



Université
de Toulouse

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace (ISAE)

Présentée et soutenue par :

Jorge César BRÄNDLE DE MOTTA

le jeudi 27 juin 2013

Titre :

Simulation des écoulements turbulents avec des particules de taille finie en régime dense

École doctorale et discipline ou spécialité :

ED MEGeP : Dynamique des fluides

Unité de recherche :

Équipe d'accueil ISAE-ONERA EDyF

Directeur(s) de Thèse :

M. Jean-Luc ESTIVALEZES (directeur de thèse)

M. Eric CLIMENT (co-directeur de thèse)

Jury :

M. Alfredo SOLDATI - Président

M. Jean-Luc ESTIVALEZES - Directeur de thèse

M. Eric CLIMENT - Co-directeur de thèse

M. Anthony WACHS - Rapporteur

M. Alain BERLEMONT - Rapporteur

M. Wim-Paul BREUGEM

M. Jérémie BEC

Remerciements

Réaliser une thèse est un exercice de haute voltige. Il faut savoir jongler entre science, administratif, ressources humaines, psychologie, sociologie... tout en avançant sur un petit fil et gardant l'équilibre. Pour atteindre cet équilibre j'ai trouvé des appuis dans mon environnement de travail ainsi que dans ma vie personnelle.

Pour commencer, j'aimerais remercier ceux qui m'ont encadré durant ma thèse : Jean-Luc Estivalezes, Eric Climent et Stéphane Vincent. Eux trois ont su m'apporter leur propre vision de la science de sorte que j'ai pu me forger ma propre personnalité en tant que chercheur. Avec le recul je me rends compte que le fait d'avoir des points de vue divergents a été un grand enseignement. Je les remercie surtout pour avoir su être justes et m'encadrer quand je me dispersais dans mes recherches et me faire confiance quand je prenais des initiatives « peu usuelles » .

Ensuite j'aimerais remercier tous ceux qui m'ont donné le goût de la recherche et pour la mécanique des fluides, grâce à eux, j'ai pu m'investir dans cette thèse tout en prenant plaisir. Et, ce goût date de ma « prépa » avec M. Bernis, en passant par l'école d'ingénieur avec Jean-Paul Caltagirone, Pierre Charrier... Ensuite, une fois la thèse commencée j'ai retrouvé des personnes qui étant passionnées par leur sujet m'ont transmis ce goût : Pascal Fede, Wim-Paul Breugem, Markus Abel et Markus Uhlmann. Merci à eux.

A ce même titre je tiens à remercier le jury de la thèse. Grâce à leurs commentaires et leurs suggestions j'ai regardé ma thèse avec un nouvel oeil : je me suis rendu compte de tout ce que j'avais réalisé et compris, mais aussi du vaste et intéressant terrain qui restait à explorer. Je repars donc avec l'envie de continuer la recherche avec maintenant plus de maîtrise et de vue d'ensemble.

Durant ma thèse j'ai eu le support des stagiaires qui ont su apporter du « frais » au sujet. Je tiens à remercier Bertrand Gazanion et Amine Chadil pour avoir su me supporter et avoir été persévérants durant leur stage. Au même titre j'aimerais remercier Ali Özel qui a aussi participé à ce projet.

Pour réaliser une thèse il faut un environnement de travail adapté. Moi, j'ai eu la chance de travailler sur trois laboratoires différents. Tout d'abord l'ONERA a été le lieu où j'ai passé la plupart de mon temps. Là-bas j'ai retrouvé le support humain des autres doctorants (et assimilés) et j'ai partagé mes galères. Je dois à ce titre remercier un grand nombre de personnes qui ont su être à l'écoute, voici un petit échantillon : Anne B., Arthur S., Batiste D., Cécile D., David B., David V., Davide Z., Emma M., Farid B., Germain B., Gianluca L., Ghislain B., Hélène P.-D., Henri G., Jean-Mathieu S., Jegan P., Julien A., Loïc F., Maria-Margarida P., Maxime V., Najatt N., Nicolas G., Pierre T., Rémi C., Samuel G., Vincent G., Valentin B., Violaine T., Vital G., Ysolde P., ... Ensuite au laboratoire TREFLE, où j'allais en début de thèse, j'ai pu trouver une ambiance familiale qui m'a permis de voir les heures de « débogage » comme un moment agréable. La thèse n'aurait pas été la même sans la compagnie d'Adrien E., Alexandre P., Antoine

L., Johana P., Pierre L., Louiza B., Noémie D., Stéphane G., Finalement, j'ai passé la fin de ma thèse à l'IMFT où j'ai pu rencontrer brièvement quelques camarades avec qui je vais pouvoir partager des repas (maintenant que la thèse est finie) : Adrien J., Enrica M., Marie-Charlotte G., ...

Comme je disais, il faut un équilibre personnel afin d'arriver à bon port. En ce qui me concerne j'ai trouvé cet équilibre grâce à deux sources : mes proches et l'impro. Voilà quelques noms qui me viennent à la tête de ces gens qui ont su être là quand j'avais besoin de me balader hors science : Adélaïde M., Agathe V., Arthur S., Bertrand G., Elsa L., Eva N., Farid R., Gregory P., Helios de M., Joris P., Lucia R., Lucie B., Manon B., Marie P., Raphael P., Sara S., Tangi B., ...

J'ai aussi une pensée particulière pour Marion G. qui a été près de moi durant toute la partie finale de ma thèse et qui a su me conseiller et me donner le soutien dont j'ai eu besoin.

En ce qui concerne l'Improvisation théâtrale je tiens à remercier la Ligue Universitaire d'Improvisation de Toulouse (LUDI) qui a été durant ces trois ans un défouloir absolu. C'est grâce à eux que j'ai pu voyager chaque mercredi sans sortir de Toulouse, merci à eux. Je veux aussi remercier les patronnes du bar O Bohem (Anne, Claire et Jo). Ce bar nous a accueilli pour le championnat d'impro et d'autres péripéties. Personnellement, j'ai retrouvé dans leur équipe une famille d'accueil sur Toulouse. Je veux aussi remercier la Brique de Toulouse, ligue qui m'a aussi accueilli apportant ainsi un lieu supplémentaire où me défouler en sortant du labo. J'ai aussi une pensée pour les improvisateurs montréalais avec qui j'ai partagé la scène pendant quelques mois.

Pour ce même souci d'équilibre personnel j'ai commencé durant la thèse une véritable réflexion sur la validité de la méthodologie scientifique. Je devais en quelque sorte comprendre si ce que j'avais fait durant la thèse, et plus généralement, ce que l'on fait dans nos laboratoires, n'était pas du « pipeau ». Pour cela j'ai commencé un mémoire d'épistémologie. Je tiens à remercier Emmanuel Barot de l'Université du Mirail, qui a suivi cette réflexion et qui m'a guidé.

Pour finir, j'aimerais dédier cette thèse à Ana Maria Alonso de Motta, ma mère.

Table des matières

Introduction générale	1
I Introduction aux écoulements particuliers	3
I.1 Contexte et exemples d'application	4
I.2 Description générale des écoulements particuliers turbulents	6
I.2.1 Forces exercées sur une particule dans un écoulement	6
I.2.2 Dynamique de la phase dispersée	10
i. Dispersion des particules	10
ii. Concentration préférentielle	11
iii. Collisions	16
I.2.3 Modulation de la turbulence	16
I.3 Objectifs et plan de l'étude	23
II Méthodes numériques pour les écoulements particuliers de taille finie	27
II.1 Approche ALE pour la simulation des écoulements particuliers	28
II.2 Approches de type domaines fictifs pour la simulation des écoulements particuliers	30
II.2.1 Méthode de pénalisation par maille	30
II.2.2 Méthode DLM	31
II.2.3 Méthode de pénalisation visqueuse	31
II.2.4 Méthode Physalis	32
II.2.5 Méthode IB	33
II.2.6 Méthode IIM	35
II.2.7 Méthodes basées sur une résolution Lattice Boltzmann	36
II.3 Choix de notre méthode	39
Méthode de simulation VoFLag pour la simulation directe des écoulements fluide/particule	41
III Développement de la méthode VoFLag pour la simulation directe des écoulements fluide/particule	43
III.1 Introduction	43
III.2 A tensorial penalty approach for finite size particulate flows	46
III.2.1 Fictitious domain framework	46
III.2.2 Generalized one-fluid model for particulate flows	47
III.2.3 Penalty methods for solid behavior and incompressibility	48
i. Second order implicit tensorial penalty method	48
ii. Augmented Lagrangian methods for multi-phase flows	50
iii. Physical characteristics of the equivalent fluid	51
III.2.4 Eulerian-Lagrangian VOF method for particle tracking	54

i.	Computation of particle velocity	54
ii.	Transport of the particles	57
iii.	Update of the solid fraction	57
III.2.5	Numerical modeling of particle interaction	57
i.	Existing models for particle interaction	59
ii.	Solid/solid collision	59
iii.	Lubrication	60
iv.	Four-way coupling	60
III.2.6	General numerical methods	61
III.2.7	Parallel implementation	62
III.2.8	Sum up of the implemented Eulerian-Lagrangian Algorithm	62
IV	Etude du domaine de validité de la méthode VoFLag sur des cas simples	65
IV.1	Chute d'une particule à faible nombre de Reynolds	65
IV.2	Rotation forcée d'une particule dans un milieu infini	66
IV.3	Etude des paramètres et modèles numériques dans le cas d'une particule bidimensionnelle dans un écoulement de Poiseuille	70
IV.4	Besoins numériques	73
V	Développement et adaptation d'une méthode de collisions pour des particules de taille finie	75
V.1	Collision de particules dans un fluide visqueux	75
V.2	Description de la méthode	78
V.3	Collision solide-solide	78
V.4	La force de lubrification	79
V.5	Implémentation de la méthode	80
V.6	Validations	82
V.7	Conclusion	82
	Simulation des écoulements turbulents avec des particules de taille finie	85
VI	Description des simulations réalisées	87
VI.1	Rappels sur la turbulence	87
VI.1.1	Transfert et dissipation de l'énergie	87
VI.1.2	Approche corrélatoire de la turbulence	89
VI.1.3	Approche spectrale de la turbulence	91
VI.1.4	Approche lagrangienne de la turbulence	91
VI.2	Méthode de forçage de la turbulence	92
VI.3	Champ fluide initial	93
VI.4	Description de la turbulence en diphasique	96
VI.4.1	Étude des grandeurs lagrangiennes de la turbulence	96
VII	Analyse de la dynamique des particules	103
VII.1	Description du mouvement de la phase dispersée	103
VII.1.1	Etude sur la dispersion des particules solides	103
VII.1.2	Analyse des accélérations des particules solides	105

VII.1.3	Etude de la concentration préférentielle	108
VII.1.4	Régime collisionnel	109
VII.1.5	Modification du régime collisionnel par la lubrification	114
VII.2	Etude de l'écoulement moyen autour des particules	119
VII.2.1	Algorithme pour déterminer le champ moyen autour des particules solides	119
VII.2.2	Description de l'écoulement moyen autour des particules	120
VII.2.3	Dissipation autour des particules de taille finie	126
VII.3	Conclusion	128
 Conclusions et perspectives		 131
 Annexes		 137
A	Article sur le modèle de collisions	139
 Bibliographie		 147

Introduction générale

Introduction aux écoulements particulaires

La présence de particules solides dispersées dans un fluide en écoulement est fréquemment rencontrée. Ces écoulements sont appelés écoulements particulaires ou écoulements chargés en particules. Les écoulements particulaires sont présents dans diverses applications industrielles mais aussi dans un grand nombre de phénomènes naturels. C'est pour cela que l'unité Milieux Hétérogènes du département DMAE de l'ONERA et le groupe Particules, Spray et Combustion de l'IMFT ont porté un grand intérêt à ce type d'écoulement et poursuivent une collaboration sur le sujet depuis plusieurs années. C'est dans le cadre de cette collaboration que cette Thèse a été réalisée. Cette étude a bénéficié d'un co-financement de la région Midi-Pyrénées.

