
Multi-Echelle

Sommaire

VI – 1	Introduction	122
VI – 2	Modèle DLM-FD	122
VI – 2.1	Formulation mathématique	122
VI – 2.2	Discrétisation temporelle	124
VI – 2.2.1	Splitting d’opérateurs	124
VI – 2.2.2	Convergence temporelle	125
VI – 2.3	Résolution spatiale	126
VI – 2.3.1	Stencil	126
VI – 2.3.2	Validation	126
VI – 2.4	Performances informatiques	127
VI – 3	Extraction de lois de traînée	128
VI – 3.1	Dérivation des équations de Navier Stokes dans les systèmes multi-particules	128
VI – 3.2	Approche semi-empirique	129
VI – 3.3	Déduction de $f(\mathcal{E}_f)$ à partir du saut de pression	129
VI – 3.4	Approche purement empirique	130
VI – 3.4.1	Corrélations basées sur des données expérimentales	131
VI – 3.4.2	Corrélations basées sur des données de simulation numérique	131
VI – 4	Comparaison directe	132
VI – 4.1	Choix du système et dimensionnement	132
VI – 4.1.1	Paramètres physiques	133
VI – 4.1.2	Hauteur du domaine	134
VI – 4.1.3	Paramétrage de la simulation DLM-FD	134
VI – 4.1.4	Paramétrage de la simulation DEM-CFD	135
VI – 4.2	Comparaison des résultats	135
VI – 4.2.1	Hauteur de lit	135
VI – 4.2.2	Fraction volumique de fluide	136
VI – 4.2.3	Vitesse des particules	137
VI – 5	Conclusion	139

VI – 1 Introduction

Comme nous l'avons introduit au début du chapitre II, les écoulements fluide-particules peuvent être étudiés et modélisés en se plaçant à différentes échelles spatiales, à savoir micro, méso et macro. Le modèle DEM-CFD implémenté au cours de cette thèse permet d'étudier des systèmes comportant un nombre de particules compris entre quelques milliers et plusieurs dizaines de millions d'éléments. A cette échelle de modélisation, les trajectoires des particules sont connues individuellement, mais les équations décrivant le fluide sont résolues de façon moyennée en espace, *ie.* sur une grille plus large que le diamètre des particules. L'échange de quantité de mouvement entre la phase fluide et la phase solide est alors réalisé à l'aide d'une corrélation de la force hydrodynamique, souvent réduite à la seule force de traînée. La plateforme logicielle PeliGRIFF, dans laquelle le modèle méso a été implémenté, permet également de réaliser des simulations d'écoulements particuliers à l'échelle micro. Parmi les types de résolution directe présentés dans la section II – 1, la méthode implémentée dans PeliGRIFF est celle des Multiplicateurs de Lagrange Distribués utilisée sur une grille cartésienne fixe combinée à une méthode de Domaines Fictifs, dont l'acronyme est DLM-FD.

L'objectif de ce chapitre est d'étudier des simulations à l'échelle micro afin d'améliorer celles réalisées à l'échelle méso. Pour cela, dans la suite de ce chapitre, nous détaillons d'abord la méthode DLM-FD utilisée pour les simulations à l'échelle micro ainsi que ses capacités à retrouver des solutions connues pour des écoulements fluide-particules. Puis nous présentons différentes méthodes employées pour extraire des lois de traînée et les principaux résultats obtenus par la communauté scientifique dans différentes configurations d'écoulement. Enfin, nous comparons les résultats de deux simulations conjointes d'un seul et même système, l'une réalisée à l'échelle micro, l'autre à l'aide du modèle DEM-CFD implémenté au cours de cette thèse. Cela dans le but d'évaluer les différences de comportement du lit de particules lorsque celui-ci est simulé avec les deux approches.

VI – 2 Modèle DLM-FD

Nous détaillons ci-après le modèle DLM-FD employé pour nos simulations à l'échelle micro. Plus d'informations concernant ce modèle peuvent être trouvées dans [222, 223].

Soit Ω un domaine borné de \mathbb{R}^d , $d \in \langle 2, 3 \rangle$ et appelons $\partial\Omega$ la limite de Ω . Supposons que Ω soit rempli de N particules $P_i(t)$, $i = 1, \dots, N$. Pour des raisons de simplicité, nous considérons $N = 1$, l'extension à plusieurs éléments est simple. Les conditions aux limites pour la vitesse du fluide sur $\partial\Omega$ sont de type Dirichlet. Dans la suite de cette partie concernant le modèle DLM-FD, nous travaillons avec des grandeurs adimensionnelles que nous distinguons par l'ajout d'une étoile au symbole des grandeurs dimensionnelles.

VI – 2.1 Formulation mathématique

Les équations régissant le système peuvent être adimensionnées en introduisant les grandeurs suivantes : L_c pour la longueur, U_c pour la vitesse, T_c pour le temps (en considérant que nous utilisons une échelle de temps convectif), $\rho_f^* U_c^2$ pour la pression et $\rho_f^* U_c^2 / L_c$ pour le mouvement de corps-rigide des multiplicateurs de Lagrange. ρ_f^* représente la densité du fluide. La formulation variationnelle des équations de conservation combinées qui gouvernent le fluide et le déplacement des particules furent initialement dérivées par Glowinski *et al.* [88] pour des objets de flottabilité non-nulle, puis ces travaux furent étendus aux particules de flottabilité nulle et non-nulle par Patankar *et al.* [169, 167, 198].

Dans cette étude, la formulation originelle de Glowinski *et al.* [88] est employée, pour laquelle le mouvement de corps rigide est assuré en contraignant le champ de vitesse du fluide. L'écoulement est considéré incompressible et le fluide Newtonien, respectivement. Les phases fluide et solide sont décrites par les équations de conservation suivantes, écrites sous leur forme variationnelle :

- Les équations combinées de quantité de mouvement

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) \cdot \mathbf{v} d\mathbf{x} - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{v} d\mathbf{x} + \frac{1}{\mathcal{R}e_c} \int_{\Omega} \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{v} d\mathbf{x} + \int_{P(t)} \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{v} d\mathbf{x} = \mathbf{0}, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}_0(\Omega) \quad (\text{VI.1})$$

$$(\rho_r - 1) \left[V_P \left(\frac{d\mathbf{U}}{dt} - \mathcal{F}r \frac{\mathbf{g}^*}{g^*} \right) \cdot \mathbf{V} + \left(\mathbf{I}_P \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{I}_P \cdot \boldsymbol{\omega} \right) \cdot \boldsymbol{\xi} \right] - \sum_j \mathbf{F}_{cj} \cdot \mathbf{V} - \sum_j \mathbf{F}_{cj} \cdot \boldsymbol{\xi} \times \mathbf{R}_j - \int_{P(t)} \boldsymbol{\lambda} \cdot (\mathbf{V} + \boldsymbol{\xi} \times \mathbf{r}) d\mathbf{x} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{V} \in \mathbb{R}^d, \boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^{\tilde{d}}, \quad (\text{VI.2})$$

$$\int_{P(t)} \boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{u} - (\mathbf{U} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})) d\mathbf{x} = 0, \quad \forall \boldsymbol{\alpha} \in \Lambda(t), \quad (\text{VI.3})$$

- L'équation de continuité

$$- \int_{\Omega} q \nabla \cdot \mathbf{u} d\mathbf{x} = 0, \quad \forall q \in \mathcal{P}_0(\Omega). \quad (\text{VI.4})$$

Où $\mathbf{u} \in \mathcal{V}_{\partial\Omega}(\Omega)$ est le vecteur vitesse du fluide, $p \in \mathcal{P}(\Omega)$ est la pression, $\boldsymbol{\lambda} \in \Lambda(t)$ la vitesse des multiplicateurs de Lagrange distribués, $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^d$ le vecteur vitesse de translation des particules, $\boldsymbol{\omega} \in \mathbb{R}^{\tilde{d}}$ la vitesse angulaire des particules, \tilde{d} le nombre de composantes non-nulles de $\boldsymbol{\omega}$ (si $d = 2$: $\boldsymbol{\omega} = (0, 0, \omega_z)$ et $\tilde{d} = 1$; si $d = 3$: $\boldsymbol{\omega} = (\omega_x, \omega_y, \omega_z)$ et $\tilde{d} = 3 = d$), $(\mathbf{v}, q, \boldsymbol{\alpha}, \mathbf{V}, \boldsymbol{\xi})$ les fonctions tests pour $(\mathbf{u}, p, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{U}, \boldsymbol{\omega})$ respectivement, $\mathbf{F}_{cj} \in \mathbb{R}^d$ la force de contact, $\mathbf{R}_j \in \mathbb{R}^d$ les vecteurs entre les centres de gravité des particules et le point de contact, \mathbf{r} le vecteur position par rapport au centre de gravité de la particule, $V_P = M^*/(\rho_s^* L_c^d) \in \mathbb{R}$ le volume adimensionnel de la particule, M^* la masse de la particule, $\mathbf{I}_P = \mathbf{I}_P^*/(\rho_s^* L_c^{d+2}) \in \mathbb{R}^{\tilde{d} \times \tilde{d}}$ le tenseur d'inertie adimensionnel de la particule, $\rho_s^* \in \mathbb{R}$ la densité de la particule, $\mathbf{g}^* \in \mathbb{R}^d$ l'accélération de la gravité et $g^* \in \mathbb{R}$ le module de l'accélération de la gravité.

Dans les équations précédentes, les espaces fonctionnels suivants ont été introduits :

$$\mathcal{V}_0(\Omega) = \{\mathbf{v} \in \mathcal{H}^1(\Omega)^d \mid \mathbf{v} = \mathbf{0} \text{ on } \partial\Omega\}, \quad (\text{VI.5})$$

$$\mathcal{V}_{\partial\Omega}(\Omega) = \{\mathbf{v} \in \mathcal{H}^1(\Omega)^d \mid \mathbf{v} = \mathbf{u}_{\partial\Omega} \text{ on } \partial\Omega\}, \quad (\text{VI.6})$$

$$\mathcal{P}(\Omega) = \{q \in \mathcal{L}^2(\Omega) \mid \int_{\Omega} q d\mathbf{x} = 0\}, \quad (\text{VI.7})$$

$$\Lambda(t) = \mathcal{H}^1(P(t))^d, \quad (\text{VI.8})$$

$$\Lambda_T(t) = \mathcal{H}^1(P(t)). \quad (\text{VI.9})$$

Ainsi que les nombres adimensionnels :

$$\text{nombre de Reynolds} \quad \mathcal{R}e_c = \frac{\rho_f^* U_c L_c}{\eta^*}, \quad (\text{VI.10})$$

$$\text{nombre de Froude} \quad \mathcal{F}r = \frac{g^* L_c}{U_c^2}, \quad (\text{VI.11})$$

$$\text{rapport de densité} \quad \rho_r = \frac{\rho_s^*}{\rho_f^*}, \quad (\text{VI.12})$$

Où η^* est la viscosité du fluide. Le nombre de Froude peut s'exprimer en fonction de $(\rho_r, \mathcal{R}e_c)$ de deux façons différentes selon que l'échelle de vitesse introduite soit visqueuse ou inertielle [238, 235]. Le système présente donc deux paramètres adimensionnels indépendants : ρ_r et $\mathcal{R}e_c$.

