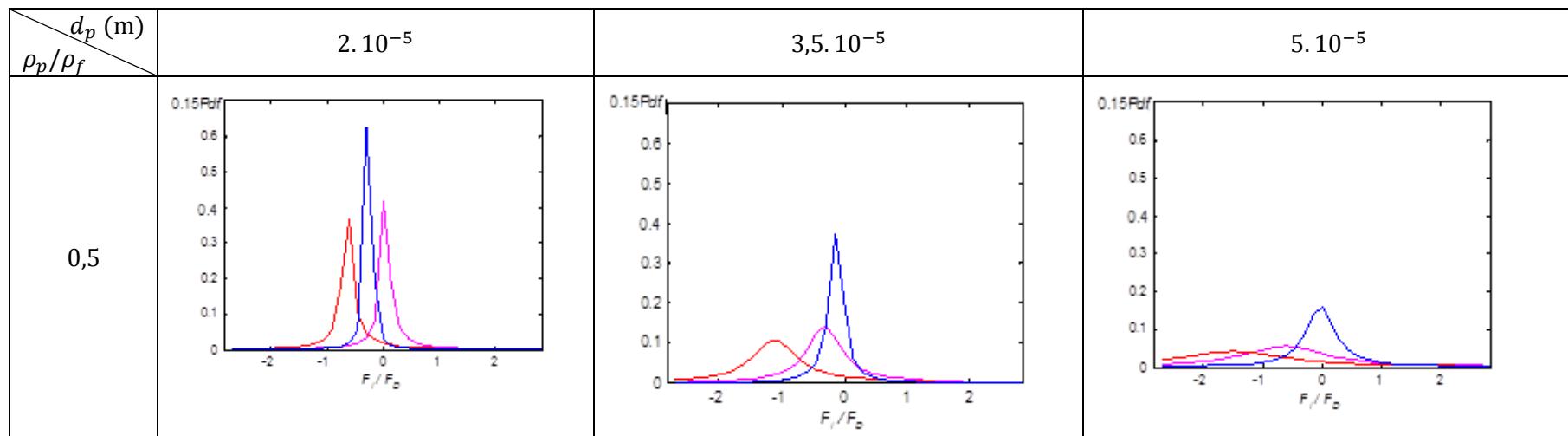


Figure 64 : Cas E : Fonction de densité de probabilité du rapport de la force i à la force de traînée. Rose : force inertielle, rouge : force d'accélération en volume, bleu : force de masse ajoutée

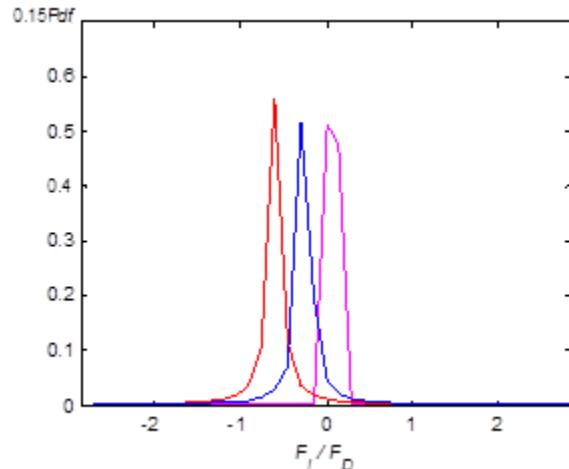


Figure 65 : Cas E ($\rho_p/\rho_f = 0,01$, $d_p=2.10^{-5}$ m) : Fonction de densité de probabilité du rapport de la force i à la force de traînée. Rose : force inertielle, rouge : force d'accélération en volume, bleu : force de masse ajoutée

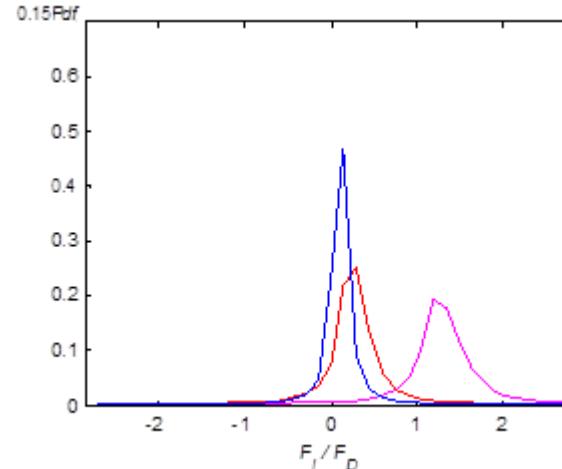


Figure 66 : Cas E ($\rho_p/\rho_f = 10$, $d_p=2.10^{-5}$ m) : Fonction de densité de probabilité du rapport de la force i à la force de traînée. Rose : force inertielle, rouge : force d'accélération en volume, bleu : force de masse ajoutée

4.5.9 Dispersion et coefficient de dispersion des particules

Dispersion des particules

La dispersion des particules dans un écoulement turbulent est définie par la variance de la distance parcourue par les particules au cours du temps. Si l'on exprime la dispersion selon l'axe i cela donne :

$$\overline{x_{i,p}^2(t)} = \langle (x_{i,p}(t) - (x_{i,p}(t_0))^2 \rangle \quad (4.60)$$

Il est aussi possible de calculer la dispersion dans deux directions i et j à l'aide de

$$\overline{x_{ij,p}^2(t)} = \langle [x_{i,p}(t) - x_{i,p}(t_0)][x_{j,p}(t) - x_{j,p}(t_0)] \rangle \quad (4.61)$$

Nous n'avons pas calculé les dispersions croisées, de ce fait les coefficients de diffusion qui seront présentés seront relatifs à la dispersion définie par l'équation (4.60). Nous avons choisi de l'évaluer par tranche parallèle à la surface libre en prenant en compte les particules présentes dans la tranche k à l'instant initial t_0 à partir duquel on commence les calculs.

Dans le cas de particules de même densité que le fluide, assimilées à des traceurs qui suivent parfaitement les particules fluides environnantes, le comportement de la dispersion moyenne des particules aux temps courts et aux temps longs présente en turbulence homogène isotrope les caractéristiques suivantes³³ :

$$\overline{x_{i,p}^2(t)} = \begin{cases} \overline{u_{fi}^{\prime 2}}t^2 & \text{lorsque } t \rightarrow 0 \\ 2\overline{u_{fi}^{\prime 2}}T_{ii}t & \text{lorsque } t \rightarrow \infty \end{cases} \quad (4.62)$$

Les Figure 67 à 70 présentent les dispersions évaluées dans différentes tranches du domaine de calcul. Chaque couleur est associée à une tranche, nous distinguons ici la dispersion dans les directions parallèles à la surface libre de la dispersion dans la direction normale à la surface libre.

L'allure générale des courbes de dispersion des particules est conforme à celle obtenue par Armenio *et al.*⁹² : la dispersion est dans un premier temps parabolique puis semble varier linéairement dans un deuxième temps.

Dans la zone de diffusion, les courbes de dispersion dans la direction normale (respectivement parallèle) à la surface libre calculées dans les différentes tranches sont proches les unes des autres. On note que les particules se dispersent un peu plus rapidement dans la direction normale à la surface libre que dans une direction parallèle : ceci est lié à la légère anisotropie de la turbulence dans cette zone ($w_f^{\prime 2} > u_f^{\prime 2}, v_f^{\prime 2}$). En outre, la dispersion est d'autant plus rapide qu'on se rapproche de la zone de forçage où l'intensité turbulente est plus grande.

Dans la couche de surface (voir Figure 67), la dispersion dans la direction normale chute lorsqu'on se rapproche de la surface libre où les fluctuations de vitesse normale s'annulent. En revanche, la dispersion parallèlement à la surface libre augmente au voisinage de la surface libre, conséquence de l'augmentation des fluctuations de vitesse tangentielle très près de la surface libre (voir Figure 60 et Figure 61).

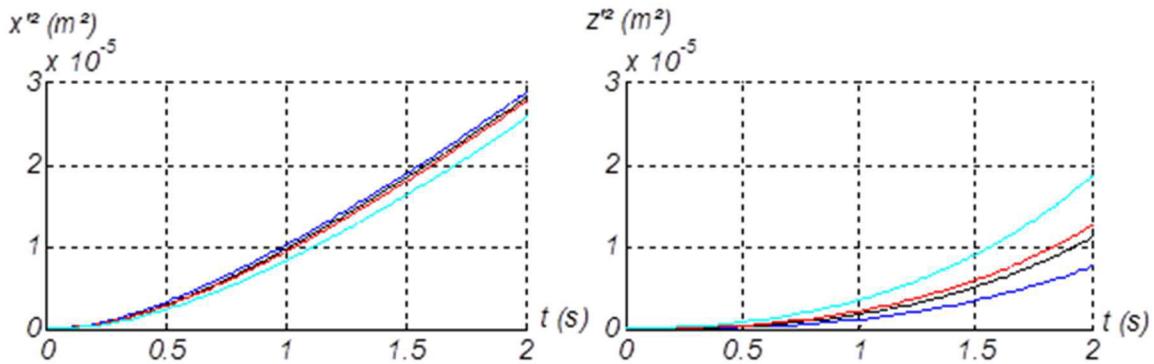


Figure 67 : Cas A ($\rho_p/\rho_f = 1$, $d_p=1.10^{-5}$ m) : Dispersion des particules en fonction du temps à différentes distances de la surface libre (bleu foncé : $z \in [\Delta ; 2\Delta]$, noir : $z \in [2\Delta ; 3\Delta]$, rouge : $z \in [3\Delta ; 4\Delta]$, cyan : $z \in [6\Delta ; 7\Delta]$)

Aux temps courts, nous observons un bon accord entre la dispersion des particules calculée par simulation numérique directe et la loi présentée en (4.58) comme on peut le voir sur les Figure 68 à Figure 70 où on a mis en vis-à-vis la courbe de dispersion calculée par DNS et la courbe théorique.

Par contre, aux temps longs, comparer la dispersion calculée par DNS avec la loi théorique établie en turbulence homogène isotrope s'avère plus difficile. En effet, cela suppose d'une part de définir le domaine où la dispersion suit son comportement asymptotique aux temps longs, et d'autre part de calculer le temps de décorrélation lagrangien qui, dans une turbulence anisotrope, est sensible à la façon dont on l'évalue. Les mêmes problèmes apparaissent pour la détermination du coefficient de diffusion c'est pourquoi ces points seront abordés dans le paragraphe suivant.

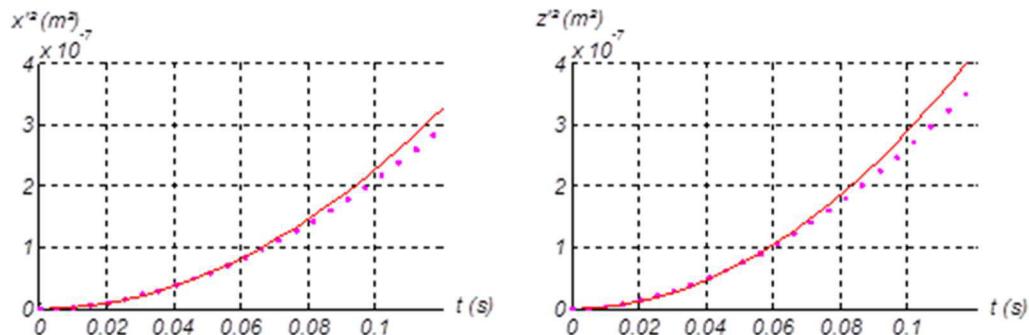


Figure 68 : Cas A ($\rho_p/\rho_f = 1$, $d_p=1.10^{-5}$ m, plan Lz/6) : (Points magenta .) : Dispersion de particules en fonction du temps. (Trait continu rouge -) : Estimation de la dispersion évaluée à l'aide de l'équation 4.61 aux temps courts

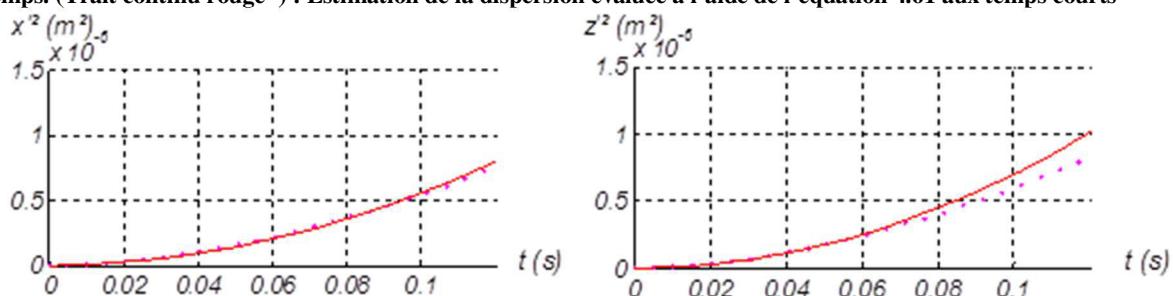


Figure 69 : Cas A ($\rho_p/\rho_f = 1$, $d_p=1.10^{-5}$ m, plan Lz/4) : (Points magenta .) : Dispersion de particules en fonction du temps. (Trait continu rouge -) : Estimation de la dispersion évaluée à l'aide de l'équation 4.61 aux temps courts

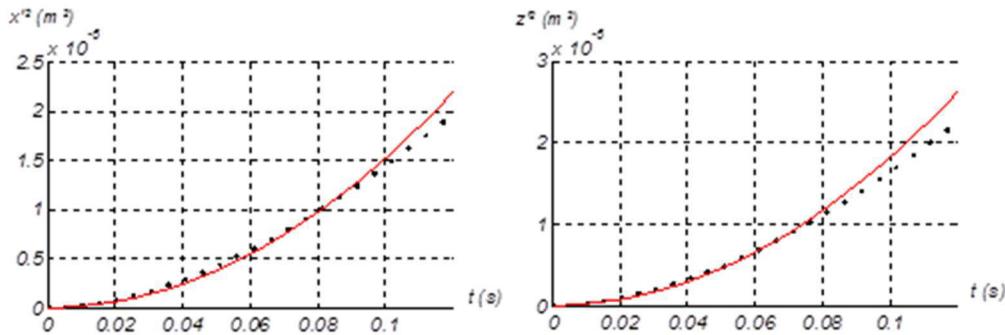


Figure 70 : Cas A ($\rho_p/\rho_f = 1$, $d_p=1.10^{-5}$ m, plan Lz/3) : (Points magenta .) : Dispersion de particules en fonction du temps. (Trait continu rouge -) : Estimation de la dispersion évaluée à l'aide de l'équation 4.61 aux temps courts

Coefficient de diffusion

Le coefficient de diffusion des particules s'obtient en dérivant la dispersion des particules par rapport au temps³³.

$$D_i = \frac{1}{2} \frac{dx_{p,i}^2(t)}{dt} \quad (4.63)$$

Dans le cas d'une turbulence homogène isotrope, on peut lier le coefficient de diffusion aux échelles de décorrélation lagrangienne. Lorsque les particules se comportent comme des traceurs, le coefficient de diffusion est donné par³³ :

$$D_{ii} = u'^2 i T_{ii} \text{ lorsque } t \rightarrow \infty \quad (4.64)$$

L'échelle lagrangienne est la même que celle qui a été présentée pour la phase fluide puisqu'on assimile ici les particules solides à des particules de fluide.

En turbulence homogène isotrope, le comportement asymptotique de la dispersion aux temps longs est une droite.

Dans notre cas, il apparaît que la dispersion semble suivre un comportement linéaire sur un intervalle de temps restreint seulement (on observe ensuite une inflexion de la courbe de dispersion). Ceci est lié au caractère fortement non homogène de la turbulence dans la direction normale à la surface libre : au fur et à mesure que la dispersion croît, les particules explorent des régions dont les caractéristiques de turbulence diffèrent de celles de leur tranche d'origine.

Pour comparer les coefficients de diffusion estimés par les relations (4.62) et (4.63), nous supposons qu'il existe un intervalle de temps sur lequel (i) la dispersion suit son régime asymptotique aux temps longs et (ii) la turbulence reste homogène à l'échelle de la distance moyenne parcourue par les particules depuis l'instant $t = 0$. Nous avons choisi arbitrairement l'intervalle de temps $[1,5; 2,5]$ s. L'interpolation de la dispersion par un polynôme a aussi été effectuée de façon non concluante (Annexe 6).

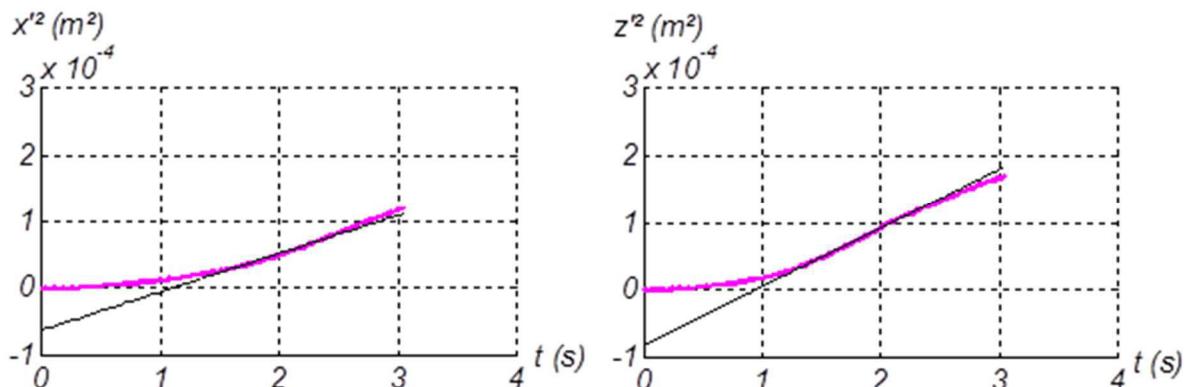


Figure 71 : Cas A ($\rho_p/\rho_f = 1$, $d_p=1.10^{-5}$ m, plan Lz/6) : (Points magenta .) : Dispersion de particules en fonction du temps. (Traits pleins noirs -) : Régression linéaire sur l'intervalle de temps $[1,5; 2,5]$ s

Nous rapportons dans le tableau suivant les valeurs de coefficient de dispersion calculées par régression linéaire et à l'aide de l'échelle de décorrélation lagrangienne, pour le plan Lz/6. Il apparaît que les valeurs de coefficient de dispersion estimées par régression linéaire et celles déterminées à l'aide de la relation (4.63) sont du même ordre de grandeur. L'écart (d'un facteur 2 à 3) entre les valeurs estimées par régression linéaire et celles calculées à l'aide de la relation (4.63) montrent cependant que le caractère non homogène de la turbulence est trop prononcé pour pouvoir utiliser les résultats établis en turbulence homogène isotrope.

