
Validation

Sommaire

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

IV – 1 Introduction

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

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

IV – 2 Valeurs théoriques

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

IV – 2.1 Saut de pression à travers le lit

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

C'est à dire :

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

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

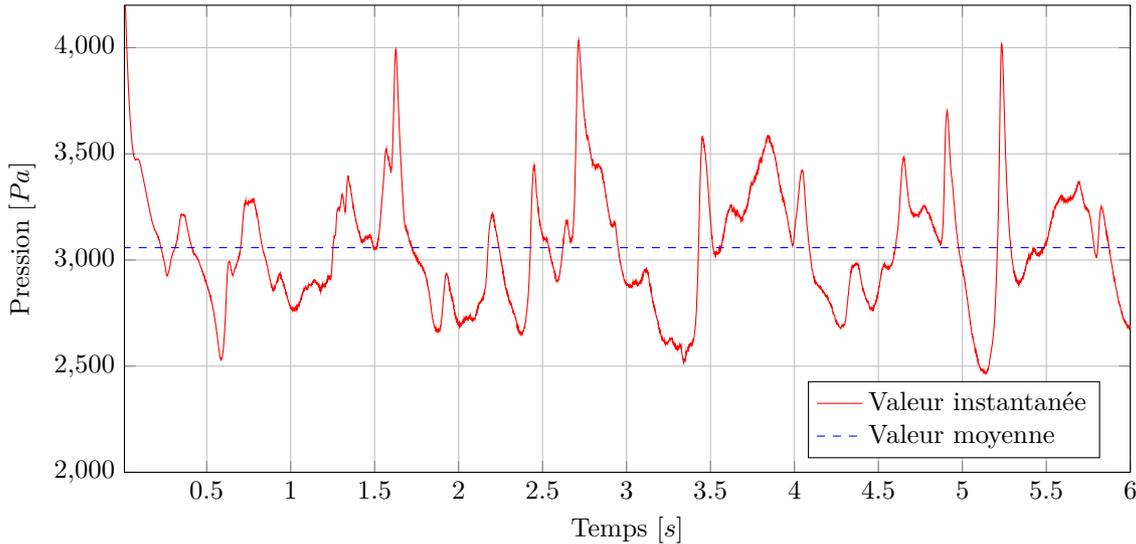


FIGURE IV.1 – Oscillations de la pression dynamique du fluide (air) sur la face d'entrée du réacteur pour $U_{in} = 2U_{mf}$. Propriétés du système données dans le tableau IV.1

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

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

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

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

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

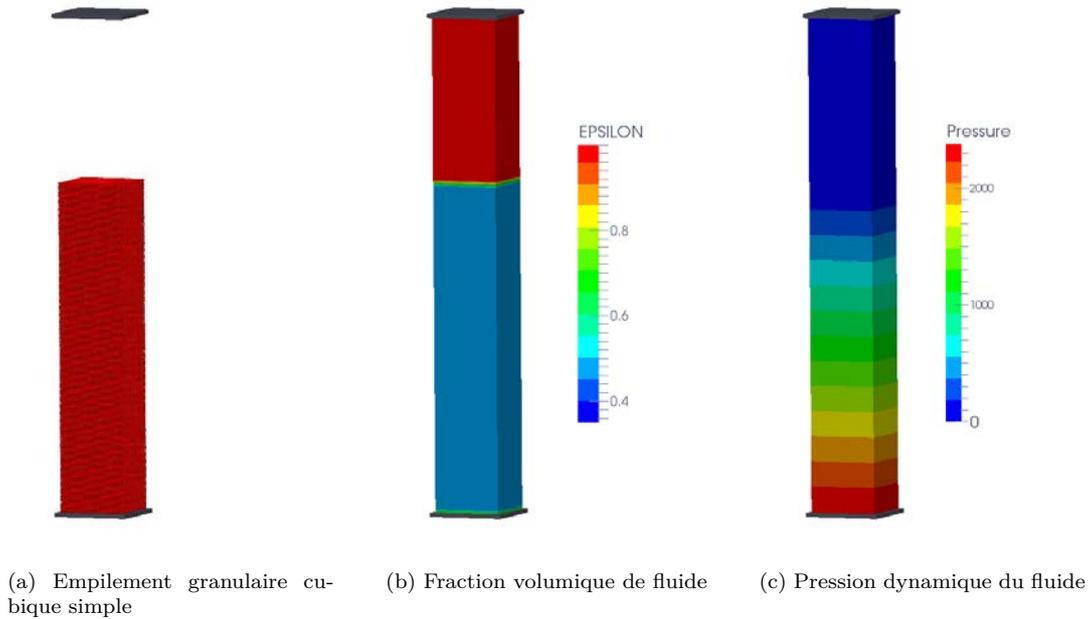


FIGURE IV.2 – Ecoulement à travers un lit fixe de $40 \times 40 \times 200$ particules empilées selon un arrangement cubique simple