VI – 2.2 Discrétisation temporelle

Les équations de conservation du fluide sont résolues à l'aide d'un schéma temporel d'ordre deux utilisant un schéma de Crank-Nicholson pour le terme de diffusion et d'Adams-Bashford pour le terme d'advection. Mais la précision temporelle de l'algorithme général est néanmoins d'ordre un en raison du splitting d'opérateur employé.

VI – 2.2.1 Splitting d'opérateurs

Le problème (VI.1)-(VI.2)-(VI.3)-(VI.4) est résolu à l'aide d'une schéma à pas fractionnaire de Marchuk-Yanenko (MY) à l'ordre 1. Ainsi, les principales étapes du calcul réalisées à chaque itération sont les suivantes :

1. Une méthode de projection L2 pour la résolution du problème de Navier-Stokes pour calculer $\mathbf{u}^{n+1/2}$ et p^{n+1} :

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} - \frac{1}{2\mathcal{R}e_c} \nabla \mathbf{u}^* &= -\nabla p^n + \frac{1}{2\mathcal{R}e_c} \nabla \mathbf{u}^n, \\ &- \frac{1}{2} (3\mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^n - \mathbf{u}^{n-1} \cdot \nabla \mathbf{u}^{n-1}) - \alpha \boldsymbol{\lambda}^n, \end{aligned} \quad (\text{VI.13})$$

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^*, \quad \frac{\partial \psi}{\partial n} = 0 \text{ sur } \partial\Omega, \quad (\text{VI.14})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^{n+1/2} &= \mathbf{u}^* - \Delta t \nabla \psi, \\ p^{n+1} &= p^n + \psi - \frac{\Delta t}{2\mathcal{R}e_c} \nabla^2 \psi. \end{aligned} \quad (\text{VI.15})$$

2. Un problème granulaire, étape de prédiction :

- trouver $\mathbf{U}^{n+1/3}$ et $\boldsymbol{\omega}^{n+1/3}$ tels que :

$$(\rho_r - 1)V_P \frac{\mathbf{U}^{n+1/3} - \mathbf{U}^n}{\Delta t} = (\rho_r - 1)V_P F_r \frac{\mathbf{g}}{g} + \sum_j \mathbf{F}_{cj}, \quad (\text{VI.16})$$

$$(\rho_r - 1)\mathbf{I}_P \frac{\boldsymbol{\omega}^{n+1/3} - \boldsymbol{\omega}^n}{\Delta t} = \sum_j \mathbf{R}_j \times \mathbf{F}_{cj} + (\rho_r - 1)\boldsymbol{\omega}^n \times \mathbf{I}_P \cdot \boldsymbol{\omega}^n, \quad (\text{VI.17})$$

- mettre à jour la position des particules $\mathbf{X}^{n+1/3}$

3. Un problème de domaine fictif pour trouver \mathbf{u}^{n+1} , $\mathbf{U}^{n+2/3}$, $\boldsymbol{\omega}^{n+2/3}$ et $\boldsymbol{\lambda}^{n+1}$:

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^{n+1/2}}{\Delta t} + \boldsymbol{\lambda}^{n+1} = \alpha \boldsymbol{\lambda}^n, \quad (\text{VI.18})$$

$$(\rho_r - 1)V_P \frac{\mathbf{U}^{n+2/3} - \mathbf{U}^{n+1/3}}{\Delta t} - \int_{P(t)} \boldsymbol{\lambda}^{n+1} d\mathbf{x} = \mathbf{0}, \quad (\text{VI.19})$$

$$(\rho_r - 1)\mathbf{I}_P \frac{\boldsymbol{\omega}^{n+2/3} - \boldsymbol{\omega}^{n+1/3}}{\Delta t} - \int_{P(t)} r \times \boldsymbol{\lambda}^{n+1} d\mathbf{x}, \quad (\text{VI.20})$$

$$\mathbf{u}^{n+1} - (\mathbf{U}^{n+2/3} + \boldsymbol{\omega}^{n+2/3} \times r) = \mathbf{0} \text{ dans } P(t) \quad (\text{VI.21})$$

4. Un problème granulaire, étape de correction :

- imposer $\mathbf{X}^{n+2/3} = \mathbf{X}^n$ et trouver \mathbf{U}^{n+1} et $\boldsymbol{\omega}^{n+1}$ tels que :

$$(\rho_r - 1)V_P \frac{\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^{n+2/3}}{\Delta t} = \sum_j \mathbf{F}_{cj}, \quad (\text{VI.22})$$

$$(\rho_r - 1)\mathbf{I}_P \frac{\boldsymbol{\omega}^{n+1} - \boldsymbol{\omega}^{n+2/3}}{\Delta t} = \sum_j \mathbf{R}_j \times \mathbf{F}_{cj}, \quad (\text{VI.23})$$

- mettre à jour la position des particules \mathbf{X}^{n+1}

Précisons que ce splitting d'opérateur offre une meilleure précision en utilisant un forçage explicite, c'est à dire en prenant $\alpha = 1$ dans les équations (VI.13) et (VI.18).

VI – 2.2.2 Convergence temporelle

Le pas de temps du solveur fluide nécessite tout d'abord de respecter une condition de CFL liée au traitement explicite du terme d'advection. Qui plus est, comme mis en évidence dans [], en raison de l'utilisation d'un schéma d'Adams-Bashford, la condition de stabilité est vérifiée pour une condition de CFL qui dans notre cas doit inférieure à 0.3. Ainsi, le pas de temps fluide doit respecter :

$$\Delta t_f < \frac{0.3 \Delta x}{|\mathbf{u}_f|} \quad (\text{VI.24})$$

D'autre part, le splitting d'opérateur engendre une erreur due au couplage temporel entre les phases fluide et solide. De ce fait, pour obtenir une solution convergée, il est nécessaire de décrire suffisamment finement le temps caractéristique relatif au régime d'écoulement. Dans le cas d'un écoulement inertiel, ce temps est :

$$\tau_{\text{Conv}} = \frac{d_p}{|\mathbf{u}_f|} \quad (\text{VI.25})$$

et pour un écoulement en régime de Stokes :

$$\tau_{\text{Diff}} = \frac{\rho_f d_p^2}{\mu_f} \quad (\text{VI.26})$$

Dans cette étude nous jugeons qu'une discrétisation minimale de $100 \Delta t_f$ par temps caractéristique est nécessaire pour une reproduction fidèle de l'écoulement. Ainsi, la condition générale sur le pas de temps fluide est donnée par :

$$\Delta t_f = \min \left(\frac{0.3 \Delta x}{|\mathbf{u}_f|}, \frac{\tau_{\text{Conv}}}{100}, \frac{\tau_{\text{Diff}}}{100} \right) \quad (\text{VI.27})$$

La figure VI.1 illustre la convergence temporelle obtenue pour deux régimes d'écoulements, $\mathcal{Re} = 0.01$ et $\mathcal{Re} = 100$, à travers un arrangement cubique simple de sphères dans les cas $\alpha = 0$ et $\alpha = 1$. La solution en régime de Stokes est connue analytiquement grâce aux travaux de Zick & Homsy [246] tandis que la solution à $\mathcal{Re} = 100$ provient d'une extrapolation de Richardson à $\Delta x = 0$.

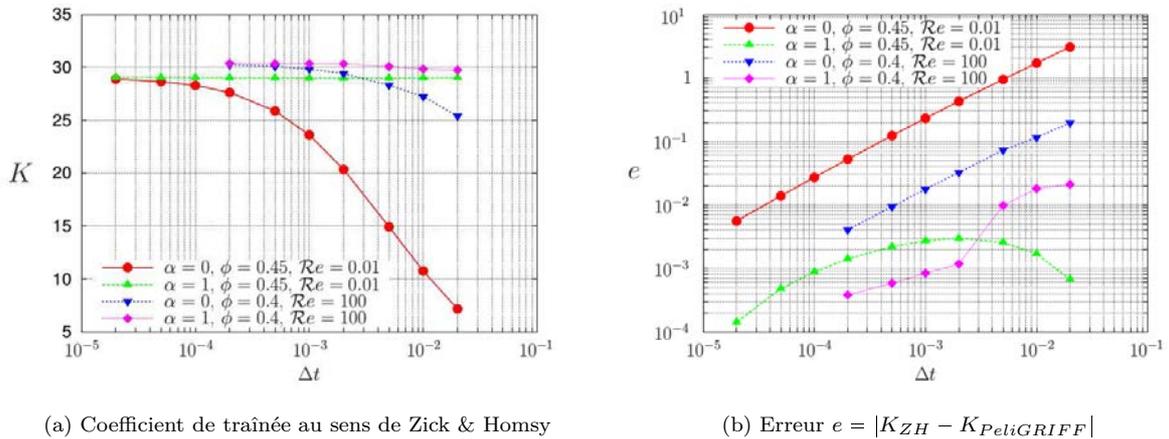


FIGURE VI.1 – Convergence temporelle pour un écoulement à travers un assemblage cubique simple de sphère en fonction du régime d'écoulement et du type de forçage

Au regard de la figure VI.1, nous observons une convergence en $\mathcal{O}(\Delta t_f)$ quelque soit le type de forçage et de régime d'écoulement. Néanmoins, l'analyse des courbes de convergence nous permet de dire que d'une part l'erreur est plus importante pour un écoulement en régime de Stokes par rapport à un régime inertiel. D'autre part, dans le cas d'un forçage explicite à l'étape de prédiction du fluide ($\alpha = 1$ dans le sous problème 1), l'amplitude de l'erreur est significativement plus faible pour $\mathcal{Re} = 0.01$ et un ordre de grandeur plus petite pour $\mathcal{Re} = 100$. Ainsi, pour étudier des écoulements à faible nombre de Reynolds, il est préférable d'utiliser $\alpha = 1$ pour ne pas être obligé d'utiliser des valeurs de Δt_f qui rendraient le calcul prohibitif.

