
Introduction

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

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

Présentation des outils d'analyse

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

V – 2.1 Grandeurs observées

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

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

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

V – 2.1.1 Précisions sur la fraction volumique

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

V – 2.1.2 Précisions sur la hauteur du lit

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

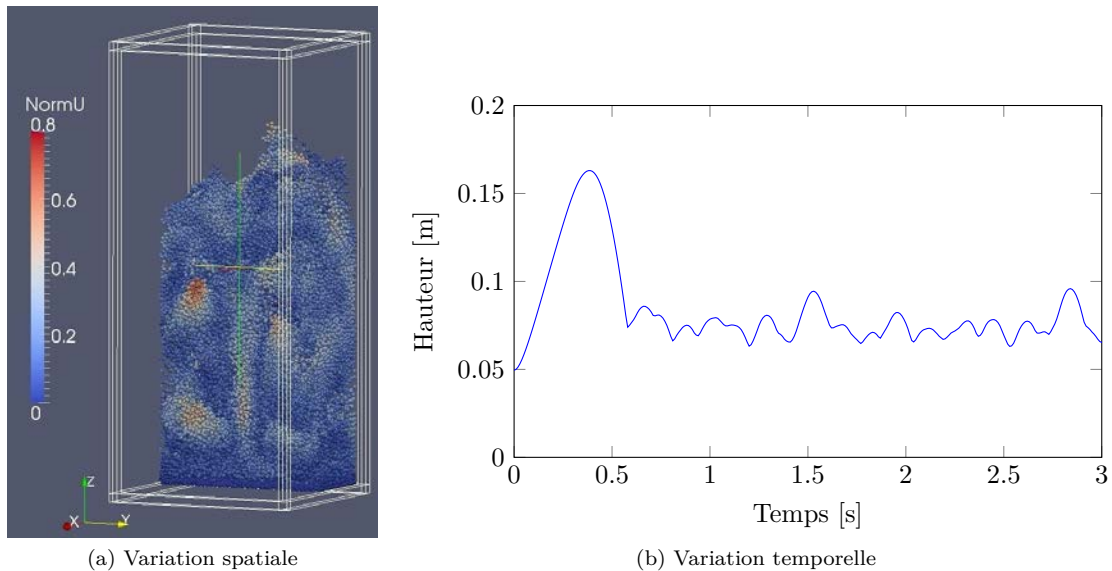


FIGURE V.1 – Illustration de la variation en temps et en espace de la hauteur du lit

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

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

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

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

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

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

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

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

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

V – 2.2 Représentation des résultats

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

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

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

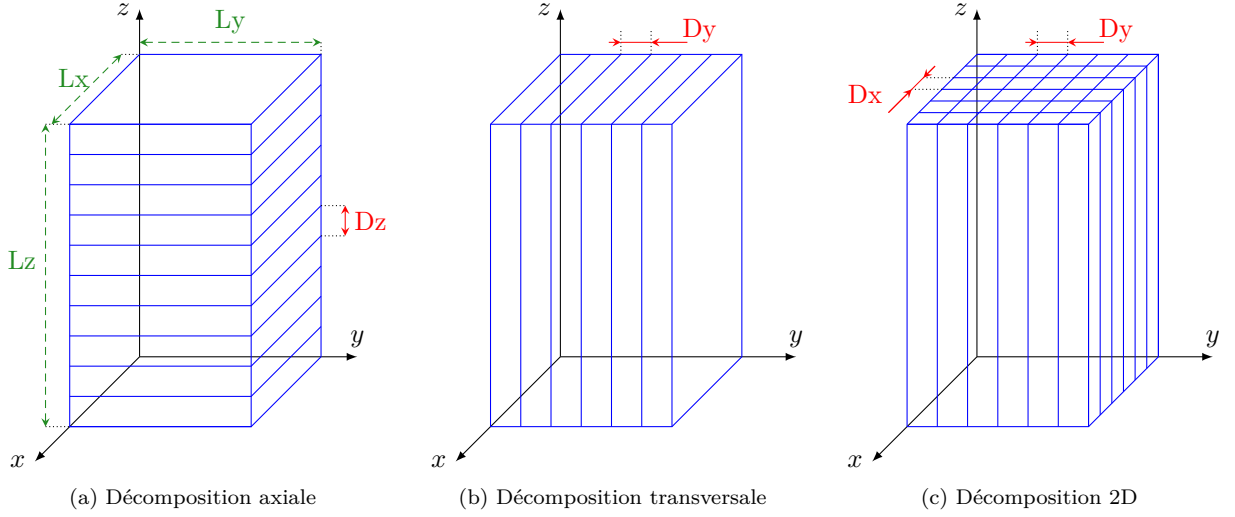


FIGURE V.2 – Différentes décompositions de domaine utilisées pour analyser et visualiser les résultats d'analyse statistique

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

V – 2.3 Outils statistiques

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

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

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

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

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

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

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

et :

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

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

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

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

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

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

V – 2.4 Echantillonnage

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

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

V – 2.4.1 Fréquence d'échantillonnage

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

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

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

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

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

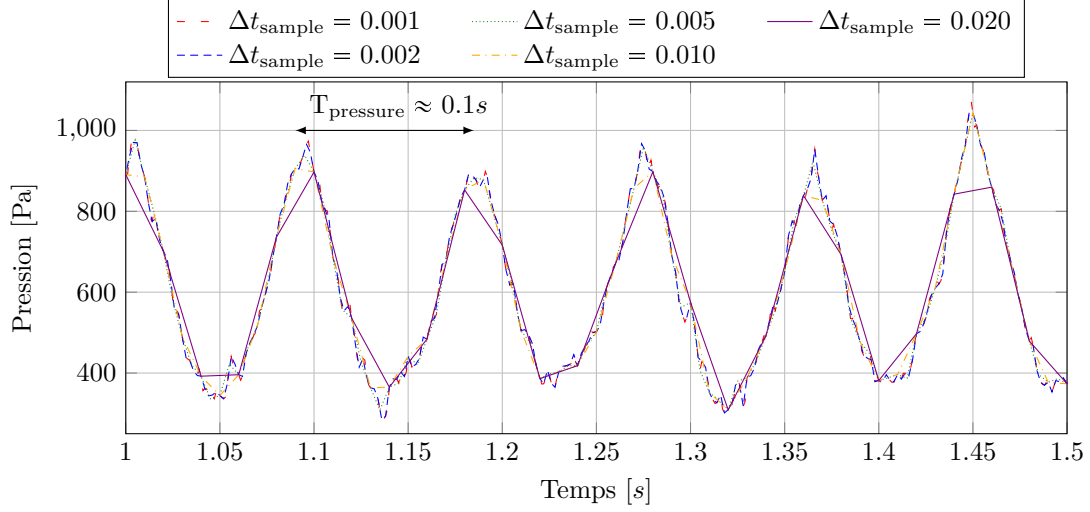


FIGURE V.3 – Evolution temporelle de la pression sur la face d'entrée pour différentes fréquences d'échantillonnage

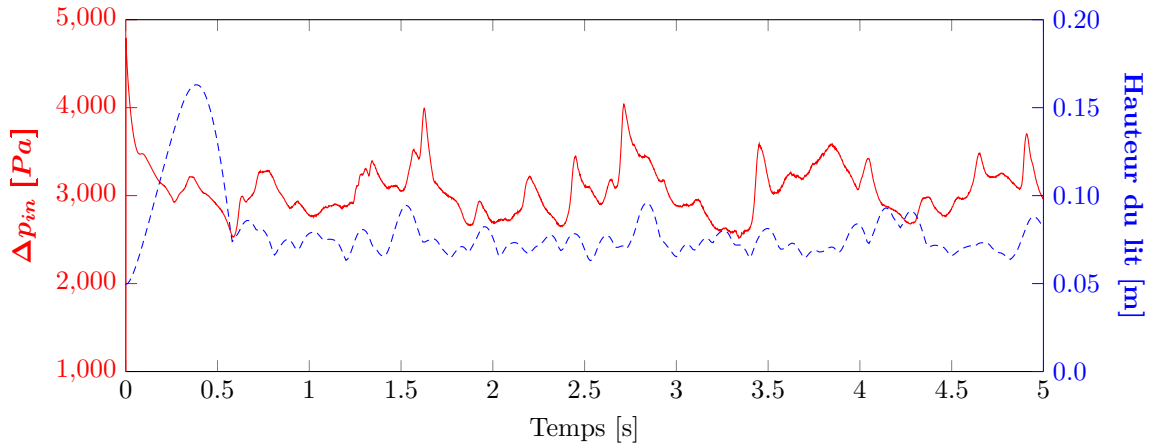


FIGURE V.4 – Evolution temporelle de la hauteur maximale des particules et de la pression dynamique de fluide sur la face d'entrée d'un lit bouillonnant

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

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

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

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

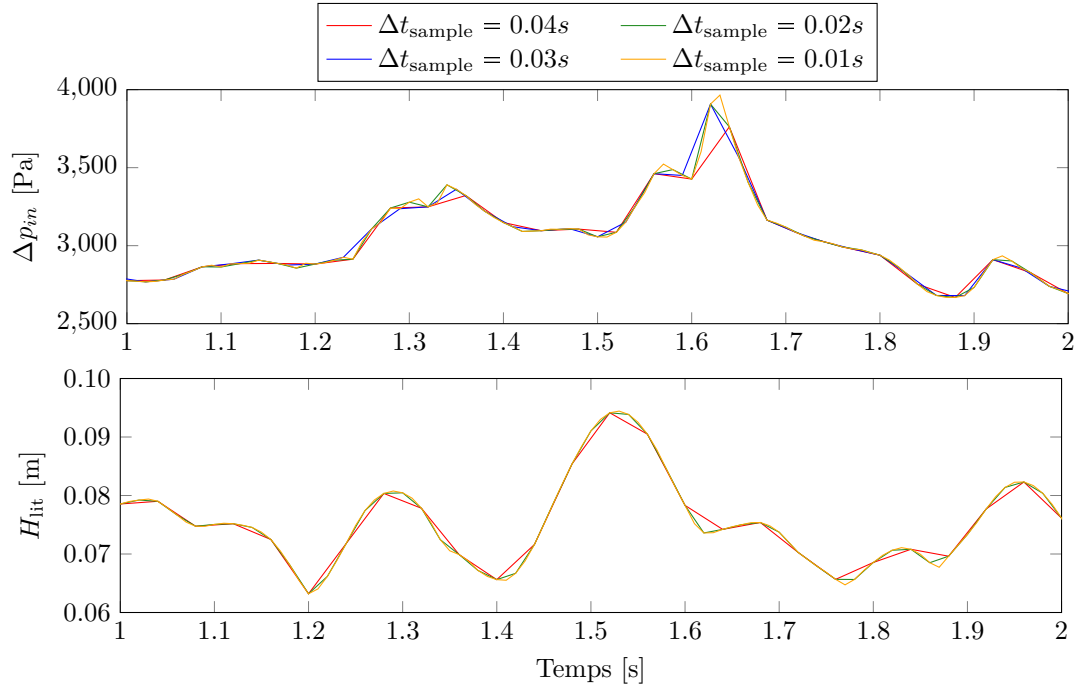


FIGURE V.5 – Evolution temporelle de la hauteur maximale des particules et de la pression dynamique de fluide sur la face d'entrée d'un lit bouillonnant pour différentes fréquences d'échantillonnage

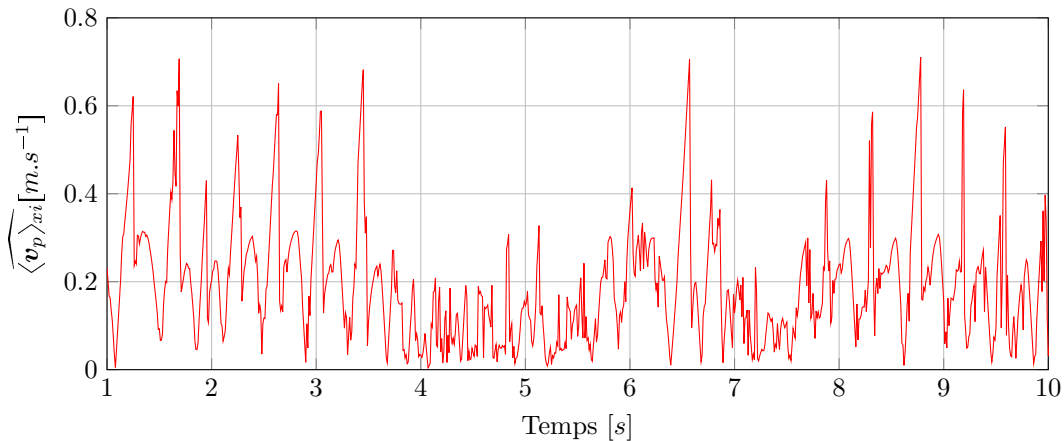


FIGURE V.6 – Valeur maximale de la vitesse des particules moyennée dans un volume de contrôle

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

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

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

Remarque 10 Les méthodes de calculs de f_{sample} présentées ici sont basées sur une pré-étude du comportement du lit, ie. une première fluidisation sur un petit système et durant quelques oscillations de la hauteur du lit de particules afin d'estimer la vitesse maximale des particules. Il serait intéressant de pouvoir estimer la vitesse maximale des particules dans le lit en fonction des paramètres de la

fluidisation. Une telle étude a été entreprise mais n'a pas abouti à une formulation concluante, principalement en raison de la multitude de facteurs entrant en compte : caractéristiques des particules et du fluide bien sûr, mais également dimensions du domaine (un même ensemble de particules dans une colonne étroite n'a pas le même comportement que dans un réacteur plus large).