Le type d'écoulement qui nous intéresse fait intervenir deux phases : une phase porteuse fluide et une phase discrète composée de particules solides. De ce fait il faut s'intéresser d'une part à la distribution spatiale de ces particules, et d'autre part à la modification de l'écoulement induite par la présence des particules. Ces interactions ne sont pas triviales et sont sujettes à de nombreux paramètres physiques : densité et concentration des particules, forme et taille des particules, régime d'écoulement de la phase porteuse. La modélisation et la prédiction de ces interactions est l'une des questions centrales de la mécanique des fluides diphasiques depuis de nombreuses années. L'essor du calcul numérique haute-performance pour la simulation directe de ces écoulements en régime turbulent donne de nouveaux moyens d'investigation qui viennent compléter les mesures et l'analyse théorique. Le développement, la validation et l'utilisation d'un outil de simulation de ce type constitue le coeur de ce travail de Thèse.

Selon les caractéristiques du fluide et des particules on peut rencontrer différents régimes diphasiques. Depuis les années 80 et jusqu'à ces dernières années, des simulations d'écoulements particulaires ont pu être réalisées sous certaines hypothèses assez restrictives, voir [Maxey and Riley, 1983]. L'une des hypothèses importantes est que la taille des particules considérées est petite devant toutes les petites échelles spatiales de la turbulence (en particulier les particules doivent avoir un diamètre bien inférieur aux structures dissipatives de l'écoulement qui sont de l'ordre d'une dizaine d'échelles spatiales de Kolmogorov). Quand cette hypothèse n'est plus valide on parle alors de particules de taille finie. L'objectif de ce travail de recherche est de tester l'influence de cette hypothèse sur la dynamique des particules dans un écoulement turbulent isotrope et homogène. Pour cela, on a utilisé et adapté le code Thétis (anciennement Aquilon) développé au laboratoire TREFLE (I2M) au sein de l'Institut Polytechnique de Bordeaux. Ce code avait déjà permis l'étude de plusieurs configurations d'écoulement de particules de taille finie par des simulations directes couplées de l'écoulement liquide et de la phase solide.

I.1 Contexte et exemples d'application

Des particules dans la nature

Les écoulements particuliers sont présents dans un grand nombre d'écoulements naturels. La modélisation du transport et de la sédimentation des particules dans les rivières et l'océan permet de mieux comprendre les phénomènes d'érosion des côtes et la morphodynamique des cours d'eau. Le transport éolien du sable est aussi un point central de différents phénomènes naturels tels que, les tempêtes de sable, mais aussi l'accélération de la désertification du sud de l'Espagne due au transport de sable venant du Sahara. De même, la prédiction de la dispersion de particules émises par un volcan en éruption est essentielle pour la sécurité du transport aérien comme cela fut le cas lors de l'éruption du volcan Islandais Eyjafjöll en 2010 entraînant de fortes perturbations du trafic aérien Européen.

Quand on étudie des écoulements diphasiques à phase dispersée on peut aussi s'intéresser à des gouttes ou des bulles dans un écoulement fluide. En effet, si elles sont suffisamment petites leur déformation devient négligeable et leur dynamique est alors assez proche de particules solides sphériques. On peut ainsi s'intéresser aux gouttelettes d'eau dans les nuages. Ceci permet de prédire les conditions propices à la chute de pluie [Falkovich et al., 2002].

Finalement, on peut citer d'autres applications potentielles de ces écoulements dans le milieu du vivant. Par exemple, le transport des copépodes et du plancton dans l'océan peuvent être assimilés à du transport de particules actives. De même, le transport de différentes cellules dans le sang permet de prévoir certaines maladies.

Des particules dans les applications industrielles

Dans l'industrie, les écoulements particuliers sont présents dans de nombreux procédés. L'un d'entre eux est le lit fluidisé. Cet écoulement consiste en un écoulement moyen ascendant chargé en particules qui, sous l'effet de ce flux fluide, restent en suspension. Ainsi les échanges thermiques et chimiques sont optimisés. La simulation et l'analyse physique de cette configuration d'écoulements a fait l'objet de plusieurs actions de recherche partenariale entre l'IMFT et des industriels comme EDF, AREVA, TOTAL,...

L'unité Milieux Hétérogènes du DMAE à l'ONERA Toulouse s'intéresse tout particulièrement aux écoulements diphasiques dans les chambres de combustion des moteurs d'aéronefs. Comment on peut le voir dans la figure I.1, le combustible est injecté à grande vitesse dans la chambre. Ce jet liquide est cisailé par des jets d'air autour de l'injection ce qui permet d'atomiser le combustible (passage d'un état de phase continue à un état dispersé sous forme de fines gouttelettes). Ceci permet d'optimiser le rendement du moteur et de réduire les émissions.

Comprendre l'évolution des gouttes de combustible dans la chambre de combustion est essentiel pour pouvoir prévoir les régions d'allumage [Bruyat, 2012, Linassier, 2012], les risques de remontée de la flamme sur l'injecteur et aussi éviter l'éjection de combustible non brûlé. La granulométrie de ces gouttes montre un large spectre de tailles, [Linassier, 2012]. La figure I.2 montre différentes étapes du cycle d'un moteur dans une chambre de combustion expérimentale nommée MERCATO. On peut voir clairement dans la chambre le combustible sous forme de gouttelettes de différentes tailles distribuées hétérogènement dans un écoulement très turbulent suite à l'atomisation du jet.

Afin de répondre à des problématiques industrielles, l'IMFT et l'ONERA ont développé des codes de simulation numérique capables de prédire la dynamique des écoulements particuliers à l'échelle réelle. Le groupe PSC de l'IMFT participe au développement du code NEPTUNE_CFD basé sur une approche de type multi-fluides pour simuler les écoulements particuliers. Coté ONERA, le logiciel CEDRE possède des modules capables d'intégrer le mouvement de la phase dispersée à l'aide soit d'une approche Euler-Euler (module SPIREE), soit Euler-Lagrange (module SPARTE).

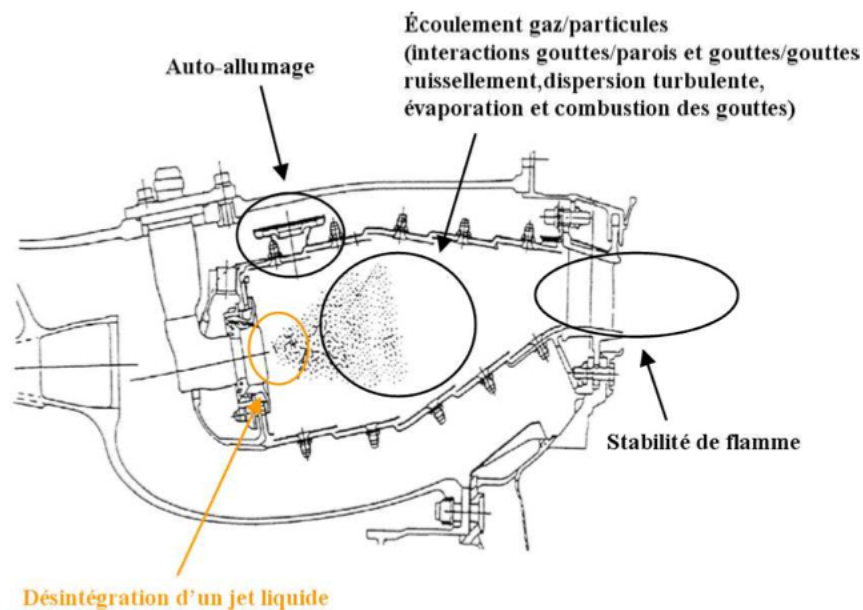


FIGURE I.1 – Différents phénomènes dans une chambre de combustion. Source [Couderc, 2007].

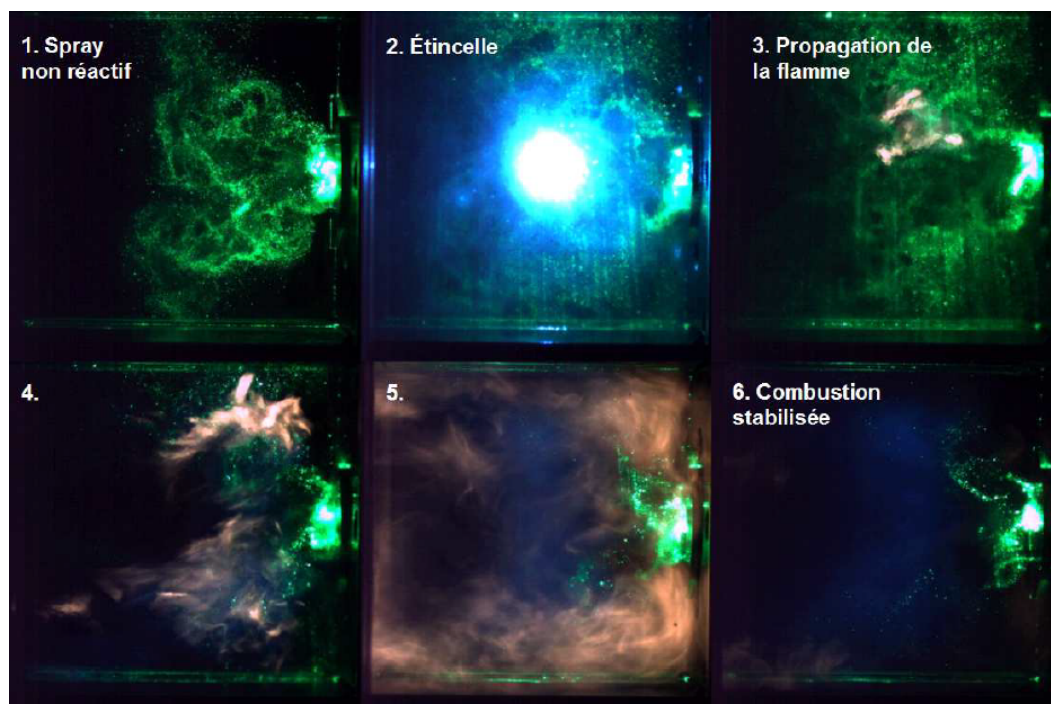


FIGURE I.2 – Exemples d'images tomographiques montrant les différentes phases de l'allumage complet du foyer de la chambre MERCATO. Source [Linassier, 2012].

Le module SPARTE a été utilisé pour la simulation de la distribution des gouttes dans une chambre de combustion. Toutefois, les hypothèses des modèles utilisés dans l'approche Euler-Lagrange restent très restrictives. La figure I.3 illustre le cas d'une chambre de combustion peuplée en gouttelettes de différentes tailles. Cette image est issue d'une simulation à l'aide des solveurs CHARME (pour la combustion) et SPARTE (pour le suivi lagrangien des gouttes) du code de calcul CEDRE.

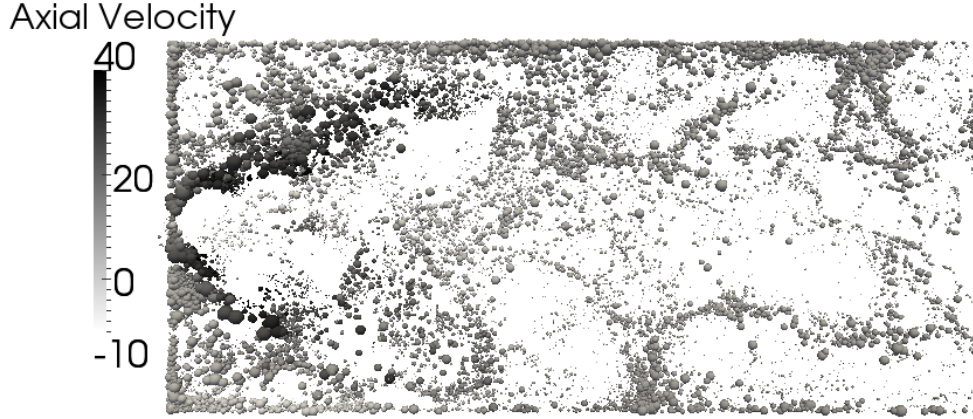


FIGURE I.3 – Coupe longitudinale d'une simulation de la chambre du MERCATO réalisée avec le code CEDRE. Source [Bruyat, 2012].

I.2 Description générale des écoulements particuliers turbulents

I.2.1 Forces exercées sur une particule dans un écoulement

Lorsqu'une particule se déplace dans un fluide celui-ci exerce sur la surface latérale de la particule des contraintes dont on peut évaluer la force résultante et le moment. La force résultante est l'intégrale des contraintes sur la surface de la particule, \mathbf{F} . Ainsi, on peut écrire l'évolution de la position de la particule grâce au système d'équations suivant :

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{V}_p \quad (\text{I.1})$$

$$m_p \frac{d\mathbf{V}_p}{dt} = \mathbf{F} + m_p \mathbf{g} \quad (\text{I.2})$$

où, m_p est la masse de la particule, \mathbf{X} sa position, et \mathbf{V}_p sa vitesse.