Tableau 9: Coefficient de diffusion évalué dans le plan Lz/6

D_i	$\frac{1}{2} \frac{dx_{p,i}^2(t)}{dt}$ pour $t \in [1,5; 2,5]$ s ($m^2.s^{-1}$)	$\overline{u'_{f,i}^2} \cdot T_{Li}$ ($m^2.s^{-1}$)
x	$2,9 \cdot 10^{-5}$	$1,4 \cdot 10^{-5}$
z	$4,3 \cdot 10^{-5}$	$1,6 \cdot 10^{-5}$

4.6 Étude du dépôt de particules soumises à la sédimentation

Nous présentons maintenant des simulations qui ont été effectuées en prenant en compte les effets de la sédimentation. Les tailles de particules restent inchangées ainsi que le domaine de simulation, seule la force de sédimentation apparaît maintenant dans l'équation de la dynamique.

4.6.1 Influence de la sédimentation sur la vitesse de dépôt :

La Figure 72 présente la vitesse de dépôt calculée pour deux nombre de Reynolds différents en prenant en compte ou non les effets inertiels. La vitesse de dépôt est comparée dans chaque cas à la vitesse de chute des particules. On remarque qu'ici aussi, les effets inertiels jouent un rôle négligeable sur la vitesse de dépôt des particules. De plus, on remarque que la vitesse de dépôt des particules est égale à la vitesse de chute des mêmes particules même pour les simulations effectuée à des intensités turbulentes importantes : la vitesse de dépôt mesurée lorsque la sédimentation est prise en compte est beaucoup plus importante que la vitesse de dépôt mesurée lorsque les particules ne sont pas soumises aux effets de la sédimentation.

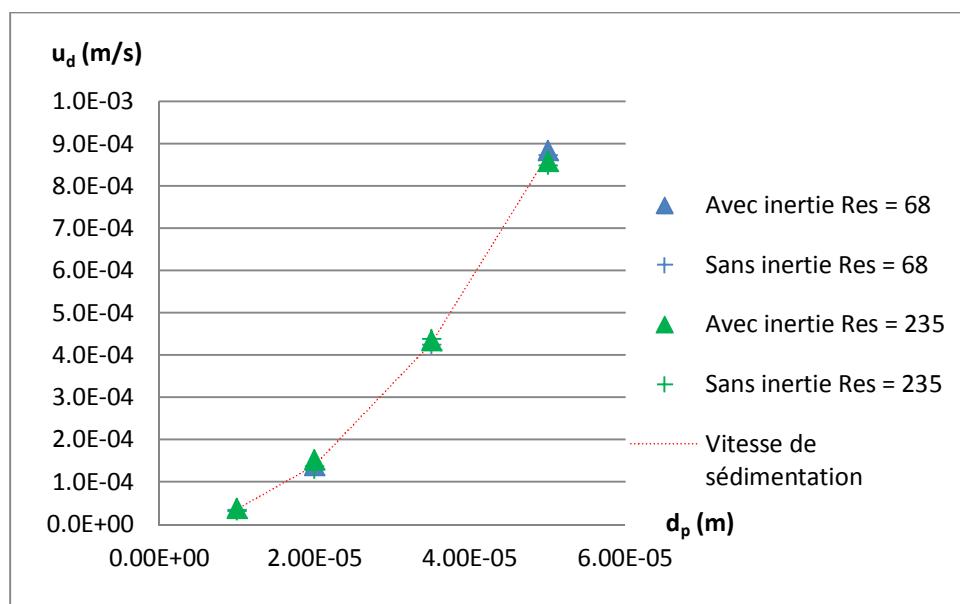


Figure 72 : ($\rho_p/\rho_f = 0,5$) : Vitesse de dépôt de particules soumises aux effets de la gravité.

4.6.2 Nombre de Reynolds particulaire

Comme on peut le vérifier sur la Figure 55, le nombre de Reynolds des particules est inférieur à l'unité dans toute la zone de diffusion. On remarque que dans les directions tangentielle à la surface libre, le nombre de Reynolds augmente lorsque l'on s'approche de la zone de forçage, ce qui est dû à l'augmentation des fluctuations de la vitesse du fluide. Pour la vitesse normale à la surface libre, lorsque la sédimentation est prise en compte, le nombre de Reynolds varie peu à l'approche de la zone de forçage : la sédimentation contrôle la vitesse relative entre le fluide et la particule.

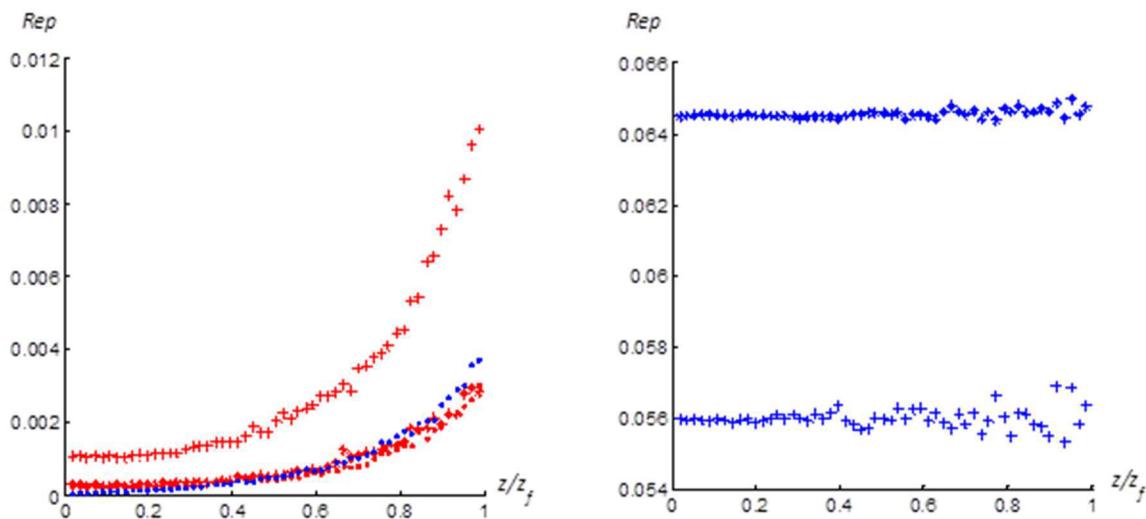


Figure 73 : Cas A : nombre de Reynolds particulaire instantané, évalué à l'aide de la vitesse tangentielle à la surface libre (en rouge, courbes figure de gauche) et à l'aide de la vitesse normale à la surface libre (en bleu, courbes figure de droite et une courbe figure de gauche) en fonction de la distance à la surface libre.

Figure de gauche : (signe point .) : $\rho_p/\rho_f = 1$; $d_p = 2 \cdot 10^{-5}$ m particules non soumises aux effets de la gravité

Les deux figures : (signe étoile *) : $\rho_p/\rho_f = 10$; $d_p = 2 \cdot 10^{-5}$ m particules soumises aux effets de la gravité

Les deux figures : (signe plus +) : $\rho_p/\rho_f = 0,5$; $d_p = 5 \cdot 10^{-5}$ m particules soumises aux effets de la gravité

4.6.3 Concentration des particules

Nous comparons les concentrations des particules soumises à la sédimentation (en rouge) à la concentration des particules non soumises à la sédimentation (en bleu) pour trois tailles de particules (Figure 74, Figure 75, Figure 76).

Il apparaît que la concentration des particules est uniforme sur l'ensemble du domaine lorsque la sédimentation est prise en compte (alors qu'une chute de concentration est observée près de la surface libre en l'absence de sédimentation). Les fluctuations de concentration, de l'ordre de 5% au plus, sont liées aux erreurs statistiques de comptage.

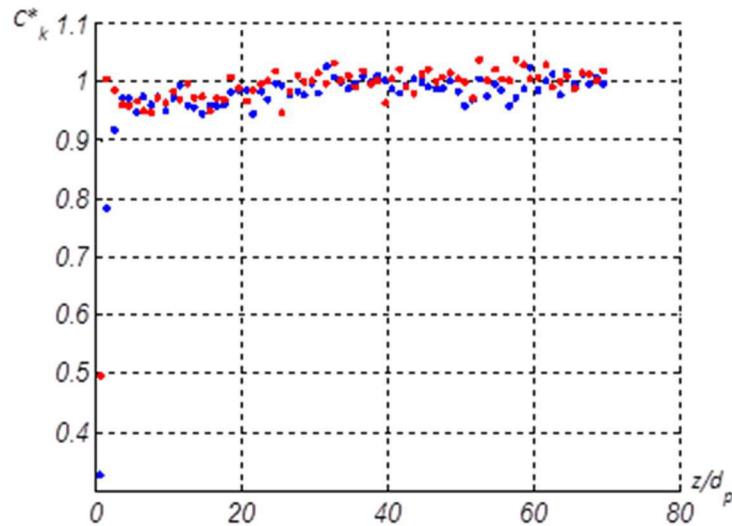


Figure 74 : Cas A ($d_p=1.10^{-5}\text{m}$) : (Bleu $\rho_p/\rho_f = 1$) Concentration des particules non soumises à la sédimentation (Rouge $\rho_p/\rho_f = 0,5$) Concentration des particules soumises à la sédimentation

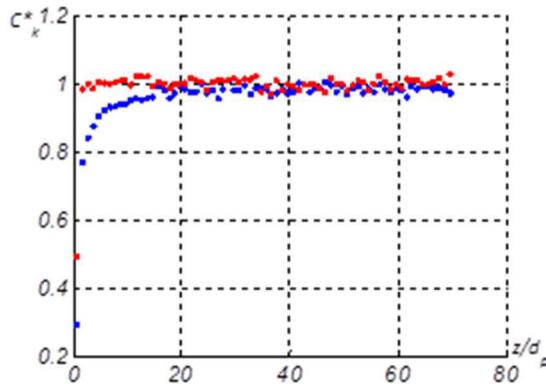


Figure 75 : Cas A ($d_p=2.10^{-5}\text{m}$) :
(Bleu $\rho_p/\rho_f = 1$) Concentration des particules non
soumises à la sédimentation
(Rouge $\rho_p/\rho_f = 0,5$) Concentration des particules
soumises à la sédimentation

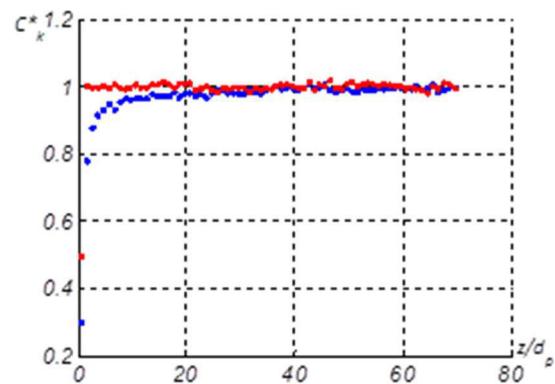


Figure 76 : Cas A ($d_p=5.10^{-5}\text{m}$) :
(Bleu $\rho_p/\rho_f = 1$) Concentration des particules non
soumises à la sédimentation
(Rouge $\rho_p/\rho_f = 0,5$) Concentration des particules
soumises à la sédimentation

Les figures 79 et 80 présentent les profils de concentration particulaire conditionnée au sens de la vitesse du fluide vu (vers la surface libre ou vers la zone de forçage) pour deux diamètres de particule. On constate tout d'abord qu'il n'y pas de différence de comportement significative entre les deux tailles de particules considérées. Les Figure 77 et Figure 78 montrent des profils similaires à ceux obtenus lorsque la sédimentation n'est pas prise en compte (Figure 58). En particulier, la concentration en particules voyant le fluide se diriger vers la zone de forçage est supérieure à celle des particules voyant le fluide se diriger vers la surface libre, ceci est lié au fait que les éjections occupent plus d'espace que les impacts.

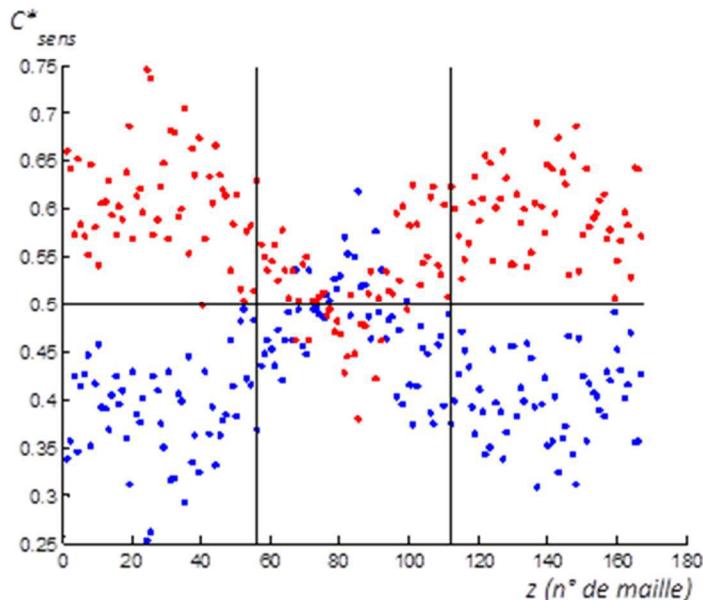


Figure 77 : Cas A ($d_p=2.10^{-5}\text{m}$, $\rho_p/\rho_f = 0,5$) : Concentration instantanée des particules. (Bleu) : concentration des particules dont la vitesse du fluide vu est dirigée vers la surface libre, (Rouge) : concentration des particules dont la vitesse du fluide vu est dirigée vers la zone de forçage

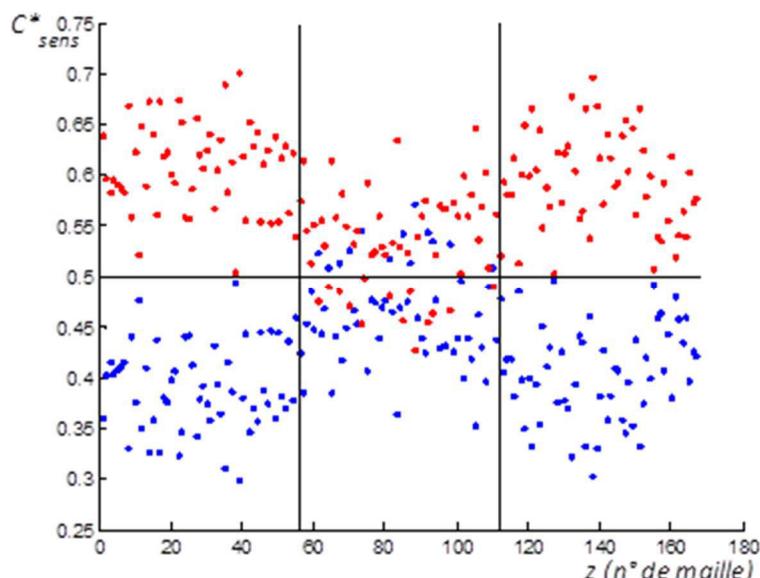


Figure 78 : Cas A ($d_p=5.10^{-5}\text{m}$, $\rho_p/\rho_f = 0,5$) : Concentration instantanée des particules. (Bleu) : concentration des particules dont la vitesse du fluide vu est dirigée vers la surface libre, (Rouge) : concentration des particules dont la vitesse du fluide vu est dirigée vers la zone de forçage

Les figures 81 et 82 présentent les profils de concentration particulaire conditionnée au sens de la vitesse des particules (vers la surface libre ou vers la zone de forçage). On constate que près de la surface libre, la concentration en particules dont la vitesse est dirigée vers la zone de forçage chute alors que la concentration en particules dont la vitesse est dirigée vers la surface libre augmente fortement. Très près de l'interface, les particules se dirigent majoritairement vers la surface libre. Ce phénomène est d'autant plus marqué pour les particules de grandes tailles qui possèdent donc une vitesse de chute plus élevée. Ainsi, quand bien même les particules sont soumises à la sédimentation dans l'ensemble du domaine de calcul, elles ne se diffèrentient des traceurs que dans les dernières mailles situées près de la surface libre, où les fluctuations normales du fluides deviennent faibles (du fait de la présence de la surface libre) devant la vitesse de chute des particules.

Près de la surface libre, le mouvement des particules est de type piston avec une vitesse normale égale à la vitesse de chute. La conservation de la matière impose une concentration constante jusqu'à la

distance de capture égale à $d_p/2$. Ceci permet d'expliquer l'absence de chute de concentration en présence de sédimentation observée sur les Figure 74 à Figure 76.