V – 2.4.2 Temps d'échantillonnage

Comme nous pouvons l'observer sur la figure V.7, les moyennes temporelles des variables décrivant le comportement du lit dépendent du temps d'échantillonnage. C'est pourquoi la détermination d'un critère de convergence temporelle est important afin de savoir à partir de quel moment les statistiques n'évoluent plus lorsque le temps d'échantillonnage est augmenté.

Précisons que ces statistiques sont calculées une fois la phase transitoire de fluidisation passée, c'est à dire après la première seconde au regard de la figure V.5

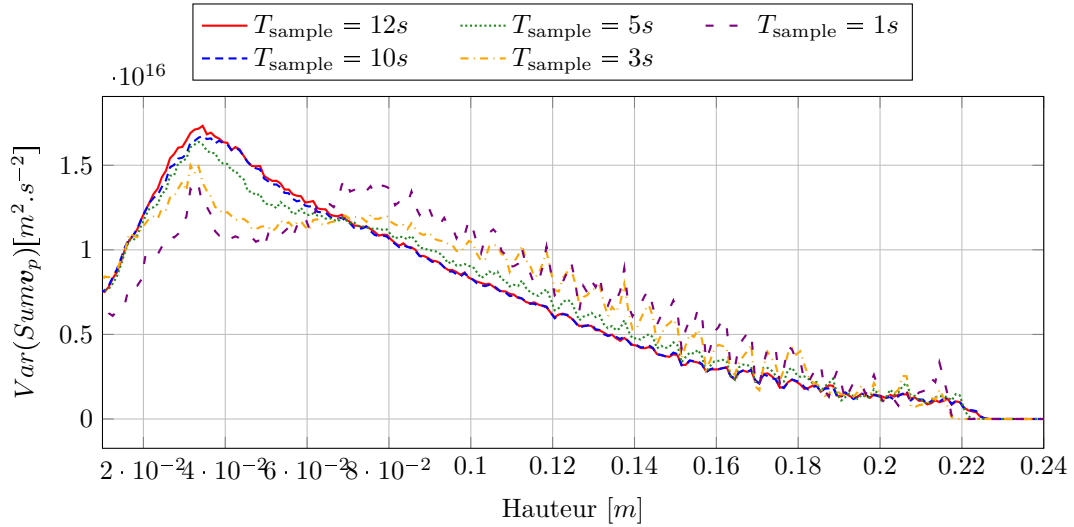


FIGURE V.7 – Influence du temps d'échantillonnage sur les statistiques calculées

Plusieurs grandeurs peuvent avoir ce rôle de critère de convergence, nous détaillons ci-après deux méthodes utilisées dans cette étude qui nous permettent de considérer les temps d'échantillonnage comme suffisamment longs.

V – 2.4.2.a Premier critère de convergence

Le premier critère de convergence est basé sur la variation temporelle de la norme de vitesse de la totalité des particules :

$$\langle Sum|\mathbf{v}_p|\rangle_{X,T} = \frac{1}{T_{\text{sample}}} \int_t \sum_{p=0}^{N_p} |\mathbf{v}_{p,t}| \quad (\text{V.10})$$

Soit sous forme discrétisée :

$$\langle Sum|\mathbf{v}_p|\rangle_{X,T} = \frac{1}{N_T} \sum_{t=0}^T \sum_{p=0}^{N_p} \mathbf{v}_{p,t} \quad (\text{V.11})$$

Chacun s'accorde sur le fait que lorsque l'on allonge le temps d'échantillonnage, cette grandeur tend vers une valeur constante.

Ainsi, le premier critère de convergence est considéré comme atteint lorsque les fluctuations temporelles de $\langle|\mathbf{v}_p|\rangle_{X,T}$ sont faibles. La grandeur observée est décrite par l'expression suivante :

$$C_1 = \frac{1}{\langle Sum|\mathbf{v}_p|\rangle_{X,T} - \langle Sum|\mathbf{v}_p|\rangle_{X,T}^{t-n\Delta t_{\text{sample}}}} \cdot \frac{\langle Sum|\mathbf{v}_p|\rangle_{X,T}^t - \langle Sum|\mathbf{v}_p|\rangle_{X,T}^{t-n\Delta t_{\text{sample}}}}{n \Delta t_{\text{sample}}} \quad (\text{V.12})$$

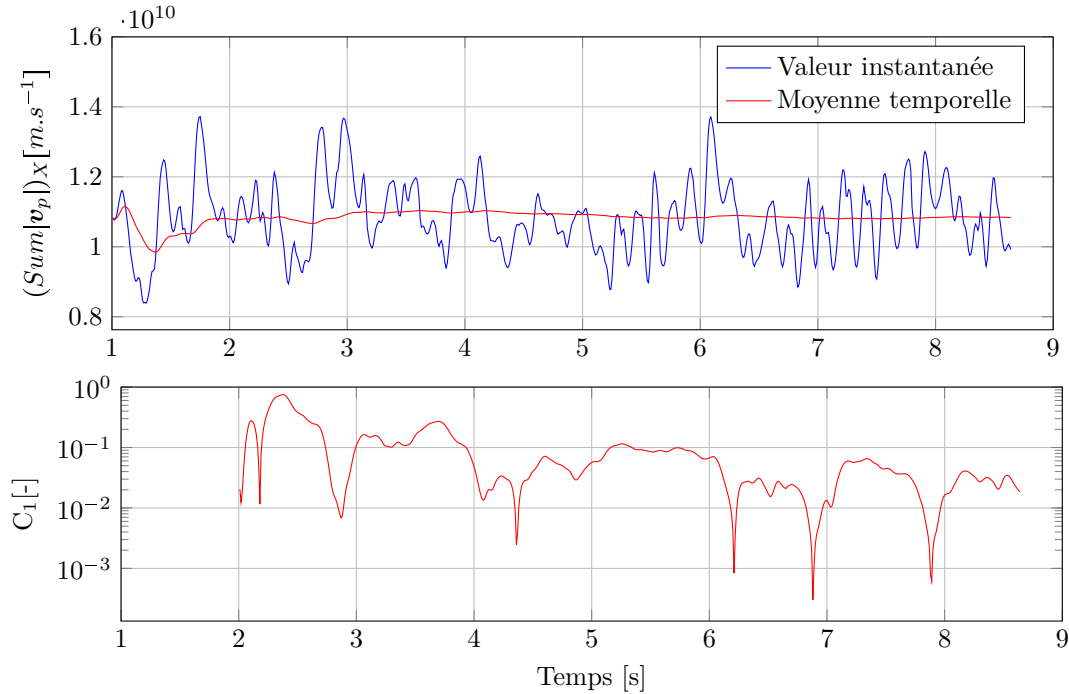


FIGURE V.8 – Evolution temporelle de somme des vitesses des particules dans le domaine (en haut) et du critère de convergence C_1 (en bas)

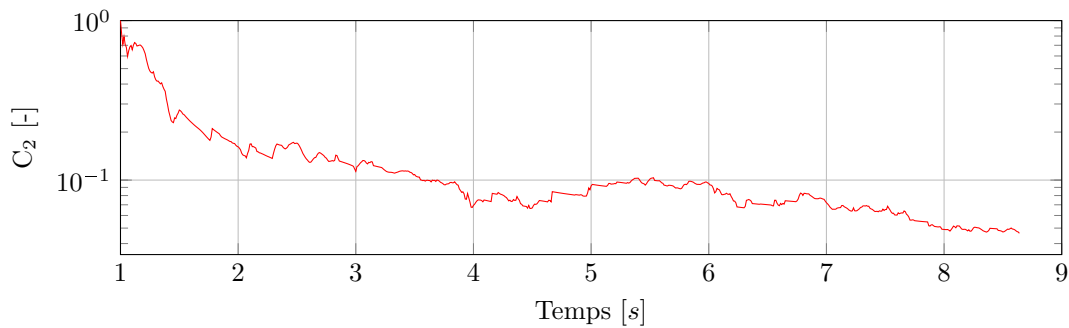
Où $\langle \widehat{Sum|v_p|} \rangle_{X,T}$ et $\langle \widehat{Sum|v_p|} \rangle_{X,T}$ sont les valeurs maximale et minimale, respectivement, atteintes par la moyenne temporelle de la vitesse de l'ensemble des particules. Le temps d'étude est considéré comme suffisamment long lorsque $C_1 < 0.05$. En outre, cette condition doit être respectée un certain nombre de fois consécutives pour s'assurer de ne pas avoir atteint un plateau provisoire, c'est pourquoi la dérivée est calculée sur n pas de temps d'échantillonnage, ici nous choisissons n de telle sorte que $n \Delta t_{\text{sample}} = 1s$. La figure V.8 illustre l'évolution temporelle de norme de vitesse de l'ensemble des particules ainsi que de sa moyenne temporelle (en haut). La figure V.8 présente quant à elle la diminution de la pente de la moyenne temporelle, *ie.* la grandeur C_1 (en bas).

V – 2.4.2.b Second critère de convergence

Une autre grandeur a également été étudiée afin de s'assurer que les statistiques ne diffèrent plus lorsque le temps d'échantillonnage est augmenté. Celui-ci est basé sur la moyenne temporelle de la vitesse verticale des particules dans le domaine. Ainsi, considérons d'une part $\langle v_z \rangle_{xi,T}$ la moyenne temporelle de la vitesse moyenne des particules dans le volume de contrôle xi et $\langle \widehat{v_z} \rangle_{xi,T}$ la valeur maximale parmi les volumes de contrôle qui composent le système. D'autre part, $\langle |v_z| \rangle_{xi,T}$ est la grandeur obtenue par le même principe de moyenne spatiale puis temporelle mais cette fois-ci avec la norme de la vitesse. Le second critère de convergence porte sur le quotient des deux valeurs précédemment introduites :

$$C_2 = \frac{\langle \widehat{v_z} \rangle_t}{\langle |v_z| \rangle_t} \quad (\text{V.13})$$

Cette grandeur nous renseigne sur l'évolution de la vitesse verticale moyenne dans le réacteur. Etant donné que les particules restent confinées dans le système, C_2 tend graduellement vers zéro car les quantités de particules se déplaçant vers le haut et vers le bas se compensent progressivement. La figure V.9 illustre l'évolution temporelle de la grandeur C_2 pour un lit fluidisé bouillonnant.



(a) Convergence

FIGURE V.9 – Evolution temporelle du critère de convergence C_2

V – 3 Etude approfondie de lits 3D

Dans un lit fluidisé de grande dimension, de nombreux phénomènes 3D ont lieu, tels que la formation de bulles et de grappes (en anglais “clusters”) de particules. Ces phénomènes peuvent difficilement être étudiés expérimentalement car il faudrait pour cela utiliser des appareils de mesure intrusifs qui modifient la formation et l’évolution de ces structures. De plus, ces dispositifs de mesure permettent d’obtenir seulement une faible quantité d’informations, il n’est donc pas possible d’obtenir la totalité des informations des champs de vitesse et de pression du fluide, de même que toutes les trajectoires et collisions des particules. Il existe certes des moyens de mesure non-intrusifs tels que la vélocimétrie par image de particules¹, l’imagerie par résonance magnétique² ou le suivi de particules par émission de positron³ mais ces dispositifs sont beaucoup plus lourds et contraignants à mettre en place que des simulations Euler-Lagrange. En effet, les dispositifs de PIV ne permettent de visualiser que les particules se trouvant proche de la paroi du réacteur faisant face à la caméra optique. Or les bulles de fluide d’un lit bouillonnant 3D remontent majoritairement par le centre du réacteur et la vitesse du fluide et des particules est quasiment nulle sur les parois, la caméra ne visualise alors pas la dynamique de l’ensemble de l’écoulement. Concernant les techniques de MRI et de PEPT, les dispositifs expérimentaux sont généralement très lourds et coûteux à mettre en place. De plus, une telle installation est peu évolutive, c’est à dire qu’une expérience est généralement dimensionnée pour une seule configuration d’écoulement fluide-particules, il n’est alors pas possible d’étudier par exemple l’influence de la densité du fluide ou de la dimension du réacteur. L’approche méso implémentée durant cette thèse est en revanche particulièrement adaptée à l’étude approfondie des lits fluidisés 3D car la taille des systèmes qu’il est possible d’étudier avec cette échelle de modélisation permet aux structures d’évoluer librement au sein du lit. De plus, le suivi lagrangien des particules et le traitement des contacts assurent une modélisation plus proche de la réalité que les modèle Euler-Euler et offrent la possibilité d’étudier en détail la dynamique des particules.

Ci après, nous présentons une analyse statistique du comportement d’un lit fluidisé bouillonnant pour différentes vitesses d’injection, puis nous nous basons sur certaines de ces valeurs statistiques pour étudier l’influence de certains paramètres sur la dynamique de l’écoulement.

V – 3.1 Description statistique du lit en fonction de U_{in}

Afin de mieux comprendre les phénomènes se déroulant au sein d’un lit bouillonnant, nous présentons ici un ensemble de courbes décrivant la dynamique du fluide et des particules pour différentes vitesses d’injection. Les statistiques ont été obtenues en respectant les critères de convergence présentés précédemment (voir §V – 2.4.2) afin que les résultats ne soient pas dépendants de la durée d’analyse. Les paramètres du lit fluidisé bouillonnant présenté dans cette partie sont référencés dans le tableau V.1.