Dans le cas où le diamètre des particules est plus petit que la plus petite échelle de l'écoulement de fluide, l'échelle de Kolmogorov dans le cas d'un écoulement turbulent, on peut estimer cette force à partir de la vitesse du fluide et de ses gradients à l'endroit où se situe la particule, $\mathbf{u}_{f@p}$. Pour cela on considère que les particules sont suffisamment petites et on utilise le champ de vitesse du fluide non perturbé. A partir de cette hypothèse on peut décomposer la force en plusieurs contributions :

– **Force de flottabilité ou d’Archimède**

La force de flottabilité est issue de l’intégrale du gradient de pression hydrostatique dûe à la gravité. Elle est calculée à partir de la masse du fluide équivalent $m_f = m_p \frac{\rho_f}{\rho_p}$:

$$\mathbf{f}_g = -m_f \mathbf{g} \quad (\text{I.3})$$

Le cas des particules de même masse volumique que le fluide est rencontré dans beaucoup d’applications, notamment dans les écoulements biologiques. Dans ce cas la force de flottabilité se compense avec la force de gravité. Le nombre de Froude établit le rapport entre les forces de gravité et les forces d’inertie. Dans le cas de la turbulence, il s’exprime à partir des fluctuations de vitesse $Fr = \frac{2\Delta\rho g R}{\rho_f u'}$. Ce nombre permet d’estimer dans le cas général si les termes gravitationnels sont négligeables vis-à-vis des fluctuations induites par la turbulence.

– **Force due au gradient de pression ou force de Chen**

L’écoulement non perturbé exerce une force sur la surface de la sphère correspondant à la particule. Cette force équivaut à l’intégrale $\int_{A_p} -p \mathbf{n} dA = \int_{V_p} -\nabla p dV$. Ce terme peut être assimilé à l’accélération du fluide non perturbé $\frac{D\mathbf{u}_{f@p}}{Dt}$. La force due à la pression du fluide non perturbé est alors :

$$\mathbf{f}_C = m_f \frac{D\mathbf{u}_{f@p}}{Dt} \quad (\text{I.4})$$

– **Force de traînée**

Dans le cas où la particule a une vitesse différente du fluide non perturbé, on peut définir la vitesse de glissement $\mathbf{V}_p - \mathbf{u}_{f@p}$. Cette vitesse de glissement est à l’origine de la force de traînée sur la particule. La force peut être exprimée à l’aide du coefficient de traînée, C_D , de la section de référence de la particule et de la masse volumique du fluide :

$$\mathbf{f}_t = -\frac{\pi}{2} R^2 \rho_f C_D (Re_p) |\mathbf{V}_p - \mathbf{u}_{f@p}| (\mathbf{V}_p - \mathbf{u}_{f@p}) \quad (\text{I.5})$$

Dans le cas d’une sphère le coefficient de traînée est évalué à partir du nombre de Reynolds basé sur la vitesse de glissement et le diamètre de la particule, $Re_p = \frac{2R|\mathbf{V}_p - \mathbf{u}_{f@p}|}{\nu}$. Le coefficient de traînée pour une sphère isolée est bien connu empiriquement, voir figure I.4. La corrélation de Schiller et Naumann [Schiller and Naumann, 1935] est utilisée dans la plupart des modèles de trajectoires. Cette corrélation n’est valable que pour des écoulements à Reynolds modéré, $Re_p < 800$:

$$C_D = \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) \quad (\text{I.6})$$

Pour les faibles nombres de Reynolds cette relation devient équivalente à la solution analytique de l’écoulement de Stokes, $C_D = \frac{24}{Re_p}$. Pour l’écoulement de Stokes la force s’exprime simplement par :

$$\mathbf{f}_t = -m_p \frac{\mathbf{V}_p - \mathbf{u}_{f@p}}{\tau_p} \quad (\text{I.7})$$

où, τ_p est le temps de relaxation de la particule, $\tau_p = \frac{2R^2 \rho_p}{9\nu \rho_f}$.

– **Force de masse ajoutée**

La force de masse ajoutée résulte de l’inertie du fluide environnant. Elle s’exprime à l’aide du coefficient de masse ajoutée C_A , qui vaut $\frac{1}{2}$ dans le cas d’une sphère, [Auton et al., 1988, Magnaudet et al., 1995] :

$$\mathbf{f}_a = C_A m_f \left(\frac{D\mathbf{u}_{f@p}}{Dt} - \frac{d\mathbf{V}_p}{dt} \right) \quad (\text{I.8})$$

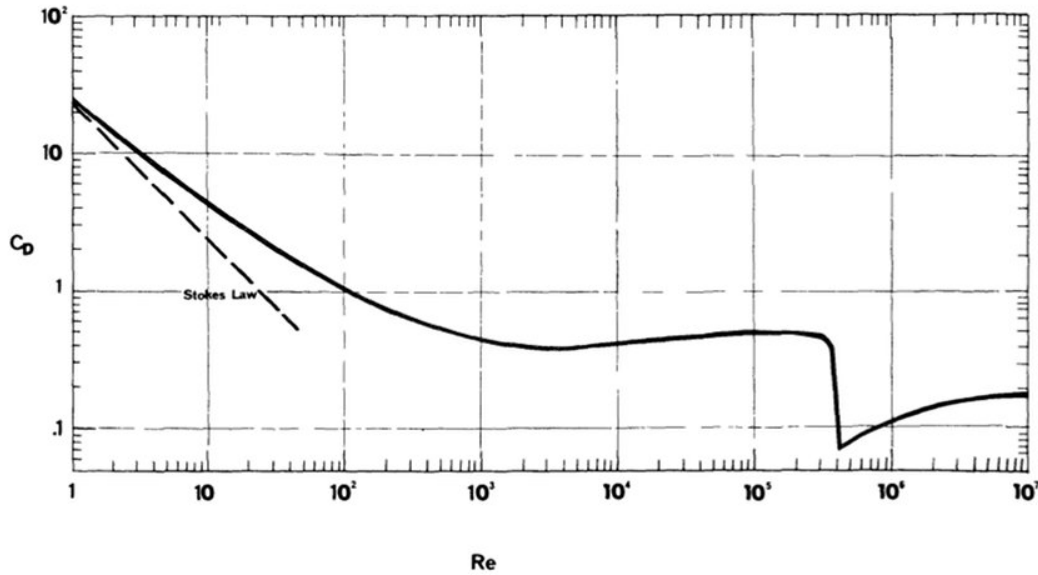


FIGURE I.4 – Coefficient de traînée pour une sphère, source [Clift et al., 1978].

Dans le cas des particules où $\rho_p \gg \rho_f$ cette force devient négligeable devant l'inertie propre des particules.

– **Force d'histoire ou de Basset**

Dans le cas d'un écoulement instationnaire il existe un écart entre la force visqueuse exercée sur la particule et la force qu'exercerait l'écoulement établi correspondant. Cet écart est dû à un déphasage temporel de la force visqueuse. Boussinesq [Boussinesq, 1885] puis Basset [Basset, 1888] ont exprimé cette force pour un écoulement de Stokes autour une sphère solide :

$$\mathbf{f}_B = 6\rho_f R^2 \sqrt{\pi\nu_f} \int_{-\infty}^t \frac{d}{d\tau} (\mathbf{u}_{f@p} - \mathbf{V}_p) \frac{d\tau}{\sqrt{t-\tau}} \quad (\text{I.9})$$

Cette force est souvent négligée car dans la plupart des cas elle joue un rôle limité sauf dans les cas d'accélération brutale de la particule. De plus, son implémentation est ardue.

– **Force de Portance**

Dans le cas où l'écoulement de fluide présente un cisaillement ou bien si la particule est animée d'une vitesse de rotation différente de la rotation locale de l'écoulement, une nouvelle force apparaît sur une direction perpendiculaire aux lignes de courant. C'est la force de portance. Cette force qui peut être importante pour des cas où la vitesse de glissement (en translation ou rotation) est non-nulle est encore difficile à exprimer de façon générale dans un écoulement quelconque. De même que la force de masse ajoutée, cette force devient négligeable pour $\rho_p \gg \rho_f$.

Connaissant l'expression de ces forces, le transport lagrangien de chaque particule peut se simuler en résolvant le système d'équations suivant :

$$\frac{d\mathbf{X}_p}{dt} = \mathbf{V}_p \quad (\text{I.10})$$

$$m_p \frac{d\mathbf{V}_p}{dt} = \mathbf{f}_g + \mathbf{f}_C + \mathbf{f}_t + \mathbf{f}_a + \mathbf{f}_B + \mathbf{f}_f + m_p \mathbf{g} \quad (\text{I.11})$$

Comme on l'a décrit dans la section précédente, de nombreuses applications mettent en jeu des particules dont la taille n'est plus négligeable devant les échelles spatiales de l'écoulement. Il est donc nécessaire de se poser la question de la validité de cette décomposition et de l'expression de chacune des contributions lorsque les particules n'ont plus une taille négligeable vis-à-vis de la plus petite échelle de l'écoulement.

Effet de la taille finie des particules

Plusieurs travaux de recherche ont étudié l'évolution de la force résultante exercée sur une particule pour des cas d'écoulements turbulents dont l'échelle de Kolmogorov est plus petite que le diamètre des particules. De ce fait, la force instantanée subie par la particule ne peut pas être exprimée simplement à partir du bilan ci-dessus. La première difficulté tient au fait que l'on ne connaît pas la vitesse du fluide à l'endroit où se situe la particule. En effet, on a alors accès uniquement au champ perturbé autour de la particule. Toutefois, il est intéressant d'estimer à quelle force moyenne (et à quel couple) est soumise la particule ainsi que décrire les statistiques des fluctuations de la force instantanée. Ceci permet de remonter de façon indirecte aux différentes contributions d'un modèle d'équations de trajectoire pour des particules de taille finie.

Dans l'article de [Bagchi and Balachandar, 2003], la force exercée par un écoulement turbulent (obtenu par simulation numérique directe) est calculée sur des particules fixes ayant des diamètres jusqu'à dix fois l'échelle de longueur de Kolmogorov. Les auteurs constatent que la traînée moyenne est proche des corrélations classiques. L'accord avec la corrélation est d'autant meilleur que le rayon de la particule est petit. Dans le cas où il existe un glissement moyen entre les particules et le fluide, la traînée semble être prédominante pour modéliser le comportement des particules de taille finie.

Dans l'article de [Burton and Eaton, 2005], des simulations d'une THI (turbulence homogène isotrope) décroissante autour d'une particule fixe sont analysées. Dans ces simulations, le rayon de la particule est de l'ordre de l'échelle de longueur de Kolmogorov. La durée physique des simulations est courte de sorte à ne pas modifier significativement les caractéristiques de l'écoulement. Ces simulations fortement résolues permettent d'établir un bilan des forces exercées sur la particule afin de les comparer aux modèles théoriques de forces pour des particules ponctuelles. Pour évaluer les caractéristiques de l'écoulement du fluide à la position de la particule, les auteurs ont utilisé une simulation sans particule avec la même condition initiale que le cas diphasique. Comme dans l'article de [Bagchi and Balachandar, 2003], cette étude montre que la force de traînée est prédominante dans le bilan des forces. L'erreur relative commise entre la moyenne quadratique de la force estimée et celle calculée avec la particule résolue varie entre 15% et 30%.

L'article de [Merle et al., 2005] étudie aussi les forces exercées sur une bulle sphérique fixe. Cette fois, l'écoulement considéré est celui d'un écoulement turbulent en conduite résolu à l'aide d'une méthode de simulation des grandes échelles. Le rayon de la bulle est de l'ordre de vingt fois l'échelle de Kolmogorov. La moyenne des forces est bien estimée par les corrélations utilisées pour le cas ponctuel ([Moore, 1962] prédit correctement la traînée et [Auton et al., 1988] la portance). Il est alors observé des oscillations de la force exercée sur l'inclusion. Ces oscillations semblent plus fortes pour la portance que pour la traînée.