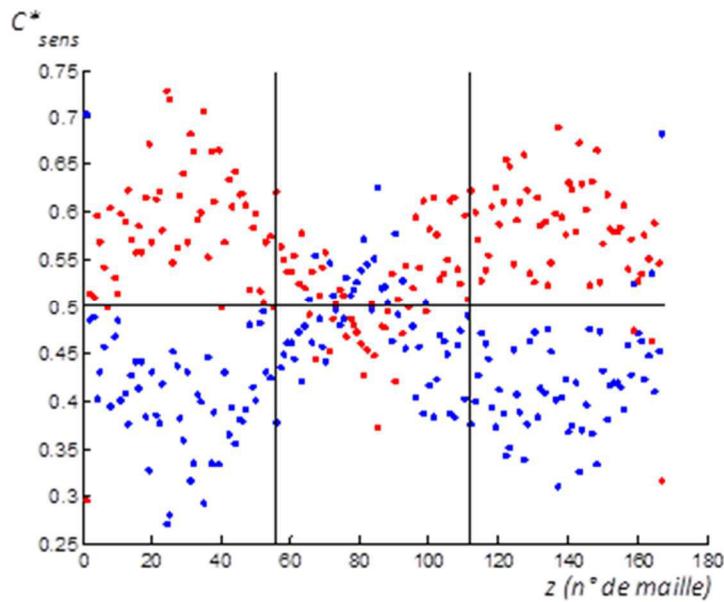


Figure 79 : Cas A ($d_p=2.10^{-5}$ m, $\rho_p/\rho_f = 0,5$) : Concentration instantanée des particules. (Bleu) : concentration des particules dont la vitesse des particules est dirigée vers la surface libre, (Rouge) : concentration des particules dont la vitesse des particules est dirigée vers la zone de forçage

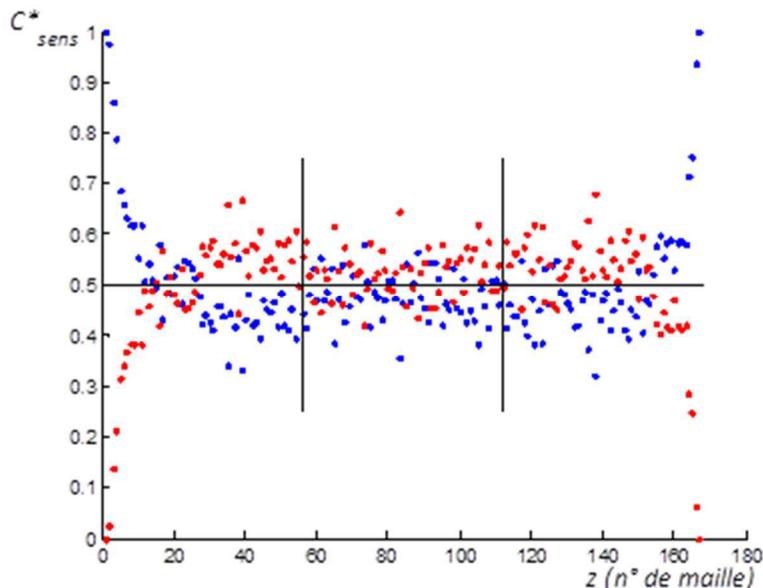


Figure 80 : Cas A ($d_p=5.10^{-5}$ m, $\rho_p/\rho_f = 0,5$) : Concentration instantanée des particules. (Bleu) : concentration des particules dont la vitesse des particules est dirigée vers la surface libre, (Rouge) : concentration des particules dont la vitesse des particules est dirigée vers la zone de forçage

4.6.4 Variance de la vitesse des particules et de la vitesse du fluide vu

Calcul de la variance de la vitesse des particules :

Nous avons calculé la variance des fluctuations de la vitesse des particules par rapport à leur vitesse de chute soit :

$$w_p'^2 \approx (w_p - v_{sed})^2 \quad (4.65)$$

Il apparaît que dans la majeure partie du domaine, la variance de la vitesse des particules est très proche de celle du fluide et de celle du fluide vu. On en déduit qu'il n'y a pas de concentration préférentielle des particules. Ceci est en accord avec le fait que les effets inertiels soient négligeables.

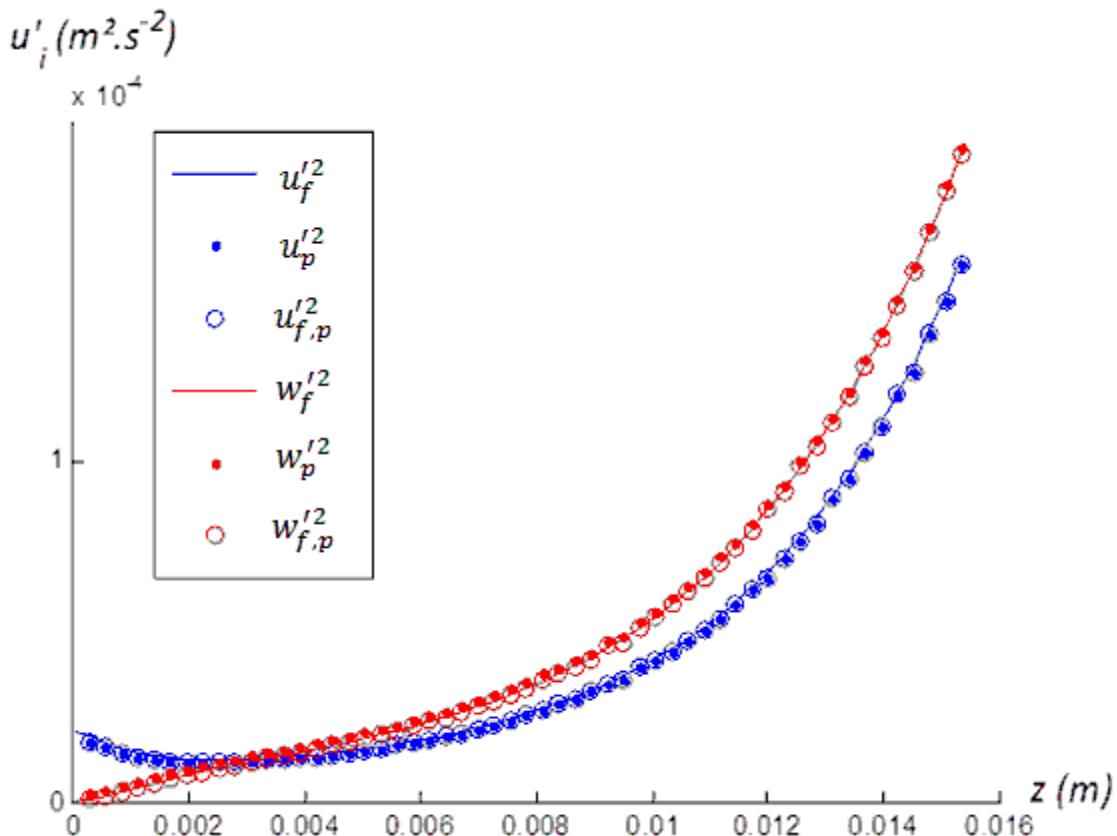


Figure 81 : Cas A ($d_p=5.10^{-5}m$, $\rho_p/\rho_f = 0,5$) : Variance des fluctuations de la vitesse des particules par rapport à leur vitesse de chute

Vitesse de dérive des particules :

Un autre résultat sur la vitesse du fluide vu mérite d'être présenté : il s'agit de la moyenne de la vitesse du fluide conditionnée par la présence des particules. Dans le cadre des écoulements multiphasiques, cette vitesse est aussi parfois appelée vitesse de dérive des particules³³. On a vu précédemment qu'*a priori* le phénomène de concentration préférentielle des particules est négligeable dans le domaine de calcul. Dans la configuration d'écoulement étudiée ici, cela signifie que normalement la vitesse de dérive des particules est nulle puisque la vitesse moyenne du fluide est nulle. Si on regarde les Figure 82 à Figure 84 qui présentent la vitesse de dérive pour trois tailles de particules en prenant en compte, ou pas, la vitesse de sédimentation, on peut voir que la vitesse de dérive fluctue en effet autour de zéro.

Cependant, près de la surface libre, on observe une divergence entre la vitesse du fluide vu par les particules non soumises à la sédimentation et celle du fluide vu par les particules soumises à la sédimentation. Les particules non soumises à la sédimentation ont une vitesse de dérive supérieure.

Dans la zone de diffusion, la concentration en particule est uniforme puis, à proximité de la surface libre, le comportement des particules se différencie : lorsqu'elles ne sont pas soumises à la sédimentation, seules les particules voyant une vitesse du fluide positive vont se diriger vers la paroi et le nombre de particules qui vont revenir dans la zone de diffusion (et voyant ainsi une vitesse du fluide négative) sera inférieur au nombre de particules entrées dans la sous couche de glissement du fait de la condition de capture des particules au niveau de la surface libre. La vitesse de dérive prenant en compte les deux populations de particules (celle dirigée vers la surface libre et celle s'éloignant de la surface libre), il est donc logique que la valeur de la vitesse de dérive soit positive.

Dans le cas des particules soumises à la sédimentation, on a vu que la vitesse des particules près de la surface libre est proche de la vitesse de chute du fait de la très forte baisse des fluctuations de la vitesse normale du fluide dans la sous couche de glissement. Or, juste avant l'entrée dans la sous couche de glissement, la concentration en particules est uniforme. La vitesse de chute imposant en quelque sorte une translation verticale de la répartition spatiale des particules, la concentration dans la sous couche de glissement des particules soumises à la sédimentation est donc de la même façon uniforme à proximité de la surface libre. La vitesse de dérive se rapproche donc ainsi de la moyenne de la vitesse du fluide calculée dans une tranche proche de la surface libre, c'est-à-dire nulle. De plus, il est logique d'observer que l'écart entre la vitesse de dérive des particules soumises ou non à la sédimentation augmente avec la taille de la particule puisque la vitesse de dépôt des particules augmente avec le diamètre des particules.

On peut remarquer que cet écart dans les vitesses de dérive dépend de la condition de capture à l'interface libre : si une condition de rebond avait été mise en place, on peut supposer que la vitesse de dérive des particules non soumises à la sédimentation aurait aussi été nulle.

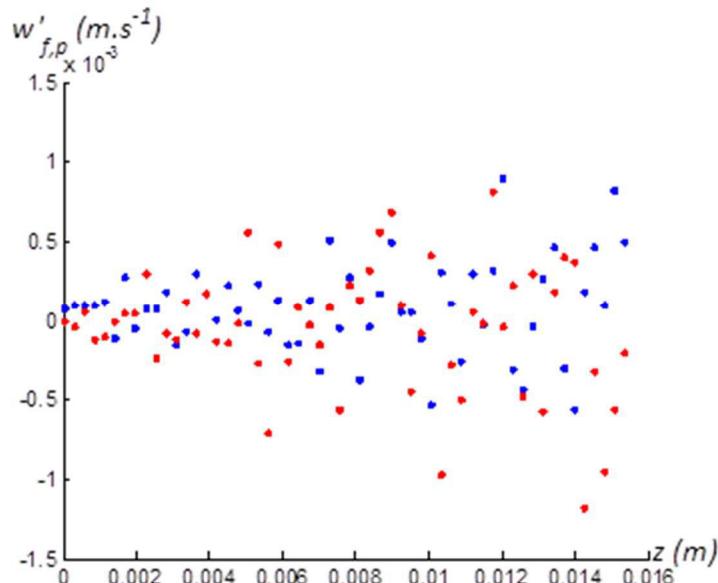


Figure 82 : Cas A ($d_p = 1.10^{-5} \text{m}$, $\rho_p/\rho_f = 0,5$) : Vitesse de dérive des particules. (Bleu) : particules non soumises à la sédimentation. (Rouge) : particules soumises à la sédimentation

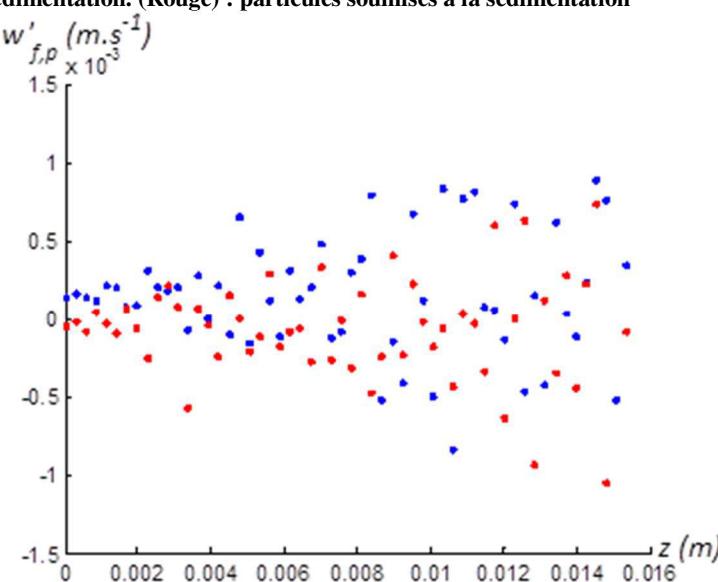


Figure 83 : Cas A ($d_p = 2.10^{-5} \text{m}$, $\rho_p/\rho_f = 0,5$) : Vitesse de dérive des particules. (Bleu) : particules non soumises à la sédimentation. (Rouge) : particules soumises à la sédimentation

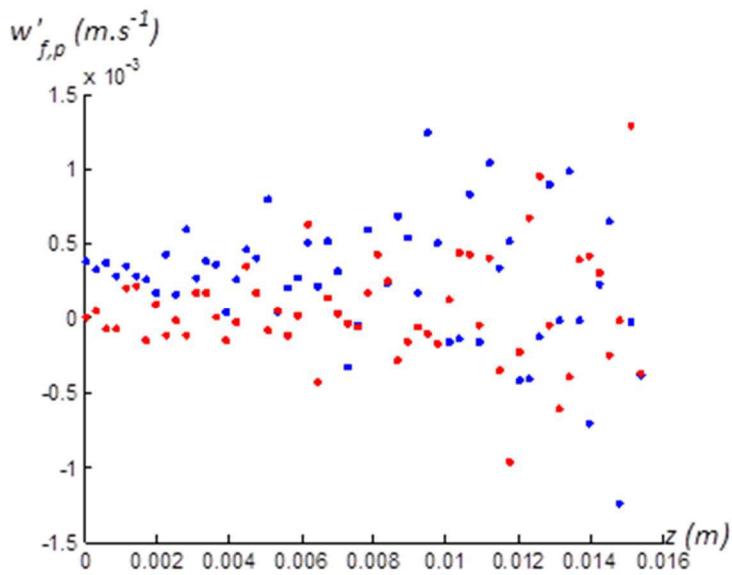


Figure 84 : Cas A ($d_p=5.10^{-5}$ m, $\rho_p/\rho_f = 0,5$) : Vitesse de dérive des particules. (Bleu) : particules non soumises à la sédimentation. (Rouge) : particules soumises à la sédimentation

4.6.5 Poids des forces dans le mouvement des particules

On peut regarder le poids des différentes forces par rapport au poids de la force de traînée. Par rapport aux particules non soumises aux effets de la sédimentation, on remarque que le comportement des composantes des forces parallèles à la surface libre n'a pas changé.

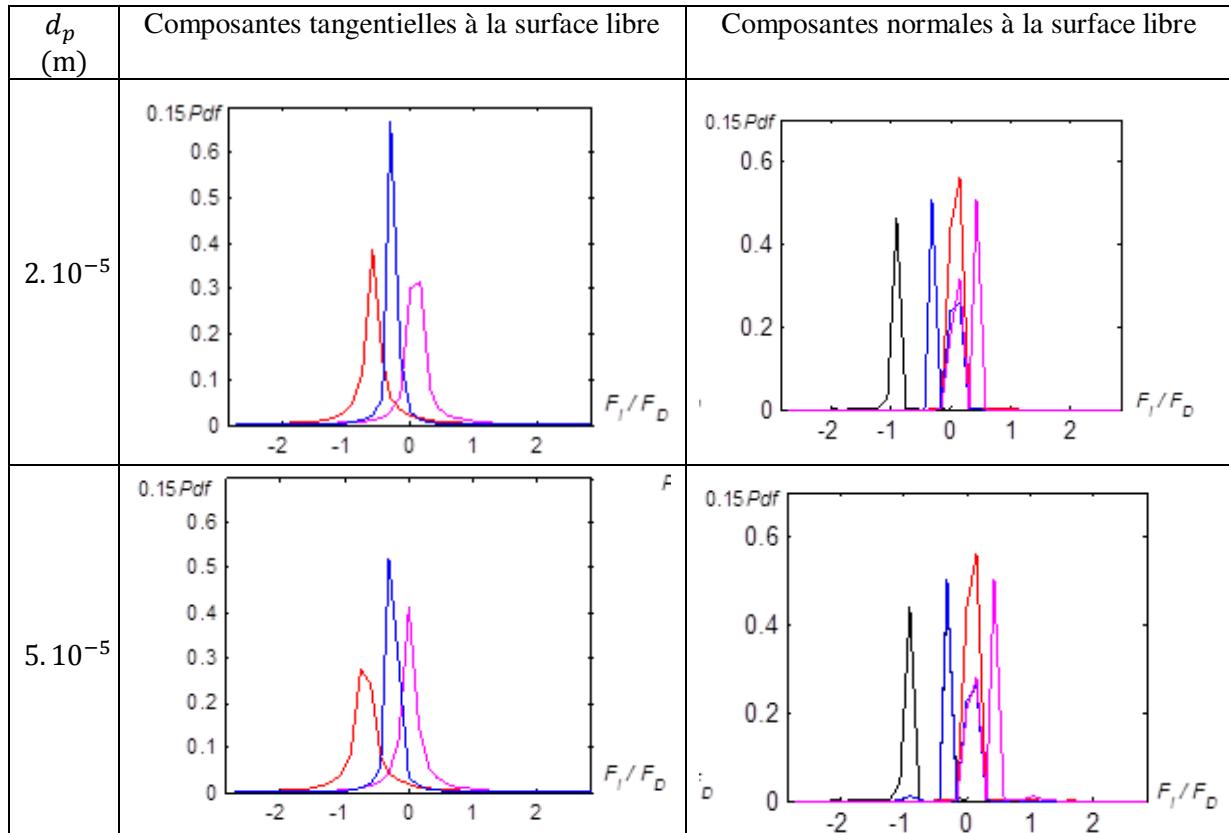


Figure 85 : Cas A ($\rho_p/\rho_f = 0,5$) : Fonction de densité de probabilité du rapport d'une force i à la force de traînée. Rose : Force inertielle, rouge : force d'accélération en volume, bleu : force de masse ajoutée, noir : flottabilité.

Par contre, pour les composantes normales à la surface libre, on remarque que la force principale (qui s'oppose à la force de traînée) est la flottabilité. Le poids relatif des autres forces est faible : la Pdf de la force d'accélération en volume est centrée autour de zéro, les Pdf de la force de masse ajoutée et de la force inertielle (associée à l'accélération propre de la particule) présentent chacune deux pics voisins de zéro. L'origine de ces deux pics est difficile à expliquer puisque les Pdf ont été moyennées sur l'ensemble du domaine. On peut cependant supposer que le pic le plus proche de zéro est associé à la région voisine de la surface libre où les fluctuations de vitesse normale du fluide sont faibles devant la vitesse de chute des particules (cette région est située dans la couche de surface). Le pic de gauche de la Pdf de la force de masse ajoutée et le pic de droite de la Pdf de la force inertielle correspondent quant à eux à la région (zone de diffusion en particulier) où les fluctuations de vitesse du fluide sont élevées et bien supérieures à la vitesse de chute des particules. Pour confirmer cela, il faudrait déterminer les Pdf des forces dans chaque tranche de domaine parallèle à la surface libre.

4.6.6 Dispersion et décorrélation temporelle des particules

De la même façon que nous l'avons effectué pour le calcul des variances des fluctuations des vitesses des particules, nous avons supposé que le déplacement moyen des particules soumises aux effets de la sédimentation était contrôlé par la vitesse de sédimentation. En première approximation, nous avons donc évalué la dispersion des particules en ôtant un déplacement moyen estimé égal à la distance parcourue au court du temps par une particule évoluant à la vitesse de sédimentation :

$$\overline{x_{i,p}^2(t)} = \langle (x_{i,p}(t) - x_{i,p}(t_0) - tv_{sed,i})^2 \rangle \quad (4.66)$$

Dispersion des particules dans le plan $L_z/6$:

La Figure 86 montre qu'aux temps courts, la dispersion des particules soumises à la sédimentation est proche de la dispersion des particules en l'absence de sédimentation.