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

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

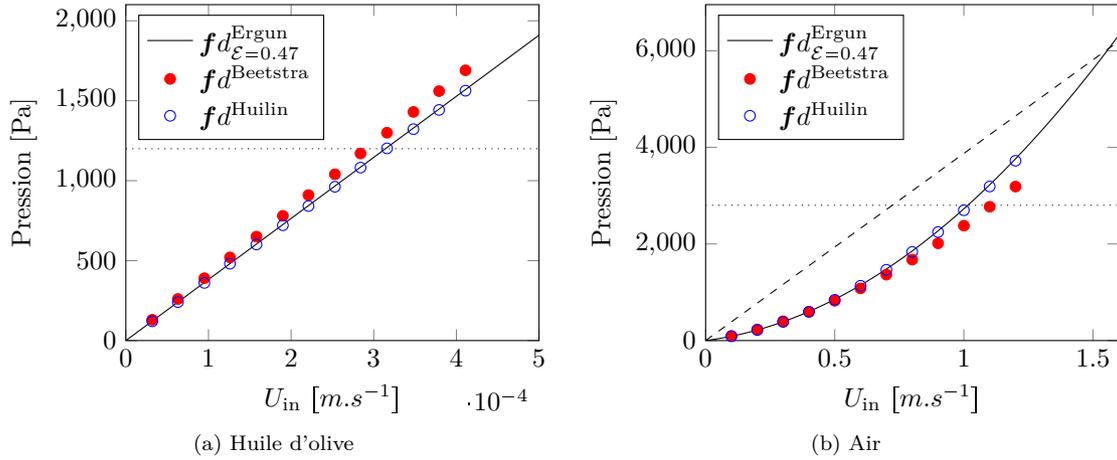


FIGURE IV.3 – Evolution du saut de pression à travers le lit en fonction de la vitesse d'entrée du fluide. Les paramètres de simulation \mathcal{E} sont présentés dans les tableaux IV.1-(a) et (b)

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

IV – 2.2 Vitesse minimale de fluidisation

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

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

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

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

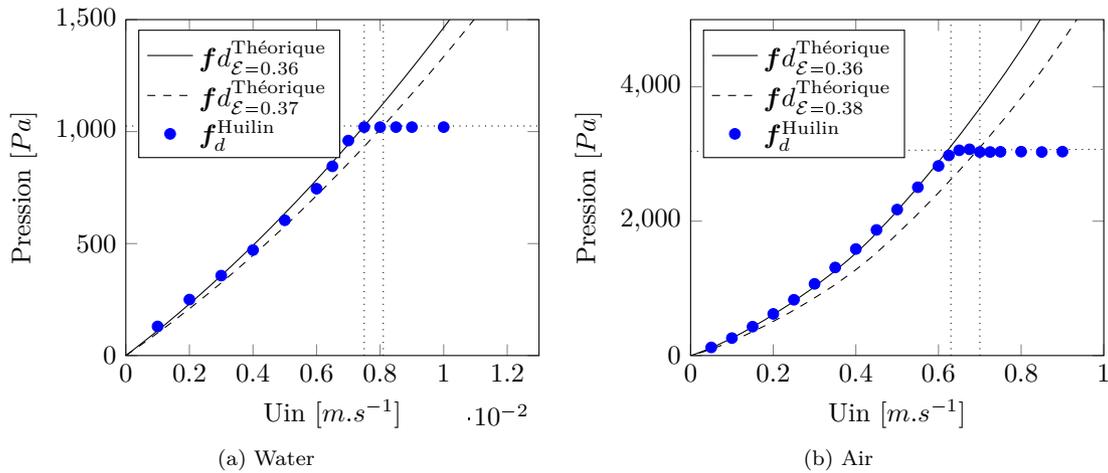


FIGURE IV.4 – Evolution du saut de pression à travers le lit en fonction de la vitesse d'entrée du fluide. Les paramètres de simulation sont présentés dans le tableau IV.1.

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

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

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

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

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

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

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

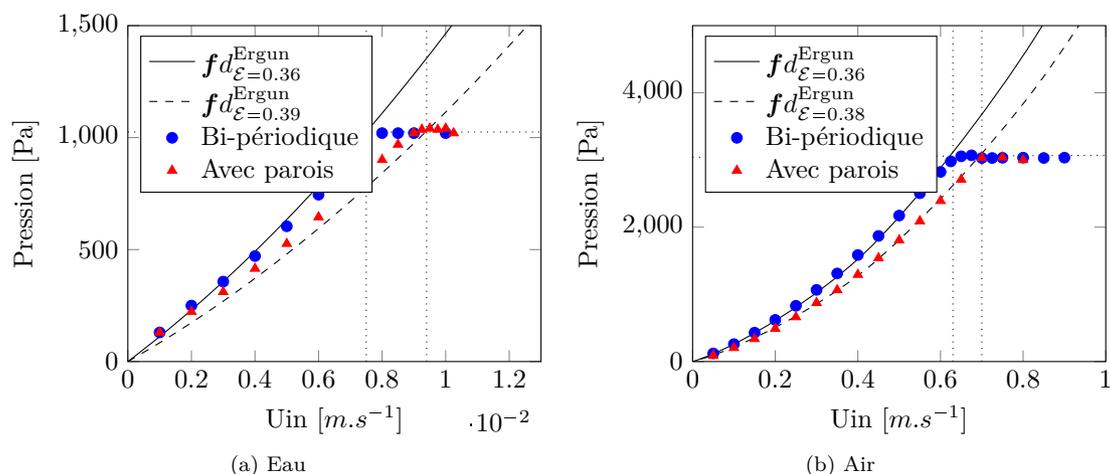


FIGURE IV.5 – Evolution du saut de pression à travers le lit en fonction de la vitesse d'entrée du fluide. Les paramètres de simulation sont présentés dans le tableau IV.1, la formulation employée pour la loi de traînée est celle de Huilin *et al.* [107]