1. en anglais “Particle Image Velocimetry (PIV)”
 2. en anglais “Magnetic Resonance Imaging (MRI)”
 3. en anglais “Positron Emission Particle Tracking (PEPT)”

TABLE V.1 – Paramètres de simulation pour le lit fluidisé de référence employé en partie V – 3.1

Paramètre	Valeur
Nombre de particules	100 000
d_p	1 mm
ρ_p	1500 [kg.m ⁻³]
ρ_f	1.2 [kg.m ⁻³]
μ_f	1.8 × 10 ⁻⁵ [Pa.s]
U_{mf}	0.24 [m.s ⁻¹]
Δp_{in}	370
Domaine	0.1 × 0.1 × 0.2 [m ³]
Maillage	200 × 200 × 400

V – 3.1.1 Fraction volumique de fluide

Comme nous pouvons le voir sur la figure V.10-(a), pour de faibles vitesses d'injection ($1.5U_{mf}$ et $2U_{mf}$), la moyenne temporelle de la fraction volumique de fluide dans la partie basse du réacteur, $\mathcal{E}_{f,bulk}$, est quasiment uniforme et la transition entre le lit de particules et la zone ne comportant que du fluide ($\mathcal{E}_f = 1$) s'effectue sur une zone restreinte, *ie.* un plage d'une dizaine de d_p . Dans cette zone, les fluctuations de \mathcal{E}_f , représentées par $Var(\mathcal{E}_f)_{xi}$ sur la figure V.10-(b), sont élevées car la porosité du lit oscille au rythme des bulles entre une zone dense ($\mathcal{E}_f \simeq 0.5$) et une zone entièrement dépeuplée.

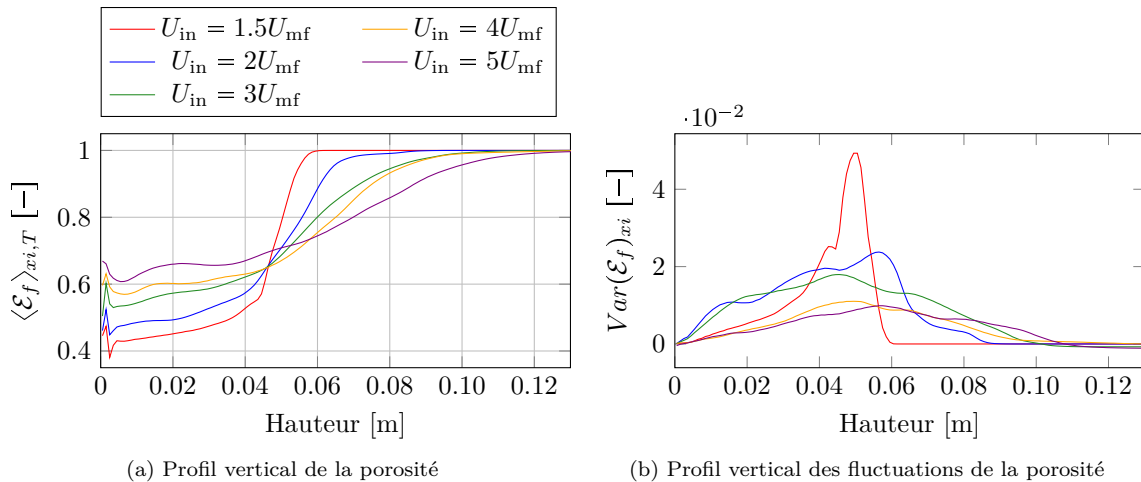


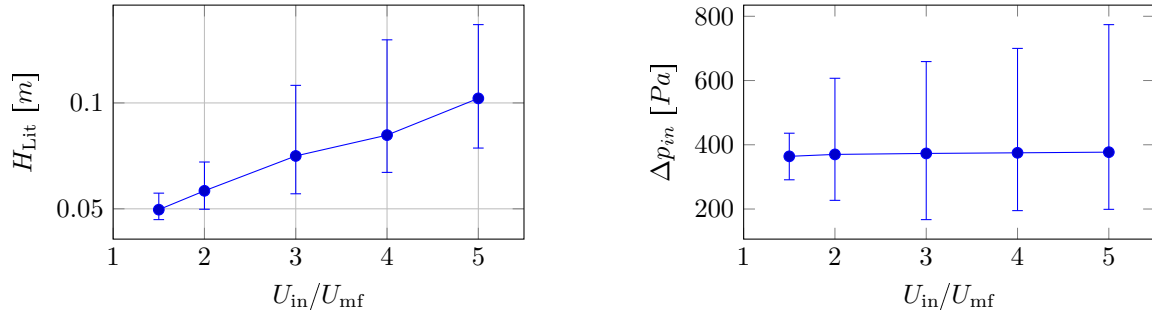
FIGURE V.10 – Influence de la vitesse d'injection sur la fraction volumique de fluide

En revanche, pour des vitesses d'injection plus élevées ($4U_{mf}$, $5U_{mf}$), la porosité du lit dans la partie basse du réacteur est plus élevée et la zone de transition entre $\mathcal{E}_{f,bulk}$ et $\mathcal{E}_f = 1$ s'élargit, les fluctuations de \mathcal{E}_f sont alors moins élevées mais plus étalées. L'augmentation de la porosité du lit s'explique par l'augmentation de la hauteur du lit en fonction de la vitesse d'injection comme nous le présentons en partie §V – 3.1.2. L'élargissement de la zone de transition entre $\mathcal{E}_{f,bulk}$ et $\mathcal{E}_f = 1$ s'explique quant à lui par l'augmentation de la présence de bulles dans le système, qui remonte plus haut dans le réacteur avant d'exploser.

V – 3.1.2 Hauteur du lit et saut de pression

Chacun s'entend sur le fait que l'augmentation de la vitesse d'injection du fluide dans un lit fluidisé engendre une augmentation de la hauteur du lit de particules. La figure V.11 illustre cette augmentation de la hauteur moyenne du lit et de ses fluctuations en fonction de la vitesse d'injection du fluide ainsi que l'augmentation des fluctuations de la pression dynamique du fluide sur la face d'entrée. Nous

remarquerons que le saut de la pression moyen à travers le lit de particules reste constant et égal au poids relatif des particules calculé à l'aide la formule (IV.7).



(a) Hauteur du lit de particules et amplitude des fluctuations

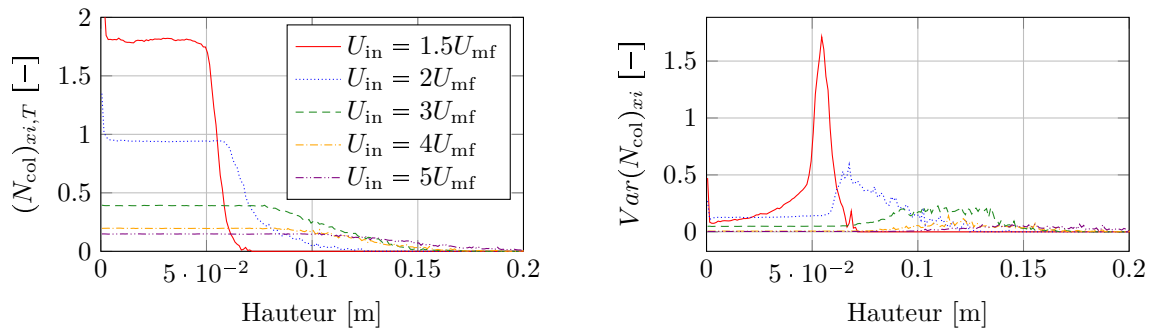
(b) Saut de pression dynamique sur la face d'entrée du réacteur et amplitude des fluctuations

FIGURE V.11 – Influence de la vitesse d'injection sur la hauteur du lit et la pression dynamique en entrée du réacteur

Remarquons que de fortes variations de la hauteur de lit ainsi que les fluctuations de pression que cela engendre peut avoir des conséquences néfastes pour les dispositifs expérimentaux et les réacteurs de production. En effet, les forces exercées sur la face inférieure du réacteur lors de la chute d'une grande quantité de particules peut détériorer la cuve de même que l'augmentation de la pression dans la partie basse du domaine peut endommager les pompes du système d'injection de fluide.

V – 3.1.3 Collisions entre les particules

Au sein d'un lit fluidisé bouillonnant, les collisions entre les particules sont très fréquentes et doivent impérativement être prises en compte afin de simuler correctement la dynamique de l'écoulement. La figure V.12 montre la distribution verticale de la moyenne temporelle du nombre de contacts moyen par particule par volume de contrôle pour différentes vitesses d'injection. La baisse du nombre de collisions lorsque la vitesse d'injection augmente s'explique par l'augmentation de la distance entre les particules résultant de l'expansion du lit. Quelle que soit la vitesse d'injection, le nombre de contacts moyen par particule est homogène dans la partie basse du domaine, là où la densité de particules est la plus élevée. En comparant les courbes V.12-(a) et (b) aux distributions verticales de \mathcal{E}_f et $Var(\mathcal{E}_f)$, nous observons une corrélation entre la concentration de particules ($1 - \mathcal{E}_f$) et le nombre de collisions dans le lit, il en va de même pour les variances.



(a) Nombre de contacts moyen par particule

(b) Variance du nombre de contacts moyen par particule

FIGURE V.12 – Influence de la vitesse d'injection sur les collisions interparticulaires au sein du réacteur

Remarque 11 Pour les vitesses d'injection $U_{in} = 1.5U_{mf}$ et $U_{in} = 2U_{mf}$, nous observons un nombre élevé de contacts dans le premier volume de contrôle. Cela est dû à la couche de particules non fluidisées dont nous avons parlé précédemment (voir §III – 5.1.1).

V – 3.1.4 Vitesse des particules

Au sein d'un lit fluidisé bouillonnant, les trajectoires des particules sont extrêmement chaotiques en raison de la multitude de contacts interparticulaires et des nombreuses bulles de fluide remontant dans le réacteur. La répartition axiale de la valeur temporellement et spatialement moyennée de la norme de vitesse des particules est représentée sur la figure V.13.

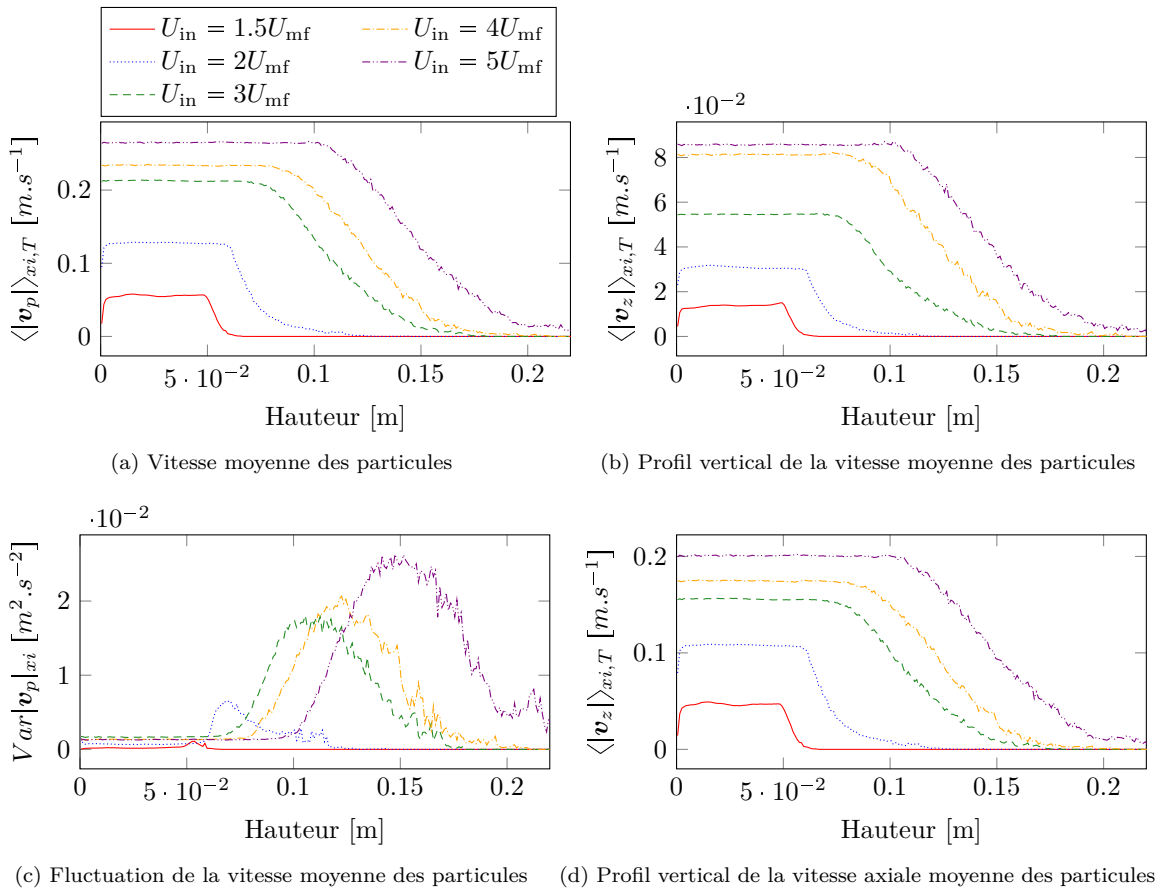


FIGURE V.13 – Influence de la vitesse d'injection sur la vitesse des particules dans le réacteur

Comme nous pouvions nous y attendre, les normes de vitesse des particules, qui renseignent directement sur le taux d'agitation du lit, sont plus élevées pour de fortes vitesses d'injection du fluide. En comparant les figures V.13-(a), (b) et (d), nous constatons que le déplacement des particules est majoritairement vertical pour de faibles vitesses d'injection, mais qu'une part non négligeable provient des déplacements transversaux pour de plus fortes vitesses d'injection. Cela est dû à l'augmentation de la taille des bulles, et du déplacement des particules lorsque les bulles éclatent, propulsant alors des particules dans les directions transverses. Afin de compléter cette étude de la vitesse des particules dans le domaine, la figure V.14 illustre la distribution de la vitesse des particules en fonction de leur valeur. Une telle distribution des valeurs de v_z peut être utilisée pour calculer le pas de temps d'échantillonnage Δt_{sample} (voir §V – 2.4.1), de même que la distribution de la norme de vitesse $|\mathbf{v}_p|$ est utile pour l'estimation du pas de temps de simulation Δt_p .