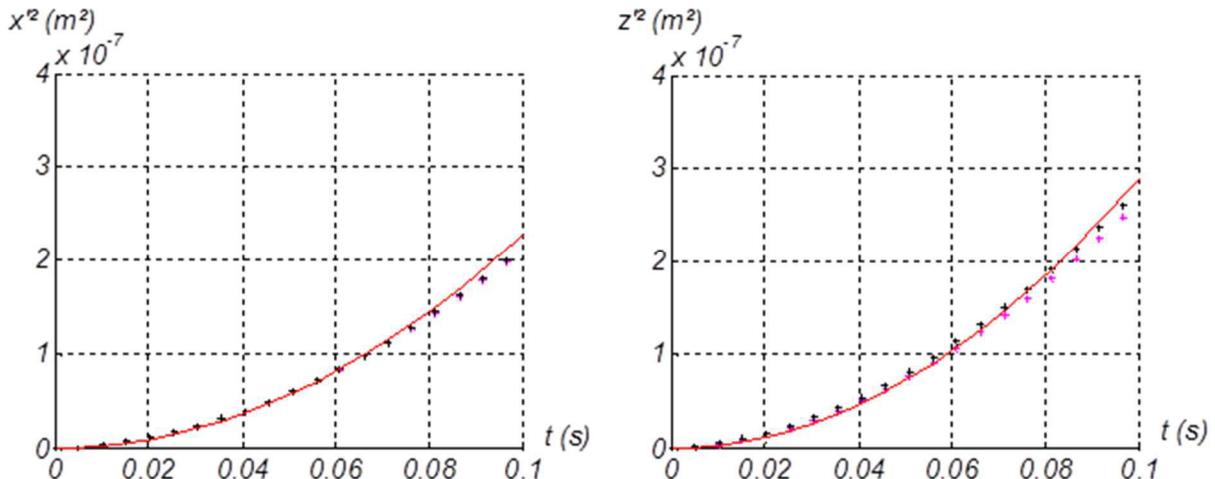


Figure 86 : Cas A ($d_p = 1.10^{-5}$ m, plan $L_z/6$) : Dispersion des particules en fonction du temps. (Noir +) : $\rho_p/\rho_f = 1$, (Magenta +) : $\rho_p/\rho_f = 0,5$, (Traits pleins rouges -) : Estimation de la dispersion évaluée à l'aide de l'équation 4.61 aux temps courts

Par contre aux temps longs, la figure 92 montre qu'en présence de sédimentation, la dispersion des particules dans les directions normale et parallèle à la surface libre est significativement diminuée par rapport au cas sans sédimentation.

En effet, il est connu³³ que l'application d'une force extérieure sur les particules diminue leur dispersion. Ce phénomène s'explique par le fait que les particules soumises à l'action d'une force extérieure vont avoir une trajectoire qui se décorrèle plus rapidement que des particules traceurs. En effet, la vitesse de glissement existant entre le fluide et les particules induite par la force extérieure,

entraîne celles-ci à interagir plus rapidement avec des structures tourbillonnaires indépendantes. C'est ce que l'on nomme l'effet de croisement de trajectoire. Une des conséquences de l'effet de croisement de trajectoire est que la dispersion des particules diminue dans la direction parallèle à la vitesse de glissement et est plus fortement diminuée dans les directions perpendiculaires à cette vitesse. Ainsi, dans notre cas, on devrait observer une baisse de la dispersion des particules suivant l'axe z et une baisse encore plus importante suivant les directions x et y (puisque la vitesse de sédimentation est dirigée suivant z).

Pour la dispersion des particules évaluée dans les directions perpendiculaires à la vitesse de sédimentation (soit les directions parallèles à la surface libre), on observe que la dispersion diminue bien comme attendu (Figure 87). Par contre, dans la direction normale à la surface libre, la dispersion diminue beaucoup plus fortement alors qu'elle devrait diminuer de façon moins importante que dans les directions tangentialles : on explique cela par le caractère non homogène et non isotrope de la turbulence. En effet, sous l'effet de la vitesse de glissement, les particules sont entraînées vers la surface libre où les fluctuations de vitesse normales diminuent et s'annulent à l'interface, ce qui affecte et limite la dispersion des particules.

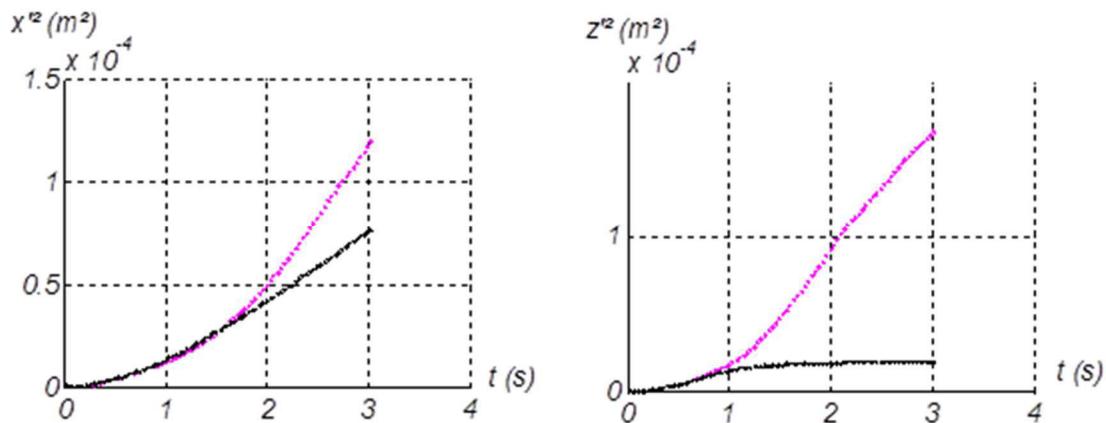


Figure 87 : Cas A ($d_p = 1.10^{-5}$ m, plan $L_z/6$) Dispersion de particules en fonction du temps. (Magenta +) : $\rho_p/\rho_f = 1$, (Noir +) : $\rho_p/\rho_f = 0,5$

Décorrélation temporelle des particules dans la tranche $L_z/6$:

Si l'on regarde la décorrélation temporelle des particules dans une tranche du domaine située dans la zone de diffusion, on remarque que la décorrélation évolue différemment selon que l'on s'intéresse à la composante normale de la vitesse des particules ou aux composantes tangentialles.

Pour la composante normale à la surface libre, la décorrélation temporelle est plus rapide lorsque la sédimentation est prise en compte, ce qui est cohérent avec la baisse de la dispersion des particules dans la direction normale à la surface libre.

Par contre, dans les directions parallèles à la surface libre, la décorrélation temporelle est plus lente lorsque la sédimentation est prise en compte. Pour comprendre ce phénomène, il est intéressant de revenir à l'échelle de décorrélation temporelle du fluide présentée sur la Figure 44. Sur cette figure, on remarque que, plus on se rapproche de la surface libre, plus l'échelle de décorrélation temporelle du fluide diminue. Cela signifie que les particules soumises aux effets de la sédimentation qui les dirigent vers la surface libre voient, en moyenne, un fluide dont la vitesse se décorrèle plus lentement que la vitesse du fluide vu par les particules non soumises à la sédimentation ; d'où la décorrélation plus lente des particules soumises à la sédimentation.

Toutefois, une décorrélation plus lente devrait induire une dispersion plus grande des particules comme on l'a vu avec l'équation (4.61) : ce n'est pas le cas car les fluctuations de la vitesse du fluide diminuent lorsqu'on s'approche de la surface libre. Ainsi, les particules soumises à la sédimentation voient une vitesse parallèle à la surface libre du fluide qui se décorrèle plus lentement mais qui possède aussi des vitesses moins élevées, d'où la baisse de la dispersion observée.

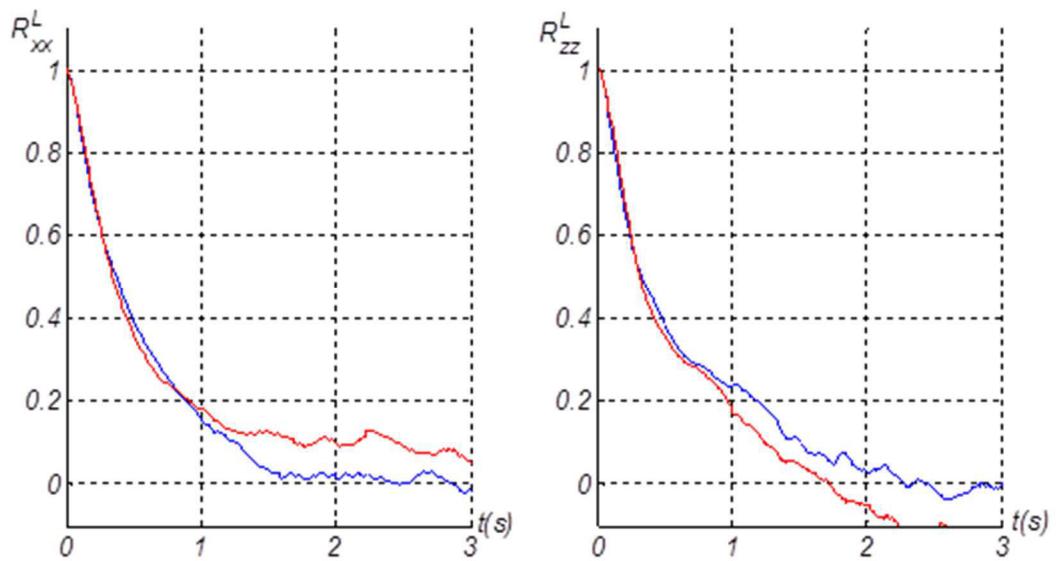


Figure 88 : Cas A ($d_p = 1.10^{-5}$ m, plan $L_z/6$) : Décorrélation temporelle lagrangienne. À gauche, décorrélation des vitesses parallèles à la surface libre, à droite décorrélation de la vitesse normale à la surface libre. (Bleu) : sans sédimentation ($\rho_p/\rho_f = 1$), (Rouge) : avec sédimentation ($\rho_p/\rho_f = 0,5$)

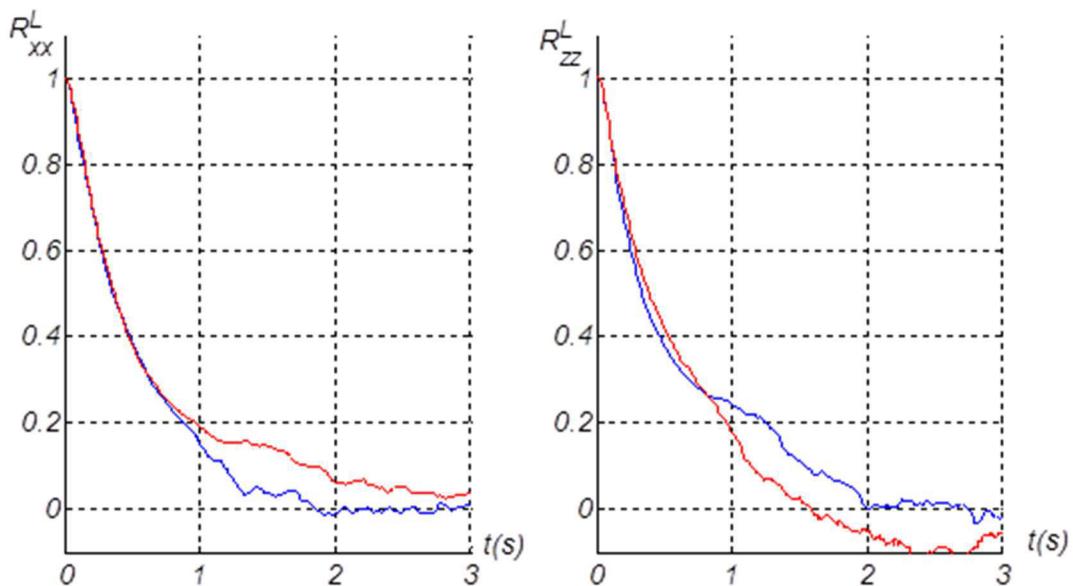


Figure 89 : Cas A ($d_p = 2.10^{-5}$ m, plan $L_z/6$) : Décorrélation temporelle lagrangienne. À gauche, décorrélation des vitesses parallèles à la surface libre, à droite décorrélation de la vitesse normale à la surface libre. (Bleu) : sans sédimentation ($\rho_p/\rho_f = 1$), (Rouge) : avec sédimentation ($\rho_p/\rho_f = 0,5$)

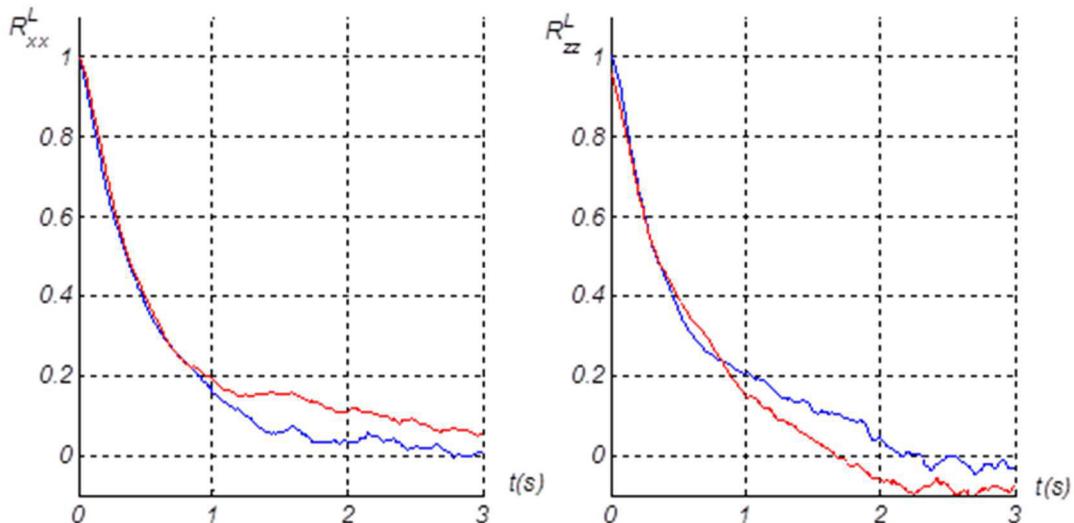


Figure 90: Cas A ($d_p = 5.10^{-5}$ m, plan $L_x/6$) : Décorrélation temporelle lagrangienne. À gauche, décorrélation des vitesses parallèles à la surface libre, à droite décorrélation de la vitesse normale à la surface libre. (Bleu) : sans sédimentation ($\rho_p/\rho_f = 1$), (Rouge) : avec sédimentation ($\rho_p/\rho_f = 0,5$)

Ces écarts de comportements observés sur les courbes de décorrélation temporelle sont observables sur les échelles de décorrélation temporelles pour les particules de plus grands diamètres (Figure 93) : l'échelle temporelle de décorrélation lagrangienne des vitesses normales à la surface libre diminue fortement lorsque la sédimentation est prise en compte.

Certains points de la courbe représentant les échelles de décorrélation dans la direction normale à la surface libre sont nuls lorsque la sédimentation est prise en compte, ils n'ont pas pu être évalués car sur les simulations utilisées pour évaluer la décorrélation temporelle des particules, il n'y a pas eu de particules qui ont permis de générer la statistique voulue : toutes les particules qui étaient situées à une distance inférieure à 3Δ de la surface libre se sont déposées dans un temps trop court pour permettre l'accumulation des statistiques. Cela confirme de plus que la vitesse de sédimentation contrôle le mouvement des particules dans une zone plus importante que celle que l'on peut calculer en prenant en compte les fluctuations de vitesse du fluide.

Cependant, les écarts de comportements observés sur les courbes de décorrélation temporelle ne sont pas observables sur les échelles de décorrélation temporelle pour les particules de petits diamètres (Figure 91 et Figure 92). La méthode qui a été privilégiée ici pour évaluer ces échelles et qui consiste à supposer que le temps de décorrélation temporelle est égal à deux fois le temps nécessaire à la décorrélation temporelle pour être inférieure à $\exp(-0,5)$ est sûrement à l'origine de la non différenciation des deux échelles avec et sans sédimentation. En effet, cette méthode permet de calculer l'échelle de décorrélation temporelle en prenant seulement en compte le début de la courbe pour s'affranchir des effets trop forts induits par le caractère non homogène de la turbulence, or c'est plutôt aux temps longs (supérieurs à 1 seconde) qu'on observe une divergence entre le comportement des particules traceurs et des particules soumises à la sédimentation. La méthode d'évaluation n'est donc peut être simplement pas assez fine pour permettre l'observation de l'impact de la sédimentation sur les échelles de décorrélation temporelle des petites particules.