VI – 2.3 Résolution spatiale

Pour une simulation à l'échelle micro, la résolution du maillage et les stencils employés influent directement sur la précision de la solution obtenue et donc sur la qualité de la modélisation.

VI – 2.3.1 Stencil

Notre modèle DLM-FD utilise un schéma volumes finis / grille décalée similaire à celui utilisé dans le modèle DEM-CFD pour résoudre les équations de conservation du fluide. Le terme d'advection est résolu à l'aide d'un schéma TVD complété d'un limiteur de pente de Superbee, tandis que le terme de diffusion est traité avec un schéma centré. La précision spatiale de l'algorithme général sans inclusion de particule est donc d'ordre deux. Comme présenté dans les précédents articles détaillant le modèle DLM-FD implémenté dans PeliGRIFF [222, 223], les points de collocation permettant d'imposer la contrainte de corps rigide au sein de la particule sont localisés aux mêmes nœuds que les variables fluides. Néanmoins, comme représenté sur la figure VI.2-(a), une série de points doit être disposée de façon aussi uniforme que possible sur la surface de la particule afin de garantir une bonne représentation numérique du diamètre de particule.

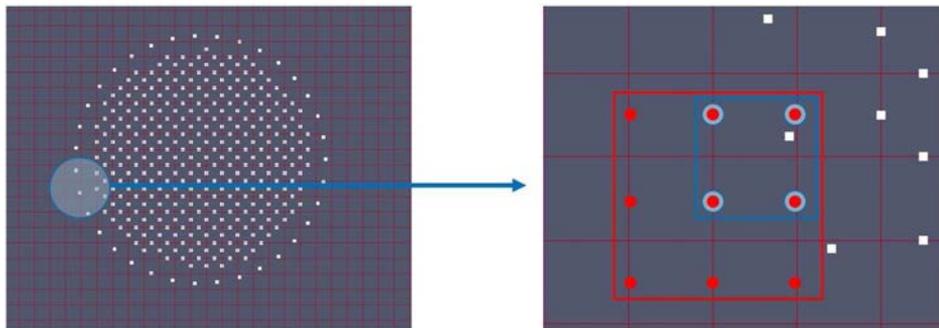


FIGURE VI.2 – (a) Répartition des points DLM-FD à l'intérieur et sur la surface d'un disque pour une grille décalée 2D. (b) Méthode d'interpolation multi-linéaire (points entourés en bleu) et quadratique (points entourés en rouge) du champ de vitesse sur un point de la surface de la particule

Afin d'améliorer la précision de la reconstruction du champ de vitesse fluide à la surface de la particule, une interpolation quadratique est utilisée au lieu d'une interpolation multi-linéaire comme présenté dans [180]. Sur la figure VI.2-(b), le stencil à 9 points en 2D (et 27 points en 3D) utilise un maximum de points du fluide, *ie.* extérieurs à la particule, pour reconstruire la solution à l'interface.

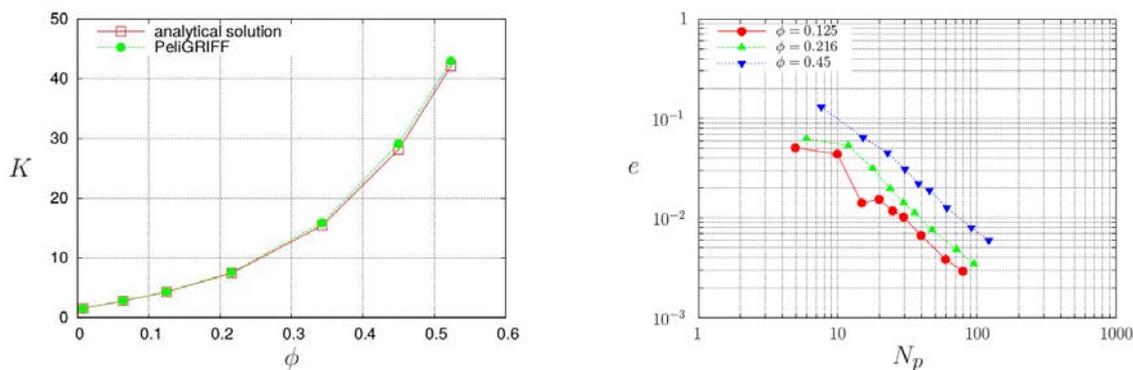
VI – 2.3.2 Validation

A l'échelle micro, il est indispensable de réaliser les simulations sur des maillages suffisamment fins pour pouvoir considérer les résultats obtenus comme une reproduction fidèle de la dynamique de l'écoulement fluide. Ainsi, afin de connaître la discrétisation spatiale requise pour l'obtention d'une description jugée convenable, il est nécessaire de réaliser des tests de convergence en maillage sur une configuration d'écoulement pour laquelle la solution exacte est connue. Or, dans le cas d'une inclusion de particules dans le fluide, très peu de problèmes peuvent être résolus de manière analytique. Nous

utilisons deux solutions exactes bien connues : (i) la vitesse de Stokes d'une particule isolée sédimentant dans un domaine infini, et (ii) l'écoulement en régime de Stokes à travers un arrangement infini cubique simple de sphères pour lequel la solution analytique fut dérivée par Zick & Homsy [246]. Cette dernière solution est particulièrement intéressante dans notre cas car elle permet de vérifier la convergence en maillage dans des configurations d'écoulements allant d'une sphère isolée dans un domaine infini ($\mathcal{E}_f = 1$), à une concentration de particules égale au packing cubique simple ($\mathcal{E}_f = 1 - \pi/6 \simeq 0.476$). Pour une telle configuration, la relation entre la vitesse superficielle, le saut de pression imposé à travers le lit et le coefficient de friction K peut s'écrire de la façon suivante pour une sphère centrée dans un boîte tri-périodique :

$$\frac{\Delta p^*}{L^*} = \frac{9}{2} \frac{\eta^*}{a^{*2}} \phi K V^* \quad (\text{VI.28})$$

Où L^* et a^* représentent la longueur de l'arête de la boîte cubique et le rayon de la sphère, respectivement. Ainsi, les résultats de Zick & Homsy [246] permettent d'obtenir analytiquement l'évolution de K en fonction de la concentration de particules $\phi = 1 - \mathcal{E}_f$. La figure VI.3 illustre d'une part les très bons résultats obtenus par le code PeliGRIFF par comparaison à la solution analytique. D'autre part, les courbes de convergence en maillage indiquent un ordre de convergence en $N_p^{-1.3}$ ainsi qu'une augmentation de l'erreur de la solution calculée lorsque la concentration en particules augmente.



(a) Coefficient de traînée K en fonction de la fraction volumique de solide ϕ pour une résolution spatiale de 40 points par diamètre

(b) Convergence de la solution calculée en fonction du nombre de point par diamètre de particule N_p

FIGURE VI.3 – Comparaison de résultats de simulation par rapport à la solution analytique pour un écoulement à travers un arrangement infini cubique simple de sphères pour $Re = 0.01$

Nous observons que pour une concentration de particules égale à $\phi = 0.45$, c'est à dire pour une porosité de lit correspondant approximativement à celle d'un lit bouillonnant, l'erreur commise vis à vis de la solution analytique n'est que de 4% pour une discrétisation spatiale de 24 points par diamètre de particule. Dans cette étude, nous considérons une telle approximation comme acceptable et décidons donc d'employer une résolution de maillage de 24 points par diamètre de particules pour les simulations présentées ci-après (voir section VI – 4).

VI – 2.4 Performances informatiques

A l'inverse du modèle DEM-CFD utilisé dans les chapitres précédents pour lequel la résolution du problème granulaire était la plus chronophage face au problème fluide en raison de la grande quantité de particules par rapport au nombre de mailles fluides, pour le modèle présenté ici, la majeure partie du temps de simulation est passée dans la résolution du problème fluide. En effet, nous avons conclu précédemment (voir §VI – 2.3) qu'une résolution minimum de 24 points par diamètre de particules était nécessaire à une bonne description de l'écoulement, tandis que la taille de maille employée dans le modèle Euler-Lagrange est environ deux fois plus grande que le diamètre des particules. Or, comme nous l'avons vu lors de l'étude des performances informatiques du code PeliGRIFF (voir §III – 6),

le comportement parallèle du solveur fluide est d'autant meilleur que le nombre de cellules fluides par cœur est important. Le choix de la charge de calcul par cœur est donc un compromis entre le temps passé, le nombre de cœurs utilisés et les performances du code. Ainsi, dans cette étude, nous optons pour un nombre de cellules fluides par cœur compris entre 250 000 et 500 000. La résolution du problème granulaire est quant à elle si peu coûteuse qu'elle est réalisée sur un seul cœur de calcul.

VI – 3 Extraction de lois de traînée

Une des principales difficultés rencontrées lors d'une démarche de changement d'échelle entre les modèles micro et les modèle Euler-Lagrange est la prise en compte de l'influence des particules voisines sur la force de traînée exercée sur un élément de la phase solide. En effet, comme nous l'avons abordé en partie II – 2.3.2, de nombreuses équipes de recherche à travers le monde proposent des lois de traînée permettant de décrire la force hydrodynamique perçue par une particule en fonction de la concentration de particules. Même si la majorité des formulations employées dans les modèles Euler-Lagrange et Euler-Euler sont une combinaison de l'équation d'Ergun [67] et de Wen & Yu [225], d'autres formulations de la force de traînée furent proposées au fil du temps, soit pour des régimes d'écoulement et des concentrations de particules donnés, soit pour de larges plages de $\mathcal{R}e_p$ et de \mathcal{E}_f . Ces formulations peuvent être extraites de différentes façons, nous en recensons ci-après les principales, en nous basant sur différents ouvrages de référence [125, 30, 70, 38] et articles de synthèse [52, 136, 12].