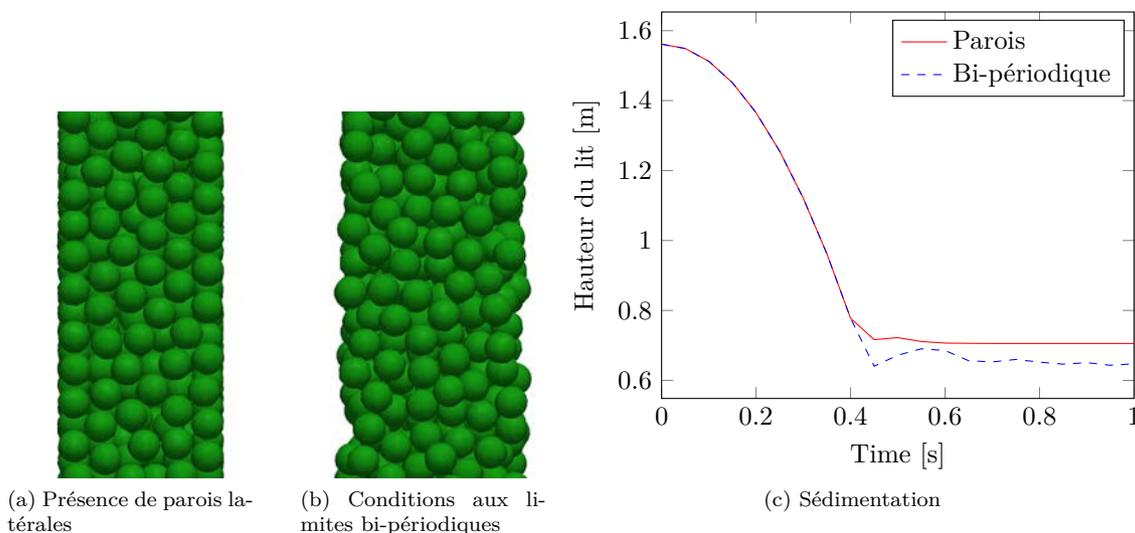


FIGURE IV.6 – Illustration de la présence de murs sur la compacité d'un lit de particules lors d'une sédimentation

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

IV – 3 Lits pulsés

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

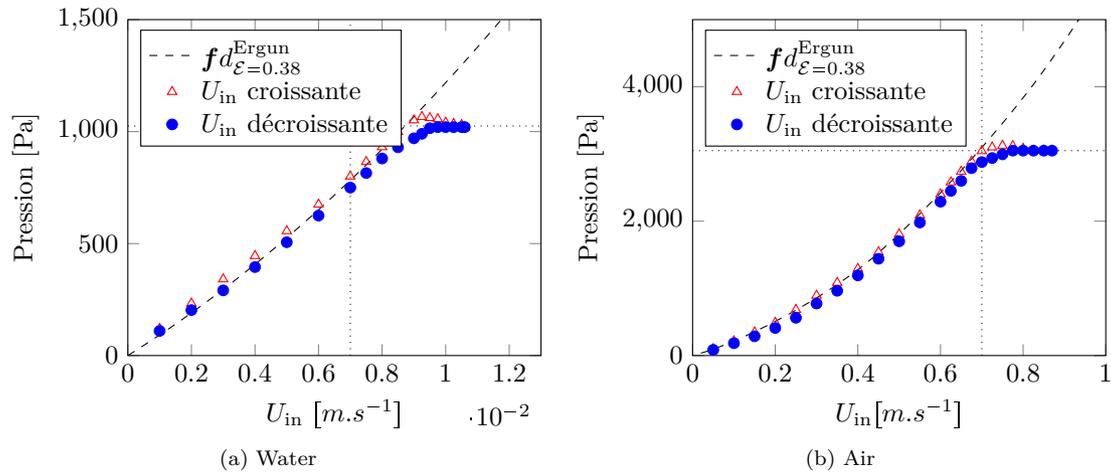


FIGURE IV.7 – Evolution du saut de pression à travers le lit en fonction de la vitesse d'entrée du fluide. Les paramètres de simulation sont présentés dans le tableau IV.1