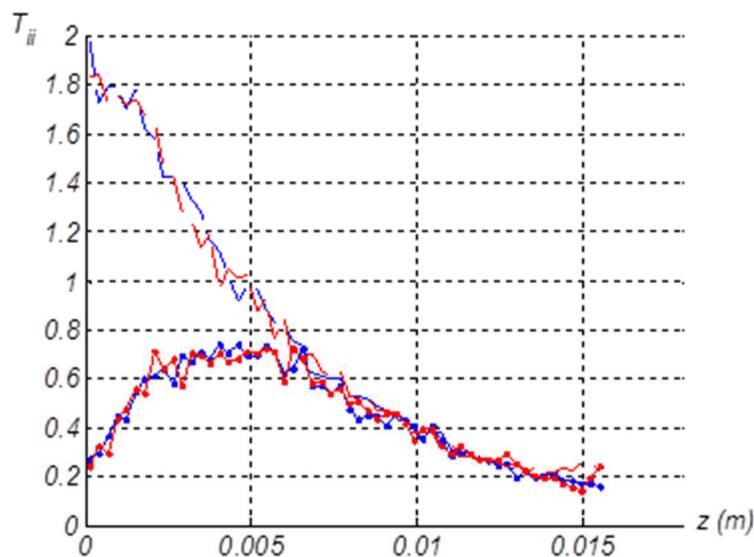


Figure 91 : Cas A ($d_p = 1.10^{-5}$ m, plan $L_z/6$) : Échelle temporelle de décorrélation lagrangienne des particules suivant (tirets --) : les vitesses parallèles à la surface libre, et (points et tirets ._) : la vitesse normale à la surface libre. (Bleu) : ($\rho_p/\rho_f = 1$) sans sédimentation, (Rouge) : ($\rho_p/\rho_f = 0,5$) avec sédimentation

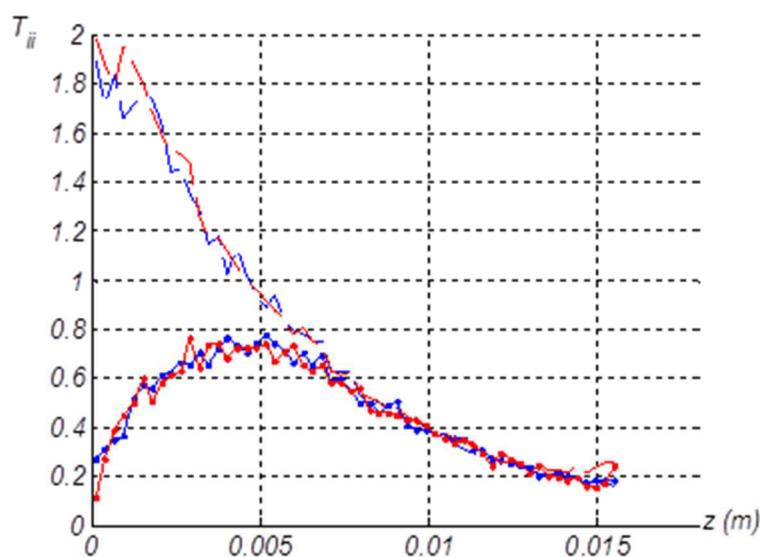


Figure 92 : Cas A ($d_p = 2.10^{-5}$ m, plan $L_z/6$) : Échelle temporelle de décorrélation lagrangienne des particules suivant (tirets --) : les vitesses parallèles à la surface libre, et (points et tirets ._) : la vitesse normale à la surface libre. (Bleu) : ($\rho_p/\rho_f = 1$) sans sédimentation, (Rouge) : ($\rho_p/\rho_f = 0,5$) avec sédimentation

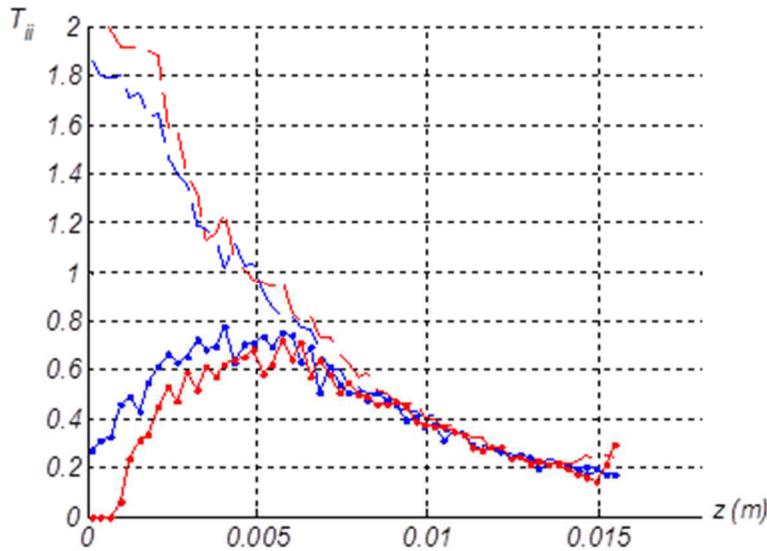


Figure 93 : Cas A ($d_p = 5.10^{-5} \text{ m}$, plan $L_z/6$) : Échelle temporelle de décorrélation lagrangienne des particules suivant (tirets --) : les vitesses parallèles à la surface libre, et (points et tirets .-) : la vitesse normale à la surface libre. (Bleu) : ($\rho_p/\rho_f = 1$) sans sédimentation, (Rouge) : ($\rho_p/\rho_f = 0,5$) avec sédimentation

4.7 Étude du dépôt de particules soumises aux effets de la lubrification

4.7.1 En l'absence de sédimentation

On observe que la vitesse de dépôt des particules soumises à la sédimentation diminue lorsque la lubrification est prise en compte. De plus, de la même façon que pour les particules en apesanteur, un adimensionnement des vitesses de dépôt et des diamètres des particules par les échelles de la turbulence au niveau de la surface libre permet de voir que le dépôt des particules est là encore fortement corrélé aux échelles de la turbulence.

Nous présentons ici des résultats relatifs à deux simulations effectuées à l'aide des cas D et B. Sur cette figure, on peut voir que la prise en compte des effets de la lubrification se traduit par une baisse de la vitesse de dépôt des particules. La vitesse de dépôt croît toujours avec le diamètre de la particule. On note que l'adimensionnement par les échelles de Kolmogorov de surface conduit à une vitesse de dépôt adimensionnée qui varie linéairement avec le diamètre adimensionné des particules : on obtient la même loi d'échelle qu'en l'absence de lubrification, seul le coefficient de proportionnalité change.

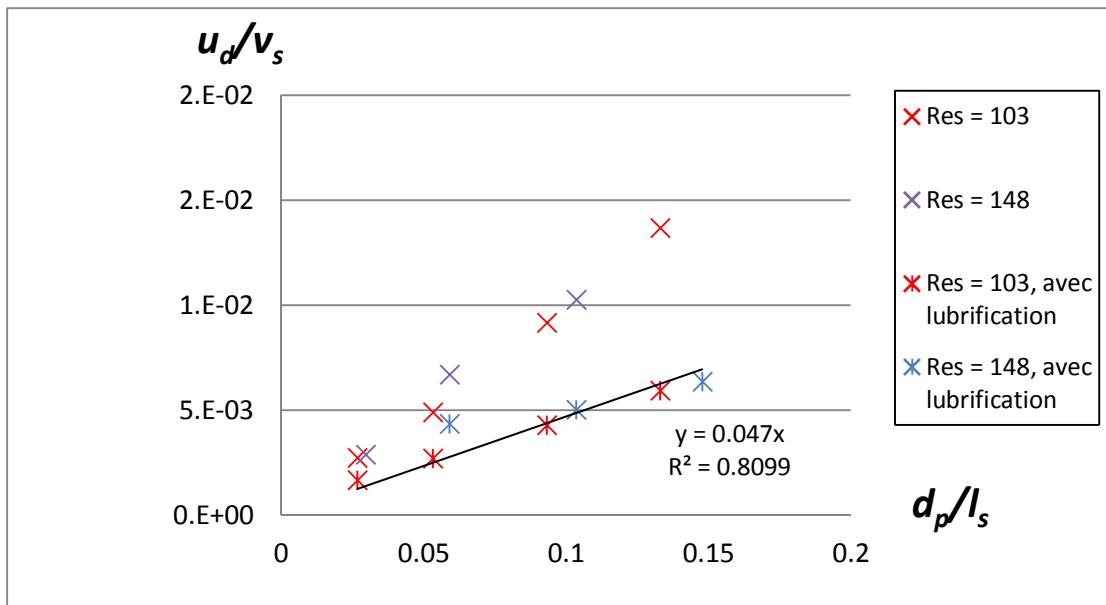


Figure 94 : Vitesse de dépôt adimensionnée sans sédimentation, avec et sans lubrification. L'interpolation linéaire prend en compte tous les points de la simulation des cas B et D ($\text{Re}_s = 103$ et $\text{Re}_s = 148$)

On peut interpoler la vitesse de dépôt, ce qui donne :

$$\frac{u_d}{v_s}^{lub} = 0,047 \left(\frac{d_p}{l_s} \right) \quad (4.67)$$

Concentration des particules

Comme pour les particules en apesanteur non soumises aux effets de la lubrification, les particules étudiées ici voient leur concentration baisser lorsque l'on s'approche de la surface libre.

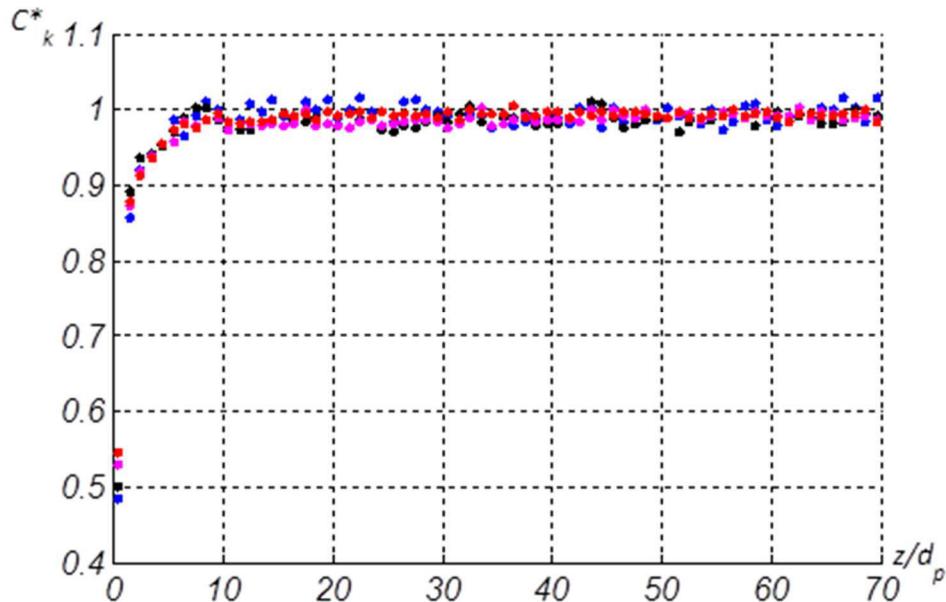


Figure 95 : Cas B (avec lubrification sans sédimentation): Concentration en fonction de la distance à la surface libre. (Bleu) : $d_p = 1.10^{-5} \text{ m}$, (Noir) : $d_p = 2.10^{-5} \text{ m}$, (Magenta) : $d_p = 3.510^{-5} \text{ m}$, (Rouge) : $d_p = 5.10^{-5} \text{ m}$.

4.7.2 Avec sédimentation

Lorsque la lubrification est prise en compte dans le dépôt de particules soumises aux effets de la sédimentation, il est intéressant de noter que la vitesse de dépôt est toujours contrôlée par la vitesse de sédimentation. On observe une légère baisse de la vitesse de dépôt.

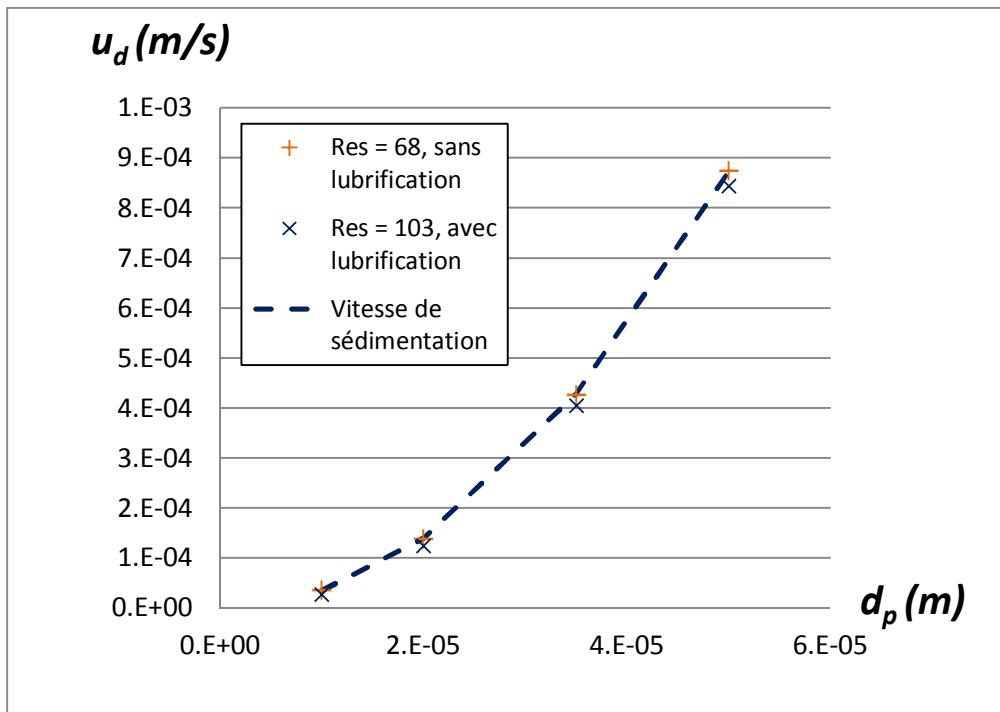


Figure 96 : Vitesse de dépôt soumises à la sédimentation et sans et avec lubrification.

Concentration des particules

La concentration des particules au niveau de la surface libre augmente lorsque la sédimentation et la lubrification sont prises en compte. On rappelle que, contrairement aux particules en apesanteur, les particules soumises à la sédimentation sans les effets de la lubrification ont une concentration uniforme de la zone de forçage jusqu'à la dernière tranche avant la surface libre. L'augmentation de la concentration en particules peut être expliquée de la manière suivante : à l'approche de la surface libre, les fluctuations de la vitesse normale du fluide deviennent négligeables devant la vitesse de sédimentation des particules. Or, le coefficient de frottement introduit dans l'expression de la force de trainée devant la vitesse de la particule augmente et retarde le mouvement de la particule qui voit sa vitesse diminuer. Le nombre de particules étant constant en régime permanent, leur concentration au niveau de la surface libre est donc plus importante.

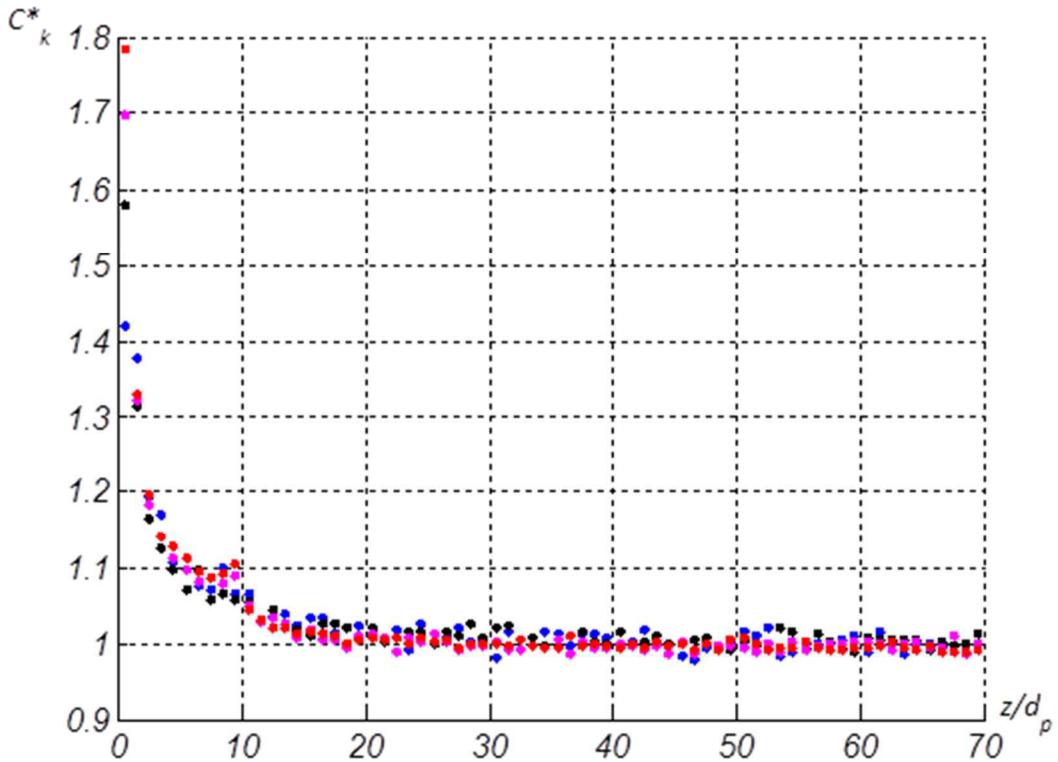


Figure 97 : Cas B (avec lubrification et sédimentation $\rho_p/\rho_f = 0,5$) : Concentration en fonction de la distance à la surface libre. (Bleu) : $d_p=1.10^{-5}$ m, (Noir) : $d_p=2.10^{-5}$ m, (Magenta) : $d_p=3.5.10^{-5}$ m, (Rouge) : $d_p=5.10^{-5}$ m.

4.8 Résumé

Nous avons étudié par simulation numérique directe le dépôt de particules sur une interface libre dans le cas d'un écoulement turbulent de vitesse moyenne nulle s'amortissant au niveau de la surface libre. La résolution de l'écoulement a été développée par Campagne²⁷ et nous avons ainsi pu notamment comparer nos résultats portant sur les caractéristiques de l'écoulement à ses travaux ainsi qu'aux travaux de Bodart⁸⁴. Nous avons en particulier examiné l'anisotropie de l'écoulement à proximité de la surface.

Le suivi lagrangien, développé dans le cadre de nos travaux sur la capture des particules au niveau d'une paroi solide, a été implémenté dans le code de simulation numérique directe via un couplage « *one way* » dans lequel on néglige l'influence des particules sur l'écoulement du fluide porteur, et on ne tient pas compte non plus des interactions entre particules. La plupart de nos simulations ont porté sur des particules dont la masse volumique était du même ordre de grandeur que celle du fluide porteur : il s'avère que les particules se comportent essentiellement comme des traceurs de particules fluides ; la plupart des statistiques évaluées pour les particules sont très proches des statistiques évaluées pour le fluide lui-même. Cependant, très près de l'interface, à l'échelle de quelques diamètres particulaires, on note que le comportement des particules en suspension s'écarte significativement de celui des particules fluides.

Dépôt de particules en l'absence de sédimentation

Les particules se comportent comme des traceurs du fluide jusqu'à leur capture au niveau de l'interface libre : le dépôt s'opère par interception directe. Il est lié aux fluctuations de vitesse normale du fluide à la distance $d_p/2$ de la surface libre. À cette distance, les particules sont situées dans la couche de Kolmogorov. Il apparaît que, quels que soient le nombre de Reynolds de surface et le

diamètre des particules, la vitesse de dépôt adimensionnée par la vitesse de Kolmogorov de surface varie linéairement avec le diamètre des particules adimensionné par la longueur de Kolmogorov de surface suivant la loi :

$$\frac{u_d}{v_s} = 0,097 \left(\frac{d_p}{l_s} \right)$$

En outre, on montre que les forces de nature inertielle, bien que nécessaires pour compenser la force de trainée du fluide dans l'équation de la dynamique des particules, ont très peu d'influence sur la vitesse de dépôt des particules dans le domaine étudié.