Avant cela, présentons les différentes notations employées pour exprimer l'effet de la concentration de particules sur la force de traînée d'une sphère dans un système multi-particules, \mathbf{f}_d . Elle peut tout d'abord s'écrire comme le rapport des forces :

$$f(\mathcal{E}_f, \mathcal{R}e) = \frac{\mathbf{f}_d}{\mathbf{f}_{d,S}} \quad (\text{VI.29})$$

Où $\mathbf{f}_{d,S}$ est la force de traînée s'exerçant sur une particule isolée, \mathbf{f}_d et $\mathbf{f}_{d,S}$ étant calculée avec la même vitesse superficielle. La prise en compte de la présence de particules voisines sur le déplacement d'un élément peut également être exprimé comme le rapport des vitesses d'une particule isolée sédimentant dans un domaine infini et d'un ensemble de particules sédimentant d'un seul tenant :

$$g(\mathcal{E}_f, \mathcal{R}e) = \frac{|\mathbf{v}_{p,bulk}|}{|\mathbf{v}_{p,S}|} \quad (\text{VI.30})$$

Les équations (VI.29) et (VI.30) sont liées [52] par la relation :

$$f(\mathcal{E}_f) = \frac{1}{(g(\mathcal{E}_f))^2} \frac{C_{D,S}}{C_D} \mathcal{E}_f \quad (\text{VI.31})$$

Enfin, une autre notation couramment employée, que nous avons d'ailleurs utilisée en partie II – 2.3.2, consiste à normaliser la force de traînée \mathbf{f}_d par la force exercée sur une particule isolée en régime de Stokes :

$$F(\mathcal{E}_f, \mathcal{R}e) = \frac{\mathbf{f}_d}{3\pi\mu_f d_p (|\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p|)} \quad (\text{VI.32})$$

VI – 3.1 Dérivation des équations de Navier Stokes dans les systèmes multi-particules

Comme nous l'avons dit lors de la validation du modèle DLM-FD (voir VI – 2.2.2), la solution analytique des équations de Navier-Stokes (NS) dans le cas d'une inclusion de particules n'est connue que dans le cas d'un écoulement en régime de Stokes autour d'une sphère isolée dans un domaine infini [204] ou pour un arrangement infini cubique simple de sphères monodisperses [246]. Précisons que la solution fournie par Zick & Homsy tend vers la solution de Stokes dans le cas où l'espacement entre les sphères tend vers l'infini. Néanmoins, d'autres équipes se sont attelées à la dérivation des équations

de NS à travers une suspension plus ou moins dense de particules, toujours pour de faibles nombres de Reynolds, mais ces formulations utilisent toutes des constantes faisant office de terme de fermeture. Parmi les différentes dérivations proposées au fil du temps, citons par exemple celles de Batchelor [9] pour un arrangement aléatoire de sphères et Barnea & Mizrahi [8] pour de faibles concentrations de particules. D'après Di Felice [52], la formulation de Batchelor offre de meilleurs résultats que celle de Barnea *et al.* pour $1 \leq \mathcal{E}_f \leq 0.95$. Toujours d'après Di Felice [52], pour des concentrations de particules plus élevées, la formulation proposée par Reed & Anderson [181] correspond mieux aux résultats que celle présentée 20 ans plus tôt par Happel [92]. Ces différentes formulations sont données dans le tableau VI.1. Une telle approche a également été employée pour dériver des formulations de $f(\mathcal{E}_f)$ pour des valeurs de $\mathcal{R}e$ plus élevées [131, 58], mais les résultats obtenus restent mitigés.

TABLE VI.1 – Formulations de la fonction de porosité $f(\mathcal{E}_f)$ pour un écoulement en régime de Stokes pour de faibles concentrations de particules (Batchelor [92] et Barnea *et al.* [8]) et des concentrations de particules plus importantes (Reed *et al.* [181] et Happel [92])

Auteur	Formulation
Batchelor (1972) [9]	$f(\mathcal{E}_f) = \frac{\mathcal{E}_f}{1 - 6.55(1 - \mathcal{E}_f)}$
Barnea <i>et al.</i> (1973) [8]	$f(\mathcal{E}_f) = [1 + k(1 - \mathcal{E}_f)^{1/3}] \mathcal{E}_f \quad k \in [1 : 2]$
Reed <i>et al.</i> (1980) [181]	$f(\mathcal{E}_f) = \frac{[1 + 4.7(1 - \mathcal{E}_f)] \mathcal{E}_f}{1 + 1.83(1 - \mathcal{E}_f)}$
Happel (1958) [92]	$f(\mathcal{E}_f) = \frac{[3 + 2(1 - \mathcal{E}_f)^{5/3}] \mathcal{E}_f}{3 + 4.5(1 - \mathcal{E}_f)^{1/3} + 4.5(1 - \mathcal{E}_f)^{5/3} - 3(1 - \mathcal{E}_f)^2}$

VI – 3.2 Approche semi-empirique

La force de traînée exercée sur une particule en présence de voisines peut également être formulée en se basant sur l'idée qu'un fluide peuplé de particules est assimilable à un pseudo-fluide dont les caractéristiques (densité et viscosité) sont celles du mélange fluide-particules [188, 203]. Ainsi, sur ce principe, Hawksey [94] modifia l'expression d'une particule isolée sédimentant dans un écoulement de Stokes et proposa :

$$g(\mathcal{E}_f, \mathcal{R}e) = \frac{v}{v_S} = \mathcal{E}_f^2 \exp\left(\frac{-2.5(1 - \mathcal{E}_f)}{1 - \frac{39}{64}(1 - \mathcal{E}_f)}\right) \quad (\text{VI.33})$$

Zuber [247] montra plus tard que cette expression donne des résultats satisfaisants pour des $\mathcal{R}e$ allant jusqu'à 58.

En utilisant le même raisonnement, Barnea *et al.* [8] proposèrent une expression de $f(\mathcal{E}_f)$ valable pour une large plage de nombres de Reynolds :

$$\begin{cases} f(\mathcal{E}_f) = \frac{1 + (1 - \mathcal{E}_f)^{1/3}}{\mathcal{E}_f} \exp\left(\frac{5(1 - \mathcal{E}_f)}{3\mathcal{E}_f}\right) & \mathcal{R}e \text{ grand} & (\text{VI.34a}) \\ f(\mathcal{E}_f) = \frac{1 + (1 - \mathcal{E}_f)^{1/3}}{\mathcal{E}_f^2} & \mathcal{R}e \text{ petit} & (\text{VI.34b}) \end{cases}$$

VI – 3.3 Déduction de $f(\mathcal{E}_f)$ à partir du saut de pression

Comme nous l'avons vu lors de l'explication sur l'origine du saut de pression dynamique à travers un lit, fixe ou fluidisé, de particules (voir I – 3.1) la force de traînée et le saut de pression sont intimement liés. En effet, l'écoulement à travers un lit dense de particules est fortement modifié comme l'illustre la figure VI.4. Rappelons que l'expression proposée par Blake [15] permet de décrire le saut de pression

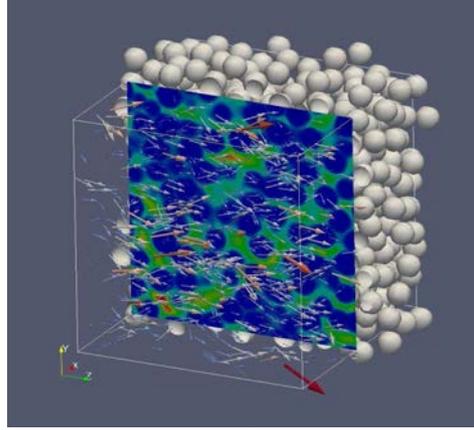


FIGURE VI.4 – Illustration d'un écoulement à travers un lit dense de particules

pour des écoulements en régime de Stokes tandis que l'expression de Burke & Plummer [25] est quant à elle valable pour de fortes valeurs de Re . Les expressions de Blake-Kozeny et de Burke-Plummer peuvent être réécrites [52] en utilisant le formalisme de la fonction de porosité, respectivement :

$$f(\mathcal{E}_f) = 8.33 \frac{(1 - \mathcal{E}_f)}{\mathcal{E}_f^2} \quad (\text{VI.35})$$

$$f(\mathcal{E}_f) = 5.33 \frac{1}{\mathcal{E}_f^2} \quad (\text{VI.36})$$

Or il est évident qu'aucune de ces deux formulations ne s'approche de la valeur désirée $f(\mathcal{E}_f) = 1$ lorsque \mathcal{E}_f tend vers 1, contrairement à l'expression semi-empirique proposée par Foscolo *et al.* [77]. Selon Gibilaro [84], la formulation du saut de pression à travers une population de particules que proposèrent Foscolo *et al.* [77] offre de bon résultats pour des porosités allant jusqu'à $\mathcal{E}_f = 0.9$. Son expression est la suivante :

$$\frac{\Delta P}{L} = \frac{\rho_f u^2 (1 - \mathcal{E}_f)}{d_p} \left(\frac{17.3}{Re} + 0.336 \right) \mathcal{E}_f^{-4.8} \quad (\text{VI.37})$$

Où les constantes 17.3 et 0.336 ont été évalués grâce à des résultats expérimentaux. Plus tard, en s'inspirant des travaux de Dallavale sur l'expression du coefficient de traînée en régime d'écoulement intermédiaire, Gibilaro [85] proposa une amélioration de l'expression de Foscolo :

$$\frac{\Delta P}{L} = \frac{\rho_f u^2 (1 - \mathcal{E}_f)}{d_p} \left[\left(\frac{17.3}{Re} \right)^\alpha + 0.336^\alpha \right] \mathcal{E}_f^{-4.8} \quad (\text{VI.38})$$

avec

$$\alpha = 2.55 - 2.1[\tanh(20\mathcal{E}_f - 8)^{0.33}]^3 \quad (\text{VI.39})$$

Notons que les expressions (VI.37) et (VI.38) sont toutes deux de la forme

$$f(\mathcal{E}_f) \simeq \mathcal{E}_f^{-3.8} \quad (\text{VI.40})$$

VI – 3.4 Approche purement empirique

Enfin, une méthode purement empirique peut être employée pour déterminer la force de traînée sur une particule au sein d'une population. De façon générale, cette technique consiste à faire passer une courbe par un nuage de points obtenus de façon expérimentale ou par le biais de simulations à l'échelle micro. De nombreuses équipes proposèrent de telles expressions, valables soit pour de faibles plages de Re et/ou de \mathcal{E}_f mais avec de très bon résultats, soit pour de plus larges plages de Re et/ou de \mathcal{E}_f avec une approximation moins fidèle des résultats expérimentaux ou numériques.