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

IV – 3.1 Détails sur les lits pulsés

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

IV – 3.1.1 Vitesses dans les lits fluidisés

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

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

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

IV – 3.1.2 Configuration étudiée

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

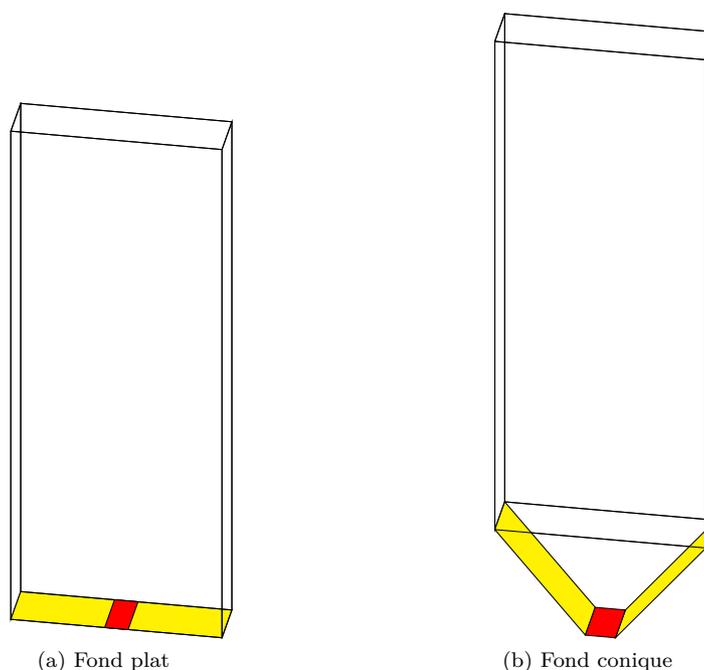


FIGURE IV.8 – Lits fluidisés “2,5 D” communément employés pour les études expérimentales. En jaune, la face inférieure du réacteur ; en rouge, la surface d’injection du fluide

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

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

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

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

IV – 3.1.2.b Particules employées

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

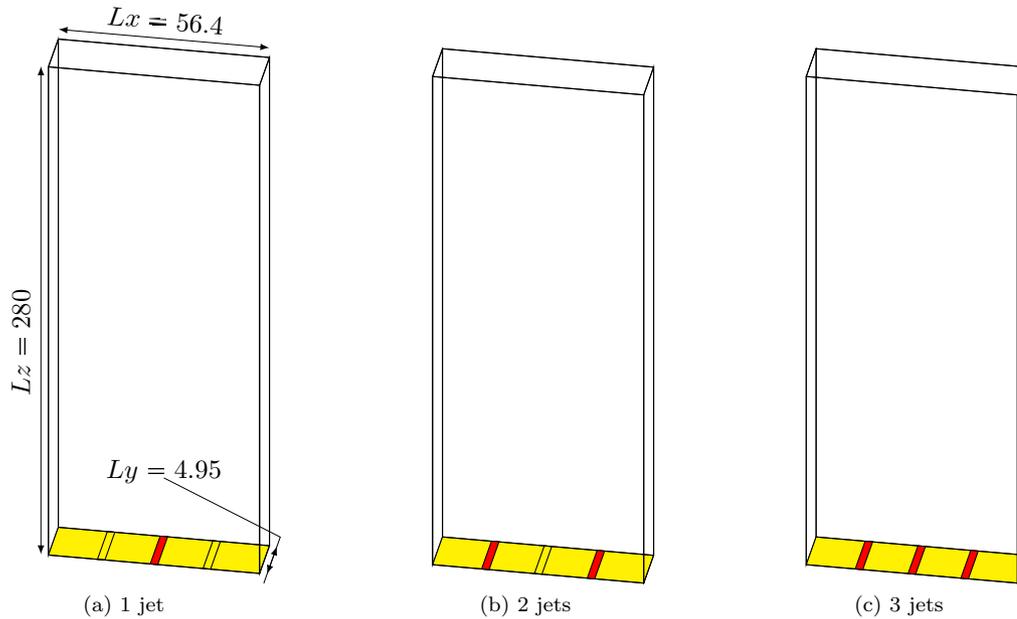


FIGURE IV.9 – Géométrie du dispositif expérimental de Brown [20], dimensions exprimées en millimètres

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

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

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

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

IV – 3.1.2.c Maillage

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

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

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

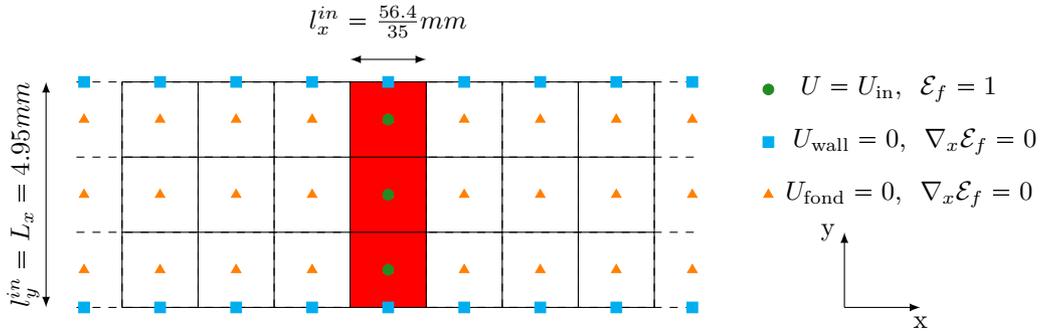


FIGURE IV.10 – Conditions aux limites discrétisées sur la face inférieure d'un lit pulsé