Lorsque les interactions hydrodynamiques particule/interface sont prises en compte, la vitesse de dépôt adimensionnée par la vitesse de Kolmogorov de surface varie encore linéairement avec le diamètre des particules adimensionné par la longueur de Kolmogorov de surface. Cependant le coefficient de proportionnalité est inférieur :

$$\frac{u_d}{v_s} = 0,047 \left(\frac{d_p}{l_s} \right)$$

Enfin, l'examen des profils de concentration (avec et sans prise en compte des interactions hydrodynamiques) révèlent une chute de la concentration particulaire au voisinage de l'interface sur une distance de l'ordre de quelques diamètres de particule.

Dépôt des particules soumises à la sédimentation

Lorsque la sédimentation est prise en compte, les résultats portant sur la vitesse de dépôt des particules ainsi que sur les densités de probabilité des forces montrent que la flottabilité a un impact prépondérant sur le comportement des particules ; la vitesse de dépôt est dans ce cas contrôlée par la vitesse de sédimentation des particules. Par contre, à l'aide de l'étude de la concentration des particules dans le domaine et des échelles de décorrélation temporelle, on a pu mettre en avant que ce n'est que très près de l'interface libre que les particules sont contrôlées par la sédimentation tandis qu'il est probable que, dans le reste du domaine, elles se comportent toujours comme des traceurs fluides. Ainsi, la concentration en particules est homogène dans l'ensemble du domaine de simulation. Dans la zone de diffusion de la turbulence, cela s'explique par le fait que le comportement des particules est très proche du comportement du fluide. Très près de la surface libre, les fluctuations turbulentes du fluide deviennent négligeables devant la vitesse de sédimentation des particules : l'écoulement des particules est de type piston avec une vitesse égale à la vitesse de sédimentation et la concentration est uniforme jusqu'à la distance de capture $d_p/2$ de l'interface.

Lorsque la lubrification est prise en compte, la vitesse de dépôt reste contrôlée par la sédimentation. On constate cependant que les interactions hydrodynamiques entre les particules et l'interface diminuent sensiblement la vitesse de dépôt et conduisent à une augmentation de la concentration particulaire à proximité de l'interface.

Il faut noter que le rôle prépondérant de la sédimentation est lié aux faibles nombres de Reynolds atteint dans nos simulations numériques directes. Dans l'industrie, si l'on se réfère aux travaux de Daoud *et al.*⁹, les niveaux de turbulence au niveau de la surface libre sont très élevés. Ainsi près du panache de bulles, le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente et l'énergie cinétique turbulente peuvent atteindre des valeurs respectives de $0,4\text{m}^2/\text{s}^3$ et $0,15\text{m}^2/\text{s}^2$.

Si l'on suppose que l'extrapolation de la vitesse de dépôt est possible pour des valeurs de nombre de Reynolds plus élevé, et qu'on évalue la vitesse de dépôt u_d à l'aide l'équation (4.66) on obtient, pour une inclusion de diamètre $10\mu\text{m}$ une vitesse de dépôt par interception directe de l'ordre de 3.10^{-4}m/s à mettre en balance avec une vitesse de sédimentation de $3,5.10^{-5}\text{m/s}$. Le mécanisme prépondérant dans la capture est alors inversé, comme on avait pu l'observer dans le cas de l'aérosol pour les vitesses pariétales les plus élevées.

Conclusion

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés au transport et au dépôt turbulent de particules non-browniennes en suspension dans une phase liquide dans le contexte de la métallurgie d'élaboration. Plus précisément, nous avons étudié le dépôt turbulent d'inclusions en suspension dans l'acier liquide. Parmi les différentes échelles impliquées dans le processus de dépôt, soient l'échelle macroscopique du procédé et des plus grandes structures de l'écoulement, l'échelle intermédiaire de la couche limite qui se développe au voisinage de la surface de dépôt, l'échelle microscopique des inclusions et l'échelle nanoscopique des interactions physicochimiques entre les inclusions et la surface de dépôt, nous nous sommes placés à l'échelle intermédiaire associée à la couche limite.

Nous avons envisagé deux types de surface de dépôt : l'interface métal liquide/paroi solide et l'interface métal liquide/laitier. Et nous avons développé deux modèles comprenant chacun (i) une description (plus ou moins fine) de l'écoulement du métal liquide dans la couche limite et (ii) un suivi lagrangien des inclusions en suspension (de leur entrée dans la couche limite jusqu'à leur éventuel lieu de capture).

Le suivi lagrangien est la partie commune aux deux modèles. Les inclusions sont considérées comme des particules solides de forme sphérique, non-browniennes (taille supérieure au micromètre) et de taille inférieure à la longueur de Kolmogorov. Leur trajectoire est obtenue en intégrant la relation fondamentale de la dynamique en translation (la rotation n'est pas prise en compte). Les forces considérées sont le poids, la poussée d'Archimède, la force d'accélération en volume, la force de masse ajoutée et la force de traînée. Dans le cas de la paroi solide, nous prenons en compte la force de lift. Le nombre de Reynolds particulaire étant très inférieur à l'unité, la force de traînée (loin de l'interface) est modélisée par la loi de Stokes. Près de l'interface, on prend en compte les interactions hydrodynamiques entre les inclusions et l'interface qui s'opposent à la capture, en incluant les coefficients de frottement dans l'expression de la force de traînée. Dans ce cas, il faut prendre en compte les phénomènes microscopiques qui favorisent la capture, c'est-à-dire la rugosité de la paroi solide ou les forces de Van der Waals. Ces forces variant rapidement avec la distance de séparation particule/interface, la relation fondamentale de la dynamique est intégrée à l'aide d'un schéma prédicteur correcteur d'ordre 3, bien adapté aux systèmes raides. La vitesse du fluide non perturbé à la position de la particule est calculée soit directement soit à l'aide d'une interpolation polynomiale d'Hermite.

Le dépôt turbulent sur une paroi solide a été étudié dans le cas d'un écoulement turbulent en conduite ou en canal. C'est une configuration qui a fait l'objet d'un grand nombre d'investigations dans le cas des aérosols. Nous avons choisi de décrire schématiquement l'écoulement du métal liquide dans la sous-couche visqueuse et dans la zone tampon en nous appuyant sur le modèle de Cleaver et Yates¹⁸. Ce modèle qui a été utilisé à de multiples reprises par Ahmadi^{51,52,74} dans le cas du dépôt turbulent d'aérosols dans un canal, décrit analytiquement la cinématique des structures turbulentes qui apportent le liquide à la paroi (sweeps) et celles qui l'éjectent (bursts). Ces structures sont ici figées dans le temps. Ce modèle simple de mise en œuvre et très rapide en temps de calcul nous a permis de développer et de tester le code de suivi lagrangien. Le flux de particules déposées est évalué à l'aide de la méthode dite de la « trajectoire limite ».

Dans un premier temps, nous avons étudié le dépôt d'aérosols afin de valider notre code de calcul avec des données de la littérature. Nous nous sommes placés dans le cas de particules non-browniennes. Nous avons vérifié que nos résultats numériques concordent avec le modèle semi-empirique de Wood¹⁶ (ajusté sur des données expérimentales de dépôt d'aérosols) qui s'écrit sous forme adimensionnée (en utilisant les unités de paroi construites avec la vitesse de frottement et la viscosité cinématique du fluide) :

$$u_d^+ = 4,5 \cdot 10^{-4} \tau_p^{+2} + \tau_p^+ g^+$$

où u_d^+ est la vitesse de dépôt adimensionnée par la vitesse de frottement, τ_p^+ est le nombre de Stokes de la particule, c'est-à-dire le rapport du temps de relaxation de la particule au temps de paroi. Dans la gamme de nombres de Stokes étudiée, les mécanismes de dépôt prépondérants sont la sédimentation et l'impact inertiel et turbulent, en accord avec la littérature relative aux aérosols. Notons que la contribution de l'impact inertiel et turbulent se caractérise par une dépendance quadratique avec le nombre de Stokes de la particule. Enfin, comme attendu, la prise en compte des interactions hydrodynamiques (lubrification) ne modifie pas la vitesse de dépôt des particules du fait de la faible viscosité dynamique des gaz.

Dans un deuxième temps, nous avons examiné le dépôt turbulent d'inclusions en suspension dans l'acier liquide. Comme pour les aérosols, la sédimentation joue souvent un rôle important dans la capture des particules. Cependant, lorsque l'intensité turbulente de l'écoulement augmente fortement, la sédimentation n'est plus le mécanisme principal de capture : l'interception directe devient prépondérante. De plus, quelle que soit l'intensité turbulente de l'écoulement, les effets inertIELS n'influencent que très peu le dépôt des hydrosols. Ces aspects différencient le comportement des hydrosols de celui des aérosols. À partir de nos simulations numériques (en l'absence de lubrification), nous proposons une loi donnant la vitesse de dépôt en l'absence d'effet gravitaire, correspondant à la contribution de l'interception directe. Cette loi s'écrit sous forme adimensionnée (en utilisant les unités de paroi) :

$$u_d^+ = 0,0188 (\tau_p^+)^{0,84} = 9,3 \times 10^{-4} (d_p^+)^{1,68}$$

où d_p^+ est le rapport du diamètre de la particule à la longueur de paroi. Cette loi est en bon accord avec celle que nous avons obtenue analytiquement à partir des travaux de Hallberg *et al*⁶. et de Davies⁵⁹ :

$$(u_d^+)^{-1} = \frac{8,9^3}{2} \left(\left(\frac{2}{d_p^+} \right)^2 - \frac{1}{25} \right) + \frac{847}{60}$$

Soit :

$$u_d^+ \cong 7 \cdot 10^{-4} d_p^{+2}$$

si le diamètre des particules vérifie la condition $d_p^+ < 10$.

Lorsque les effets de la lubrification sont introduits dans l'équation de la dynamique des particules, nous avons pu observer que, contrairement aux aérosols, la vitesse de dépôt des hydrosols est significativement diminuée. En nous basant sur nos résultats numériques, nous proposons la loi de dépôt suivante qui tient compte des effets de lubrification :

$$u_d^+ \cong \left[\frac{3}{2} \left(\frac{\varepsilon}{d_p} \right)^{0,35} \right] (9,3 \times 10^{-4} (d_p^+)^{1,68}) + \left[0,78 \left(\frac{\varepsilon}{d_p} \right)^{0,29} \right] u_{sed}^+$$

où le premier terme du membre de droite représente la contribution de l'interception directe et le second terme représente celle de la sédimentation. Les termes entre crochets sont les facteurs correctifs associés à la lubrification. Cette loi a été établie pour des vitesses de frottement u_τ comprises entre 0,06 m.s⁻¹ et 0,3 m.s⁻¹, des diamètres de particule adimensionnés d_p^+ compris entre 0,19 et 1,9 (unités de paroi) et une hauteur équivalente de rugosité ε comprise entre 3,9 10⁻⁸ m et 3,9 10⁻⁷ m.

Le deuxième type d'interface que nous avons étudié est l'interface métal liquide/laitier. L'écoulement du métal liquide est calculé par simulation numérique directe à l'échelle de la couche de surface. Nous nous sommes placés dans une configuration simplifiée où l'interface métal liquide/laitier est modélisée par une surface libre plane indéformable. La turbulence est entretenue à distance de l'interface par un forçage aléatoire (vision très simplifiée par rapport au traitement en poche où la turbulence est générée par bullage) et diffuse vers la surface libre. La vitesse moyenne du fluide dans le domaine de simulation est nulle. L'évolution des inclusions en suspension est obtenue par suivi lagrangien à l'aide d'un couplage one-way. Le diamètre des inclusions varie de 10⁻⁵ m à 5.10⁻⁵ m et le rapport entre la densité des particules et la densité du fluide varie de 0,5 (inclusions d'alumine) à 1 (inclusions fictives). L'écoulement vu par les particules est caractérisé par le nombre de Reynolds de surface qui varie de 68 à 235 suivant les simulations.

Nous avons tout d'abord montré que les forces d'origine inertielles ont une influence négligeable sur la vitesse de dépôt des inclusions à l'interface : ceci est en accord avec les faibles valeurs de nombre de Stokes caractérisant les inclusions et concorde avec les résultats obtenus pour le dépôt turbulent

d'inclusions sur une paroi solide. En outre, l'examen de la variance des composantes de la vitesse du fluide, de la vitesse des particules et de la vitesse du fluide vu par les particules montre qu'elles sont superposées : les particules suivent parfaitement les fluctuations du fluide, elles se comportent comme des traceurs du fluide, ce qui corrèle l'effet négligeable des forces inertielles sur le transport et le dépôt des inclusions.

Comme dans le cas de la paroi solide, les mécanismes de dépôt prépondérants sont la sédimentation et l'interception directe. En l'absence d'effet gravitaire, le dépôt d'inclusions est contrôlé par l'interception directe et dépend fortement du nombre de Reynolds de surface. Dans ce cas, nous avons montré que la vitesse de dépôt adimensionnée par la vitesse de Kolmogorov de surface est proportionnelle au diamètre des inclusions adimensionné par la longueur de Kolmogorov de surface :

$$\frac{u_d}{v_s} = 0,097 \left(\frac{d_p}{l_s} \right)$$

Ceci est cohérent avec l'existence au voisinage immédiat de la surface libre d'une sous-couche de Kolmogorov^{27,81,82,89} où la vitesse normale quadratique du fluide suit son comportement asymptotique linéaire (notons que le comportement de la vitesse normale est quadratique au voisinage d'une paroi solide).

Lorsque les effets de lubrification sont pris en compte dans les simulations numériques, il apparaît que la vitesse de dépôt associée à l'interception directe diminue de 40% à 55%. Cependant la linéarité de u_d/v_s avec d_p/l_s semble conservée. Nous proposons la loi de dépôt suivante :

$$\frac{u_d}{v_s} = 0,045 \left(\frac{d_p}{l_s} \right)$$

L'examen des profils de concentration en l'absence d'effet gravitaire montre que la concentration des inclusions est uniforme dans la couche de surface sauf au voisinage direct de l'interface sur une épaisseur de quelques diamètres particulaires : tant que les fluctuations de vitesse locale du fluide sont très supérieures à la vitesse de dépôt des inclusions, la concentration inclusionnaire est homogène.

Dans le cas des inclusions d'alumine, en présence d'effet gravitaire, il apparaît que le dépôt est contrôlé par la sédimentation dans la gamme étudiée de nombres de Reynolds de surface. La contribution de l'interception directe est faible et inférieure d'un ordre de grandeur à la sédimentation. Ainsi, la vitesse de dépôt est approximativement égale à la vitesse de sédimentation de Stokes. La concentration des inclusions est homogène jusqu'à une distance de l'interface égale à la distance de capture soit le rayon des inclusions. Ceci est lié au fait que près de l'interface, la vitesse des sédimentation est très supérieure aux fluctuations de vitesse du fluide conduisant à un écoulement piston des inclusions à la vitesse de Stokes.

Lorsque les interactions hydrodynamiques entre les inclusions et l'interface sont prises en compte, la vitesse de dépôt est faiblement affectée (la lubrification affecte surtout la contribution de l'interception directe). La concentration particulaire est homogène dans la couche de surface à l'exception du voisinage direct de l'interface où la concentration augmente sous l'effet de la lubrification (qui retarde l'approche des inclusions).

Enfin, nous avons estimé la vitesse de dépôt pour des niveaux de turbulence à la surface libre plus élevés, tels que ceux rencontrés industriellement : ainsi près du panache de bulles, le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente et l'énergie cinétique turbulente peuvent atteindre des valeurs respectives de $0,4\text{m}^2/\text{s}^3$ et $0,15\text{m}^2/\text{s}^2$. Si l'on suppose que la loi donnant la contribution de l'interception directe reste valable pour des valeurs de nombre de Reynolds plus élevées, on constate que la vitesse de dépôt pour des inclusions de $10\mu\text{m}$ de diamètre est de l'ordre de 3.10^{-4}m/s soit un ordre de grandeur supérieur à la vitesse de sédimentation qui est de $3,5.10^{-5}\text{m/s}$: le mécanisme de dépôt prépondérant devient donc l'interception directe.