Dans l'article de [Homann and Bec, 2010], une simulation directe autour de particules de densité neutre ($\rho_p = \rho_f$) plongées dans un écoulement turbulent est analysée pour déduire le rôle de la taille finie de la particule. Dans ces simulations les particules vont jusqu'à vingt fois l'échelle de Kolmogorov. Homann et Bec proposent une relation basée sur les corrections de Faxén permettant de prédire l'effet sur l'accélération moyenne des particules. Cette correction est le second terme du développement limité de la force de traînée en fonction du rayon de la

particule. De ce fait, ce terme ne devient important que pour des particules suffisamment grandes. Cette prédiction étant une bonne approximation pour l'estimation des accélérations les auteurs ont conclu que la dynamique de ces particules neutres est surtout due à la correction de Faxén, les forces d'inertie étant moins importantes.

I.2.2 Dynamique de la phase dispersée

i. Dispersion des particules

La dispersion des particules est l'une des données statistiques la plus importante d'un écoulement particulaire. Le parcours moyen $\langle X_i^2 \rangle$ permet de quantifier cette dispersion. De façon classique il est relié aux autocorrélations de vitesses

$$R(\tau) = \frac{\langle \mathbf{V}_i(t_0) \mathbf{V}_i'(t_0 + \tau) \rangle}{\sqrt{\langle \mathbf{V}_i'^2(t_0) \rangle} \sqrt{\langle \mathbf{V}_i'^2(t_0 + \tau) \rangle}} \quad (\text{I.12})$$

grâce à l'équation (I.13), [Taylor, 1921].

$$\langle X_i^2 \rangle = 2 \langle \mathbf{V}^2(T) \rangle \int_0^T \int_0^{t_0} R(\tau) d\tau dt_0 \quad (\text{I.13})$$

Comme on peut le voir cette dispersion est liée à l'agitation des particules $\langle \mathbf{V}_i'^2(T) \rangle$. Cette agitation des particules est liée à celle du fluide à partir de l'équation I.11. En prenant en compte la masse ajoutée et la traînée de Stokes, Tchen et Hinze [Tchen, 1947, Hinze, 1975] proposent une théorie liant le temps de corrélation et l'agitation des particules fluides. .

$$\frac{\langle \mathbf{V}^2 \rangle}{\langle \mathbf{u}_f^2 \rangle} = \frac{\frac{T_{L_f}}{\tau_p} + \beta^2}{\frac{T_{L_f}}{\tau_p} + 1} \quad (\text{I.14})$$

Cette formule est basée sur l'hypothèse que le tenseur d'autocorrélation est exponentiel : $R_{f@p} = \exp(-t/T_{L_f@p})$. Cette hypothèse n'est valable que pour des nombres de Reynolds suffisamment grands.

Dans une amélioration postérieure [Deutsch, 1992] propose d'utiliser le temps de corrélation et l'agitation du fluide « vue » par les particules :

$$\frac{\langle \mathbf{V}^2 \rangle}{\langle \mathbf{u}_{f@p}^2 \rangle} = \frac{\frac{T_{L_f@p}}{\tau_p} + \beta^2}{\frac{T_{L_f@p}}{\tau_p} + 1} \quad (\text{I.15})$$

La différence entre $\langle \mathbf{u}_{f@p}^2 \rangle$ et $\langle \mathbf{u}_f^2 \rangle$ et $T_{L_f@p}$ et T_{L_f} provient du fait que les particules solides ne suivent pas les mêmes trajectoires que les particules fluides. La différence entre l'agitation et l'agitation du fluide « vue » peut aller jusqu'à 10% et celle du temps d'autocorrélation jusqu'à 30% [Deutsch, 1992, Lavieville, 1997, Fede, 2004, Fede and Simonin, 2006]. Pour des particules neutres on peut voir qu'on obtient une agitation semblable à celle du fluide.

Des améliorations ont été faites par la suite pour prendre en compte la variation de la forme de la fonction d'autocorrélation des particules fluides quand le nombre de Reynolds est fini, [Sawford, 1991, Boivin, 1996]. Ces améliorations permettent de mieux prédire l'agitation des particules à faible inertie.

ii. Concentration préférentielle

Phénomène

L'approche présentée précédemment considère des particules distribuées de façon homogène dans l'écoulement turbulent. Cette hypothèse n'est plus valide dans certains écoulements turbulents particulaires. En effet, on peut constater que les particules se regroupent sous la forme de clusters ou agrégats non-cohésifs de particules. La figure I.5 illustre ce phénomène de concentration préférentielle. On peut distinguer clairement des zones où la densité des particules est plus grande et d'autres complètement dépeuplées de particules.

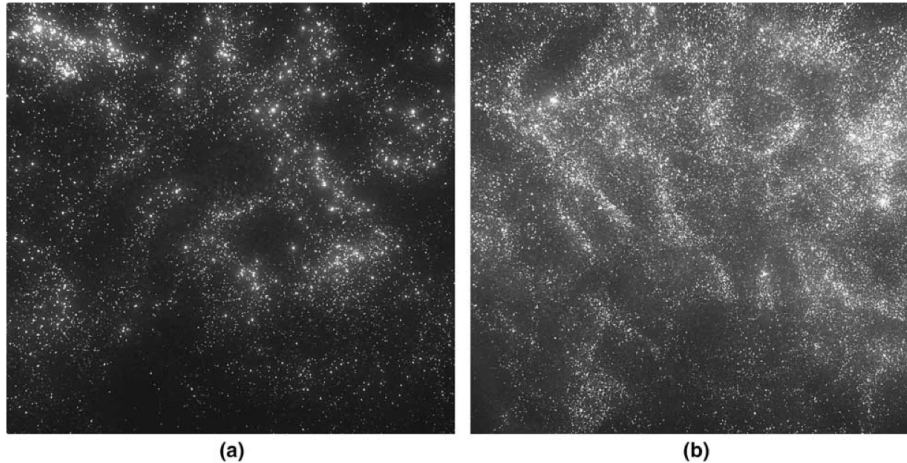


FIGURE I.5 – Distribution de deux types de particules dans une chambre turbulente. Les zones d'accumulation préférentielle sont clairement visibles (zones plus lumineuses). Source [Wood et al., 2005].

Applications

Ce phénomène de concentration préférentielle joue un rôle important dans un grand nombre d'applications. Par exemple, dans les nuages la création de gouttes d'eau à partir des gouttelettes est accélérée par ce phénomène de concentration préférentielle [Falkovich et al., 2002] qui augmente le taux de rencontre des gouttes et donc la coalescence. Un autre exemple nous vient de la biologie, où l'on montre que la concentration préférentielle est essentielle pour avoir un modèle fidèle du taux de reproduction des copépodes [Squires and Yamazaki, 1995, Schmitt and Seuront, 2008]. Cet effet provient du fait que la concentration préférentielle augmente le taux de rencontre entre les individus. Il est donc nécessaire de comprendre ce phénomène fondamental.

Physique

Pour comprendre ce phénomène, il faut remonter aux travaux théoriques de [Maxey, 1987]. Dans son étude, M.R. Maxey a montré que les trajectoires des particules sont déviées vers les zones de faible vorticit  correspondant   un fort taux de d formation. Pour ce faire, il part de l'écriture de l' quation (I.11) sous l'hypoth se de faible inertie $\frac{dV}{dt} \sim \frac{Du}{Dt}$. Dans le cas sans gravit , on obtient alors l' quation (I.16) pour le champ de vitesse de particules \mathbf{V} en fonction du champ de vitesse fluide \mathbf{u} .

$$\mathbf{V} = \mathbf{u} - \tau_p(1 - \beta) \frac{D\mathbf{u}_{f@p}}{Dt} \quad (\text{I.16})$$

Ici, $\beta = \frac{3}{2\rho_p + 1}$ est relatif au rapport des densit s fluide/particule.

La divergence de ce champ de vitesse laisse alors apparaître les normes du tenseur des taux de déformation S et de la vorticité Ω :

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = -\tau_p(1 - \beta) (\|S\|^2 - \|\Omega\|^2) \quad (\text{I.17})$$

Ce résultat montre que les particules plus lourdes que le fluide ($0 < \beta < 1$) ont tendance à s'accumuler dans des endroits où la vorticité est faible et le taux de déformation est fort. Inversement les particules plus légères ($1 < \beta < 3$) se retrouvent préférentiellement dans les zones de forte vorticité et faible taux de déformation. La figure I.6 schématise le principe physique pour différents types de particules. Les particules plus denses que le fluide sont expulsées en périphérie des tourbillons alors que les inclusions de masse volumique plus faible que le fluide (comme les bulles) vont s'accumuler dans les zones de forte vorticité.

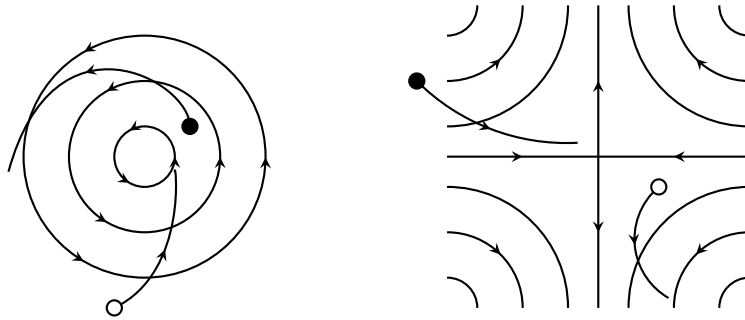


FIGURE I.6 – Trajectoires de particules dans un tourbillon et une zone de déformation pure. Symboles creux pour des particules plus légères que le fluide et symboles pleins pour les plus lourdes . Adapté de la figure de [Squires and Eaton, 1990].

Il est important de rappeler que dans le cas d'une turbulence homogène isotrope, ces zones de l'écoulement ont une durée de vie qui doit être suffisante pour que la concentration préférentielle ait lieu. Si les régions spatiales de faible vorticité se déforment ou se déplacent trop rapidement, les particules qui ont un temps de réponse donné n'auront pas le temps de migrer vers ces régions et de s'y accumuler. Ceci a donné lieu à la construction d'un nombre adimensionnel, le nombre de Stokes dont la signification sera détaillée dans la section suivante. Lorsque la gravité joue, la sédimentation des particules est donc influencée par la présence de structures tourbillonnaires comme l'a montré l'étude de [Maxey, 1987].

Cette concentration préférentielle peut avoir en retour un effet sur le fluide et aussi sur les propriétés statistiques des particules : par exemple, [Aliseda et al., 2002] ont montré que l'accumulation préférentielle pouvait avoir un effet sur la vitesse de chute des particules dans un écoulement turbulent.

Quelques conséquences

Comme décrit dans le paragraphe précédent, il est nécessaire de déterminer les fluctuations de vitesse du fluide « vues » par les particules pour établir la relation de Tchen-Hinze. Le rôle joué par la migration vers les zones de faible ou forte vorticité sur l'agitation des particules reste encore un sujet d'études, [Février, 2000, Fede, 2004]. Finalement, la moyenne quadratique de l'accélération du fluide « vue » par les particules pourrait être modifiée à son tour. En effet, pour des particules plus lourdes que le fluide cette moyenne quadratique diminue quand les particules sont distribuées dans des zones à faible vorticité, [Bec et al., 2006]. L'effet contraire a été démontré numériquement et expérimentalement pour des bulles plus légères que le fluide porteur,

[Volk et al., 2008]. Il est clair que l'accumulation préférentielle réduit la distance interparticules et donc a un effet sur le taux de collision entre particules.

Quantification

Dans la figure I.5 on observe deux cas de concentration préférentielle. Bien qu'il soit facile de distinguer les zones de concentration préférentielle il est difficile de déterminer lequel des deux cas présente une plus grande concentration préférentielle. Afin de quantifier ce phénomène plusieurs méthodes ont été mises en place.

La première méthode pour quantifier le niveau de *clustering* d'une distribution des particules consiste à calculer la moyenne des distances au plus proche voisin et comparer cette moyenne à celle attendue pour une distribution de Poisson, [Clark and Evans, 1954]. Une moyenne plus petite que celle de Poisson serait liée à une augmentation locale de la concentration.

Une deuxième méthode consiste à établir la fonction de distribution radiale de paires autour d'une particule test, [Reade and Collins, 2000, Wood et al., 2005, Salazar et al., 2008]. Il s'agit ici de compter le nombre de particules dans une coque sphérique entre r et $r + \Delta r$ autour d'une particule i pour obtenir la densité moyenne dans ce volume $g_i(r)$, puis de réaliser la moyenne entre tous les volumes i . Si les particules sont distribuées de façon homogène cette grandeur est constante et égale à la densité moyenne dans l'écoulement. En cas contraire, on obtient une variation caractéristique de la répartition spatiale des particules. Comme on verra ci-dessous cette fonction est aussi utile pour le calcul statistique du nombre de collisions [Sundaram and Collins, 1997, Reade and Collins, 2000, Zhou et al., 2001].