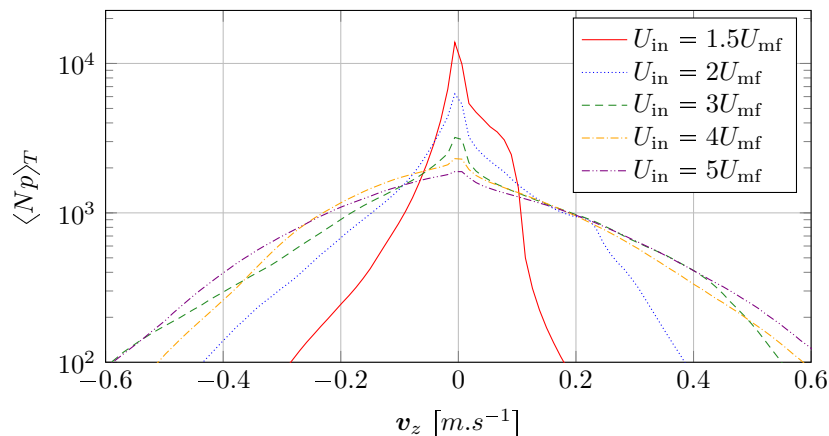


FIGURE V.14 – Influence de la vitesse d’injection sur la distribution (PDF) de vitesse des particules dans le réacteur pour le système présenté dans le tableau V.1, largeur des classes : $0,01 \text{ m.s}^{-1}$

V – 3.2 Influence de la taille du domaine

La taille du domaine d’étude est un paramètre important qu’il est intéressant d’étudier car il peut grandement influencer la dynamique de l’écoulement et donc les statistiques qui en résultent. En effet, dans un lit bouillonnant, les bulles de fluide qui apparaissent au sein de la phase dispersée peuvent atteindre des tailles très importantes. Or, si le domaine d’étude est trop étroit, la dimension de ces bulles de fluide peut aisément être du même ordre de grandeur que celle du réacteur et les structures ne peuvent alors pas se former et évoluer librement dans le domaine. Ainsi, une fluidisation bouillonnante se transforme rapidement en fluidisation en bouchons car les bulles occupent toute la section du réacteur.

Pour éviter cette configuration, l’évolution des statistiques du lit de particules à été analysée pour différentes tailles de domaine. Pour cela, nous avons fait varier la section du réacteur en conservant une hauteur de lit et de domaine fixée. Les lits de départ sont composés de particules initialement arrangées de façon cubique simple sur 50 couches de particules. Les caractéristiques des domaines étudiés sont résumées dans le tableau V.2.

TABLE V.2 – Systèmes étudiés pour la convergence des statistiques en fonction de la taille du domaine

Notation	Nombre de particules	Nombre de cellules fluides	Nombre de cœurs
20×20	20 000	18 100	1
40×40	80 000	72 400	4
60×60	180 000	162 900	9
80×80	320 000	289 600	16
100×100	500 000	452 500	25
120×120	720 000	651 600	36

Les conditions au bord sont périodiques pour les faces latérales, les faces supérieures et inférieures sont quant à elles vues comme des obstacles pour les particules mais sont tout de même traversées par le fluide (voir section III – 5.1). Les caractéristiques des particules employées pour cette partie sont les mêmes que celles des particules utilisées pour l’étude de l’influence de la vitesse d’entrée (voir tableau V.1), et le fluide est injecté à $U_{in} = 3U_{mf}$. Une sélection de statistiques décrivant le comportement du lit de particules en fonction de la taille du domaine est présentée figure V.15. Bien entendu, ces statistiques sont, ici aussi, obtenues sur un temps d’échantillonnage suffisamment long pour garantir l’indépendance des valeurs en fonction de la durée d’analyse.

Au regard de la distribution verticale des statistiques, il est clair que la dynamique du lit est grandement dépendante de la section du réacteur. En effet, l’étalement vertical de la grandeur $\langle \mathcal{E}_f \rangle_{xi,T}$ pour les cas $20d_p \times 20d_p$ et $40d_p \times 40d_p$ par exemple, illustre une hauteur de lit et une porosité plus

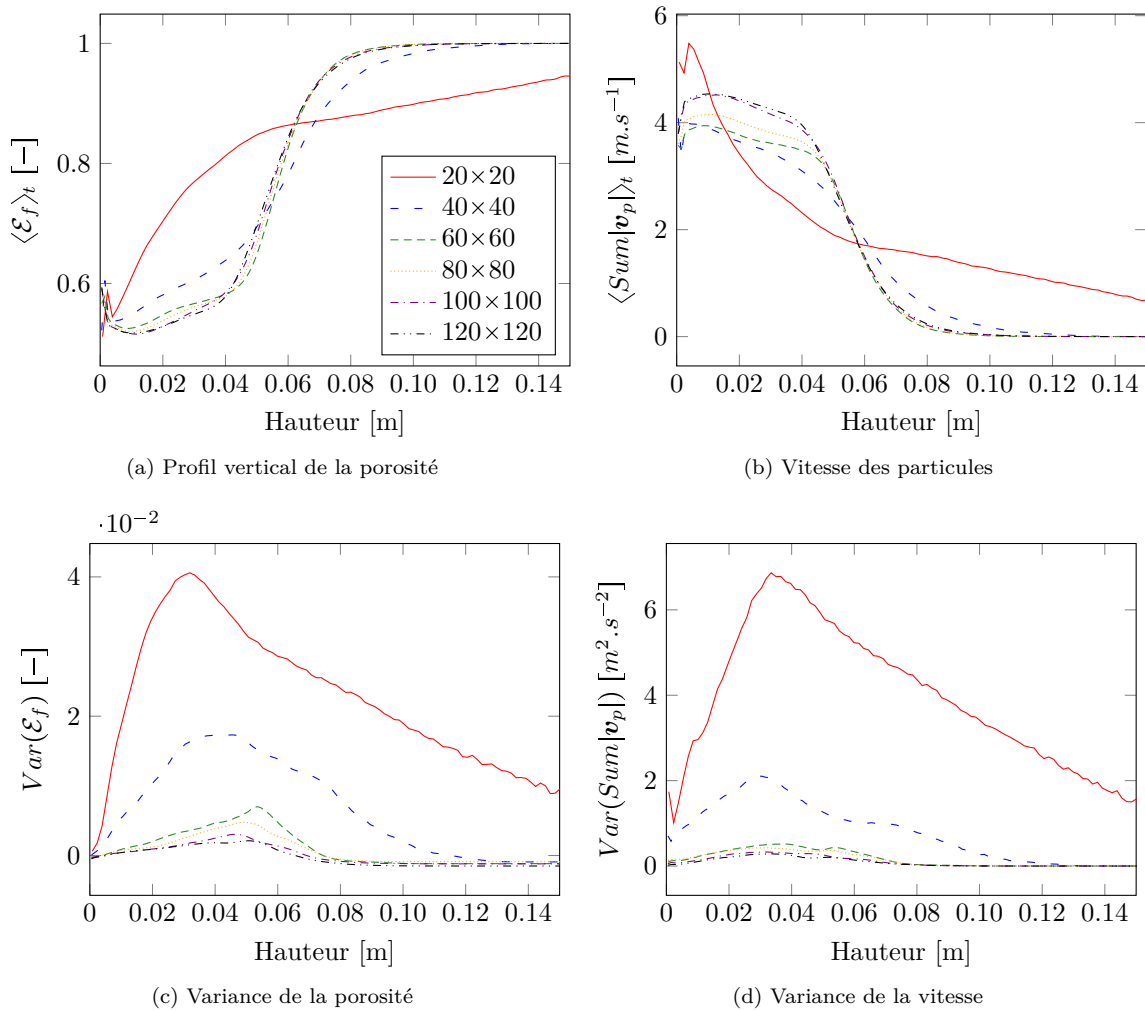


FIGURE V.15 – Evolution des statistiques du lit en fonction de la taille du domaine

élevées. Les valeurs de $Var(\mathcal{E}_f)_{xi}$, elles aussi plus élevées pour les petits systèmes, indiquent que la porosité fluctue plus que pour les domaines de section plus large.

Ces résultats traduisent une situation où des bulles de fluide occupent toute la largeur du lit et s'élèvent bien plus haut que dans le cas d'une fluidisation bouillonnante comme nous pouvons l'observer sur la figure V.16 pour laquelle, précisons le, les dimensions sont respectées.

Au terme de cette analyse portant sur l'influence de la taille du domaine sur la dynamique du lit, nous pouvons conclure que, pour la configuration étudiée, les statistiques décrivant la dynamique du lit sont identiques à partir d'une section de domaine égale à $100d_p \times 100d_p$. Ainsi, cela montre qu'il n'est pas nécessaire de réaliser d'étude sur un domaine plus large pour obtenir les statistiques décrivant le comportement d'un lit infiniment plus grand. Néanmoins, précisons que la section minimale de $100d_p \times 100d_p$ correspond au système étudié ici, et que cette étude de sensibilité à la taille de domaine réalisée sur une autre configuration de domaine mènera à une autre section minimale à partir de laquelle les statistiques convergent. Parmi les paramètres ayant certainement une influence sur la section minimale de convergence, citons par exemple :

- la quantité de particules dans le système, qui peut être exprimée comme la hauteur du lit au repos,
- le type de conditions aux limites, comme par exemple la présence de parois en lieu et place de conditions aux limites périodiques,

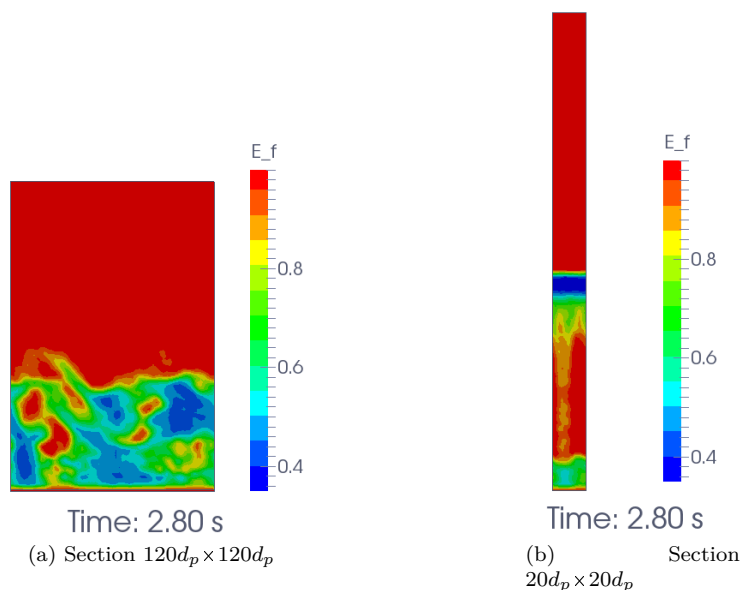


FIGURE V.16 – Distribution spatiale instantanée de la fraction volumique de fluide pour un plan de coupe passant par le milieu du domaine

- la vitesse d'injection du fluide dans le domaine, dont dépend la taille des bulles de fluide créées au sein du lit.

V – 3.3 Influence des paramètres numériques

Pour réaliser une simulation avec le modèle DEM-CFD développé au cours de cette thèse, il est nécessaire de fixer certains paramètres numériques tels que la résolution du maillage ou le pas de temps des solveurs granulaire et fluide. Aussi, pour garantir le fait que la valeur choisie pour ces paramètres n'affecte pas la qualité des simulations, une étude paramétrique de l'influence de ces paramètres sur les statistiques décrivant le comportement du lit a été réalisée. Afin de représenter les résultats de cette étude de façon concise, seuls les résultats concernant la moyenne temporelle de la somme des vitesses des particules dans le domaine sont illustrés dans ce rapport. Les résultats obtenus pour cette valeur, $\langle |U_{3D}| \rangle_{X,T}$, sont tracés sur la figure V.17.

V – 3.3.1 Influence de la taille de grille

Dans l'état actuel de l'implémentation du modèle DEM-CFD, les variables du fluide sont moyennées directement en utilisant le maillage du fluide. Ainsi, comme nous l'avons évoqué précédemment, la taille des mailles doit être suffisamment grande pour que les variables soient traitées de façon moyennée, mais les volumes de contrôle ne doivent pas être non plus trop grands pour que la dynamique de l'écoulement soit capturée et que l'interpolation des variables du fluide aux positions des particules soit représentative de l'écoulement vu par les particules.