Bibliographie

- ¹ Philibert, J. ; Vignes, A. ; Bréchet, Y. ; Combrade P., *Métallurgie Du Minerai Au Matériau* (Masson Éd., Paris, 1998).
- ² LSG2M - Ecole des Mines de Nancy ; LGPM - Ecole Centrale de Paris ; LEMTA - ESSTIN ; ARMINES/SPIN - Ecole des Mines de Saint Etienne ; ASCOMETAL CREAS ; ARCELOR RESEARCH ; AUBERT & DUVAL, (2006).
- ³ J.-M. Masson, **M 3 625**, (2006).
- ⁴ Y. Miki, Y. Shimada, B.G. Thomas, and A. Denissov, *Iron & Steelmaker* **24**, 31 (n.d.).
- ⁵ D. Sheng, M. Söder, P. Jönsson, and L. Jonsson, *Scandinavian Journal of Metallurgy* **31**, 134 (2002).
- ⁶ M. Hallberg, P.G. Jönsson, T.L.I. Jonsson, and R. Eriksson, *Scandinavian Journal of Metallurgy* **34**, 41 (2005).
- ⁷ H. Arai, K. Matsumoto, S. Shimasaki, and S. Taniguchi, *ISIJ International* **49**, 965 (2009).
- ⁸ T. Bonometti, J. Magnaudet, and P. Gardin, *Metallurgical and Materials Transactions. B, Process Metallurgy and Materials Processing Science* **38**, 739 (n.d.).
- ⁹ I.L.A. Daoud, N. Rimbert, A. Jardy, B. Oesterle, S. Hans, and J.-P. Bellot, *Adv. Eng. Mater.* **13**, 543 (2011).
- ¹⁰ D. Mazumdar and R.I.L. Guthrie, *ISIJ International* **35**, 1 (1995).
- ¹¹ P.G. Jönsson and L.T.I. Jonsson, *ISIJ International* **41**, 1289 (n.d.).
- ¹² B.Y.. Liu and J.K. Agarwal, *Journal of Aerosol Science* **5**, 145 (1974).
- ¹³ W. Kvasnak, G. Ahmadi, R. Bayer, and M. Gaynes, *Journal of Aerosol Science* **24**, 795 (1993).
- ¹⁴ S.K. Friedlander and H.F. Johnstone, *Industrial & Engineering Chemistry* **49**, 1151 (1957).
- ¹⁵ P.R. Owen, *Journal of Fluid Mechanics* **39**, 407 (1969).
- ¹⁶ N.B. Wood, *Journal of Aerosol Science* **12**, 275 (1981).
- ¹⁷ J.T. Davies, *Turbulence Phenomena*, First Edition (Academic Press Inc, 1972).
- ¹⁸ J.W. Cleaver and B. Yates, *Chemical Engineering Science* **30**, 983 (1975).
- ¹⁹ J.W. Brooke, K. Kontomaris, T.J. Hanratty, and J.B. McLaughlin, *Phys. Fluids A* **4**, 825 (1992).
- ²⁰ C. Narayanan, D. Lakehal, L. Botto, and A. Soldati, *Physics of Fluids* **15**, 763 (2003).
- ²¹ G.T. Csanady, *Journal of the Atmospheric Sciences* **20**, 201 (1963).
- ²² O. Simonin, E. Deutsch, and J.P. Minier, *Applied Scientific Research* **51**, 275 (1993).
- ²³ K.D. Squires and J.K. Eaton, *Physics Of Fluids A Fluid Dynamics* **3**, 1169 (1991).
- ²⁴ C. Marchioli, M. Picciotto, and A. Soldati, in *Modelling and Experimentation in Two-Phase Flow*, edited by V. Bertola (Springer-Verlag Wien, Vienna, 2003), pp. 383–429.
- ²⁵ B. Arcen, A. Taniere, and B. Oesterle, *Int. J. Multiph. Flow* **32**, 1326 (2006).
- ²⁶ Y. Pan and S. Banerjee, *Phys. Fluids* **8**, 2733 (1996).
- ²⁷ G. Campagne, *Simulation Numérique Directe de L'interaction Turbulence/surface Libre Pour L'analyse Du Transfert Intercomposantes*, ENSICA, 2006.
- ²⁸ G. Comte-Bellot and C. Bailly, *Turbulence* (CNRS Editions, 2003).
- ²⁹ H. Nasr, G. Ahmadi, and J.B. McLaughlin, *Journal of Fluid Mechanics* **640**, 507 (2009).
- ³⁰ A. Soldati and C. Marchioli, *International Journal of Multiphase Flow* **35**, 827 (2009).
- ³¹ Y. Pan and S. Banerjee, *Physics of Fluids* **9**, 3786 (1997).
- ³² O. Mirgaux, *Modélisation de La Purification de L'aluminium Liquide Par Procédé de Flottation En Cuve Agitée*, Institut National Polytechnique de Lorraine, 20071217.
- ³³ B. Oesterlé, *Ecoulements Multiphasiques : Des Fondements Aux Méthodes D'ingénierie* (Hermes Science Publications, 2006).
- ³⁴ H. Tennekes and J.L. Lumley, *A First Course in Turbulence* (The MIT Press, 1972).
- ³⁵ M.R. Maxey, *Phys. Fluids* **26**, 883 (1983).

- ³⁶ Legendre, (2000).
- ³⁷ C. Tien, *Granular Filtration of Aerosols and Hydrosols* (Butterworth-Heinemann, 1989).
- ³⁸ A.J. Goldman, R.G. Cox, and H. Brenner, *Chemical Engineering Science* **22**, 653 (1967).
- ³⁹ S.L. Goren and M.E. O'Neill, *Chemical Engineering Science* **26**, 325 (1971).
- ⁴⁰ J. Happel, *Low Reynolds Number Hydrodynamics with Special Applications to Particulate Media*. (Prentice-Hall, Englewood Cliffs N.J., 1965).
- ⁴¹ B. van Haarlem, B.J. Boersma, and F.T.M. Nieuwstadt, *Physics of Fluids* **10**, 2608 (1998).
- ⁴² B. Arcen, Etude par simulation numérique directe du comportement et de la dispersion de particules solides en écoulement non homogène isotherme ou anisotherme, Thèse doctorat, [s.n.], 2006.
- ⁴³ A.V. Nguyen and G.J. Jameson, *International Journal of Multiphase Flow* **31**, 492 (2005).
- ⁴⁴ A.V. Nguyen and G.M. Evans, *Journal of Colloid and Interface Science* **273**, 262 (2004).
- ⁴⁵ A.V. Nguyen and G.M. Evans, *International Journal of Multiphase Flow* **28**, 1369 (2002).
- ⁴⁶ G.I. Taylor, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* **120**, 13 (1928).
- ⁴⁷ J.J.M. Magnaudet, in (ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting, Canada, 1997).
- ⁴⁸ G. Segré and A. Silberberg, *Nature* **189**, 209 (1961).
- ⁴⁹ P.G. Saffman, *Journal of Fluid Mechanics* **22**, 385 (1965).
- ⁵⁰ J.B. McLaughlin, *Journal of Fluid Mechanics* **224**, 261 (1991).
- ⁵¹ F.-G. Fan and G. Ahmadi, *Journal of Colloid and Interface Science* **172**, 263 (1995).
- ⁵² F.-G. Fan and G. Ahmadi, *Journal of Aerosol Science* **24**, 45 (1993).
- ⁵³ M. Shams, G. Ahmadi, and H. Rahimzadeh, *Chemical Engineering Science* **55**, 6097 (2000).
- ⁵⁴ Charles Kittel, *Physique de L'état Solide*, Dunod (Paris, 1998).
- ⁵⁵ Y.H. Paik, J.H. Pan, and W.J. Yoon, *Journal of Colloid and Interface Science* **244**, 444 (2001).
- ⁵⁶ Y.H. Paik, W.J. Yoon, and H.C. Shin, *J Colloid Interface Sci* **269**, 354 (2004).
- ⁵⁷ J.N. Israelachvili, *Intermolecular and Surface Forces*, 2nd Revised edition (Academic Press Inc, 1991).
- ⁵⁸ V. Armenio and V. Fiorotto, *Physics of Fluids* **13**, 2437 (2001).
- ⁵⁹ R.D. Cadle, *Science* **157**, 1548 (1967).
- ⁶⁰ A.C. Wells and A.C. Chamberlain, *British Journal of Applied Physics* **18**, 1793 (1967).
- ⁶¹ L. Čerović, G. Lefèvre, A. Jaubertie, M. Féodoroff, and S. Milonjić, *Journal of Colloid and Interface Science* **330**, 284 (2009).
- ⁶² R. Maniero and P. Canu, *Chemical Engineering Science* **62**, 2821 (2007).
- ⁶³ P. Adomeit and U. Renz, *Chemical Engineering Science* **51**, 3491 (1996).
- ⁶⁴ H. Ounis, G. Ahmadi, and J.B. McLaughlin, *Journal of Colloid and Interface Science* **147**, 233 (1991).
- ⁶⁵ H. Ounis, G. Ahmadi, and J.B. McLaughlin, *Phys. Fluids A* **5**, 1427 (1993).
- ⁶⁶ M. Soltani and G. Ahmadi, *Physics of Fluids* **7**, 647 (1995).
- ⁶⁷ S.J. Kline, W.C. Reynolds, F.A. Schraub, and P.W. Runstadler, *Journal of Fluid Mechanics* **30**, 741 (1967).
- ⁶⁸ E.R. Corino and R.S. Brodkey, *Journal of Fluid Mechanics* **37**, 1 (1969).
- ⁶⁹ H.T. Kim, S.J. Kline, and W.C. Reynolds, *Journal of Fluid Mechanics* **50**, 133 (1971).
- ⁷⁰ C.R. Smith and S.P. Metzler, *Journal of Fluid Mechanics* **129**, 27 (1983).
- ⁷¹ P. Ronald L., *Progress in Aerospace Sciences* **37**, 341 (2001).
- ⁷² M. Fichman, C. Gutfinger, and D. Pnueli, *Journal of Aerosol Science* **19**, 123 (1988).
- ⁷³ Y.-L. Wu, C.I. Davidson, and A.G. Russell, *Aerosol Science and Technology* **17**, 231 (1992).
- ⁷⁴ M. Shams, G. Ahmadi, and H. Rahimzadeh, *Journal of Aerosol Science* **32**, 525 (2001).
- ⁷⁵ E.Y. Harper and I.-D. Chang, *Journal of Fluid Mechanics* **33**, 209 (1968).
- ⁷⁶ C.S. Lin, R.W. Moulton, and G.L. Putnam, *Ind. Eng. Chem.* **45**, 636 (1953).
- ⁷⁷ K. Mukai, R. Tsujino, I. Sawada, M. Zeze, and S. Mizoguchi, *Tetsu To Hagane-J. Iron Steel Inst. Jpn.* **85**, 307 (1999).
- ⁷⁸ H.T. Schlichting, *Boundary Layer Theory*, 7th ed. (McGraw-Hill Science/Engineering/Math, 1979).
- ⁷⁹ P. Moin and K. Mahesh, *Annual Review of Fluid Mechanics* **30**, 539 (1998).

- ⁸⁰ V. Eswaran and S.B. Pope, *Computers & Fluids* **16**, 257 (1988).
- ⁸¹ I. Calmet and J. Magnaudet, *Journal of Fluid Mechanics* **474**, 355 (2003).
- ⁸² B.H. Brumley and G.H. Jirka, *Journal of Fluid Mechanics* **183**, 235 (1987).
- ⁸³ K. Alvelius, *Physics of Fluids* **11**, 1880 (1999).
- ⁸⁴ J. Bodart, *Effet de Blocage Dans Un Écoulement Turbulent Non Cisaillé*, Thèse de doctorat, Université de Toulouse, 2009.
- ⁸⁵ I. Iliopoulos and T.J. Hanratty, *J. Fluid Mech.* **392**, 45 (1999).
- ⁸⁶ S. Balachandar and M.R. Maxey, *Journal of Computational Physics* **83**, 96 (1989).
- ⁸⁷ K. Kontomaris, T.. Hanratty, and J.. McLaughlin, *Journal of Computational Physics* **103**, 231 (1992).
- ⁸⁸ J.W. Brooke, T.J. Hanratty, and J.B. McLaughlin, *Physics of Fluids* **6**, 3404 (1994).
- ⁸⁹ G. Campagne, J.-B. Cazalbou, L. Joly, and P. Chassaing, *Physics of Fluids* **21**, 065111 (2009).
- ⁹⁰ M.W. Reeks, *Journal of Aerosol Science* **14**, 729 (1983).
- ⁹¹ M. Caporali, F. Tampieri, F. Trombetti, and O. Vittori, *Journal of Atmospheric Sciences* **32**, 565 (1975).
- ⁹² V. Armenio, U. Piomelli, and V. Fiorotto, *Phys. Fluids* **11**, 3030 (1999).

Annexes

Annexe 1 Coefficients de lubrification en paroi solide

Le tableau ci-dessous présentent les coefficients de frottement rapporté par Tien³⁷ qui nous avons utilisés. Dans le cadre d'une étude prenant en compte la rotation de la particule solide, il faudrait utiliser plus de coefficients que ceux figurant dans le tableau.

δ^+	$f_{ }^1$	$f_{ }^2$	f_{\perp}^1	f_{\perp}^2
∞	1,0	1,0	1,0	1,0
50	-	1,0112	-	-
20	-	1,0276	-	-
9	1,0595	1,059	1,1261	1,1278
7	1,0754	1,075	1,1625	1,1644
5	1,1029	1,1012	1,2279	1,2289
4	-	1,123	-	-
3	1,1620	1,1564	1,3802	1,3708
1,5	1,2847	1,2603	1,7563	1,6641
1	-	1,3315	-	-
0,5	1,5957	1,4527	3,2054	2,2869
0,1	2,2642	1,6327	11,359	2,9548
0,05	2,5986	1,6648	21,586	3,0839
0,01	3,4216	1,6931	101,9	3,1989
0,005	3,7867	1,6965	202,03	3,2142
0,001	4,6430	1,7003	1002,34	3,2281
0	∞	1,7010	∞	3,2295

Annexe 2 Équation du champ de vitesse

Les équations permettant de décrire le burst à une paroi solide sont⁵¹ :

$$\mathbf{u}_f^+ = \begin{cases} \mathbf{u}_{f/x}^+ = \frac{1}{0,075} \tanh(0,075z^+) \\ \mathbf{u}_{f/y}^+ = \frac{11}{16} \left(\frac{2A}{\Lambda^+} \right) \left(\frac{2z^+}{\Lambda^+} \right)^{-\frac{5}{16}} \sin\left(\frac{2\pi z^+}{\Lambda^+}\right) \sin\left(\frac{2\pi y^+}{\Lambda^+}\right) + \\ \quad A \left(\frac{2\pi}{\Lambda^+} \right) \left(\frac{2z^+}{\Lambda^+} \right)^{11/16} \cos\left(\frac{2\pi z^+}{\Lambda^+}\right) \sin\left(\frac{2\pi y^+}{\Lambda^+}\right) \\ \mathbf{u}_{f/z}^+ = -A \left(\frac{2\pi}{\Lambda^+} \right) \left(\frac{2z^+}{\Lambda^+} \right)^{11/16} \sin\left(\frac{2\pi z^+}{\Lambda^+}\right) \cos\left(\frac{2\pi y^+}{\Lambda^+}\right) \end{cases} \quad (0.1)$$

où Λ^+ est la distance moyenne adimensionnée entre deux bursts et vaut 100 et A est une constante déterminée à partir de la valeur de la vitesse du fluide le long d'une paroi solide, $A = 34,7$.

Annexe 3 Schéma d'Adams Moulton d'ordre 3

Dans ce schéma, différentes étapes distinctes se suivent pour résoudre l'équation

$$\frac{d^2 \mathbf{x}_p(x_{px}, x_{py}, x_{pz}, t)}{dt^2} = f \left(\mathbf{x}_p(x_{px}, x_{py}, x_{pz}, t), \frac{d\mathbf{x}_p(x_{px}, x_{py}, x_{pz}, t)}{dt}, t \right)$$

où $\mathbf{x}_p(x_{px}, x_{py}, x_{pz}, t)$ est le vecteur position à l'instant t de la particule qui était située au point de coordonnées (x_{px}, x_{py}, x_{pz}) et les dérivées que l'on prend ici en compte sont les dérivées du vecteur position suivant la trajectoire de la particule. Le schéma d'Adams Moulton permet de déterminer la position, la vitesse et l'accélération de la particule à l'instant $t' = t + h$ lorsque l'on connaît à l'instant précédent t la position de la particule $\mathbf{x}_p(t)$, sa vitesse $\frac{d\mathbf{x}_p(t)}{dt}$ et son accélération $\frac{d^2\mathbf{x}_p(t)}{dt^2}$ ainsi qu'une valeur de son accélération à deux instants précédents $\frac{d^2\mathbf{x}_p(t-h)}{dt^2}$

- Étape de prédiction de la position $\hat{\mathbf{x}}_p$ de la particule

$$\hat{\mathbf{x}}_p = \mathbf{x}_p(t) + h \frac{d\mathbf{x}_p(t)}{dt} + h^2 \frac{2}{3} \frac{d^2\mathbf{x}_p(t)}{dt^2} - h^2 \frac{1}{6} \frac{d^2\mathbf{x}_p(t-h)}{dt^2} \quad (0.2)$$

- Application des conditions périodiques du domaine (test de sorties des particules)
- Évaluation des forces $d^2\hat{\mathbf{x}}_p/dt^2$ à la position prédite de la particule
- Étape de correction pour évaluer la position et la vitesse de la particule à $t' = t + h$

$$\mathbf{x}_p(t+h) = \mathbf{x}_p(t) + h \frac{d\mathbf{x}_p(t)}{dt} + h^2 \frac{1}{6} \frac{d^2\hat{\mathbf{x}}_p}{dt^2} + h^2 \frac{1}{3} \frac{d^2\mathbf{x}_p(t)}{dt^2} \quad (0.3)$$

$$\frac{d\mathbf{x}_p(t+h)}{dt} = \mathbf{x}_p(t+h) - \mathbf{x}_p(t) + h^2 \frac{1}{3} \frac{d^2\mathbf{x}_p(t-h)}{dt^2} + h^2 \frac{1}{6} \frac{d^2\mathbf{x}_p(t)}{dt^2} \quad (0.4)$$

- Application des conditions périodiques du domaine (test de sorties des particules)

Annexe 4 Résolution du champ fluide

4.1 Symétrie et périodicité

La méthode choisie pour la résolution de l'équation de Navier Stokes est une méthode pseudo spectrale qui nécessite une périodicité suivant les trois directions. En x et y cela ne pose pas de problème, par contre dans la direction z , normale aux surfaces libres, il faut définir les fonctions en dehors du domaine de calcul pour satisfaire cette condition. Pour cela, le plan $z = \text{interface libre}$ est assimilé à un plan de symétrie ou d'anti symétrie pour chaque fonction $\phi(x, t)$ considérée. L'image de la fonction par rapport au plan $z = \text{interface libre}$ permet alors de définir une périodicité de la fonction de période $2L_z$ sans induire de biais entre les deux domaines de diffusion de la turbulence. Ainsi, si on considère $\phi(z, t)$ fonction monodimensionnelle, on obtient par exemple :

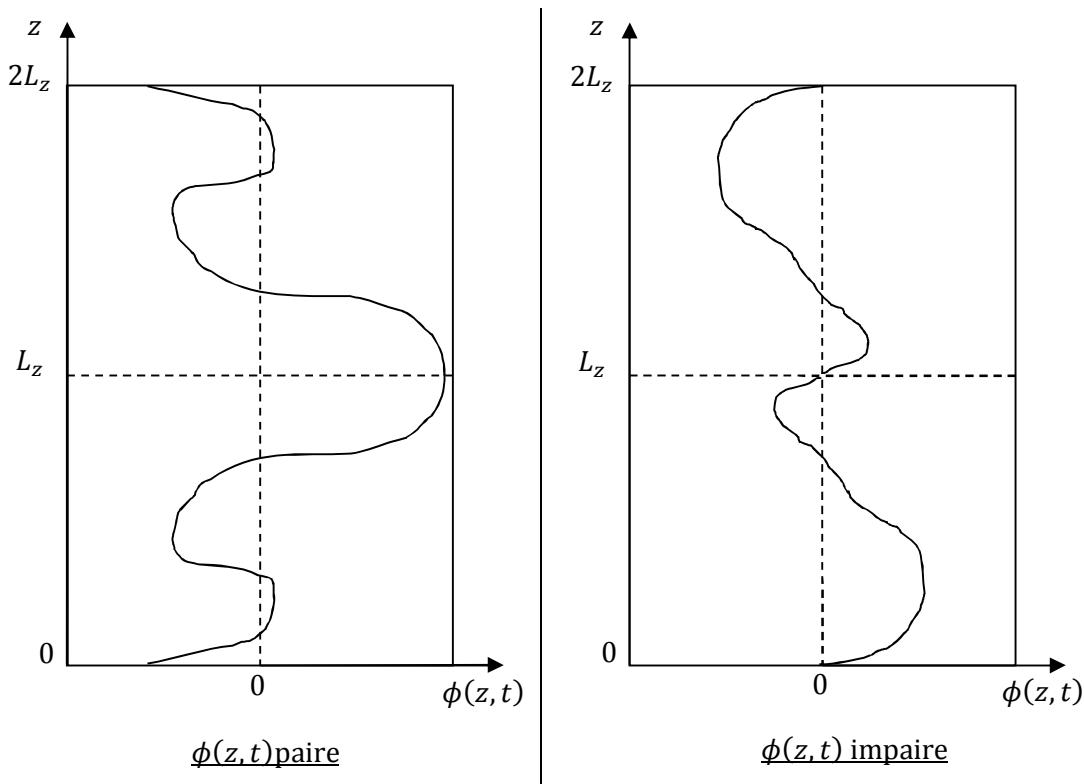


Figure 98 : Définition du plan de symétrie au niveau de l'interface libre

Seule la partie de la fonction située en $z < L_z$ est effectivement résolue dans le code. La parité des champs de vitesses est choisie en fonction des conditions à respecter au niveau de l'interface libre. Les conditions d'imperméabilité et d'absence de frottement sont à l'interface $z = i$:

$$w|_{z=i} = 0; \quad \left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)_{z=i} = 0; \quad \left(\frac{\partial v}{\partial z}\right)_{z=i} = 0 \quad (0.5)$$

Ce qui donne :

Fonction paires	Fonctions impaires
u, v, p	w, ω_x, ω_y

Tableau 10 : Parités des champs de vitesse et de vorticité

La parité d'un champ est conservée lorsqu'il est dérivé par rapport à x et y . Par contre, la parité du champ et de son gradient en z sont opposés.