Une des façons expérimentales les plus simples pour déterminer si une distribution de particules est distribuée de façon homogène consiste à diviser le domaine en cubes ou carrés égaux puis de déterminer le nombre de particules dans chaque cube, [Fessler et al., 1994, Hogan and Cuzzi, 2001, Wood et al., 2005, Aliseda et al., 2002]. On compare ensuite la distribution du nombre de particules par rapport à une distribution de Poisson. La figure I.7 montre un cas de concentration préférentielle. Afin de bien utiliser cette méthode il faut déterminer correctement la taille des boîtes de contrôle. À partir de ce nombre on peut alors créer différentes grandeurs permettant de comparer au cas de la distribution de Poisson. La première consiste à calculer la différence d'écart type adimensionné par la moyenne des particules par boîte, $D_1 = \frac{\sigma - \sigma_{\text{Poisson}}}{N_p/N_b}$, [Fessler et al., 1994]. Une valeur positive indique une distribution avec des zones concentrées. Une deuxième grandeur possible est obtenue à partir de la différence entre la distribution obtenue et celle obtenue avec une distribution de Poisson : $D_2 = \sum_n (P(n) - P_{\text{Poisson}}(n))^2$, [Wang and Maxey, 1993]. [Aliseda et al., 2002] ont montré qu'avec ces deux mesures on obtient les mêmes conclusions quand il s'agit de déterminer quelle distribution présente une plus grande concentration préférentielle.

Dans plusieurs articles, J. Bec [Bec, 2003, Bec, 2005, Bec et al., 2007] propose l'utilisation de la dimension de Kaplan-Yorke afin de déterminer le degré de concentration préférentielle. Elle donne encore des résultats analogues à ceux obtenus avec D_2 , [Calzavarini et al., 2008].

Une dernière façon de quantifier la concentration préférentielle consiste à réaliser une décomposition du domaine entier avec des cellules de Voronoï sur la base des positions des centres de particules, [Monchaux et al., 2012, García-Villalba et al., 2012, Tagawa et al., 2012]. Cette décomposition consiste en la détermination des points de l'espace qui sont les plus proches de la particule test plutôt que de tout autre particule. Ceci définit une région de l'espace pour laquelle on peut calculer la concentration volumique locale. Ainsi, si une particule a une cellule de Voronoï grande elle est isolée. Inversement, si elle est entourée de nombreuses particules le volume de sa cellule est petit et la concentration locale est grande. En analysant la fonction de densité de probabilité de ces volumes on peut alors quantifier la concentration préférentielle. Cette méthode,

bien que plus lourde à mettre en place, permet néanmoins d'obtenir un grand nombre d'informations supplémentaires comme la corrélation des zones de concentration préférentielle avec des grandeurs fluides, ou la forme plus ou moins étirée des clusters. Cette méthode est prometteuse pour une meilleure caractérisation de la concentration préférentielle.

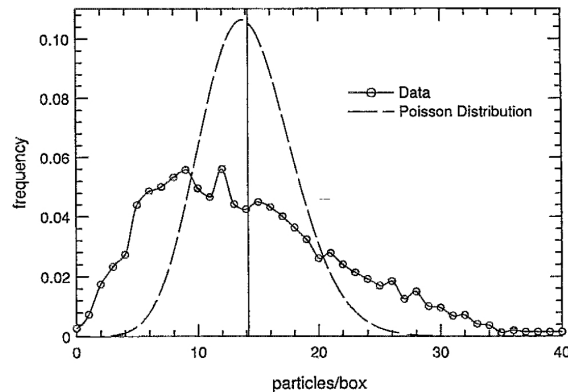


FIGURE I.7 – Nombre de particules par cube. Source : [Fessler et al., 1994].

Dans le même objectif de caractériser la morphologie des clusters [Calzavarini et al., 2008] propose l'utilisation des fonctionnelles de Minkowski permettant de décrire les clusters, [Mecke et al., 1994].

Résultats

A l'aide de simulations numériques directes de l'écoulement couplées au suivi lagrangien de particules, il a pu être montré que les particules plus denses que le fluide se concentrent dans des régions de faible vorticit . Par exemple dans l'article de [Squires and Eaton, 1991], des simulations de THI forc e avec des particules lourdes ont permis d' diter plusieurs cartes dans lesquelles on superpose les champs de vorticit  aux zones de convergence des particules. Dans les simulations de [Wang and Maxey, 1993] et celles de [Sundaram and Collins, 1997], les champs de concentration et de vorticit  sont compar s, ce qui permet de constater encore que les zones de faible vorticit  sont des zones d'accumulation des particules. Ces r sultats valident la th orie sur des cas d' coulements concrets. N anmoins, ces r sultats restent tr s qualitatifs puisqu'aucune grandeur n'est avanc e. Une fa on de quantifier l'interaction entre les zones de convergence et la vorticit  est propos e par [Tagawa et al., 2012]. Il se sert des simulations numériques avec des particules ponctuelles. A partir des volumes de Vorono , la p.d.f. conjointe entre le volume des cellules de Vorono  et l'enstrophie du volume est compar e au cas du traceur passif. Ceci montre que pour les particules plus denses que le fluide le maximum de la p.d.f. est obtenu pour des enstrophies inf rieures, alors que pour les particules plus l g res que le fluide porteur ce maximum est obtenu pour des enstrophies sup rieures. Ce r sultat permet de valider la th orie et permet de quantifier l'enstrophie des zones de convergence.

Afin de conna tre quelles sont les particules les plus sensibles   la concentration pr f rentielle [Fessler et al., 1994] r alise une s rie d'exp riences dans un canal turbulent avec diff rents types de particules. Il montre que la concentration pr f rentielle est plus prononc e pour un nombre de Stokes bas  sur l' chelle de Kolmogorov $St_k = 0.74$. Les autres particules dans ces exp riences sont plus inertielles encore et montrent aussi des clusters mais   d'autres  chelles spatiales. Il propose alors que la concentration pr f rentielle d'une classe de particules donn e appara t   des  chelles de longueur correspondant   des tourbillons dont le nombre de Stokes correspondant est proche

de l'unité. La plupart des études confirment ce résultat de [Fessler et al., 1994] et montrent que la concentration préférentielle est maximale pour $St \sim 1$, [Aliseda et al., 2002, Wood et al., 2005].

Pour cette concentration préférentielle basée sur l'échelle de Kolmogorov, la taille des clusters est estimée aux alentours de dix fois l'échelle spatiale de Kolmogorov [Aliseda et al., 2002, Wood et al., 2005]. Ce résultat est dû à la durée de vie des tourbillons de cette taille, qui est suffisante pour permettre aux particules de migrer vers ces zones.

Il est important de connaître l'influence de l'intensité de la turbulence sur la concentration préférentielle. Une première étude numérique a été réalisée par [Reade and Collins, 2000] avec des nombres de Reynolds turbulents allant de 40 à 80 montrant l'augmentation de la concentration préférentielle avec le nombre de Reynolds. En plus, le nombre de Stokes basé sur l'échelle de Kolmogorov pour lequel la concentration préférentielle est maximale augmente aussi avec le nombre de Reynolds. Les études numériques de Hogan et al. [Hogan et al., 1999, Hogan and Cuzzi, 2001] contredisent ce résultat. Ces simulations avec trois nombres des Reynolds différents $Re_\lambda \in [40, 80, 140]$ montrent une faible dépendance du phénomène de la concentration préférentielle vis à vis de l'intensité de la turbulence. Afin de valider ces résultats [Wood et al., 2005] propose une expérience dans une chambre turbulente permettant d'étudier le cas $Re_\lambda = 230$. Il en conclut que même pour ses expériences le taux de concentration préférentielle reste inchangé.

Effet de la taille finie des particules

Toutes les questions abordées précédemment doivent être revisitées pour des particules de taille finie. On doit s'attendre à trouver de la concentration préférentielle pour des particules de taille finie sous deux hypothèses. La première est que les particules soient suffisamment petites pour être sensibles aux variations spatiales de la vorticit . Par exemple, il faudrait des particules plus petites que l'échelle de Taylor. Si les particules sont trop grandes elles ne pourront pas r pondre aux gradients de vitesse qui g n rent la migration vers des zones pr f rentielles. D'autre part, ces particules vont se retrouver dans des r gions de faible vorticit  issues des tourbillons de taille interm diaire. Il faut que le temps de r ponse des particules de taille finie soient comparables au temps caract ristique de ces structures pour qu'elles aient le temps de s'y accumuler.

Afin de pouvoir  tudier les caract ristiques de la dispersion des particules de taille finie [Cate et al., 2004] ont r alis  une simulation de THI forc e avec des particules pleinement r solues. Ceci permet d'avoir un r gime statistique stationnaire pour une analyse physique d taill e de la dynamique de ces particules. Un des r sultats importants dans cet article est la mise en  vidence de zones de concentration pr f rentielle. Aucune indication sur les zones o  se regroupent les particules n'est donn e. Le temps d' tablissement de ces zones permettrait par exemple de comprendre si, comme le propose [Fessler et al., 1994], on peut trouver un temps fluide pour lequel le nombre de Stokes serait d terminant pour la concentration pr f rentielle. De m me, la description de ces zones (corr lations fluide-solide) permettrait de mieux comprendre ce ph nom ne. Dans son  tude [Cate et al., 2004] a calcul  la distribution radiale des particules afin de caract riser le r gime collisionnel.

Dans une cavit  turbulente charg e en particules, [Volk et al., 2008] ont mesur  la moyenne quadratique des acc l rations. Ils ont observ  les m mes tendances que pour les particules ponctuelles. Ainsi, pour des particules plus lourdes que le fluide celle-ci est diminu e, alors que pour des particules plus l g res elle est augment e. Pour des particules neutres (m me densit  que le fluide) dont le diam tre est sept fois plus grand que l' chelle spatiale de Kolmogorov, une r duction de la moyenne quadratique de l'acc l ration a  t  observ e. Ces r sultats sont compl mentaires des r sultats exp rimentaux obtenus   l'aide de bulles de savon se d pla ant dans une turbulence de grille, [Qureshi et al., 2008]. Dans ce cas, il a  t  d montr  qu'il y avait une relation entre l'acc l ration et la densit  de la particule consid r e. Toutefois, dans cette  tude seule la moyenne

quadratique totale des particules est donnée mais sans la comparer à celle des traceurs. De ce fait, on ne peut pas conclure que les particules neutres subissent une diminution de cette grandeur. Dans le même ordre d'idée, les expériences de [Xu and Bodenschatz, 2008] dans une turbulence générée par des disques contrarotatifs permettent d'observer une faible variation de la moyenne quadratique de l'accélération pour les particules de taille finie neutres vis à vis des traceurs. On en conclut que ces particules ne voient pas les zones de faible vorticit e.

iii. Collisions

Comme on l'a dit pr ec edemment le taux de collision joue un r ole essentiel dans un grand nombre d'applications. Il est important de bien d eterminer la fr equence de collisions entre particules. Le taux de collision peut ˆetre obtenu  a partir du nombre de particules, la moyenne des vitesses relatives radiales des particules $\langle |w_r| \rangle$, et la distribution radiale des particules au contact g_0 [Saffman and Turner, 1956] :

$$f_c = n_p^2 g_0 \pi d_p^2 \langle |w_r| \rangle \quad (\text{I.18})$$

Quand les particules ont un temps de r eponse tr es petit on peut alors consid erer que les particules se comportent comme des traceurs. De ce fait, les particules ne rentrent en collision qu' a cause du cisaillement local du fluide, qui fait que deux particules peuvent avoir une vitesse relative non nulle. Dans le cas d'une THI on peut alors estimer $\langle |w_r| \rangle$  a partir des grandeurs statistiques de la turbulence, [Saffman and Turner, 1956]. D'autrepart, dans une THI ces particules faiblement inertielles sont distribu ees de fa con homog ene et de ce fait $g_0 = 1$.