VI – 3.4.1 Corrélations basées sur des données expérimentales

Les premières propositions faites pour prendre en compte la concentration de particules se basaient sur la vitesse terminale de chute d'un ensemble de particules par rapport à celle d'une particule isolée étaient de la forme :

$$g(\mathcal{E}_f) = \frac{|\mathbf{v}_{p,bulk}|}{|\mathbf{v}_{p,S}|} = \mathcal{E}_f^n \quad (\text{VI.41})$$

Citons par exemple les travaux de Lewis *et al.* [135] et surtout de Richardson & Zaky [185] qui proposèrent une série d'expressions de n valables pour une large plage de Re , prenant en compte ou non les effets de la proximité des parois.

D'autres équipes étudient le rapport des forces de traînée d'une particule dans un lit et d'une particule isolée en cherchant à obtenir une expression de la forme :

$$f(\mathcal{E}_f) = \frac{\mathbf{f}_d}{\mathbf{f}_{d,S}} = \mathcal{E}_f^{-\gamma} \quad (\text{VI.42})$$

Comme nous l'avons évoqué en partie II – 2.3.2, les premières propositions correspondant aux résultats expérimentaux [189, 184] se basaient sur une valeur constante de γ à haut et bas Reynolds, comme par exemple la proposition de Wen & Yu [225] : $\gamma = 3.7$. De façon générale les valeurs proposées [119, 120, 186] étaient comprises entre 3.6 et 3.8. Puis Di Felice [51] proposa une expression de γ prenant en compte le régime d'écoulement.

$$\gamma = 3.7 - 0.65 \exp \frac{[1.5 - \log(Re)]^2}{2} \quad (\text{VI.43})$$

VI – 3.4.2 Corrélations basées sur des données de simulation numérique

Enfin, avec l'augmentation constante des capacités de calcul et grâce aux progrès réalisés en modélisation numérique des écoulements fluide-particules, il est de nos jours possible de calculer de façon précise la force exercée par le fluide sur une particule dans une population comme l'illustre la figure VI.5.

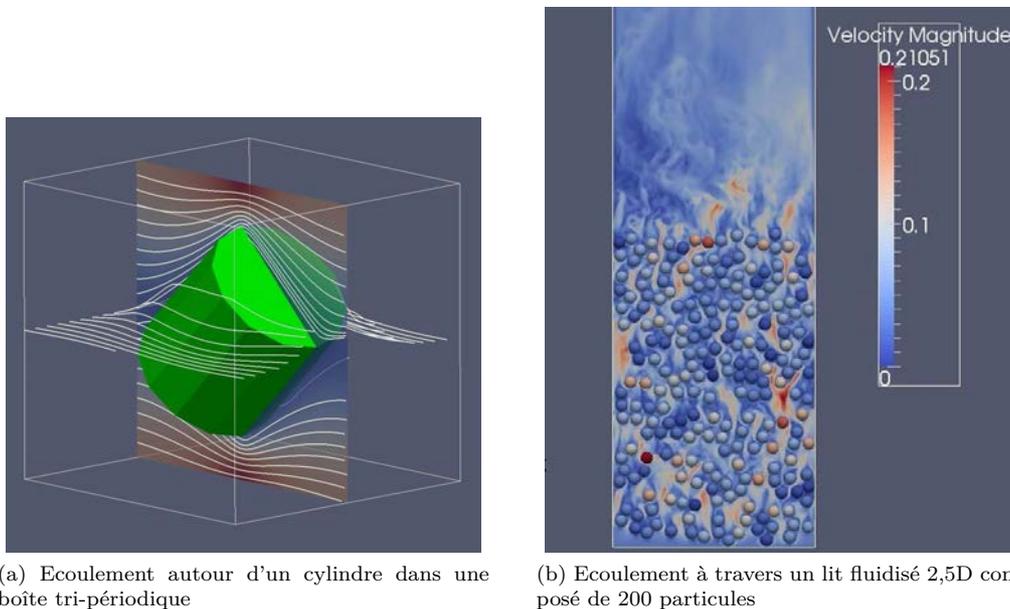


FIGURE VI.5 – Illustrations de la description du champ fluide obtenu à l'aide de simulations PeliGRIFF à l'échelle micro

Ainsi, de nombreuses équipes proposèrent des corrélations en se basant sur des simulations à l'échelle micro avec des modèles de type LBM, IBM ou DLM-FD. Relevons par exemple les travaux de Hill *et al.* [122, 121, 96, 97] qui, en se basant sur des simulations LBM, proposèrent une première formulation montrant de bons résultats pour des écoulements à travers des arrangements structurés et aléatoires de sphères pour des nombres de Reynolds faibles mais finis, $Re < \mathcal{O}(1)$, [96] et pour des Reynolds plus élevés, $\mathcal{O}(1) < Re < \mathcal{O}(100)$ [97]. Van der Hoef *et al.* [218, 12, 14, 13] utilisèrent eux aussi des simulations LBM pour proposer des corrélations valables jusqu'à $Re = 1000$ pour une suspension monodisperse et montrant de bons résultats pour des systèmes polydisperses.

Les simulations à l'échelle micro offrent également la possibilité d'extraire des lois de comportement pour d'autres contributions de force hydrodynamique que la force de traînée, où pour des particules non-sphériques. Par exemple, Zastanwy *et al.* [240] proposent des corrélations de force de traînée et de portance pour des particules non-sphériques. De même, Holzer *et al.* [99, 100] présentent des formulations de la force de traînée, de portance ainsi que du couple hydrodynamique s'exerçant sur des particules non-sphériques. Notons également le travail de Loth [141] qui, se basant sur méthode de point force, propose une expression de force de traînée pour des particules non-sphériques de formes régulières et irrégulières. Néanmoins, toutes ces relations proposées pour des particules non-sphériques ne prennent pas en compte l'effet des particules voisines.

Dans cette étude, aucune extraction de loi de traînée n'a été réalisée car les corrélations déjà existantes dans la littérature offrent des résultats satisfaisants pour les configurations étudiées comme nous le présentons dans la partie suivante.

VI – 4 Comparaison directe

Une autre méthode pouvant être employée pour transférer des informations de l'échelle micro vers l'échelle méso (ainsi que de l'échelle méso vers l'échelle macro par ailleurs), est la comparaison directe de deux systèmes identiques modélisés conjointement avec chacune des approches. D'une part, la résolution directe permet de simuler des systèmes ne comportant guère plus que quelques milliers de particules pour un temps et des ressources de calcul jugés raisonnables, *ie.* de quelques semaines sur quelques centaines de cœurs. Et d'autre part, l'approche Euler-Lagrange offre quant à elle la possibilité de simuler des systèmes composés d'un bien plus grand nombre de particules. Cela implique donc tout d'abord de choisir une configuration qu'il est possible de simuler avec les deux approches.

VI – 4.1 Choix du système et dimensionnement

Pour rester dans le même contexte que le reste de ce rapport, la comparaison entre les deux échelles est réalisée sur une simulation de lit fluidisé. Pour cela, le domaine étudié ne doit être ni trop grand afin de pouvoir être simulé à l'échelle micro, ni trop petit afin d'avoir un nombre de cellules suffisant dans chaque direction pour pouvoir réaliser une simulation DEM-CFD pertinente.

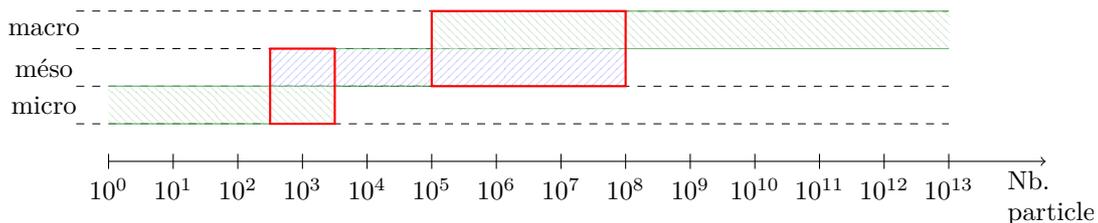


FIGURE VI.6 – Tailles de lits fluidisés possibles d'analyser avec les différentes approches

Comme illustré dans la figure VI.6 et en lien avec les contraintes de temps de calculs évoquées précédemment (voir section VI – 2.2), ce compromis se situe approximativement entre 500 et 5000 particules. Le premier système choisi pour cette étude est composé de 1000 particules, ce qui représente un lit de 10 particules dans chaque direction et le deuxième est composé de 2000 particules, soit deux

fois la hauteur du premier, ces dimensions sont résumées sur le schéma VI.7. Nous avons choisi des domaines de simulation bi-périodiques.