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

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

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

IV – 3.2 Saut de pression et oscillations

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

IV – 3.2.1 Présentation

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

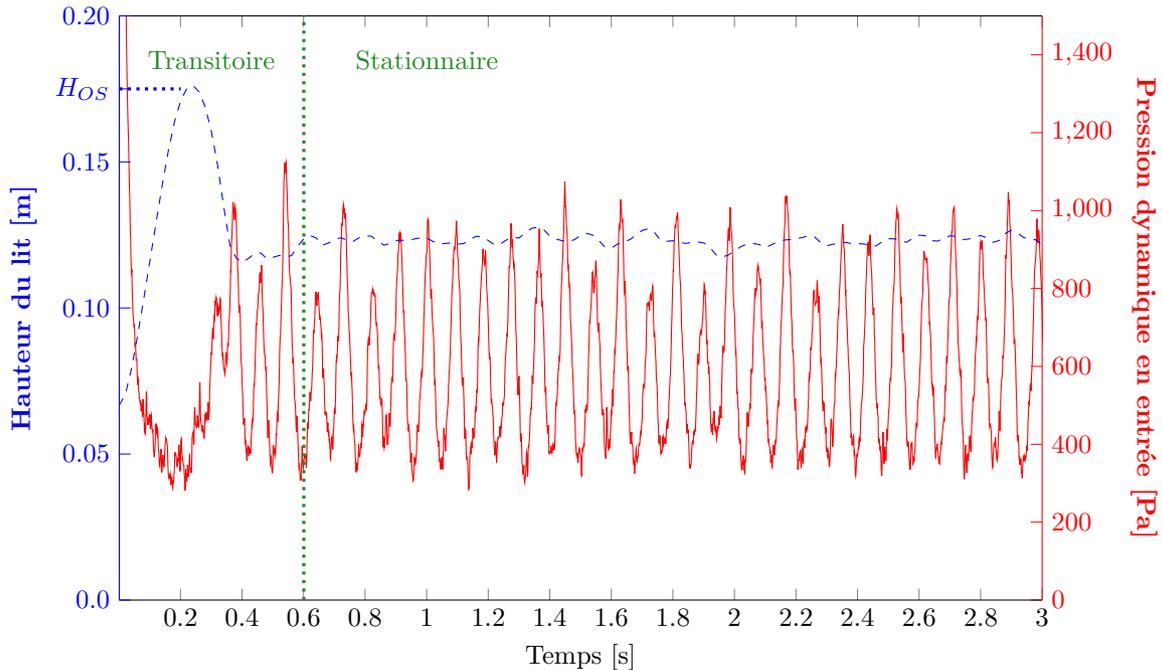


FIGURE IV.11 – Exemple d'évolution temporelle de la hauteur (en bleu) et de la pression en entrée (en rouge) dans un lit pulsé mono-jet pour une vitesse d'injection $U_{\text{bulk}} = 3U_{\text{in}}$

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

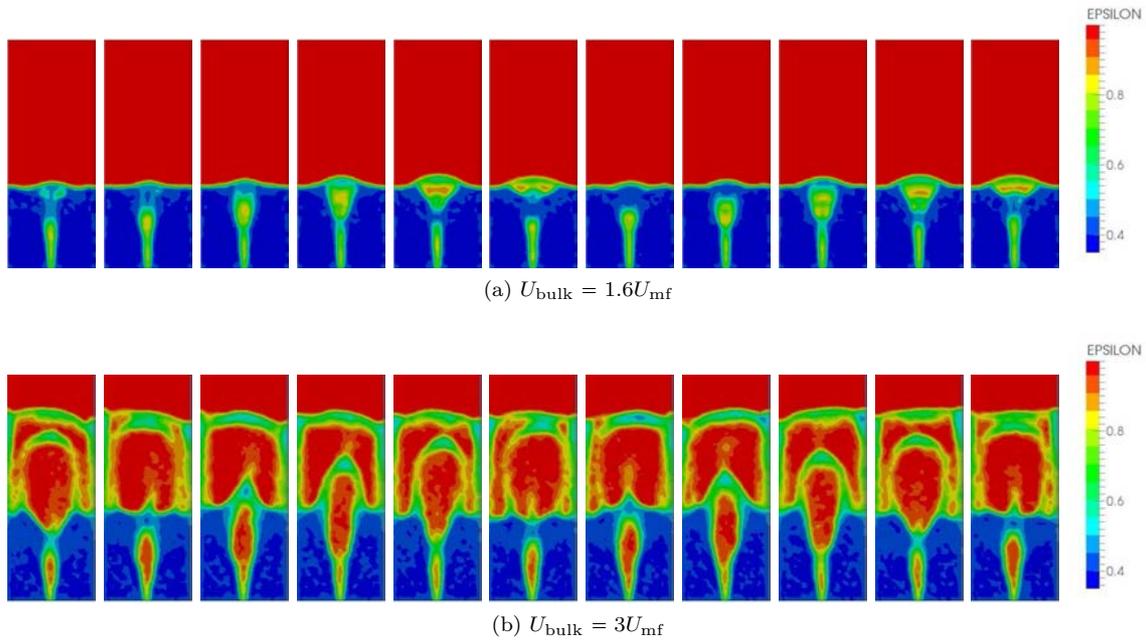


FIGURE IV.12 – Evolution temporelle de la fraction volumique de fluide entre 1s et 1.2s pour la configuration 3U-1J-550 (voir tableau IV.2)

pression ainsi que la fréquence des oscillations.