Le principe de variables localement moyennées introduit par Anderson & Jackson [5] se base sur des volumes de contrôle dont le volume est environ un ordre de grandeur plus élevé que celui des particules. Ainsi, afin de déterminer l'influence de la taille de ces volumes de contrôle sur nos résultats, une série de simulations a été menée avec différentes résolutions de maillage. Le domaine employé possède une section de $100d_p \times 100d_p$ afin que le nombre de cellules dans les directions transverses ne soit pas trop petit et ne perturbe pas le comportement du lit, en particulier lorsque la taille des mailles est grande par rapport à celle des particules. Les maillages employés sont détaillés dans le tableau V.3 et les résultats obtenus pour la moyenne temporelle de la somme des vitesses des particules dans le domaine

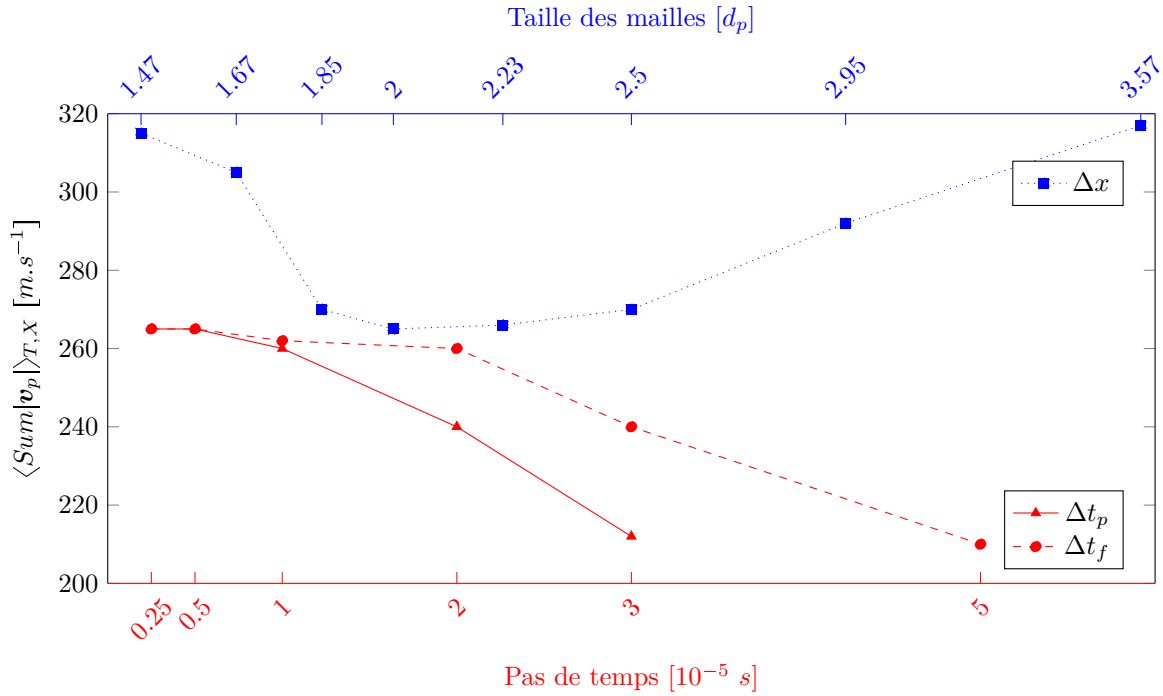


FIGURE V.17 – Influence des paramètres numériques sur la précision des résultats obtenus

sont tracés en rouge sur la figure V.17.

TABLE V.3 – Maillages employés pour l'étude de l'influence de la taille de maille pour un domaine de section $100d_p \times 100d_p$

$Nb_x \times Nb_y$	$\Delta x [d_p]$	$Nb_x \times Nb_y$	$\Delta x [d_p]$
68 × 68	1.47	44 × 44	2.23
60 × 60	1.67	40 × 40	2.5
54 × 54	1.85	34 × 34	2.95
50 × 50	2	28 × 28	3.57

Nous observons que les valeurs de $\langle [U_{3D}] \rangle_{X,T}$ obtenues pour des résolutions de maillage comprises entre $1.82 \leq \Delta x \leq 2.86$ sont quasiment identiques tandis qu'en dehors de cet intervalle, les résultats obtenus sont différents. Des résultats similaires ont été obtenus pour les autres grandeurs statistiques. Ce résultat nous indique la plage de dimensions de maille qu'il est nécessaire de respecter pour obtenir des résultats ne dépendant pas de la résolution du maillage. Ce résultat peut s'expliquer par une mauvaise prise de moyennes locales des variables du fluide en dehors de cet intervalle. En effet, une discrétisation trop grossière de l'écoulement fluide engendre une détérioration de la solution obtenue, tandis qu'un maillage trop fin ne permet pas de prendre en compte la présence des particules voisines de façon satisfaisante.

V – 3.3.2 Influence du pas de temps de la phase solide

Etant donné que les collisions interparticulaires sont très fréquentes au sein d'un lit fluidisé, il n'est pas nécessaire de préciser que les contacts entre les particules doivent être correctement modélisés. Pour cela, le pas de temps employé lors de la résolution du problème granulaire Δt_p doit être correctement fixé de façon à ce que les résultats de simulation ne soient pas tributaires de Δt_p . Comme nous l'avons présenté précédemment (voir §II – 2.2.2.b), ce pas de temps peut être exprimé en fonction du temps de collision T_C (voir équation (II.28)). Pour un écoulement granulaire sec, *ie.* sans couplage avec un fluide, il a été mis en évidence [224] que, dans le cas du modèle DEM employé, la dynamique d'un ensemble

de particules est satisfaisante pour des pas de temps $\Delta t_p < T_C/20$. Dans le cas du couplage DEM-CFD étudié ici, les moyennes temporelles, par exemple le nombre total de contacts dans le domaine et la norme de vitesse de toutes les particules, convergent vers une même valeur pour $\Delta t_p < T_C/10$ comme l'illustre la courbe aux triangles rouges de la figure V.17. Le pas de temps particulaire nécessaire à une bonne description de la dynamique moyenne du lit est donc plus élevé pour le modèle Euler-Lagrange que pour une simulation granulaire sèche. Cela peut s'expliquer par le fait que, premièrement, dans un lit fluidisé bouillonnant, les particules passent plus de temps sans rencontrer d'autres particules que dans le cas pour lequel le Δt_p maximal de la simulation en granulaire sec a été déterminé, à savoir un test de tambour tournant[224]. Cette hypothèse est confortée par les résultats présentés plus loin dans ce rapport, reliant le taux de collisions interparticulaires à la vitesse d'injection du fluide.

De plus, ce pas de temps moins contraignant qu'en simulation sèche peut résulter de la prépondérance des forces hydrodynamiques, notamment la force de traînée, sur les forces de contacts. L'approximation commise par des Δt_p trop grands est alors moins visible que lorsque les particules sont soumises aux seules forces de gravité et de contact. Ainsi des simulations avec un pas de temps fluide $\Delta t_p = T_C/10$ peuvent être réalisées, *ie.* restent stables numériquement, mais la solution obtenue n'est néanmoins pas assez précise. Rappelons que le modèle DEM à sphères molles employé ici nécessite également de respecter une forme de "CFL solide" (voir §II – 2.2.2.b). Or, dans le cas des lits fluidisés bouillonnants, la vitesse maximale des particules est une grandeur difficile à prédire et dont la plage totale de distribution est large relativement à la plage représentant 90% des vitesses (voir figure V.14).

Pour la configuration étudiée ici (voir V.1), la vitesse utilisée pour calculer la CFL solide est empiriquement estimée en fonction du rapport U_{in}/U_{mf} avec un coefficient de sécurité $k = 2$ prévenant des éventuelles sur-vitesses :

$$|\widehat{\mathbf{v}}_p| = k * U_{in} * \ln \left(\frac{U_{in}}{U_{mf}} \right) \quad (\text{V.14})$$

Remarque 12 *Cette expression est propre à la configuration étudiée ici dans le sens où les caractéristiques du système ne sont pas prises en compte. Elle est obtenue à partir d'une plage de vitesse d'entrée $U_{in} \in [0 : 7U_{mf}]$.*

Ainsi le pas de temps employé pour le traitement de la phase solide est :

$$\Delta t_p = \min \left(\frac{T_C}{10}, \frac{\delta_i^{\max}}{|\widehat{\mathbf{v}}_p|} \right) \quad (\text{V.15})$$

Où δ_i^{\max} est l'épaisseur de recouvrement maximale du modèle de sphère molle (voir II – 2.2.2).

V – 3.3.3 Influence du pas de temps de la phase fluide

Le pas de temps du solveur fluide, Δt_f , est un paramètre qui lui aussi peut avoir une influence sur la dynamique de l'écoulement modélisé. En effet, ce pas de temps doit d'une part satisfaire la condition de CFL afin de garantir la stabilité numérique lors de la résolution du problème d'advection-diffusion. Néanmoins, rappelons que si cette condition n'est pas respectée, des sous-itérations du problème d'advection sont réalisées (voir §II – 2.1). D'autre part, le déplacement des particules entre deux itérations du solveur fluide peut parfois être très important et l'approximation générée par le type de couplage temporel choisi peut alors engendrer une altération notable des résultats voir des arrêts de simulation.

Afin de connaître la valeur minimale du pas de temps fluide qu'il est nécessaire d'utiliser, une nouvelle étude paramétrique a été menée. Cette fois ci, le pas de temps particulaire est gardé fixe à $\Delta t_p = 2.5 \times 10^{-6} s$ et une série de simulations a été réalisée avec différentes valeurs de Δt_f . Comme nous pouvons le voir sur la figure V.17, les statistiques observées ne sont plus identiques à partir d'un pas de temps fluide $\Delta t_f \geq 8 \Delta t_p$. Précisons que les simulations utilisant des pas de temps $\Delta t_f \geq 24 \Delta t_p$ ont rapidement divergé alors que la condition de CFL était toujours respectée et que le temps caractéristique de convection était, selon nous, toujours suffisamment bien décrit.

V – 3.4 Paramètres de contact

Les collisions interparticulaires au sein d'un lit fluidisé étant très fréquentes, il est normal de penser que les paramètres physiques de contact influent grandement sur la dynamique de l'écoulement. Or,

il s'avère que dans le cas d'un lit fluidisé bouillonnant, peu de modifications de la dynamique globale ont été observées comme nous le présentons ci-après. Nous étudions ici l'influence de deux paramètres majeurs dans le traitement des contacts entre les particules (voir §II – 2.2.2), à savoir le coefficient de restitution élastique E_n et le coefficient de Coulomb μ_c .

V – 3.4.1 Coefficient de restitution élastique

Comme nous l'avons vu lors de la présentation du modèle de contact employé dans cette étude (voir §II – 2.2.2), le coefficient de restitution élastique normale E_n informe sur le rapport des vitesses translationnelles post- et pré-collisionnelles, c'est à dire qu'il contribue à quantifier la dissipation normale d'énergie lors d'un contact entre deux objets. La figure V.18 illustre les différences observées sur la distribution verticale (a) de la moyenne temporelle du nombre de contacts moyen par volume de contrôle, $\langle N_{\text{col}} \rangle_{xi,T}$, ainsi que (b) de la variance de la somme des normes de vitesse axiale, $Var(\text{Sum}|U_z|)_x$ [$m.s^{-1}$]. Des variations similaires à celles présentées pour $Var(\text{Sum}|U_z|)_x$ [$m.s^{-1}$]

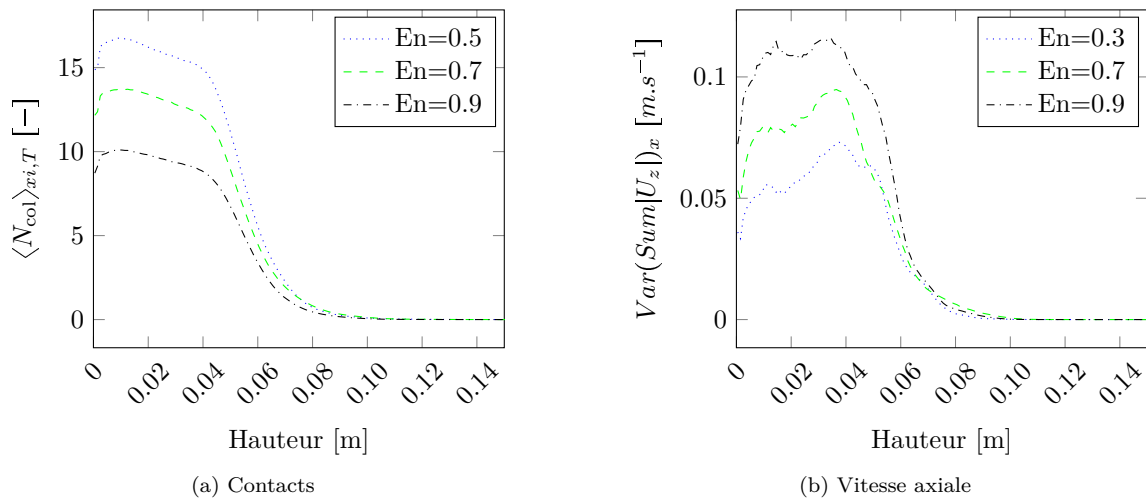


FIGURE V.18 – Evolution des statistiques en fonction du coefficient de restitution élastique E_n

sont observées pour les autres composantes de vitesse mais ces deux grandeurs sont celles présentant le plus de sensibilité au paramètre E_n . En revanche, la distribution verticale des vitesses des particules est très faiblement impactée, et la répartition de \mathcal{E}_f et $Var(\mathcal{E}_f)$ est quant à elle inchangée. Nous observons qu'une augmentation du coefficient de restitution élastique E_n engendre une plus grande fluctuation de la vitesse des particules et au sein du lit, et donc de la variance calculée.