Le cas des particules inertielles est diff erent. On peut alors consid erer que les particules rentrent en collision  a cause de leur propre agitation. Ainsi on peut  tablir une  criture analogue avec les collisions entre atomes dans les gaz. On peut alors utiliser l'agitation des particules obtenue par la th eorie de Tchen-Hinze pour estimer le taux de collision  a partir de la connaissance de la turbulence du fluide, [Abrahamson, 1975].

Pour les cas interm ediaires plusieurs m ethodes ont  t e propos ees : entre autres les mod eles de [Williams and Crane, 1983, Kruis and Kusters, 1997, Lavieville, 1997].

Dans les simulations num eriques r ealis ees avec des particules de taille finie pr esent ees par [Cate et al., 2004], la p.d.f. des temps entre deux collisions a  t e analys ee. Cette  tude permet de mettre en  vidence deux r egimes diff erents. Le premier et le plus classique, est d u au r egime inertiel des particules. Un deuxi eme r egime montre une augmentation du nombre de collisions aux temps courts (i.e. collisions cons ecutives). Les auteurs associent ces  v enements   l'existence de la lubrification existant entre les particules (les particules ont du mal   s' loigner l'une de l'autre pendant le temps de drainage visqueux).

I.2.3 Modulation de la turbulence

L'ajout d'une phase dispers ee dans un  coulement turbulent modifie les caract eristiques de celui-ci. La modification de la turbulence par la pr esence des particules est  tudi ee depuis plus de 50 ans, [Soo et al., 1960] et pose encore de nombreuses questions de compr ehension. On observe selon les cas une augmentation ou une diminution de la turbulence, des modifications du spectre d' nergie et des structures turbulentes et une interaction forte avec les m ecanismes de migration (centrip etes ou centrifuges). L'effet de la taille finie des particules est notamment un point crucial qui commence    tre abord e.

Les param etres rentrant en jeu sont nombreux. Tout d'abord, il est  vident que pour des fractions volumiques ϕ_v tr es faibles l'effet des particules n'est pas significatif. On parle alors de

one-way coupling car seul le fluide a un effet sur le mouvement des particules. Toutefois, on peut avoir une fraction volumique faible avec une charge massique ϕ_m suffisante pour modifier la turbulence, [Squires and Eaton, 1990, Boivin et al., 1998]. C'est le cas par exemple des gouttes d'eau dans l'air. Pour ces cas là on parle alors de *two-way coupling*, car les particules ont une influence sur le fluide. Dans le cas où la fraction volumique est suffisamment élevée pour que les collisions entre particules jouent un rôle on parlera de *four-way coupling*.

Mécanismes

Les mécanismes fondamentaux qui induisent des modifications de la turbulence sont divers. Celui qui semble le plus intuitif est la création de turbulence par les tourbillons de sillage d'une particule à très grand nombre de Reynolds, [Hetsroni and Sokolov, 1971]. Toutefois, les particules ayant un faible nombre de Reynolds peuvent aussi augmenter l'énergie turbulente de l'écoulement porteur [Hardalupas et al., 1989]. De plus, on peut s'attendre à ce que la présence d'une particule crée du cisaillement dans la couche limite qui se traduit par une dissipation locale accrue d'énergie. Tous ces phénomènes se cumulent et conduisent au fait que la création ou dissipation d'énergie turbulente se passe sur certaines échelles caractéristiques (le spectre d'énergie turbulente est modifié).

Pour mieux comprendre ces échanges on peut faire référence à l'approche de [Ferrante and Elghobashi, 2003, Ahmed and Elghobashi, 2000]. Ils proposent de s'intéresser à l'équation d'évolution temporelle d'énergie turbulente. Dans le cas d'une THI monophasique on obtient (voir par exemple [Pope, 2000, Chassaing, 2000]) : $\frac{dE}{dt} = -\epsilon$. La dissipation visqueuse s'écrit $\epsilon = \frac{\nu}{2} \left\langle \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 \right\rangle$ et peut être simplifiée dans une THI par $\epsilon = \nu \left\langle \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right\rangle = \langle s_{ij} s_{ij} \rangle$. En plus de ce terme, l'introduction des particules engendre un terme supplémentaire qui provient de la force de traînée exercée par les particules, $\Psi_p = \langle u_i f_i \rangle$. On obtient alors :

$$\frac{dE}{dt} = -\epsilon + \Psi_p \quad (\text{I.19})$$

La dissipation visqueuse ϵ de l'écoulement est elle aussi modifiée à son tour par la présence des particules. Cette modification provient du fait que la présence des particules introduit une modification locale de l'écoulement.

Une des questions les plus importantes est de savoir si les particules présentes dans le fluide créent ou dissipent plus ou moins d'énergie turbulente que dans la situation monophasique. C'est avec cet objectif que [Gore and Crowe, 1989] ont réalisé un récapitulatif des résultats obtenus expérimentalement. Leur conclusion est que les petites particules vont réduire l'énergie turbulente alors que les grosses particules vont créer de la turbulence. Pour étayer cette analyse, ils définissent un nombre adimensionnel avec le rapport du diamètre des particules et une taille caractéristique de la turbulence : d/l_e . Sur la base de leur analyse, ils déduisent que pour $d/l_e < 0.1$ les particules dissipent de l'énergie. Ce premier résultat ne permettait pas de comprendre l'influence des autres facteurs comme la fraction volumique ou le rapport de densités.

Une nouvelle proposition de Elghobashi [Elghobashi, 1991, Elghobashi, 1994] a mis en avant le nombre de Stokes basé sur l'échelle de longueur de Kolmogorov comme paramètre déterminant permettant de séparer les régimes dissipatifs des régimes de production. La figure I.8 détaille les différents régimes identifiés. Toutefois, on voit que cette proposition reste encore sommaire et ne permet pas d'établir de tendances générales pour tous les paramètres que l'on peut faire varier dans un écoulement turbulent chargé en particules.

Par la suite, différentes propositions ont été faites afin de synthétiser les différents résultats dans un même nombre adimensionnel, [Poelma et al., 2007, Tanaka and Eaton, 2008]. Ces paramètres ne semblent adaptés que pour des conditions particulières.

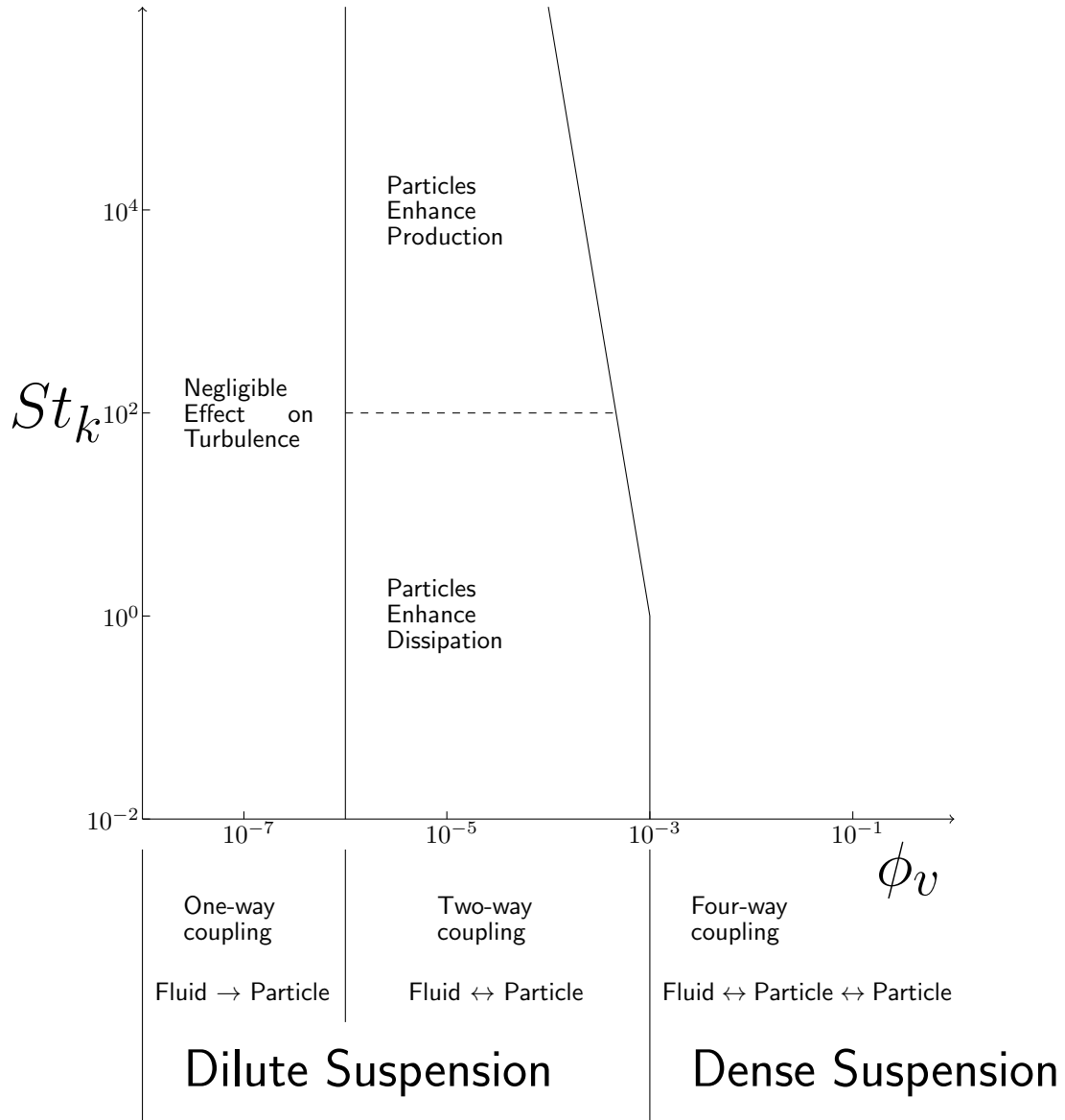


FIGURE I.8 – Figure inspirée de celle présentée dans [Elghobashi, 1991] et [Elghobashi, 1994].

Méthodologie

Certains auteurs se sont intéressés à des écoulements turbulents cisailés chargés en particules, [Ahmed and Elghobashi, 2000, Mashayek, 1998, Vermorel, 2003]. L'intérêt est que dans ce cas la turbulence est entretenue par l'écoulement monophasique lui même. Néanmoins, interpréter la modification de la turbulence par des particules devient plus complexe car elle s'ajoute aux mécanismes de transfert d'énergie de l'écoulement porteur. En plus du transfert entre les particules et l'écoulement présent dans le cas d'une THI la présence des particules modifie la production de la turbulence, ce qui vient à son tour changer les caractéristiques de la turbulence. Ainsi, [Ahmed and Elghobashi, 2000] montre que la présence des particules modifie la dynamique des tourbillons. De plus, dans le cas où les particules sont affectés par le mécanisme de concentration préférentielle, celles ci se retrouvent dans les zones à grand cisaillement. La présence des particules vient changer la dynamique de l'écoulement à grande échelle par effet collectif.

Une deuxième possibilité est de considérer un écoulement turbulent, homogène et isotrope soit en alimentant la turbulence aux grandes échelles, soit en réalisant des tests en décroissance temporelle.

Dans plusieurs articles Elghobashi s'oppose à l'idée de pouvoir comprendre la modification de la turbulence à partir de simulations forcées [Elghobashi and Truesdell, 1993, Lucci et al., 2010]. En effet, l'introduction d'un terme de forçage vient s'ajouter à la modification de la turbulence due aux particules. En plus, l'interaction entre les particules et ce forçage doit être pris en compte. Néanmoins, la simulation des écoulements turbulents décroissants amène trois problèmes principaux. Le premier est la difficulté d'établir des statistiques suffisamment convergées. Le deuxième est que dans les écoulements décroissants il y a une dépendance vis-à-vis des conditions initiales [Boivin et al., 1998]. Finalement, la taille des échelles turbulentes évolue, ce qui rend impossible l'établissement de nombres adimensionnels caractéristiques permettant de mettre en lien les tailles des particules et les caractéristiques de l'écoulement du fluide (par exemple, le rapport entre le rayon des particules et l'échelle de Kolmogorov). Il est important de comprendre que selon l'objectif de l'étude on aura intérêt à traiter une turbulence entretenue (pour des statistiques lagrangiennes par exemple) ou décroissante pour avoir accès à l'effet net des particules.