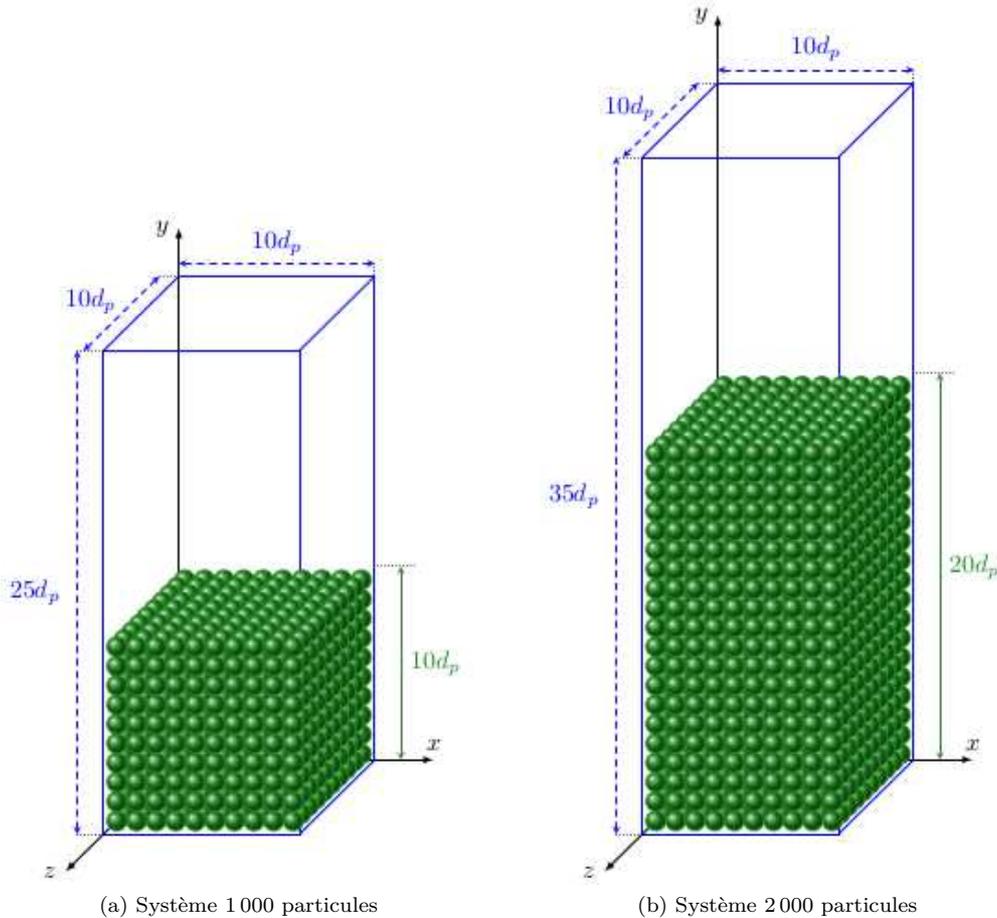


FIGURE VI.7 – Dimension des domaines étudiés

VI – 4.1.1 Paramètres physiques

Les propriétés physiques des particules et du fluide nécessitent d'être déterminées avec attention, de telle sorte que, d'une part la différence de densité entre les deux phases soit suffisamment importante pour que la force de masse ajoutée que nous avons négligée dans le modèle DEM-CFD n'ait que peu d'impact sur les résultats obtenus. D'autre part, cette différence de densité ne doit pas non plus être trop importante afin que le nombre de Reynolds particulaire ne soit pas trop grand, et qu'il ne faille donc pas utiliser des mailles trop petites. Ceci entraîne aussi des pas de temps fluide très petits (pour respecter la condition de CFL), ce qui engendrerait de longs temps de calcul. Le modèle DLM-FD implémenté dans PeliGRIFF permet de réaliser des simulations pour des systèmes dont les régimes d'écoulement vont jusqu'à $Re \sim 500$ pour des coûts de calcul modérés.

Ainsi, les propriétés des éléments employés pour cette étude correspondent à des particules de plomb fluidisées par un fluide de même densité que l'eau mais possédant une viscosité de $5 \times 10^{-4} Pa.s$. La vitesse d'injection du fluide est de $U_{in} = 3U_{mf}$ ce qui représente un régime d'écoulement faiblement bouillonnant, notamment dans le cas d'une fluidisation liquide, et un régime d'écoulement particulaire de $Re_{in} = \rho_f d_p U_{in} / \mu_f = 7$. Les caractéristiques du système sont résumées dans les tableaux VI.2.

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

(a) Phase solide		(b) Phase fluide	
Paramètre	Valeur	Paramètre	Valeur
d_p	1 mm	ρ_f	$1000kg.m^{-3}$
ρ_p	$10\,000kg.m^{-3}$	μ_f	$5 \times 10^{-4} Pa.s$
$\mathcal{E}_{f,0}^C$	0.476	U_{mf}	$0.01m.s^{-1}$
H_0^C	0.1 m	$\mathcal{R}e_{mf}$	7
μ_C	0.1	Δp_{1000}^{bed}	840 Pa
En	0.9	Δp_{2000}^{bed}	420 Pa

VI – 4.1.2 Hauteur du domaine

Le taille du système choisi étant de $10d_p \times 10d_p$ pour la section, il reste désormais à définir la hauteur du domaine. Le réacteur doit d'une part être suffisamment haut afin que le lit de particules puisse évoluer librement sans être contraint par la face haute du domaine. Mais d'autre part, cette valeur ne doit pas être trop élevée car le volume du domaine serait alors trop grand ce qui augmenterait inutilement le temps de calcul, notamment pour la simulation à l'échelle micro. Pour cela, une série de simulations DEM-CFD, peu coûteuses, a été réalisée afin d'évaluer la hauteur maximale atteinte par les particules au cours de la simulation. Rappelons que dans le cas d'un arrangement aléatoire de particules sédimentées, ou d'un arrangement initial cubique simple, cette hauteur est atteinte au cours de la première élévation du lit, lorsque sa compacité est maximale, et donc les forces de traînée les plus élevées. Suite à cette expansion initiale durant laquelle le lit atteint la hauteur H_{OS} , le lit se déstabilise et atteint son régime stationnaire de bouillonnement au cours duquel la hauteur du lit est moins élevée que H^{OS} . La hauteur du domaine pour le cas 1 000 particules a été déterminée en fonction de cette hauteur H^{OS} . Cependant, afin de limiter le nombre de mailles dans le cas de la simulation DLM-FD de 2 000 particules, la hauteur du domaine est déterminée en fonction de la hauteur maximale atteinte au cours du régime stationnaire et non durant la période transitoire. Pour que les particules n'atteignent pas le haut du domaine lors de l'expansion initiale du lit, les particules sont insérées dans le domaine de façon aléatoire dans la partie basse du réacteur, *ie.* dans la zone occupée par le lit au cours du régime stationnaire. De plus, l'état stationnaire est ainsi plus rapidement atteint comme nous le présentons en partie VI – 4.2.1. La hauteur de domaine des deux configurations étudiées est $25 \times d_p$ et $35 \times d_p$ pour les cas 1 000 et 2 000 particules, respectivement.

VI – 4.1.3 Paramétrage de la simulation DLM-FD

En accord avec les résultats présentés précédemment sur la convergence en espace (voir §VI – 2.3), la résolution du maillage choisi pour ces deux simulations est de 24 points par diamètre de particules. Donc, comme la dimension du domaine est de $10d_p \times 10d_p \times 25d_p$ (resp. $10d_p \times 10d_p \times 35d_p$), le nombre total de cellules est de $10 \times 10 \times 25 \times 24^3 = 34\,560\,000$ (resp. $10 \times 10 \times 35 \times 24^3 = 48\,384\,000$). Or nous avons vu en sous-section VI – 2.4 que, d'une part, l'optimum de performance du modèle DLM-FD utilisé se trouve aux alentours de 250 000 à 500 000 cellules par cœur de calcul. Et d'autre part, comme il est préférable de réaliser les calculs sur un nombre entier de nœuds de 16 cœurs pour utiliser au mieux les performances du cluster ENER110 comme nous l'expliquons en partie III – 6, les simulations à l'échelle micro sont réalisées sur 128 cœurs de calcul, soit 270 000 (resp. 378 000) cellules par cœur.

A partir de la résolution du maillage employé et de la vitesse du fluide dans le réacteur, il nous est possible de définir le pas de temps du solveur fluide à utiliser afin de respecter la condition de CFL de 0.3 (voir §VI – 2.2.2). Or, d'une part la vitesse vue par la particule est égale à $U_{bulk} = U_{sup}/\mathcal{E}_f$, et d'autre part, la dynamique de l'écoulement au sein du lit est loin d'être homogène comme l'illustre la figure VI.4, et des vitesses bien plus élevées que U_{bulk} sont observées localement. Pour la vitesse d'injection choisie, $U_{in} = 3U_{mf}$, des simulations préliminaires ont permis d'observer des sur-vitesses

locales 8 fois plus élevées que la vitesse d'injection, ainsi nous choisissons Δt_f tel que :

$$\Delta t_f = \frac{0.3 \Delta x}{8 U_{\text{in}}} \quad (\text{VI.44})$$

Précisons que si la condition de CFL n'est pas respectée en tout point du domaine pour certains pas de temps, des sous-itérations du problème d'advection sont réalisées. Le temps de calcul par seconde de temps physique modélisée est de 150 (resp. 210) heures, soit 19 200 (resp. 26880) heures CPU pour le cas 1 000 (resp. 2 000) particules. Les simulations sont réalisées sur une durée de 4 secondes physiques afin d'obtenir des statistiques respectant les critères de convergence présentés en partie V – 2.

VI – 4.1.4 Paramétrage de la simulation DEM-CFD

La simulation de ces systèmes de 1000 et 2000 particules à l'aide du modèle DEM-CFD est quant à elle beaucoup moins coûteuse en ressource de calcul. En effet, en accord avec les résultats présentés en partie V – 3.3 sur la taille de maille à utiliser pour notre implémentation du modèle Euler-Lagrange, le nombre d'éléments composant le maillage doit être compris entre $5 \times 5 \times 12 = 300$ et $6 \times 6 \times 15 = 540$ pour le système 1000 particules et entre $5 \times 5 \times 17 = 425$ et $6 \times 6 \times 21 = 756$ pour le système 2000 particules. Dans les deux cas, cela représente une simulation de taille très modeste et donc réalisable sur un seul cœur de calcul. Le temps de calcul pour une seconde physique est de 50 minutes et les durées simulées sont les mêmes que pour les simulations réalisées à l'échelle micro.

VI – 4.2 Comparaison des résultats

Les résultats de simulation sont analysés à l'aide des mêmes outils statistiques que ceux employés pour l'étude approfondie des lits fluidisés présentée dans le chapitre V. L'épaisseur des volumes de contrôle employés pour discrétiser la distribution verticale des grandeurs observées (voir §V – 2.2) est de $Dz = 1 d_p$.

VI – 4.2.1 Hauteur de lit

Commençons tout d'abord par commenter l'évolution temporelle de la hauteur de lit illustrée sur la figure VI.8 pour les cas 1000 et 2000 particules.