Concernant la diminution du nombre de contacts mesurés lorsque le coefficient de restitution élastique augmente, cette observation est contraire aux résultats escomptés. En effet, comme les vitesses moyennes des particules augmentent légèrement et que les variations de vitesse augmentent nettement alors que la hauteur et la porosité du lit restent constantes, nous nous attendions à ce que le nombre de contacts soit plus élevé. Néanmoins, ce résultat peut s'expliquer par le fait que les temps de contact diminuent lorsque E_n augmente, les particules passent alors proportionnellement plus de temps à se déplacer librement pour des E_n élevés. Ainsi, à un pas de temps d'échantillonnage Δt_{sample} , moins de contacts entre les particules sont observés, ce qui explique le résultat présenté sur la figure V.18-(a).

V – 3.4.2 Coefficient de Coulomb

L'influence du coefficient de friction de Coulomb μ_C sur la dynamique d'un lit fluidisé bouillonnant à elle aussi été analysée. Rappelons que ce coefficient entre en compte dans le calcul de la force de friction tangentielle (voir II – 2.2.2). Aucune modification majeure de la vitesse translationnelle des particules n'a été observée, ce qui n'est pas surprenant car ce coefficient n'a pas d'influence sur les forces normales. En revanche, comme nous pouvons l'observer sur la figure V.19, la vitesse de rotation

des particules, ω_p , est quant à elle affectée. La moyenne temporelle de la somme des normes de

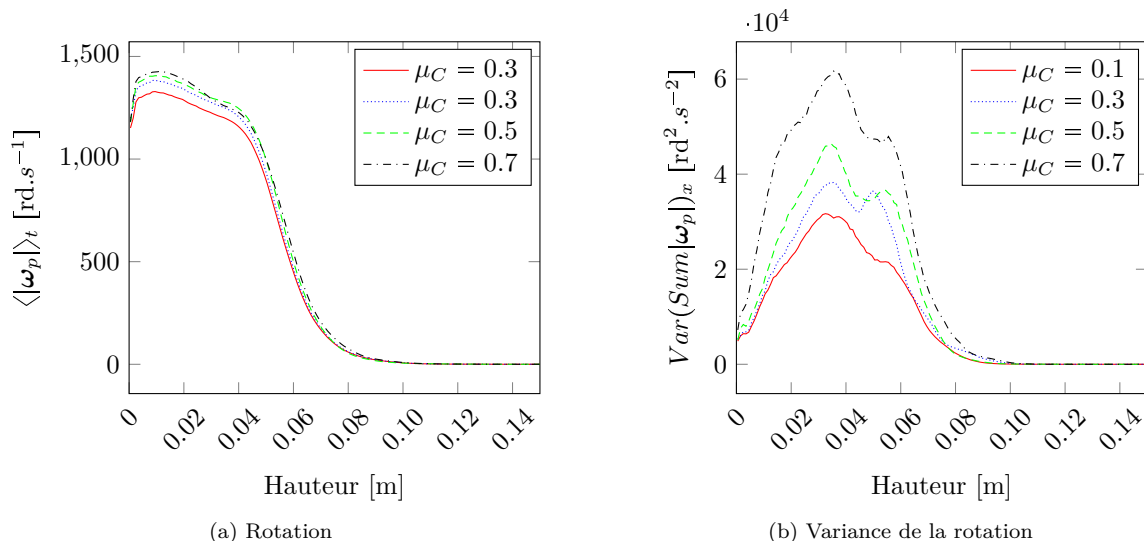


FIGURE V.19 – Evolution des statistiques en fonction du coefficient de friction μ_C

vitesse de rotation des particules au sein d'un volume de contrôle, $\langle Sum|\omega_p| \rangle_{xi,T}$, est légèrement plus faible pour des valeurs plus faibles de μ_C . Ce résultat est cohérent car la force de friction tangentielle varie linéairement en fonction du coefficient de friction (voir équation (II.17)), le couple transmis aux particules par leurs voisins est alors plus faible et la vitesse de rotation de chaque élément est ainsi moins élevée. Ce phénomène est encore mieux mis en évidence par la sous-figure V.19-(b) illustrant la variance temporelle de $Sum|\omega_p|$. En effet, l'amplitude de la vitesse de rotation des particules étant moins élevée pour de faibles valeurs de μ_C , les variations de cette grandeur autour de leur moyenne sont également plus faibles.

V – 4 Etude approfondie de lits pulsés

La dynamique de fluidisation des lits pulsés, présentée dans le chapitre de validation du code (voir §IV – 3.1), est ici étudiée plus en détail. En effet, de nombreuses autres informations peuvent être extraites de l'étude DEM-CFD par rapport à l'étude expérimentale initiale réalisée par Brown [20].

V – 4.1 Type d'analyse et représentation des résultats

Ainsi, à l'instar de l'étude menée sur les lits fluidisés bouillonnants, l'analyse du comportement des lits pulsés est basée sur l'analyse statistique des trajectoires des particules. Néanmoins, contrairement aux lits fluidisés bouillonnants pour lesquels les grandeurs temporellement moyennées sont invariantes dans les deux directions transverses⁴, et pour lesquels une représentation linéique des grandeurs en fonction de la hauteur dans le domaine est suffisante, une telle représentation des résultats n'est pas applicable aux lits pulsés. En effet, dans le cas d'une injection ne couvrant pas la totalité de la surface d'entrée, les moyennes temporelles des grandeurs caractérisant le système varient dans la direction transversale comme nous pouvons l'observer sur la figure V.20.

La représentation des variations spatiales des résultats utilisée ici est la même que celle employée par Brown, *ie.* une cartographie en deux dimensions colorée en fonction de la valeur des grandeurs observées. Pour cela, une grille similaire à celle de la simulation est utilisée pour constituer les volumes de contrôle dans lesquels les grandeurs sont localement moyennées. Les grandeurs sont, comme pour

4. dans le cas de conditions aux limites bipériodiques

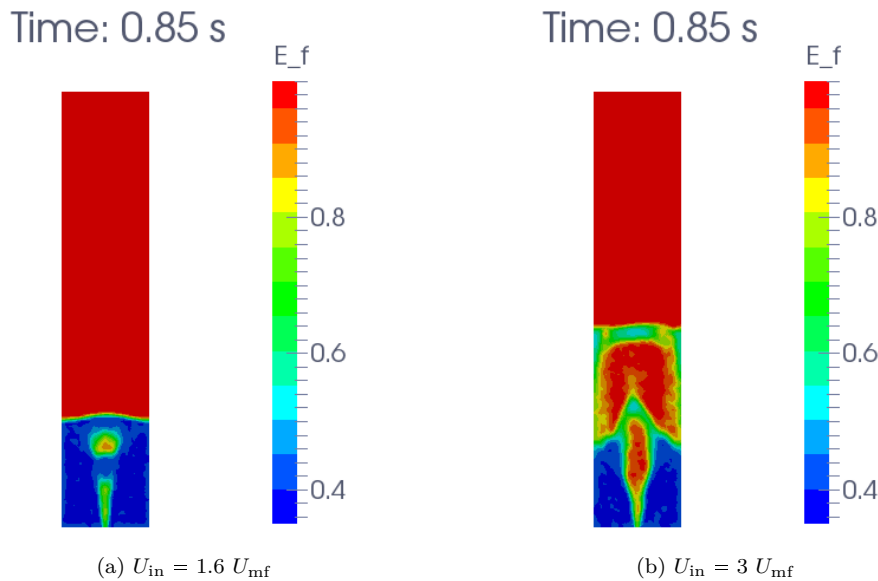


FIGURE V.20 – Exemple de lit pulsé illustrant la non-homogénéité des grandeurs statistiques dans la direction transverse

l'étude des lits bouillonnants, la position, la vitesse et le nombre de contacts des particules ainsi que les fluctuations temporelles de ces valeurs. Leurs distributions transversales pour une hauteur donnée, ou verticales pour une position transverse donnée, peuvent également être tracées afin de représenter les résultats de façon plus précise mais pour une zone plus localisée. Une autre grandeur pouvant être observée est l'évolution temporelle du saut de pression à travers le lit, que ce soit sa moyenne temporelle ou la fréquence de ses fluctuations (voir §IV – 3.2) pour plus d'information).

Notons que les critères de convergence et le choix de la fréquence d'échantillonnage sont similaires à ceux utilisés pour l'étude des lits fluidisés 3D.

V – 4.2 Résultats

De la même manière que pour les lits bouillonnants, une étude paramétrique a été menée afin d'améliorer la compréhension du comportement des lits pulsés en fonction des données physiques caractérisant le système. Ainsi, nous présentons ci-après les résultats concernant l'influence des paramètres de contact interparticulaires, qui ont cette fois-ci une incidence remarquable sur la dynamique de l'écoulement. De plus, comme le modèle DEM-CFD développé durant cette thèse a été validé dans la configuration étudiée par Brown [20, 21] puis Deb [45], il est désormais possible de faire varier les dimensions du lit, en augmentant par exemple la hauteur du lit. Mais surtout, cela ouvre également la possibilité d'augmenter la profondeur du lit et ainsi de simuler un lit pulsé 3D, de manière à étudier des systèmes dont la forme, et donc la dynamique de l'écoulement, est bien plus proche de celle des unités de production.

V – 4.2.1 Influence des paramètres de contact

Les lits pulsés constituent un type d'écoulement où l'influence des contacts inter-particulaires est particulièrement facile à visualiser. En effet, la forme spécifique de la distribution des particules (canal, fontaine, cône) est directement engendrée par les collisions entre les particules. Ainsi, la forme géométrique des structures rencontrées au sein des lits pulsés est visuellement modifiée contrairement aux lits bouillonnants pour lesquels la distribution temporellement moyennée de particules est homogène dans une section horizontale du domaine, ce qui atténue la mise en évidence de la modification de l'écoulement.

L'influence du coefficient de friction tangentielle étant plus notable que celle du coefficient de restitution élastique, nous ne présentons ici que cette analyse. Nous avons vu précédemment que dans le cas d'un lit bouillonnant, l'augmentation du coefficient de friction de Coulomb μ_C engendrait une augmentation de la rotation des particules dans tout le domaine, mais que la dynamique des particules en translation, de même que leur distribution axiale, n'était pas affectée (voir §V – 3.4.2). En revanche, dans le cas d'un lit pulsé, la modification du coefficient de friction tangentielle influe grandement sur la dynamique de l'ensemble du lit comme nous le présentons ci-après.

La figure V.21 illustre l'influence du coefficient de friction tangentielle de Coulomb dans le cas 1J-750-U3 présenté dans les tableaux IV.2 et IV.3, et pour lequel la valeur correspondant à l'expérience initiale est de $\mu_C = 0.1$.

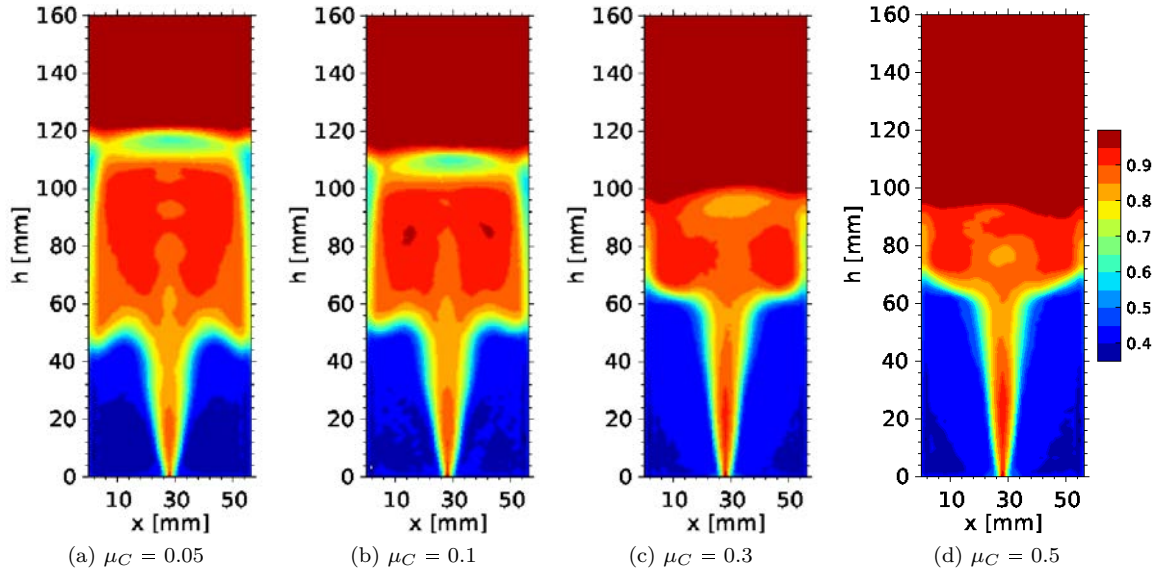


FIGURE V.21 – Influence du coefficient de friction tangentielle sur la distribution spatiale de la moyenne temporelle de la fraction volumique de fluide pour un lit pulsé à un orifice d'injection

La diminution de la hauteur du jet observée pour de plus grandes valeurs de μ_C s'explique par une augmentation de la friction entre les particules, ce qui augmente la résistance qu'elles rencontrent lors de leur progression vers le haut du domaine. Elles progressent alors plus difficilement dans le canal formé au dessus de l'orifice d'injection, et s'élèvent donc moins haut que pour de faibles coefficients de friction. La quantité de particules fluidisées étant moins importante, le saut de pression à travers le lit est lui aussi moins élevé comme nous pouvons le voir sur la figure V.22.