Pour analyser plus en détail cette modification de la turbulence des simulations numériques ont été menées. Les simulations de type Euler-Lagrange ne considèrent dans une première étape que l'influence du fluide sur les particules. Afin d'introduire le couplage inverse (*two-way coupling*) la méthode la plus utilisée est celle appelée PSIC (*Particle-source in cell*), [Crowe et al., 1977, Elghobashi and Truesdell, 1993]. Cette méthode consiste à projeter la force que la particule exerce sur le fluide sur les noeuds du maillage environnant la particule. Cette force est l'inverse de celle qu'exerce le fluide sur la particule et est obtenue dans le bilan lagrangien. A partir de cette distribution aux noeuds autour de la particule on obtient un terme source dans les équations de Navier-Stokes. Les différentes versions de cette approche considèrent différentes pondérations quant aux projections.

Résultats

Cette famille de méthodes numériques a permis l'étude systématique des THI chargées en particules. Un grand nombre de résultats a été tiré des simulations.

Dans l'article de [Ferrante and Elghobashi, 2003] on utilise la décomposition (I.19) pour expliquer ces modifications pour des particules ponctuelles dans une THI décroissante. Il est montré que la dissipation visqueuse dépend de l'inertie des particules. Pour des particules peu inertielles ($St < 1$) on trouve une augmentation de la dissipation visqueuse. Ces particules allongent la durée de vie des tourbillons. Les particules inertielles ($St = 5$) traversent les tourbillons en créant un couple dans le sens inverse de la direction des tourbillons. Ce mécanisme fait que la dissipation

est moindre que dans le cas monophasique. Ce résultat est confirmé par [Boivin et al., 1998] qui lui s'intéresse à une THI forcée avec des particules ponctuelles. Il montre que ses particules augmentent la dissipation. La dissipation visqueuse augmente avec la diminution du temps de réponse des particules, et donc, avec le nombre de Stokes. Dans ces simulations, la dissipation visqueuse augmente aussi avec l'augmentation de la charge massique. Il est important de remarquer que le bilan réalisé par [Boivin et al., 1998] est différent de celui de l'équation (I.19) puisque la THI est forcée. De ce fait, il faut prendre en compte l'apport d'énergie introduit dans le système. Dans les travaux de [Elghobashi and Truesdell, 1993], une simulation d'une THI décroissante avec des particules ponctuelles est réalisée avec un couplage inverse de type PSIC. Dans ces simulations, on observe encore une augmentation de la dissipation du fait de la présence des particules. Toutefois, contrairement à ce qui est avancé par [Boivin et al., 1998], cette dissipation augmente avec le temps de réponse des particules.

En ce qui concerne le terme de couplage Ψ_p , [Ferrante and Elghobashi, 2003] montre qu'il est positif pour des particules faiblement inertielles. Ceci implique que les particules apportent de l'énergie turbulente. Ceci se comprend car la force exercée par les particules est alignée avec la vitesse du fluide environnant. Pour des particules avec un nombre de Stokes intermédiaire Ψ_p peut être négatif, ce qui implique une dissipation due à la présence de ces particules. Dans les simulations de [Boivin et al., 1998] ce terme est négatif, ce qui est cohérent avec les résultats de [Ferrante and Elghobashi, 2003]. Pour [Boivin et al., 1998], l'influence de ce terme augmente avec le nombre de Stokes et avec la charge massique.

Afin de mieux comprendre l'influence des particules sur la turbulence on peut s'intéresser à la modification du spectre d'énergie liée à la présence des particules. Pour mieux comprendre ces effets on peut s'intéresser au bilan spectral d'énergie cinétique. Il s'écrit de façon analogue à l'équation (I.19), mais un terme supplémentaire $T(\kappa)$ apparaît. Il représente le transfert d'énergie entre les différents nombres d'onde :

$$\frac{dE(\kappa)}{dt} = -\epsilon(\kappa) + \Psi_p(\kappa) + T(\kappa) \quad (\text{I.20})$$

Afin d'étudier ces effets [Squires and Eaton, 1990] utilisent la méthode PSIC pour réaliser des simulations de THI forcée avec des particules ponctuelles. Dans cette étude, l'influence des particules se concentre sur les grands nombres d'onde, surtout quand la fraction massique est importante. L'effet constaté est l'augmentation de l'énergie cinétique et de la dissipation pour les grands nombres d'onde. Ce résultat est confirmé dans les simulations de [Elghobashi and Truesdell, 1993]. Ceci s'explique par un transfert d'énergie vers les petites échelles. Ainsi le terme $T(\kappa)$ est négatif pour des petits nombres d'onde et positif pour les grands nombres d'onde [Ferrante and Elghobashi, 2003, Boivin et al., 1998]. La figure I.9 présente ce terme de transfert pour plusieurs cas de simulation.

D'autres effets doivent être pris en compte pour comprendre toutes les facettes du phénomène de modification de la turbulence par des particules. Dans l'article de [Squires and Eaton, 1990], il est décrit que la concentration préférentielle joue un rôle important dans la modification de la turbulence. Un autre effet encore peu compris est la modification de la turbulence pour des écoulements modérément denses. Pour ces cas, les collisions ne peuvent pas être négligées, et vont sans doute jouer un rôle important. Finalement, quand les particules sont soumises à leur propre poids, les particules vont rendre l'écoulement anisotrope et vont créer un transfert d'énergie supplémentaire. Dans [Elghobashi and Truesdell, 1993] on s'intéresse à cette problématique et on montre la création d'énergie turbulente par la présence des particules soumises à la gravité. Ces particules créent de la turbulence aux petites échelles. De ce fait un transfert depuis les petites échelles apparaît (cascade inverse).

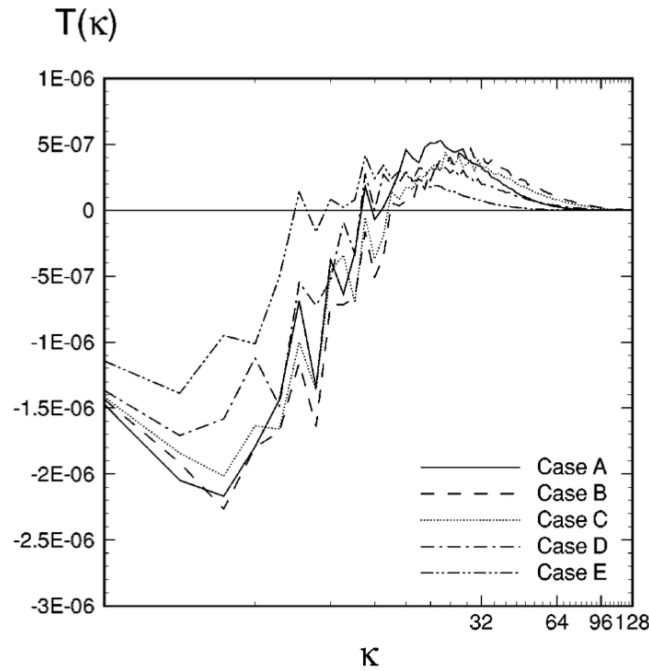


FIGURE I.9 – Terme de transfert $T(\kappa)$ pour plusieurs nombres de Stokes. Le cas A est le cas sans particules. Le temps de réponse des particules (et donc le nombre de Stokes) augmente de B à D. Source [Ferrante and Elghobashi, 2003].

Effet des particules de taille finie

Une première simulation numérique fut réalisée par [Zhang and Prosperetti, 2005] à l'aide du code Physalis qui permet de prendre en compte l'écoulement autour des particules de taille finie (voir paragraphe II.2.4, ou l'article [Prosperetti and Oğuz, 2001]). Dans ces simulations 100 particules résolues sont introduites dans une THI décroissante. Le cas diphasique décroît plus rapidement que le cas monophasique. En plus, cette décroissance est comparée à celle obtenue avec des particules ponctuelles incorporant le couplage inverse. Ils constatent encore que le cas résolu prenant en compte la taille réelle des particules dissipe plus rapidement l'énergie. Ce résultat préliminaire a été par la suite étudié plus avant.

Lucci et al. [Lucci et al., 2010, Lucci et al., 2011] se sont intéressés à l'étude de la variation de la dissipation pour des particules dont la taille dépasse l'échelle de longueur de Kolmogorov. Pour ce faire il utilise un code numérique résolvant l'écoulement autour des particules. Les particules sont modélisées à l'aide d'une méthode IBM. Dans les résultats de [Lucci et al., 2010], on constate l'effet contraire aux particules ponctuelles : la dissipation visqueuse augmente dans les simulations avec des particules dont le nombre de Stokes basé sur l'échelle de Kolmogorov varie entre 30 et 180. Cette augmentation peut s'expliquer à partir du cisaillement qui se crée autour de la particule.

Afin de valider cette explication [Lucci et al., 2010] s'intéresse à la dissipation locale autour des particules : $\epsilon(\mathbf{x}) = \nu s_{ij} s_{ij}$. Il montre qu'autour de la particule on a une augmentation locale de $\epsilon(\mathbf{x})$. L'épaisseur de cette couche ne dépend pas du rayon de la particule. Il s'intéresse aussi à la localisation de cette augmentation. Pour ce faire il sépare le domaine entre la partie qui se situe devant la particule ($\mathbf{V}_p \cdot \mathbf{O}_p \mathbf{M} > 0$), et la partie en amont. Il montre ainsi que cette augmentation est plus importante devant la particule. Ce résultat reste incomplet du fait que l'on ne localise pas l'endroit précis de l'augmentation de la dissipation. Il faudrait pour cela réaliser une champ de dissipation moyen autour des particules.

Pour des fractions volumiques identiques, [Lucci et al., 2010] ont montré que cette dissipation augmente quand on fait diminuer le rayon des particules. Ceci est dû au fait que si l'on maintient la fraction volumique et on diminue le rayon des particules on augmente forcément l'aire de l'interface solide/fluide. De ce fait, la zone de dissipation est augmentée.

L'article de [Cate et al., 2004] décrit des simulations de THI avec des particules de taille finie résolues (méthode basée sur une approche de Lattice-Boltzmann et Immersed Boundary Method). Des champs de dissipation sont discutés par les auteurs qui identifient des zones de haute dissipation autour des particules. Ceci montre encore une fois que les particules de taille finie créent localement de la dissipation. Néanmoins, la faible résolution du maillage ne permet pas de conclure définitivement. De plus il s'agit de champs instantanés, ce qui ne permet pas d'avoir une conclusion générale sur les statistiques de l'écoulement. Afin de discuter sur l'origine de cette dissipation additionnelle, les auteurs proposent une analyse spectrale. Cette analyse montre que la dissipation totale ($\epsilon + \Psi_p$) est concentrée sur des échelles inférieures à la taille de la particule. Des résultats semblables sont exposés dans l'article de [Gao et al., 2011]. Dans ce dernier article, des régimes proches de ceux de [Lucci et al., 2010] sont abordés. La simulation se fait à l'aide d'un code basé sur une approche de Lattice-Boltzmann.

Les expériences de [Tanaka and Eaton, 2010] étudient l'écoulement autour des particules de taille finie à l'aide de mesures PIV dans une turbulence forcée. Cette étude confirme l'augmentation considérable de la dissipation locale autour des particules. La figure I.10 montre la dissipation autour d'une particule. Pour ces cas particuliers, la dissipation créée aux petites échelles est compensée par une création d'énergie qui est due à la modification des structures turbulentes. Néanmoins, on trouve une diminution nette de l'énergie turbulente du fait de la diminution aux grandes échelles.

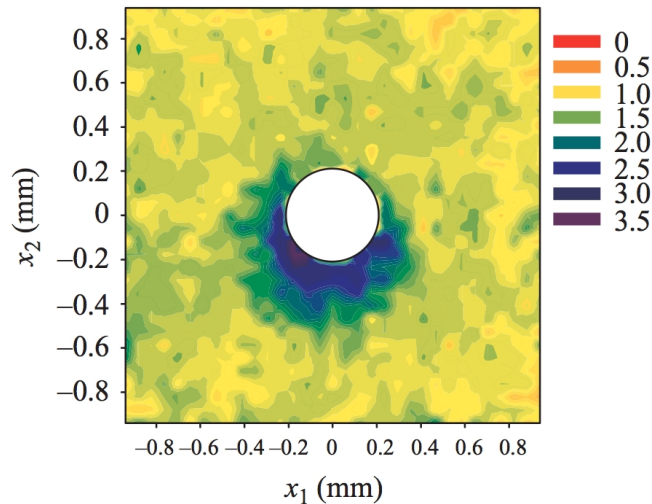


FIGURE I.10 – Contour de dissipation $\epsilon/\epsilon_{\text{monophasique}}$ autour d'une particule de $500 \mu\text{m}$. Source : [Tanaka and Eaton, 2010].