IV – 3.2.2 Valeur moyenne

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

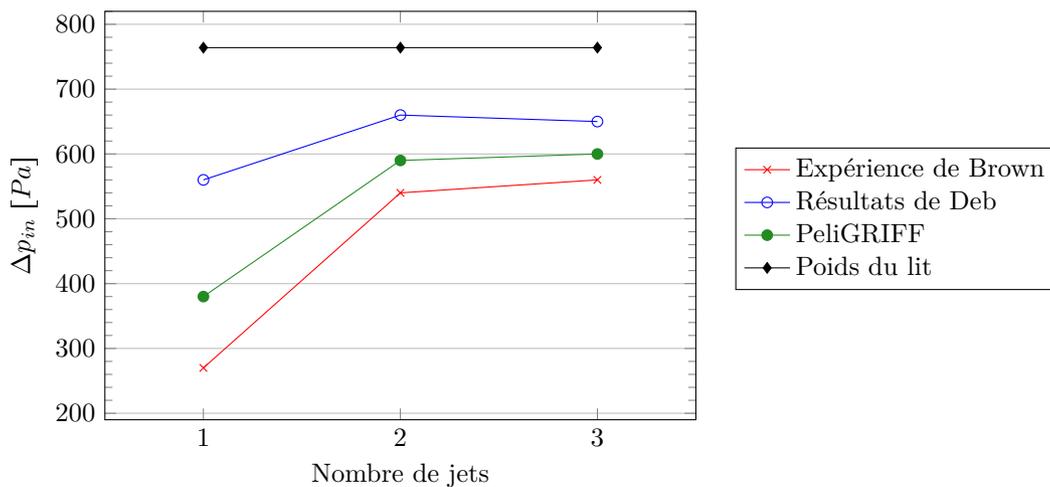


FIGURE IV.13 – Saut de pression à travers le lit de particules pour $U_{\text{bulk}} = 1,6U_{\text{mf}}$

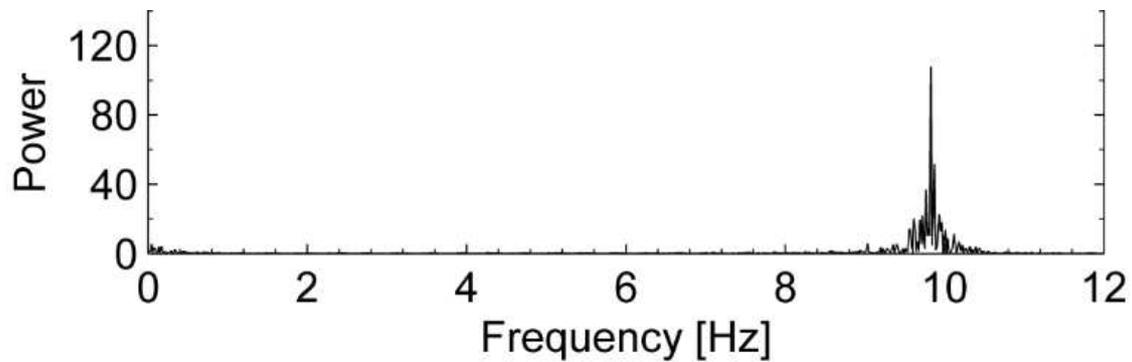
La figure IV.13, inspirée de la figure 3 de Deb *et al.* [45], illustre le saut de pression à travers le lit de particules de $550\mu\text{m}$ de diamètre pour 1, 2 et 3 jets et une vitesse d’injection de $U_{\text{bulk}} = 1.6U_{\text{mf}}$.

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

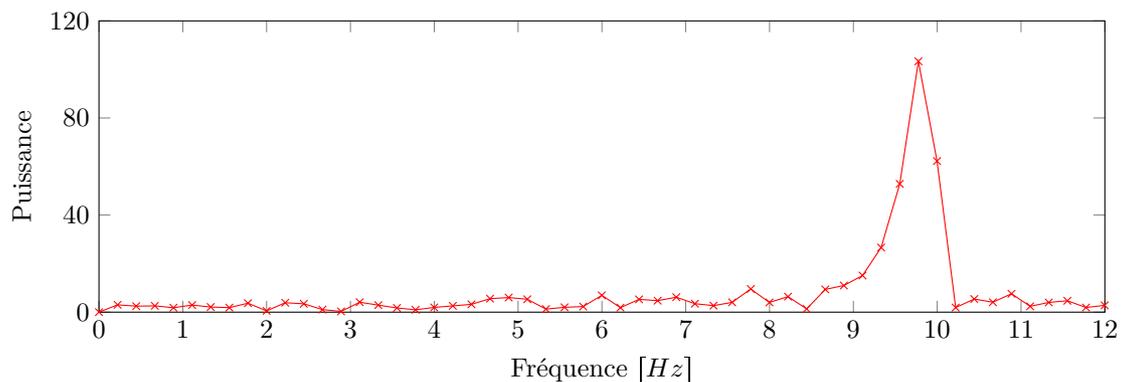
Des tests ont été réalisés avec différentes formulations de la force de traînée (Beetstra, Di Felice, Huilin), mais cela ne modifie que très peu le résultat obtenu pour le saut de pression moyen à travers le lit. En revanche, la modification des paramètres de collisions inter-particulaires influent beaucoup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