Seules les évolutions temporelles de Δp_{in} pour les cas $\mu_C = 0,1$ et $\mu_C = 0,5$ sont présentées pour des raisons de clarté. Précisons que ces deux valeurs peuvent correspondre à du verre avec des états de surface différents, soit poli dans le cas $\mu_C = 0.1$, soit $\mu_C = 0.5$ pour des sphères à surface rugueuse, suite à de nombreuses collisions par exemple. Nous observons que d'une part, l'amplitude des oscillations est plus faible mais également que la moyenne temporelle est elle aussi moins élevée. Cela est mis en évidence sur la figure V.23-(a), qui illustre l'évolution de ces grandeurs en fonction du coefficient de friction.

En analysant le spectre de fréquence temporelle de Δp_{in} , une diminution de la fréquence principale des harmoniques est également observée lorsque μ_C augmente, comme l'illustre la figure V.23-(b). Par ailleurs, la diminution de l'amplitude des oscillations de Δp_{in} observée sur les figures V.23-(a) et V.22 se traduit par une diminution de la puissance des harmoniques proches de f_{bulle} . Ainsi, nous pouvons dire que l'augmentation de la friction entre les particules, *ie.* du coefficient μ_C , freine le déplacement des particules, celles-ci tombent ainsi moins facilement dans la zone dépeuplée du canal formé par le jet et ralentissent le déplacement de leurs voisins. Les conséquences sont alors :

- une diminution du nombre de particules transportées de la base du domaine vers la surface du

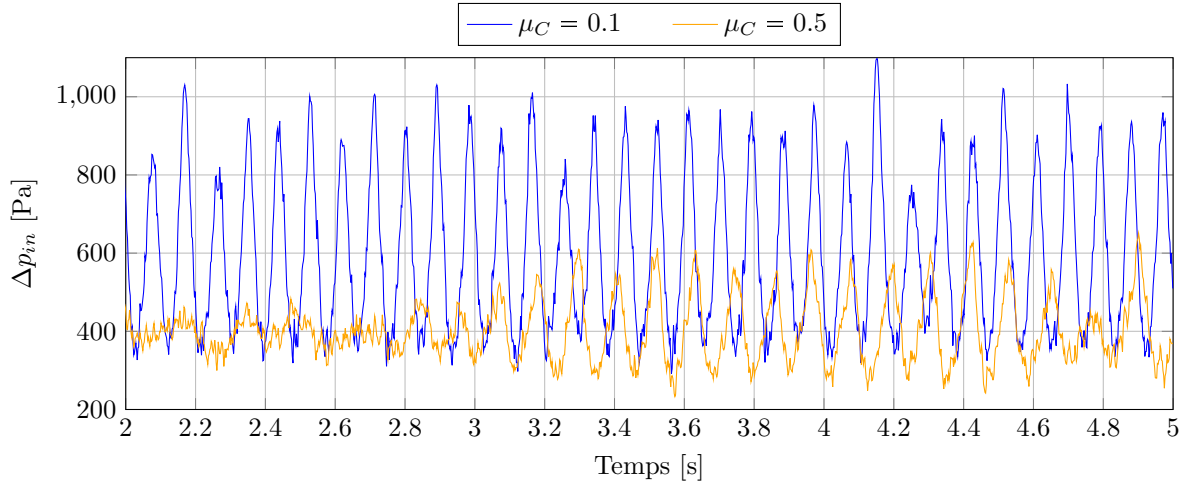


FIGURE V.22 – Evolution temporelle de la pression dynamique sur la face d'entrée du réacteur pour différents coefficients de friction

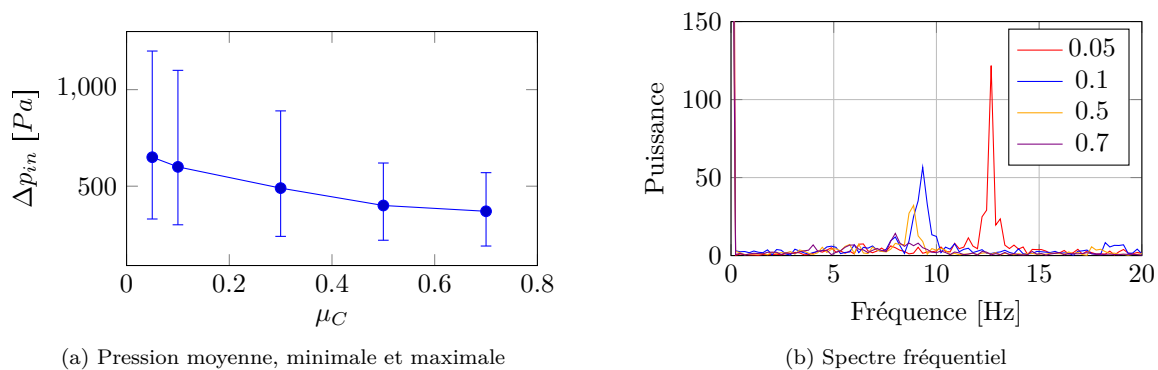


FIGURE V.23 – Influence du coefficient sur les oscillations du saut de pression dynamique sur la face d'entrée du réacteur

lit, et donc une diminution du saut de pression moyen à travers le lit, $\langle \Delta p_{in} \rangle$ et de l'amplitude de ses oscillations temporelles,

- cette diminution du nombre de particules dans le canal et l'augmentation des forces de frottement avec les particules qui forment les frontières du canal, génère une fontaine dont la hauteur est moins élevée,
- une chute moins rapide des particules dans la zone située au dessus de l'orifice d'injection, rallongeant ainsi le temps nécessaire au regroupement d'une quantité suffisante de particules pour permettre à une nouvelle bulle de fluide de se créer, et donc diminuant la valeur de f_{bulle} .

V – 4.2.2 Dynamique de bullage dans le cas d'une double injection

Les résultats moyennés temporellement permettent de quantifier et de comprendre une partie des phénomènes qui se déroulent au sein des lits pulsés. Néanmoins, l'observation de ce type d'écoulement à l'aide d'un outil de visualisation tel que Paraview par exemple, permet de mieux observer la dynamique des phénomènes se déroulant au sein des systèmes. Dans le cas du jet pulsé à deux orifices d'injection par exemple, les bulles de fluide ne remontent pas à la verticale du point d'injection mais forme un canal central comme nous pouvons l'observer sur la figure V.24.

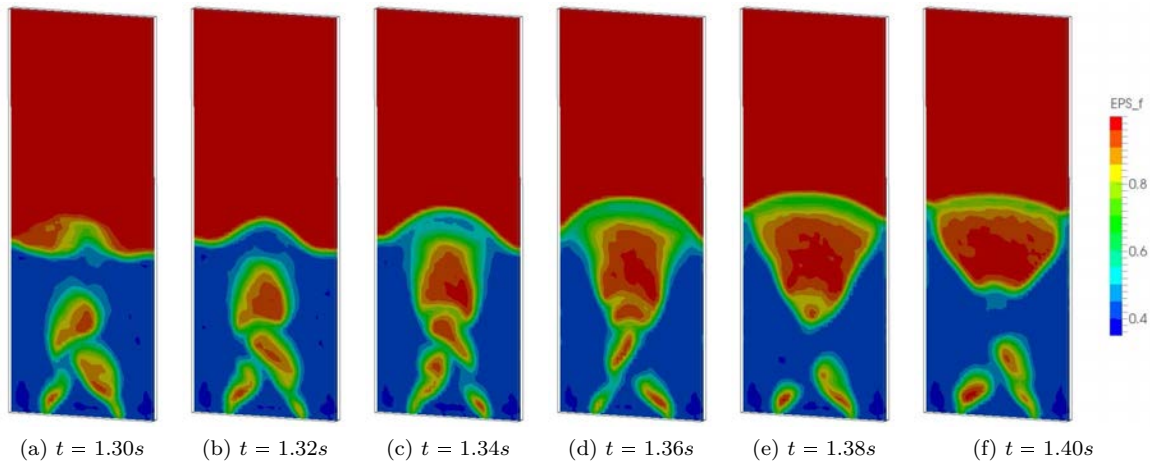


FIGURE V.24 – Dynamique de bullage dans le cas d’un lit fluidisé à deux orifices d’injection

L’apparition de ce chemin préférentiel à une faible hauteur au dessus de la face inférieure du domaine résulte d’une alternance de bulles qui sont “aspirées” vers le centre du réacteur en raison de la présence de la zone dépeuplée créée par la bulle voisine, qui favorise ainsi l’écoulement vers le centre du domaine. Ainsi, les bulles provenant de chaque jet se succèdent les unes aux autres, remontant dans la traînée des précédentes. Notons que ce genre de phénomène ne peut typiquement pas être mis en évidence par un autre outil que la visualisation dynamique 2D ou 3D.

V – 4.2.3 Modification de la géométrie

Le modèle DEM-CFD ayant précédemment été validé dans les différentes configurations d’écoulement étudiées par Brown, nous pouvons alors l’utiliser avec confiance pour simuler des systèmes dont les caractéristiques sont différentes tout en restant assez proches pour être sur que les résultats obtenus soient corrects. Ainsi, afin de mieux mettre en évidence les mécanismes de formation et de progression des bulles au sein d’un lit pulsé, nous avons fait varier les caractéristiques du domaine. Tout d’abord, nous présentons les résultats d’une augmentation de la hauteur du lit réalisée dans un domaine dont les dimensions sont conservées égales à celles du réacteur d’origine. Puis, la profondeur du domaine, jusqu’alors égale à quelques diamètres de particule, est augmentée afin d’étudier un lit fluidisé 3D à section carrée.

V – 4.2.3.a Hauteur initiale du lit

Lorsque les dimensions du réacteur sont conservées mais que la quantité de particules dans le domaine est augmentée, par exemple doublée ou triplée, la dynamique de fluidisation est grandement modifiée. En effet, pour une même vitesse d’injection, comme le fluide se répartit dans le lit de particules au fil de sa progression vers le haut du domaine, et a plus de chemin à parcourir avant d’atteindre la surface lorsque la quantité de particules est augmentée, les bulles n’atteignent pas forcément le haut du domaine. De plus l’augmentation du poids du lit que cela engendre influe sur le saut de pression moyen à travers le lit de particules, ainsi que sur la formation et le développement des bulles dans le système. En revanche, pour de plus fortes vitesses d’injection, les bulles formées à la base du lit migrent jusqu’à la surface et l’augmentation de la hauteur du lit permet d’étudier leur évolution lorsqu’elles remontent dans le lit.

Comme nous pouvons l’observer sur la figure V.25, plus les bulles de fluide montent dans le réacteur, plus leur taille augmente, notamment en raison de la coalescence des bulles entre-elles et de leur alimentation par le fluide provenant du jet et s’écoulant à travers les particules. Cette coalescence est rendue possible par la différence de vitesse de remontée entre les bulles ayant beaucoup de particules au dessus d’elles et dont la remontée est donc difficile, et celles étant dans leur sillage qui ont peu de particules au dessus d’elles et qui peuvent donc remonter plus rapidement. De plus, comme la

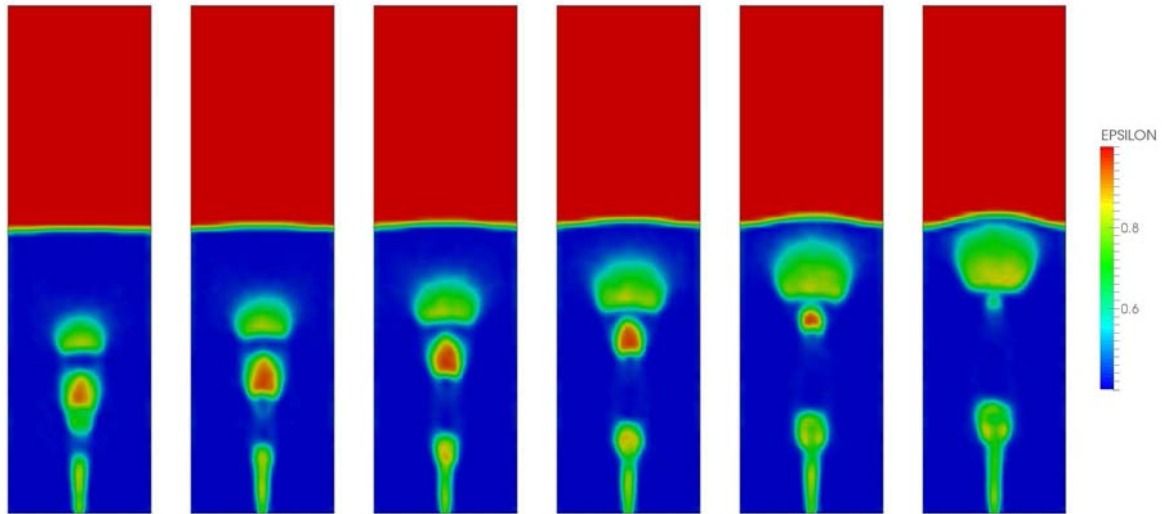


FIGURE V.25 – Coalescence de bulles dans un lit pulsé de 200 000 particules sur une durée $T \in [0.8s : 0.9s]$

progression des bulles est ralentie par les frottements des particules se trouvant au dessus d'elles, plus leur taille est grande, plus leur progression est lente, et de ce fait, les bulles leur succédant les rejoignent et augmentent encore plus leur taille.