4.2 Schéma numérique

Il existe deux méthodes principales pour la DNS. La première est l'utilisation de schéma aux différences finies et la deuxième, la plus ancienne, est l'utilisation d'une méthode pseudo spectrale. C'est cette dernière méthode qui est utilisée ici, ce qui impose donc que l'écoulement soit périodique dans au moins deux des trois directions (nous verrons que, pour les calculs, l'écoulement est même ici périodique suivant les trois directions).

La résolution des équations de Navier Stokes, qui sont des équations continues, nécessitent de passer par une phase de discréétisation temporelle et spatiale pour permettre leur résolution numérique.

4.3 Discréétisation temporelle

Le schéma temporel choisi par Campagne²⁷ est un schéma en trois sous pas de temps semi implicite dans lequel les termes convectifs sont traité par un schéma de type Runge Kutta d'ordre trois tandis que les termes visqueux sont traités par un schéma de Crank Nicholson.

L'expression des équations de Navier Stokes est légèrement modifiée pour la résolution :

$$\frac{\partial \mathbf{u}_f}{\partial t} = \mathbf{u}_f \times \boldsymbol{\omega}_f - \nabla \Pi + v \Delta \mathbf{u}_f$$

avec $\boldsymbol{\omega}_f$ rotationnel du champ de vitesse $\boldsymbol{\omega}_f = \nabla \times \mathbf{u}_f$

$$\Pi = \frac{p}{\rho_f} + \frac{\mathbf{u}_f^2}{2}$$

Si on nomme n et $n+1$ deux temps consécutifs, le schéma fait donc intervenir deux champs intermédiaires p de telle sorte que $\mathbf{u}_f^n = \mathbf{u}_f^{p=0}$ et $\mathbf{u}_f^{n+1} = \mathbf{u}_f^{p=3}$. Les champs sont déduits les uns des autres suivant l'équation :

$$\frac{\mathbf{u}_f^p - \mathbf{u}_f^{p-1}}{\Delta t} = \alpha_p \mathbf{u}_f^{p-1} \times \boldsymbol{\omega}_f^{p-1} + \beta_p \mathbf{u}_f^{p-2} \times \boldsymbol{\omega}_f^{p-2} - \gamma_p \nabla \Pi^p + \frac{1}{2} \gamma_p (v \Delta \mathbf{u}_f^{p-1} + v \Delta \mathbf{u}_f^p) \quad (0.6)$$

Les coefficients qui apparaissent dans (0.6) sont :

$$\begin{cases} \alpha_1 = 8/15 \\ \alpha_2 = 5/15 \\ \alpha_3 = 3/4 \end{cases} \quad \begin{cases} \beta_1 = 0 \\ \beta_2 = -17/60 \\ \beta_3 = -5/12 \end{cases} \quad (0.7)$$

et le troisième terme est la somme des premiers $\gamma_p = \alpha_p + \beta_p$

A chaque étape de calcul, le terme de pression doit être évalué. Pour cela, l'équation de Poisson

$$\nabla^2 \Pi = -\nabla(\mathbf{u}_f \times \boldsymbol{\omega}_f) \quad (0.8)$$

est résolue à l'aide d'un schéma en trois sous pas de temps :

$$\frac{\mathbf{u}_{f*}^p - \mathbf{u}_f^{p-1}}{\Delta t} = \alpha_p \mathbf{u}_f^{p-1} \times \boldsymbol{\omega}_f^{p-1} + \beta_p \mathbf{u}_f^{p-2} \times \boldsymbol{\omega}_f^{p-2} + \frac{1}{2} \gamma_p (v \Delta \mathbf{u}_f^{p-1} + v \Delta \mathbf{u}_f^p) \quad (0.9)$$

$$\frac{\mathbf{u}_{f**}^p - \mathbf{u}_{f*}^p}{\Delta t} = \gamma_p \nabla \Pi^{p-1} \quad (0.10)$$

$$\frac{\mathbf{u}_f^p - \mathbf{u}_{f**}^p}{\Delta t} = -\gamma_p \nabla \Pi^p \quad (0.11)$$

A partir de l'équation (0.11) et en simplifiant par la nullité de la divergence du champ de vitesse, on obtient finalement pour le champ de pression

$$\Delta \Pi^p = \frac{1}{\gamma_p \Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}_{f**}^p \quad (0.12)$$

4.4 Discréétisation spatiale

Une partie des calculs pour la résolution de l'équation de Navier Stokes est effectuée dans l'espace spectral, espace dual de l'espace physique. A partir d'un champ périodique $\phi(\mathbf{x}, t)$ dont les valeurs sont situées dans l'espace physique, on peut calculer une représentation $\hat{\phi}(\mathbf{k}, t)$ dans l'espace dual grâce à la transformation de Fourier discréétisée spatiale. Les équations de transformations reliant les deux fonctions s'écrivent :

$$\hat{\phi}(\mathbf{k}, t) = \sum_{\mathbf{x} \in M} \phi(\mathbf{x}, t) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \quad (0.13)$$

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k} \in \widehat{M}} \hat{\phi}(\mathbf{k}, t) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \quad (0.14)$$

Les équations précédentes sont en fait des approximations des fonctions $\phi(\mathbf{x}, t)$ et $\hat{\phi}(\mathbf{k}, t)$ continues. Le passage du domaine physique au domaine dual de la fonction $\phi(\mathbf{x}, t)$ par la transformation de Fourier discrétisée, nécessite la définition de cette fonction sur un maillage régulier M de dimension $\mathbf{N} = (N_x, N_y, N_z)$ où N_x, N_y et N_z sont des entiers. En accord avec les algorithmes numériques, nous considérerons des entiers pairs. Les coordonnées $\mathbf{x}_M = (x_p, y_p, z_p)$ d'un point M sont définies par

$$\begin{cases} x_p = \frac{p_x L_x}{N_x} \text{ où } p_x \in [0, \dots, N_x] \\ y_p = \frac{p_y L_y}{N_y} \text{ où } p_y \in [0, \dots, N_y] \\ z_p = \frac{p_z L_z}{N_z} \text{ où } p_z \in [0, \dots, N_z] \end{cases} \quad (0.15)$$

Où $\mathbf{L} = (L_x, L_y, L_z)$ est le vecteur des périodes spatiales du champ ϕ .

Dans l'espace de Fourier, les points sont situés de la même façon sur une grille de nombres d'onde \widehat{M} . Tout point $\mathbf{k}_d = (k_x, k_y, k_z)$ de \widehat{M} est défini par :

$$\begin{cases} k_x = \frac{2\pi q_x}{L_x} \text{ où } q_x \in [-\frac{N_x}{2}, \dots, \frac{N_x}{2} - 1] \\ k_y = \frac{2\pi q_y}{L_y} \text{ où } q_y \in [-\frac{N_y}{2}, \dots, \frac{N_y}{2} - 1] \\ k_z = \frac{2\pi q_z}{L_z} \text{ où } q_z \in [-\frac{N_z}{2}, \dots, \frac{N_z}{2} - 1] \end{cases} \quad (0.16)$$

Le module du vecteur d'onde du point de coordonnées $\mathbf{k}_d = (k_x, k_y, k_z)$ est $|\mathbf{k}_d| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$.

L'avantage principal des calculs dans le domaine spectral est la facilité avec laquelle les dérivées des fonctions peuvent être calculées. Pour un signal monodimensionnel, on montre que :

$$\begin{cases} \frac{\partial \hat{\phi}(k, t)}{\partial x} = ik\hat{\phi}(k, t) \\ \frac{\partial^2 \hat{\phi}(k, t)}{\partial x^2} = -k^2\hat{\phi}(k, t) \end{cases} \quad (0.17)$$

Ainsi, dans le domaine spectral, le calcul des dérivées spatiales devient donc un calcul local en nombre d'onde, ce qui simplifie considérablement les calculs. Cependant, dans le code de calcul numérique, les fonctions symétriques sont décomposées en une somme de fonction cosinus tandis que les fonctions antisymétriques correspondront à une somme de fonction sinus. Ceci implique un traitement légèrement différent dans le calcul des dérivées des fonctions symétriques et antisymétriques.

4.5 Méthode pseudo spectrale

La méthode de résolution de l'équation de Navier Stokes est appelé méthode pseudo spectrale car tous les calculs ne sont pas effectués dans le domaine dual présenté précédemment. Le calcul des termes non linéaires est très coûteux dans le domaine dual, ainsi ils seront calculés dans le domaine physique tandis que les dérivées seront avantageusement évaluées dans le domaine spectrale. Le passage du domaine physique au domaine spectral est effectué à l'aide des transformées de Fourier rapides (FFT3).

Annexe 5 Concentration des particules dans les plans perpendiculaires à la surface libre

On peut évaluer la concentration des particules situées dans des tranches de domaine délimitées par des plans perpendiculaires à la surface libre. Les figures ci-dessous permettent de voir que la concentration est homogène dans ces plans, comme attendu du fait de la configuration du domaine de calcul, il n'y a pas d'évolution dans les plans perpendiculaires à la surface libre.

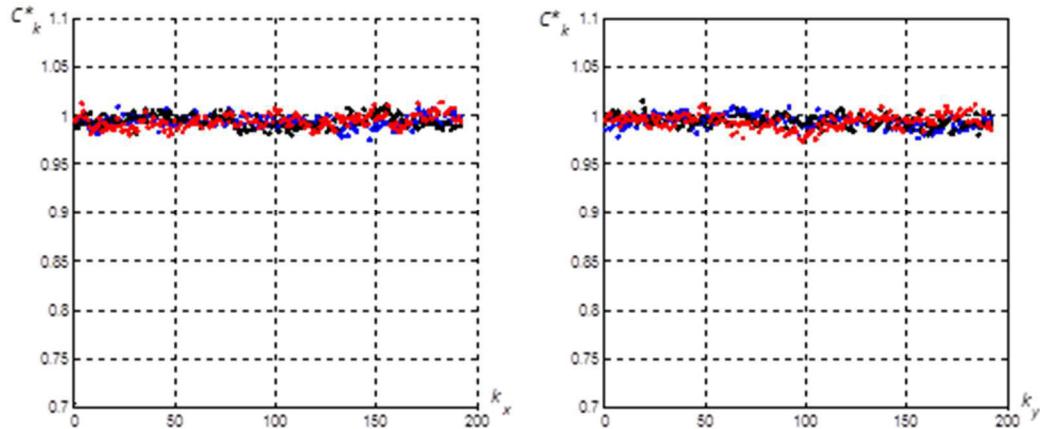


Figure 99 : Cas A ($\rho_p/\rho_f = 1$) : Concentration normalisée des particules situées dans des plans perpendiculaires à la surface libre à une distance exprimé en z/d_p de celle-ci et évaluée spécifiquement à proximité de la surface libre. (Bleu) : $d_p=1.10^{-5}$ m, (Noir) : $d_p=2.10^{-5}$ m, (Rouge) : $d_p=5.10^{-5}$ m

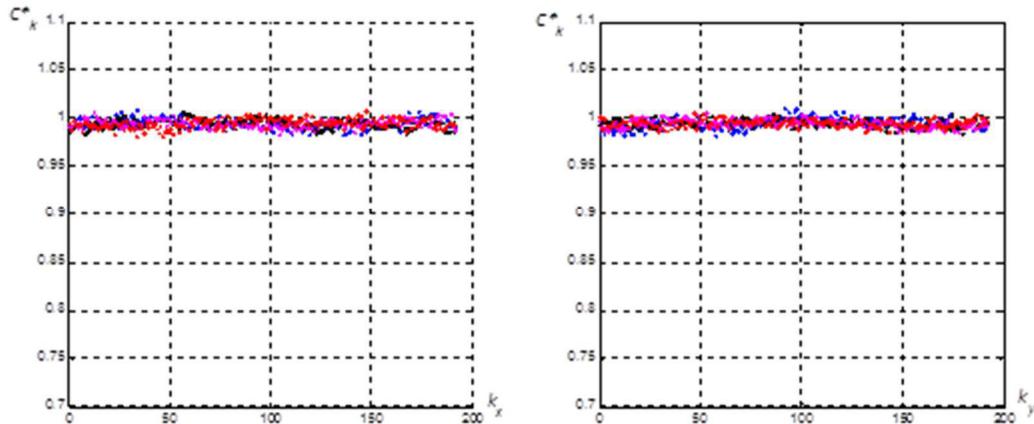


Figure 100 : Cas B ($\rho_p/\rho_f = 1$) : Concentration normalisée des particules situées dans des plans perpendiculaires à la surface libre à une distance exprimé en z/d_p de celle-ci et évaluée spécifiquement à proximité de la surface libre. (Bleu) : $d_p=1.10^{-5}$ m, $d_p=2.10^{-5}$ m, (Rouge) : $d_p=5.10^{-5}$ m

Annexe 6 Calcul du coefficient de diffusion par interpolation de la dispersion par un polynôme

Pour obtenir une valeur du coefficient de diffusion qui s'affranchisse du choix de l'intervalle temporel, nous avons aussi interpolé la dispersion par un polynôme qui a ensuite été dérivé pour calculer le coefficient de dispersion à l'aide de la formule (4.62). La Figure 101 présente la dispersion des particules comparé à l'interpolation polynomiale utilisée.

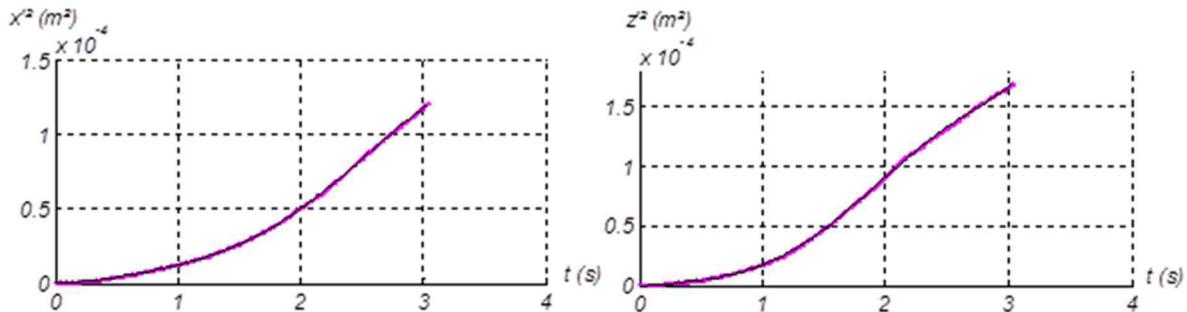


Figure 101 : Cas A ($\rho_p/\rho_f = 1$, $d_p=1.10^{-5}$ m, plan n6) : (Points magenta .) : Dispersion de particules en fonction du temps. (Traits pleins noirs -) : Interpolation de la dispersion par un polynôme de degré 6.

La Figure 102 présente les coefficients de dispersion calculé à l'aide des deux formules présentées ci-dessus. Les courbes en tirets présentent le coefficient de dispersion calculé en dérivant la dispersion des particules au cours du temps. Elles varient au cours du temps car la dispersion varie au cours du temps et on remarque que la dérivée du polynôme ne tend pas non plus vers une constante aux temps longs. Les lignes horizontales représentent le coefficient de diffusion évalué à l'aide de l'échelle de décorrélation temporelle. En turbulence homogène, le coefficient de diffusion évalué par la dérivée de la dispersion devrait donc tendre vers le coefficient de diffusion représenté par des horizontales.

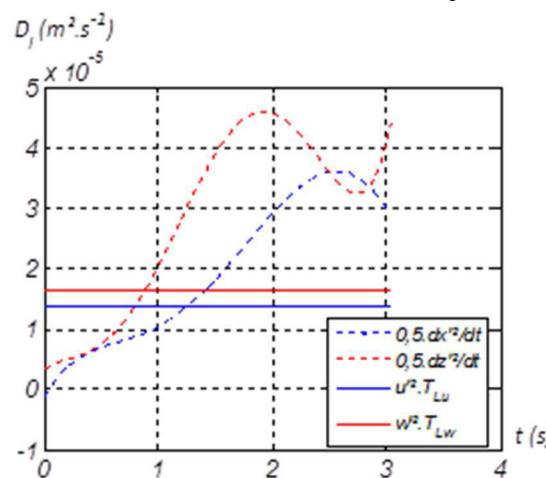


Figure 102 : Cas A ($\rho_p/\rho_f = 1$, $d_p=1.10^{-5}$ m, plan Lz/6) : Coefficient de dispersion des particules évaluée à partir des deux formules présentées