IV – 3.2.3 Fluctuations de pression

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



(a) Résultats de Brown [20] figure 7e



(b) Résultats PeliGRIFF

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

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

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

IV – 3.3 Fraction volumique moyenne

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

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

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

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

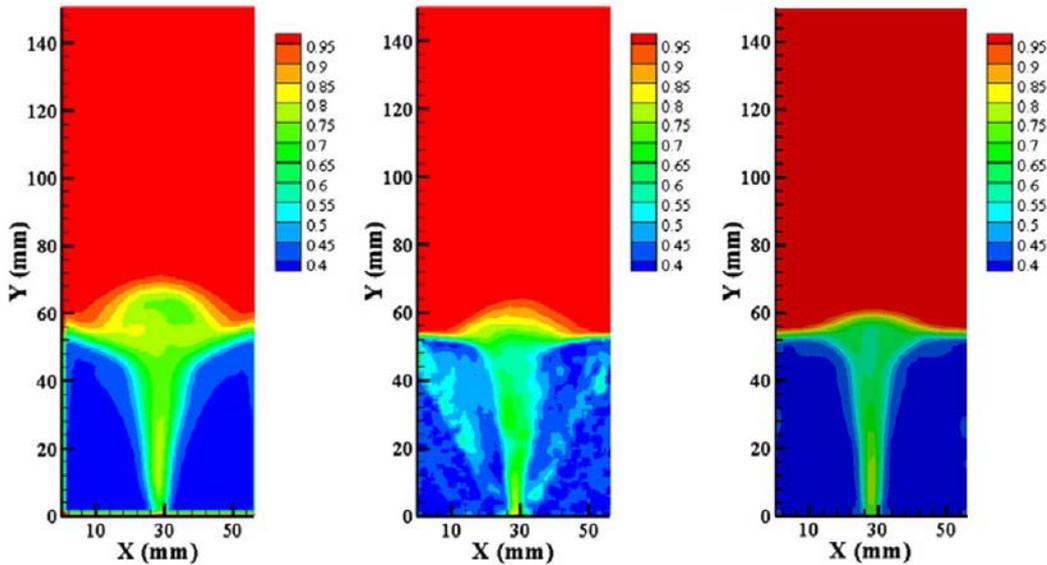


FIGURE IV.15 – Comparaison de la moyenne temporelle de la fraction volumique de fluide pour une vitesse d'injection de $U_{\text{bulk}} = 1.6U_{\text{mf}}$ et des particules de $550\mu\text{m}$ de diamètre. A gauche, résultats numériques de Deb *et al.* [45]; au centre, résultats expérimentaux de Brown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