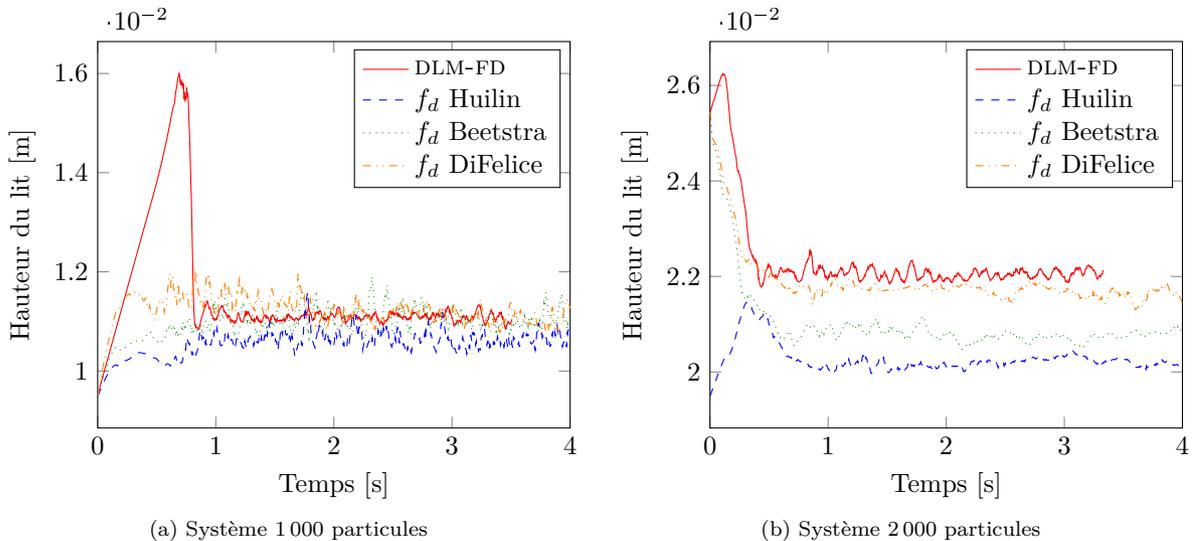


FIGURE VI.8 – Evolution temporelle de la hauteur du lit

Pour le cas 1000 particules, nous observons une forte expansion du lit durant la phase transitoire, c'est à dire entre 0 et 1 seconde. Au cours de cette période, les particules conservent longtemps leur

arrangement cubique simple sans se déstabiliser, puis lorsque survient une petite perturbation dans l'écoulement, l'arrangement se déstabilise et les particules redescendent. La fluidisation entame alors une phase transitoire durant laquelle les fluctuations de la hauteur du lit sont négligeables en comparaison à l'expansion initiale. Ce phénomène d'overshoot a précédemment été évoqué pour des simulations DEM-CFD (voir V – 2.1.2), mais il est ici accentué dans le cas d'une résolution fine de l'écoulement entre les particules. Notons que cet overshoot est ici quasiment inexistant pour les résultats obtenus avec le modèle DEM-CFD. Nous supposons que cette déstabilisation rapide de l'arrangement structuré est dû au faible nombre de mailles comportant des particules dans la direction verticale. En effet, nous avons observé que le lit se déstabilisait généralement par le bas, perdant progressivement des couches de particules qui montent moins vite que le reste du lit. Or, moins il y a de couches de particules, plus le lit se déstabilise vite. Cela se vérifie par exemple pour la corrélation de Huilin dans le cas 2 000 particules (voir courbe bleue sur la figure VI.8-(b)). Le lit initial étant alors plus haut, il met plus de temps à se déstabiliser et le phénomène d'overshoot est plus important. Comme nous l'avons introduit lors de la présentation de la géométrie des systèmes analysés, le phénomène d'overshoot est contourné dans le cas 2 000 particules pour les simulations DEM-CFD utilisant les forces de traînée de Di Felice, de Beetstra et la simulation DLM-FD en utilisant un arrangement aléatoire de particules dont la hauteur à l'état initial est quasiment égale à la hauteur en régime stationnaire. La durée de la période transitoire est alors plus courte et surtout, l'expansion du lit durant les premiers instants de fluidisation est limitée voir nulle.

Au cours du régime stationnaire bouillonnant, la hauteur du lit obtenue avec le modèle DLM-FD pour le cas 1 000 particules est bien reproduite par le modèle DEM-CFD, notamment en utilisant les formulations de force de traînée de Beetstra et de Di Felice. Pour le cas 2 000 particules en revanche, la formulation de Di Felice offre de meilleurs résultats que les formulations de Huilin et de Beetstra. Cela est probablement dû au fait que la corrélation proposée par Di Felice émane de résultats de fluidisation liquide-solide.

VI – 4.2.2 Fraction volumique de fluide

La distribution verticale de la porosité du lit $\mathcal{E}_f = f(z)$ est représentée sur la figure VI.9 pour les cas 1 000 et 2 000 particules. Pour les deux systèmes, nous observons que la porosité du lit simulé avec le modèle DLM-FD est plus grande que celle du lit obtenu avec le modèle DEM-CFD, quelque soit la formulation de force de traînée employée. Cela est lié au fait que la hauteur de lit est moins élevée en DEM-CFD qu'en DLM-FD. En effet la population de particules étant constante, si le volume occupé est moins important, la densité de particules est forcément plus grande. D'autre part, nous observons que la fraction volumique de fluide dans la partie basse du réacteur est beaucoup plus élevée pour les simulations DLM-FD que pour les simulations DEM-CFD. Cette différence est due à la condition à la limite imposée pour \mathcal{E}_f sur la face d'entrée du réacteur dans le modèle Euler-Lagrange implémenté dans cette thèse. Ce problème a déjà été abordé en partie III – 5.1.1, mais la solution proposée ne résout que partiellement le problème. En effet, la valeur de la fraction volumique interpolée au centre de gravité des particules se trouvant sur la première couche de cellules est toujours plus importante qu'elle ne devrait être, et l'intensité de la force de traînée qui s'exerce sur ces particules n'est pas suffisamment élevée pour pouvoir les fluidiser.

Ce résultat met en évidence une des améliorations qu'il est nécessaire d'apporter au modèle DEM-CFD afin d'améliorer la modélisation numérique de la dynamique du mélange fluide-particules en entrée du réacteur. Notons que l'effet de cette couche de particules non fluidisées diminue lorsque la quantité de particules dans le lit augmente pour une section de domaine donnée. En observant les fluctuations temporelles de la fraction volumique de fluide, c'est à dire la variance temporelle de \mathcal{E}_f représentée sur la figure VI.10, nous constatons d'une part que le profil obtenu pour $Var(\mathcal{E}_f) = f(z)$ avec le modèle DEM-CFD est proche de celui obtenu avec le modèle DLM-FD, quelque soit le système simulé. En effet, même si la grandeur étudiée est plus élevée dans les parties basse et centrale du lit pour la simulation DLM-FD, nous observons la même augmentation de $Var(\mathcal{E}_f)$ dans la zone haute du lit. D'autre part, nous observons que la variance de \mathcal{E}_f est plus élevée dans le cas 2 000 particules, témoignant d'une agitation plus importante des particules.

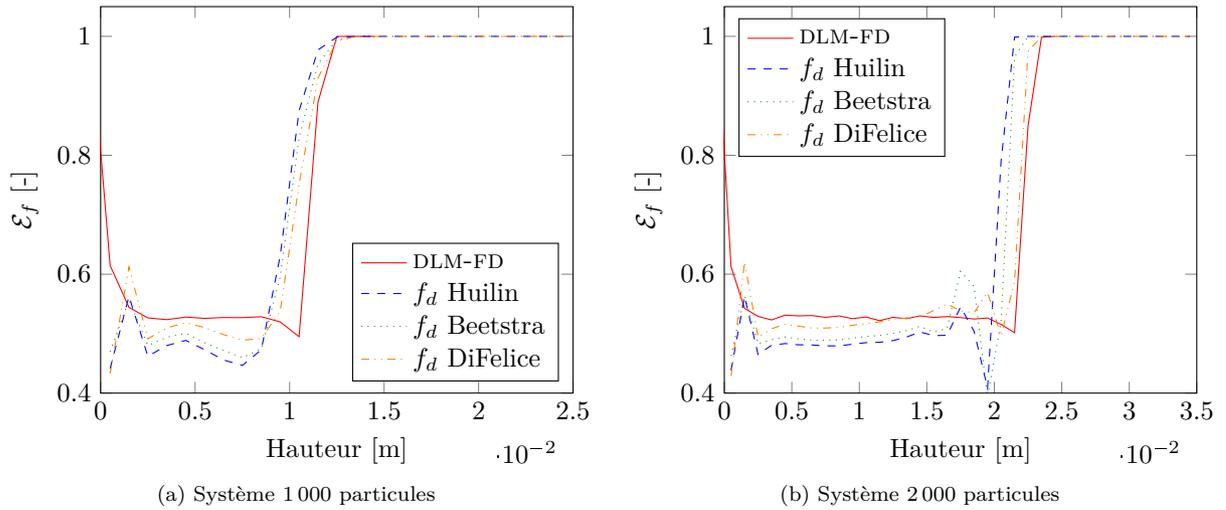


FIGURE VI.9 – Profil vertical de la porosité

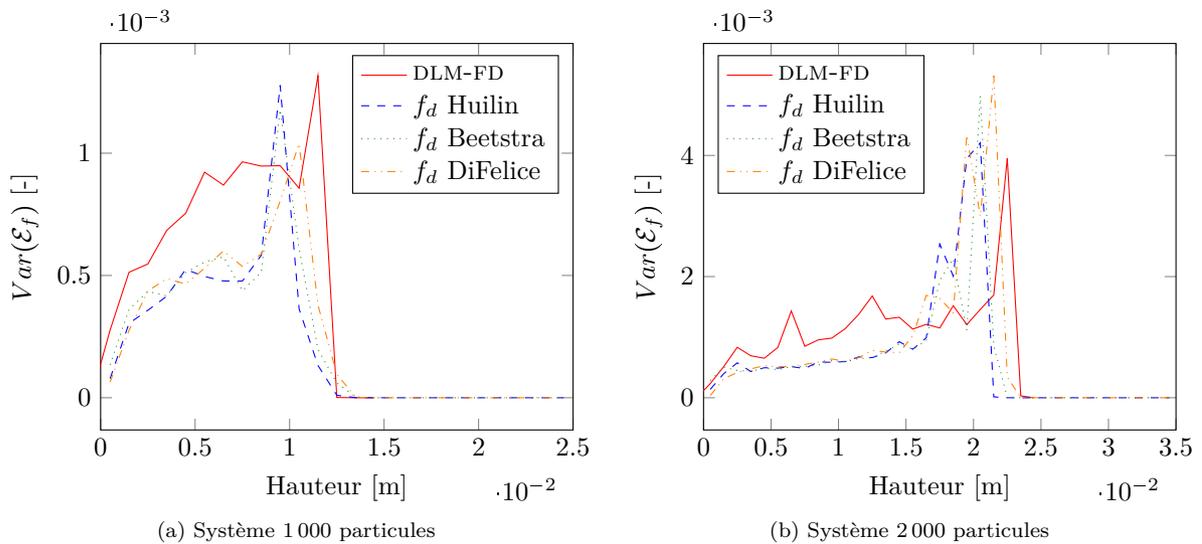


FIGURE VI.10 – Profil vertical de la variance de la porosité

VI – 4.2.3 Vitesse des particules

Pour conclure cette étude statistique de la dynamique des particules au sein du lit, nous étudions la distribution verticale de la vitesse moyenne des particules. Tout d'abord, la figure VI.11 indique que les vitesses transversales des particules, v_x , obtenues avec le modèle DLM-FD et DEM-CFD sont très proches, quelque soit le système étudié.