Pour 300 000 particules dans le lit, soit trois fois plus que dans l'expérience de Brown, et pour une vitesse d'injection identique au cas 200 000 particules, la progression de la bulle est plus difficile. En effet, comme nous pouvons le voir sur la figure V.26, la dimension de la bulle croît progressivement jusqu'à atteindre la largeur du domaine, la surface d'échange entre la bulle et les particules se trouvant au dessus d'elle ne cesse donc de croître et d'entraver sa remontée. Contrairement au cas 200 000 particules vu précédemment, aucune coalescence de bulle n'est observée, mais la taille des bulles croît néanmoins grâce au fluide qui remonte plus rapidement entre les particules que la bulle ne progresse. Il arrive que des bulles semblent disparaître au cours de leur migration vers la surface, comme par exemple celles se trouvant à l'extrémité de la zone dépeuplée au dessus de l'orifice d'injection, en réalité, le fluide qui les compose s'échappe de la bulle par le haut lorsque le poids des particules au dessus de la bulle n'est pas trop élevé. En revanche, si la quantité de particules au dessus de la bulle est trop élevée, le fluide a du mal à s'écouler et la pression sur la face d'entrée augmente, alors une nouvelle bulle de fluide se forme et est progressivement alimentée par le fluide qui peut de nouveau s'écouler plus facilement. La bulle commence alors à remonter, et ainsi de suite.

V – 4.2.3.b Lit pulsé 3D

Comme nous l'avons expliqué en présentation des lits pulsés (voir §I – 2.3), les domaines employés pour l'étude expérimentale des lits pulsés sont généralement profonds de seulement quelques diamètres de particule afin de pouvoir visualiser les structures se créant et évoluant au sein du lit l'aide de moyens tels que la PIV. Mais il faut garder en tête que ces géométries de domaine contraignent grandement la dynamique de fluidisation car les bulles sont coincées entre les parois parallèles. Leur développement est donc différent de celui des bulles se formant dans les lits pulsés utilisés à des fins industrielles, qui sont en trois dimensions. De plus, le faible nombre de mailles dans la profondeur (seulement 3 dans l'étude numérique de Deb *et al.* [45]) ne permet pas de simuler précisément l'écoulement.

Ainsi, afin de se rapprocher au mieux de ces configurations 3D où les bulles de fluide ne sont pas en contact avec les parois, la profondeur du système étudié par Brown est augmentée de sorte à ce que la section du réacteur soit carrée. L'orifice d'injection, couvrant 5×5 cellules du maillage employé pour l'étude 2D, est situé au centre de la face inférieure du domaine. Les particules employées sont celles de $550 \mu m$ utilisées par Brown et la vitesse d'entrée est fixée à $U_{bulk} = 2U_{mf}$. Comme nous pouvons l'observer sur la figure V.27, les bulles se formant au sein du lit évoluent librement sans toucher les

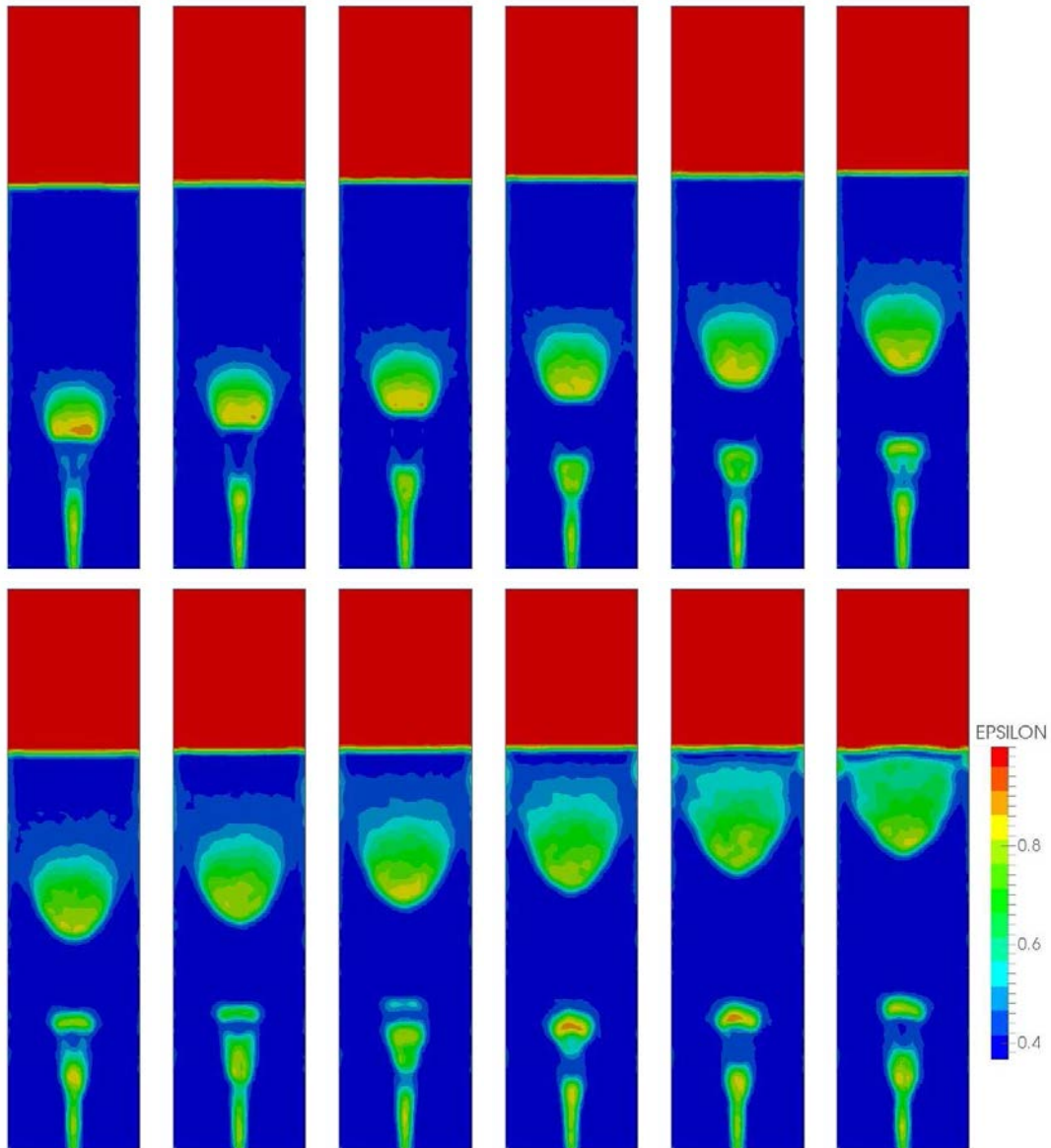


FIGURE V.26 – Remontée d’une bulle dans un lit pulsé de 300 000 particules sur une durée $T \in [0.63s : 0.85s]$

parois du système.

Cette représentation de l’évolution de structures au sein d’un lit 3D nous permet de constater que la bulle est de forme oblongue juste après s’être détachée du jet. Sa morphologie se modifie par la suite : d’une part, le bas de la bulle devient concave en raison de la remontée plus rapide d’autres particules par dessous, et d’autre part, le haut de la bulle s’aplatit en raison de la résistance générée par les particules se trouvant au dessus d’elle.

V – 5 Conclusion

Au terme de ce cinquième chapitre, un ensemble d’outils statistiques permettant d’analyser le comportement des lits fluidisés a été proposé. Une attention particulière a été portée à la détermination de la fréquence et du temps d’échantillonnage utilisés afin que les statistiques décrivant la dynamique du lit ne soit pas dépendantes de ces paramètres. Ces outils ont tout d’abord permis d’analyser en

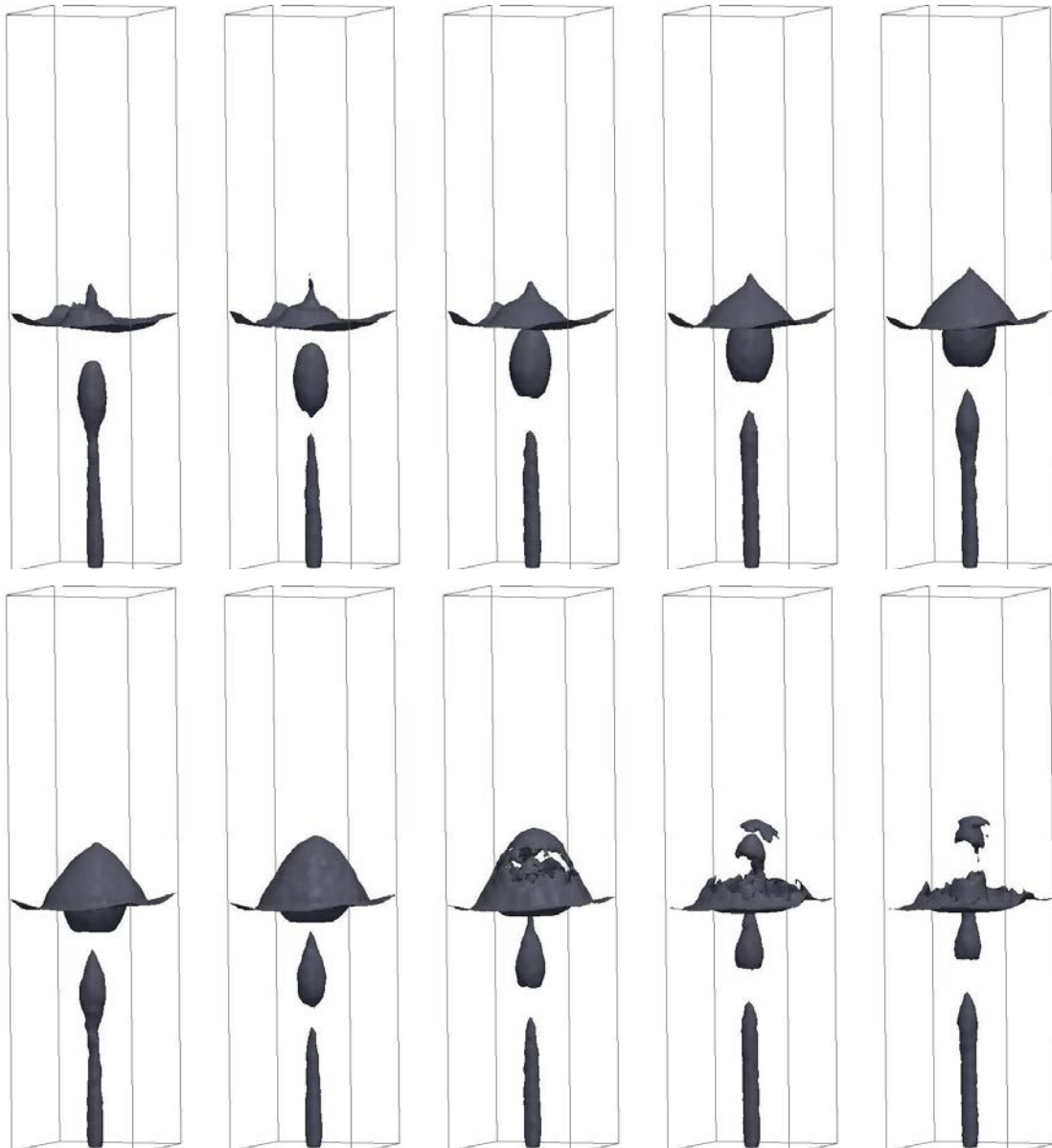


FIGURE V.27 – Iso-valeur de $\mathcal{E}_f = 0.85$ illustrant la remontée d'une bulle dans un lit pulsé 3D composé de 2 000 000 particules sur une durée $T \in [0.48s : 0.57s]$

détails la dynamique des lits fluidisés bouillonnants en fonction de la vitesse d'injection du fluide dans le domaine. Ensuite, des études paramétriques ont été menées d'une part dans le but de connaître l'influence de certains paramètres numériques tels que la résolution du maillage ou les pas de temps fluide et solide, et d'autre part afin d'étudier l'influence de certains paramètres physiques tels que le coefficient de friction de Coulomb. Dans la dernière partie de ce chapitre, la géométrie des lits pulsés utilisés pour l'étape de validation (voir chapitre précédent) a été modifiée afin d'étudier la formation et la migration de bulles de fluide au travers du lit de particules, tout d'abord dans un domaine de faible épaisseur, puis dans un lit en trois dimensions.

Les résultats présentés ci-dessus permettent de mieux comprendre le comportement des lits fluidisés denses et les phénomènes les caractérisant. Les outils présentés ici peuvent être utilisés pour une multitude d'autres analyses permettant de compléter cette étude. Parmi elles, citons par exemple : l'influence des conditions aux limites sur les faces latérales du domaine, ou l'influence de la hauteur du lit de particules sur le régime d'ébullition.