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

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

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

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

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

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

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

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

IV – 4 Conclusion

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

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

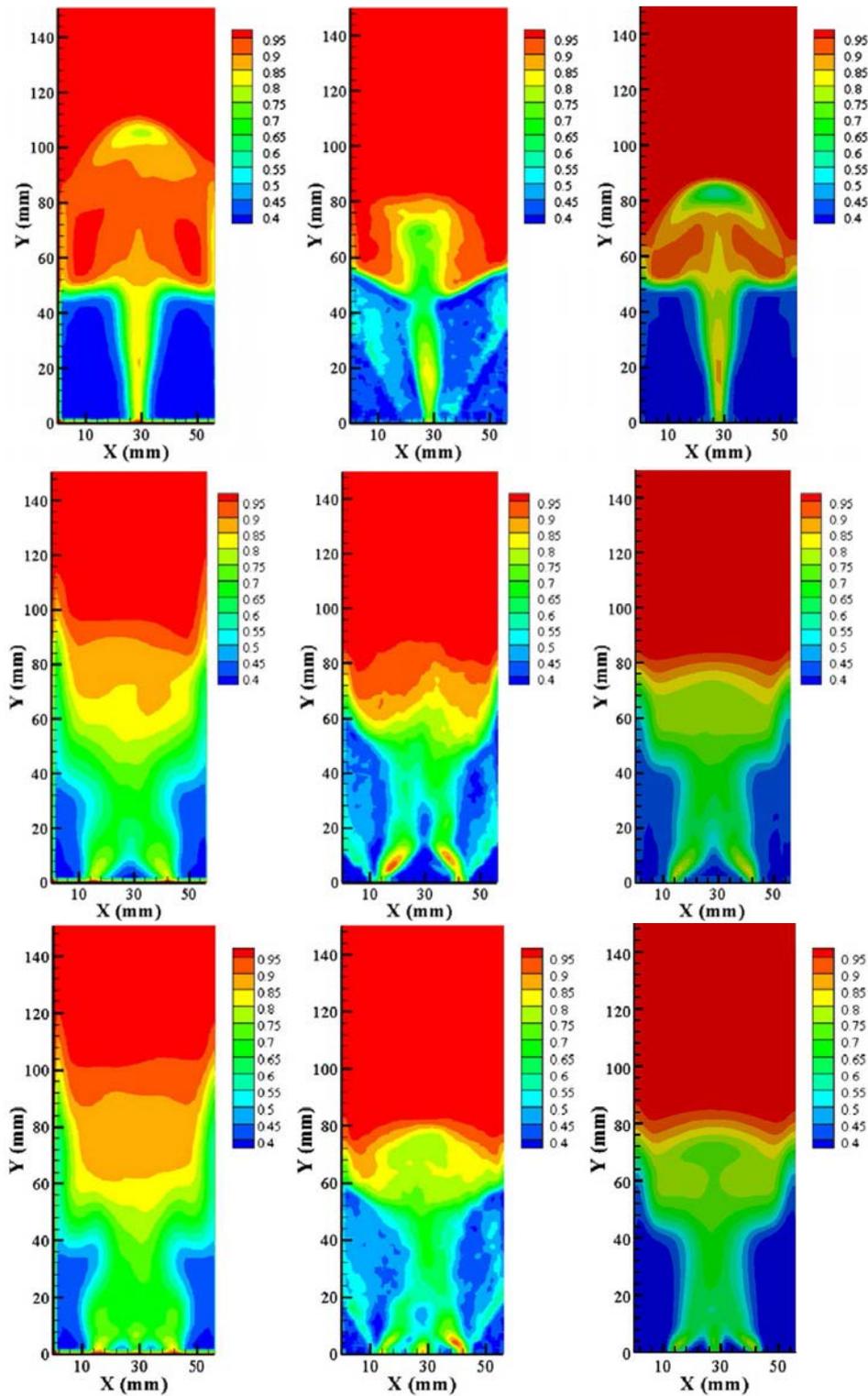


FIGURE IV.16 – Moyenne temporelle de la fraction volumique de fluide pour une vitesse d’injection de $U_{\text{bulk}} = 3U_{\text{mf}}$ et des particules de $550\mu\text{m}$ de diamètre dans les cas 1, 2 et 3 jets. Comparaison entre les résultats numérique de Deb *et al.* [45] (à gauche), les résultats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

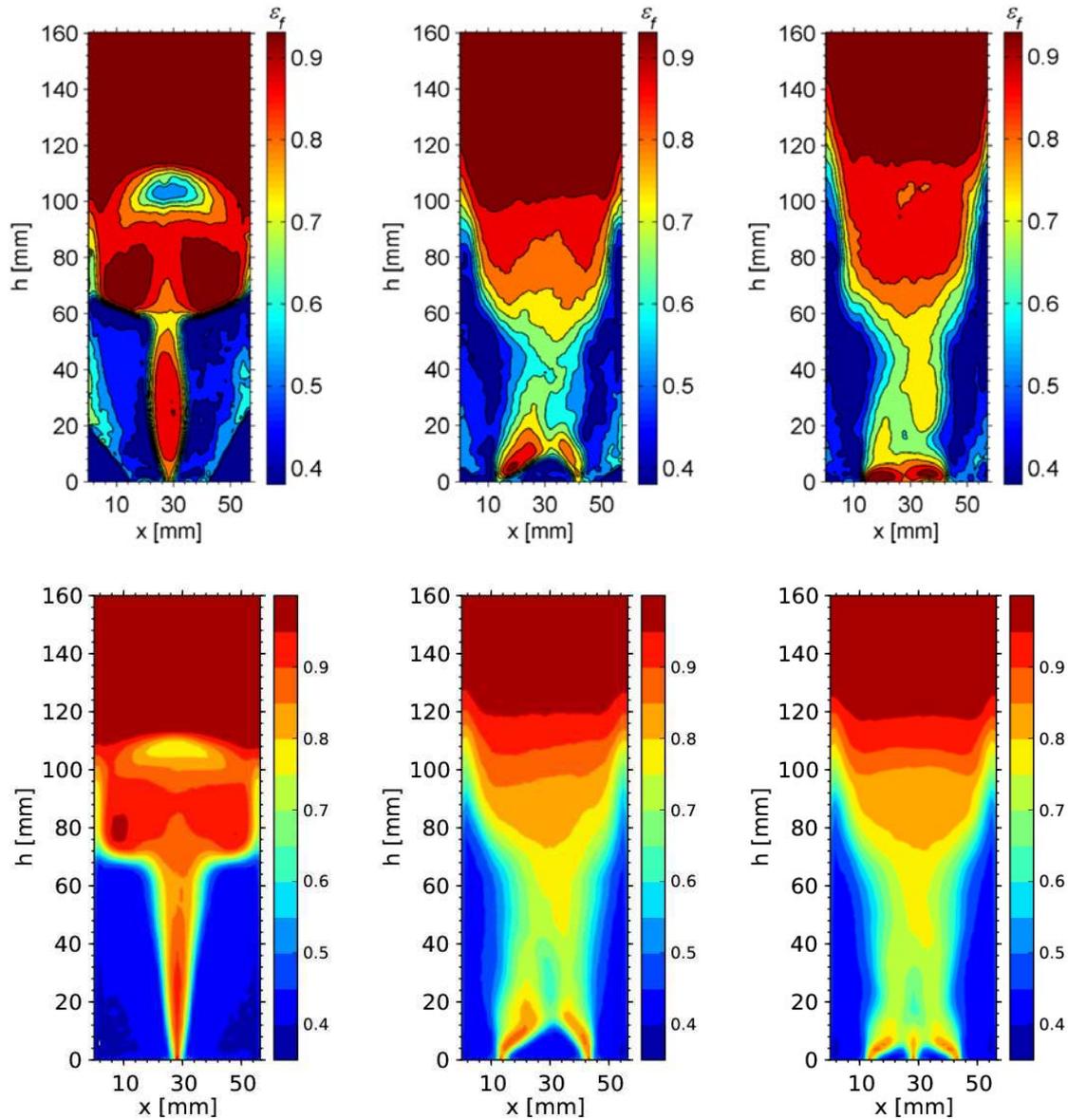


FIGURE IV.17 – Comparaison de la moyenne temporelle de la fraction volumique de fluide pour $U_{bulk} = 3U_{mf}$ et des particules de $750\mu m$ de diamètre pour des injections 1, 2 et 3 jets. En haut, résultats expérimentaux de Brown ; en bas, résultats obtenus avec le modèle DEM-CFD implémenté au cours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