Concernant la vitesse axiale des particules, v_z , nous observons sur la figure VI.12 que sa valeur est plus élevée pour les résultats de simulation DEM-CFD, pour le système 1000 particules comme pour le 2000 particules. Cette observation est intrigante au premier abord car nous avons vu précédemment que la hauteur de lit était plus importante pour la simulation DLM-FD. Ce résultat est la conséquence de l'apparition d'un phénomène de channelling lors des simulations DEM-CFD, les particules circulent alors plus rapidement dans le système, sans pour autant s'élever plus haut dans le domaine. Ce phénomène est observé à l'aide d'un outil de post-processing (Paraview) permettant de visualiser la dynamique de l'écoulement, mais ce type de résultat est difficile à illustrer sur papier. Cela est particulièrement vrai

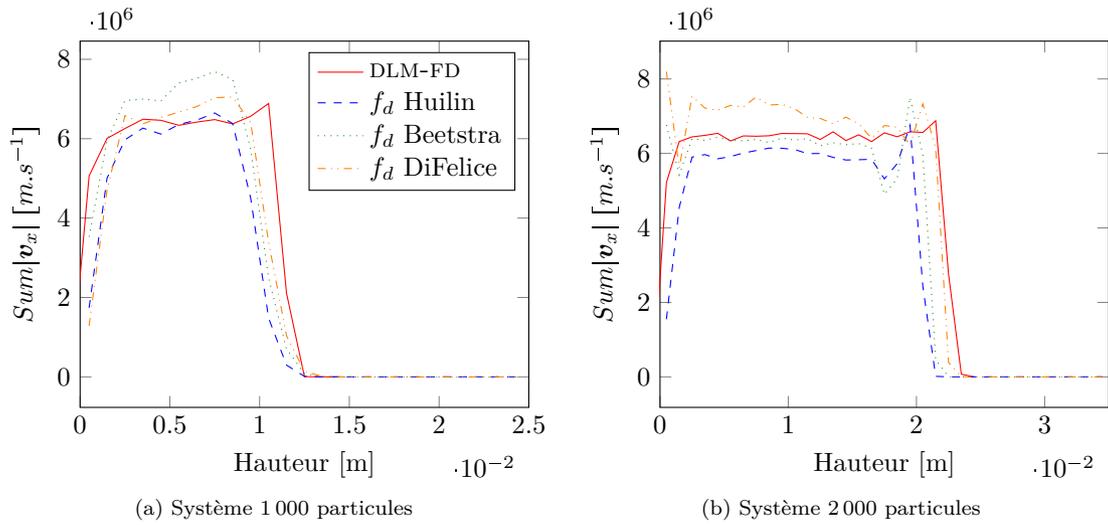


FIGURE VI.11 – Vitesse et variance de la vitesse transversale des particules

ici car le canal de remontée des particules se déplace transversalement au cours de la simulation, il n'est donc pas possible de le représenter de façon temporellement moyennée. Ensuite, nous observons que l'écart entre les formulations de force de traînée employées en DEM-CFD est assez important pour le système 1000 particules, mais quasiment nul pour le système 2000 particules. De plus, l'écart entre les variances (voir figure VI.13) obtenues avec les modèles micro et méso est bien moins important pour le système 1000 particules que pour le système 2000 particules. Ces deux dernières observations laissent penser que la dynamique de l'écoulement simulé par le modèle DEM-CFD se rapproche de celle modélisée avec le modèle DLM-FD lorsque la taille du système étudié augmente. En effet, étant donné le principe de variables localement moyennées sur lequel s'appuie le modèle Euler-Lagrange, les systèmes étudiés ne peuvent pas être trop petits.

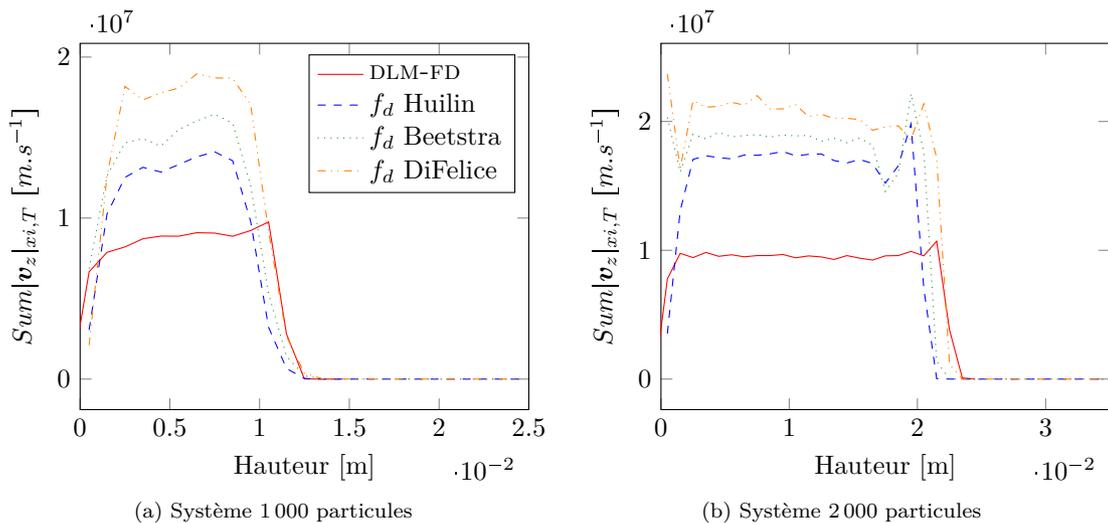


FIGURE VI.12 – Profil vertical de la vitesse axiale des particules

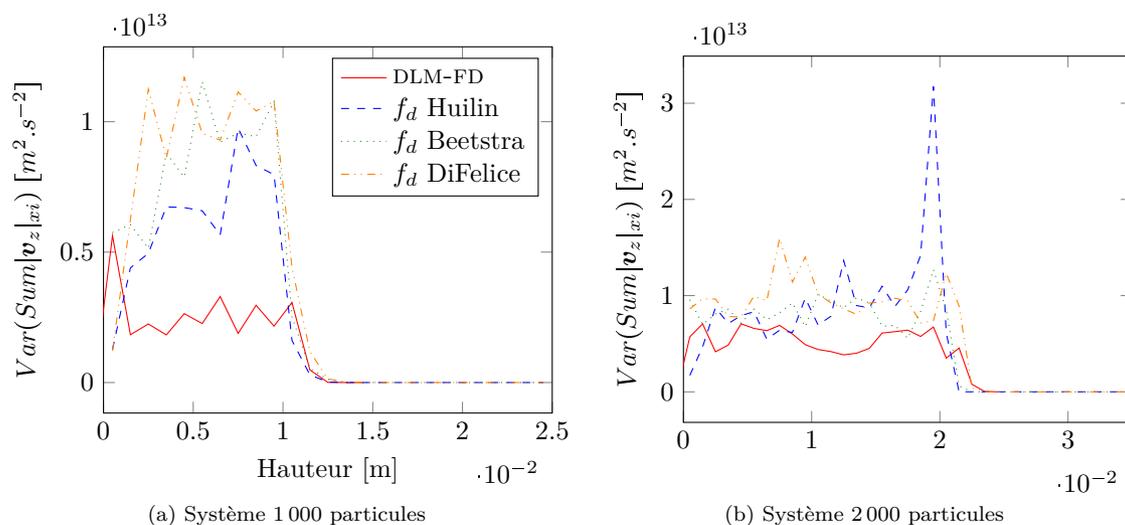


FIGURE VI.13 – Profil axial de la variance de la vitesse axiale des particules

VI – 5 Conclusion

Dans ce sixième et dernier chapitre, nous avons présenté le modèle DLM-FD employé dans cette étude pour réaliser des simulations à l'échelle micro. Les bonnes performances parallèles de son implémentation et l'ordre de précision des schémas utilisés, tant en espace qu'en temps, ainsi que son aptitude à retrouver fidèlement des solutions analytiques, même pour de fortes concentrations de particules, font de ce modèle un bon outil pour étudier les écoulements fluide-particules denses tels que les lits fluidisés. Ainsi, nous utilisons les résultats de simulations DLM-FD comme solutions de référence pour mettre en évidence les aspects du modèle DEM-CFD qu'il serait intéressant d'améliorer. Cependant, pour confirmer le fait que la résolution du maillage employé est suffisamment fine pour considérer la solution DLM-FD comme exacte, une nouvelle simulation du système 1 000 particules est actuellement en cours avec une résolution de 32 points par diamètre de particules.

Les résultats de la comparaison entre les simulations aux échelles micro et méso sont globalement bons, ce qui illustre à nouveau la justesse du modèle DEM-CFD implémenté au cours de cette thèse. Néanmoins, cette comparaison met en évidence certains points sur lesquels le modèle Euler-Lagrange implémenté dans PeliGRIFF doit être amélioré, comme par exemple le traitement de la condition aux limites sur la face d'entrée du réacteur, ou la possibilité de découpler la grille fluide des cellules de contrôle dans lesquelles les variables du fluide sont interpolées au centre de la particules. La suite de cette comparaison entre échelles de modélisation est actuellement en cours au sein de l'équipe, notamment avec la simulation prochaine d'un système plus grand ($20 \times 20 \times 20 = 8000$ particules), mais également pour des régimes de fluidisation différents, *ie.* des rapports ρ_p/ρ_f plus grands, ainsi que des vitesses d'injection plus élevées.

Enfin, une autre piste de remonter d'informations entre les modèles micro et méso a récemment commencé à être explorée avec la plateforme PeliGRIFF au sein d'IFPEN. Son but est d'extraire des lois de comportement pour des particules non-sphériques avec de forts rapports de forme en tenant compte des effets de la concentration et de l'orientation des particules et en observant la perte de charge obtenue à travers un ensemble significatif d'éléments de la phase solide.