Il est important de comprendre que la compensation des différents phénomènes peut jouer un rôle très important. Dans les expériences menés par [Poelma et al., 2007] avec des particules de taille finie dans une turbulence de grille on constate que l'inclusion des particules ne modifie pas globalement l'énergie turbulente, mais que ces particules modifient drastiquement les structures turbulentes en apportant de l'énergie aux petites échelles.

En ce qui concerne le terme propre au couplage avec les particules Ψ_p seul l'article de

[Lucci et al., 2010] donne des résultats pour des particules de taille finie. Pour ce terme on trouve encore une différence entre les particules ponctuelles et les particules de taille finie [Ferrante and Elghobashi, 2003]. Pour des particules ponctuelles ce terme est dissipatif ($\Psi_p < 0$) quand le St est suffisamment grand. Dans le cas des particules de taille finie ce terme est toujours positif bien que les particules soient inertielles. Ce terme augmente considérablement avec la masse volumique des particules. En effet, des particules inertielles vont avoir un glissement majeur. Plus on augmente la fraction solide et plus le couplage entre les phases apporte de l'énergie au système.

Ces deux effets se compensent selon les cas traités. En résumé [Lucci et al., 2010] arrive à la conclusion que la réduction totale d'énergie augmente avec la fraction volumique et avec la fraction massique (à masse volumique constante). Ce résultat est confirmé par [Cate et al., 2004] qui attribue à la fraction volumique la plupart de la réduction de l'énergie, cet effet étant plus important que celui de l'inertie des particules. Une dernière conclusion est proposée par [Lucci et al., 2010] qui montre que parfois les effets d'inertie et de taille peuvent se compenser. Si on maintient la masse volumique et massique constantes mais qu'on augmente le rayon des particules (ce qui implique une diminution du nombre de particules et une augmentation de leur temps de réponse) les effets sur la dissipation et sur le couplage restent du même ordre.

L'analyse spectrale est plus compliquée dans le cas des particules de taille finie. Ceci est dû au fait que pour obtenir le spectre spatial il faut réaliser une transformée de Fourier dans le domaine fluide. Si on réalise cette transformée dans un code prenant en compte des particules de taille finie cette transformée aura des oscillations dues au domaine solide. Toutefois, et malgré ces oscillations, les simulations de [Cate et al., 2004, Lucci et al., 2010] montrent une augmentation de l'énergie turbulente pour les échelles inférieures au diamètre des particules. Pour pouvoir comprendre l'influence des particules de taille finie [Lucci et al., 2010] s'intéresse au spectre temporel obtenu à partir de particules ponctuelles agissant comme des traceurs. Ce spectre semble peu modifié par la présence des particules solides. Un résultat semblable fut obtenu pour des particules ponctuelles [Squires and Eaton, 1990].

I.3 Objectifs et plan de l'étude

Les écoulements particulaires sont présents dans un grand nombre d'applications. Leur analyse a commencé par l'étude des particules de petite taille. Dans la figure I.11 on présente un grand nombre des études réalisées pour des écoulements particulaires selon le nombre de Stokes, le rapport des masses volumiques et la taille des particules vis-à-vis de l'échelle de longueur de Kolmogorov. Si on regarde la légende, figure I.12, on peut voir que l'étude des particules de taille finie s'est développée cette dernière décennie. Cet engouement provient de deux raisons. La première est que grâce à l'augmentation de la puissance de calcul des machines les études numériques des particules de taille finie sont maintenant réalisables numériquement. La deuxième raison est le besoin de comprendre quels sont les mécanismes existants dans ce type d'écoulements qui sont plus complexes que le cas des particules ponctuelles.

Un grand nombre de mécanismes existants pour des particules de petite taille ont été confirmés dans des écoulements avec des particules de taille finie. Néanmoins, un grand nombre de questions restent ouvertes.

La première est de comprendre quelle est l'agitation et la dispersion des particules dont la taille n'est pas négligeable devant les plus petites échelles de la turbulence.

Un deuxième champ d'investigation dans lequel peu de réponses sont disponibles est la description des collisions dans ce type d'écoulement. En plus, la connaissance de l'influence des forces

hydrodynamiques à courte distance sur le régime de collision n'est pas complète pour les particules de taille finie.

Finalement, une des questions essentielles est de mieux comprendre comment évolue l'écoulement autour des particules. On pourra estimer ainsi quel est le rayon d'influence de la particule, et savoir s'il est possible d'établir un rayon à partir duquel on peut considérer que l'écoulement n'est plus perturbé. En plus, si on s'intéresse à la dissipation moyenne autour de la particule on pourra compléter les résultats déjà existants dans ce sens.

Notre étude consiste donc à simuler des écoulements turbulents particuliers avec des particules de taille finie.

Pour simuler les écoulements particuliers il existent plusieurs méthodes. **Dans le Chapitre II on réalise un récapitulatif des différentes méthodes pour la simulation des particules de taille finie** afin de motiver le choix de la méthode numérique utilisée.

Ensuite, cette méthode a été intégrée de sorte à pouvoir simuler des milliers de particules complètement résolues. Pour ce faire, on a adapté la méthode de pénalisation de Thétis afin d'imposer le comportement solide des particules. Afin de prendre en compte le déplacement des particules dans le code, une méthode de calcul des vitesses a été développée. **Le Chapitre III est consacré à la description de la méthode**, nommée VoFLag .

Dans un deuxième temps, on s'est intéressé à la détermination du maillage optimal pour l'utilisation du code, l'objectif étant de simuler des écoulements au moindre coût. Pour cela, on a réalisé des cas de validation pour diverses configurations d'écoulement.

La détermination des limites est donné au Chapitre IV.

Afin de pouvoir traiter des écoulements denses un modèle de collision entre particules est intégré au code. Ce modèle permet de prendre en compte dans un premier temps les collisions solides. Ensuite, on ajoute une correction due au fait que la lubrification interparticulaire n'est pas résolue par le solveur fluide. **Le Chapitre V traite le modèle de collisions adopté.**

Nous avons ensuite réalisé trois cas de Turbulence Homogène et Isotrope (THI) avec particules. Le choix est fait en tenant compte des éléments cités ci-dessus. Le but est de comprendre les mécanismes d'interaction particules/turbulence. **La mise en place des cas de THI est développée au Chapitre VI.**

Ces simulations ont permis d'avoir une description de l'écoulement diphasique. D'un côté, on a pu montrer la modification locale du fluide porteur. Puis on a pu s'intéresser aux statistiques associées aux particules solides en mettant en évidence les différences avec les particules de taille finie. **L'étude de l'écoulement diphasique est présentée dans le Chapitre VII.**

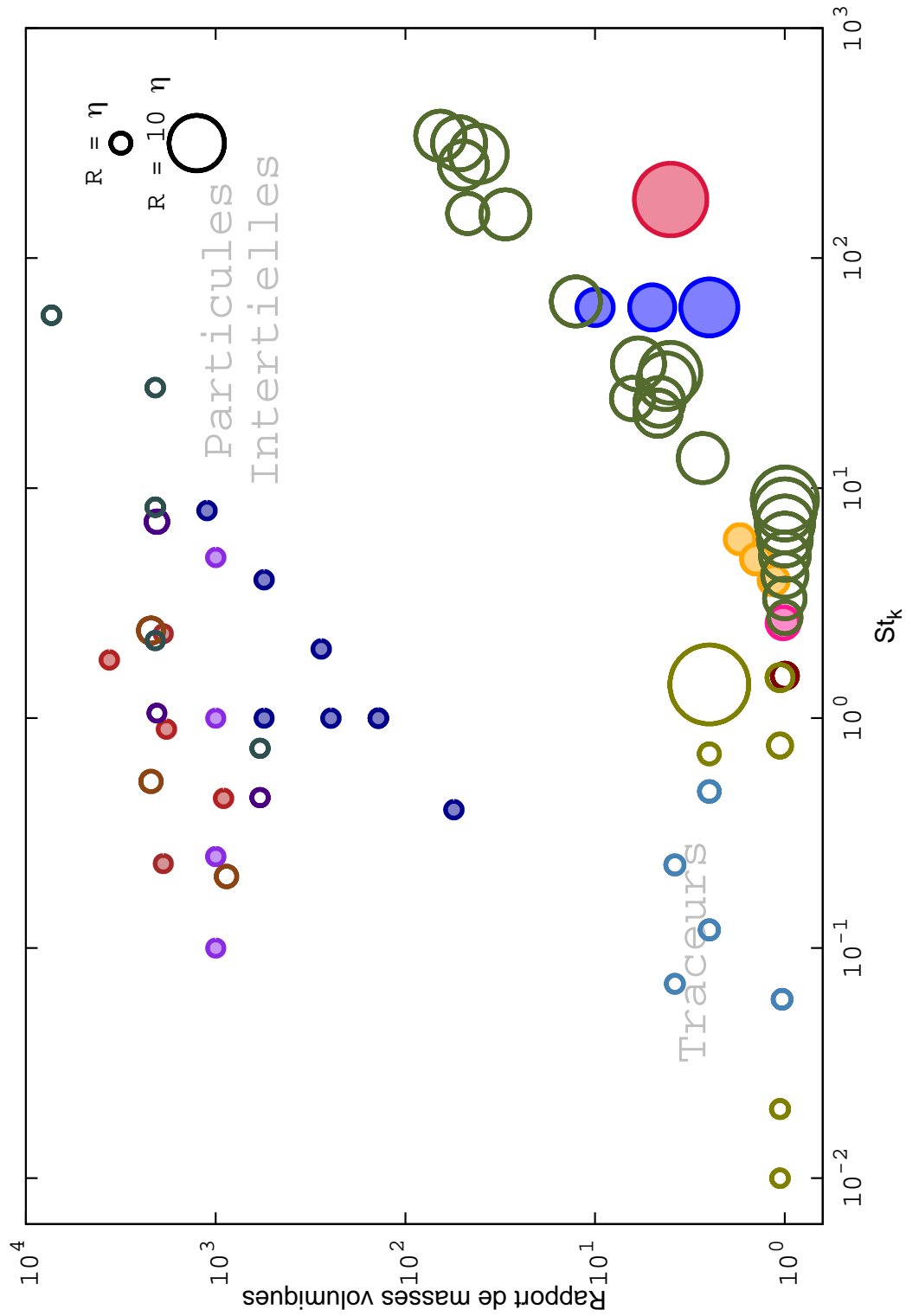


FIGURE I.11 – Différents cas de turbulence avec particules dans le plan rapport de masses volumiques $\rho = \frac{\rho_p}{\rho_f}$ vs. nombre de Stokes basé sur l'échelle de Kolmogorov. Les cercles creux sont des études expérimentales, les cercles pleins des simulations numériques. La taille des cercles dépend du rapport entre le diamètre des particules et l'échelle de Kolmogorov.

Legende		
Lucci (2011) : Num (DNS-FullResolved)		●
Ferrante (2003) : Num (TwoWay)		●
Ahmed (2000) : Num (DNS-Point)		●
Corre (2008) : Num (DNS-FullResolved)		●
Sundaram (1997) : Num (OneWay-Collisions)		●
Zhang (2005) : Num (DNS-FullResolved)		●
Elgobashi (1993) : Num (TwoWay)		●
Cate (2004) : Num (DNS-FullResolved-LB)		●
Qureshi (2009) : Exp (Bulles)		○
Elhimer : Exp (grille)		○
Xu (2008) : Exp (tournante)		○
Tanaka (2010) : Exp (Speaker)		○
Poelma (2007) : Exp (Tube)		○
Wood (2005) : Exp (Speaker)		○
Fessler (1994) : Exp (Channel)		○

FIGURE I.12 – Code de couleurs pour la figure I.11.

Méthodes numériques pour les écoulements particulaires de taille finie

Durant les 50 dernières années il y a eu un énorme progrès dans les moyens expérimentaux permettant de comprendre les écoulements particuliers. Notamment, l'apparition de la LDA (pour *Laser-Doppler Anemometer*) dans les années 70, puis de la PIV (pour *Particle Image Velocimetry*) dans les années 90 et du PDA (Particle Doppler Anemometer), ont permis l'étude de phénomènes à des échelles aussi bien locales que globales. Un résumé sur ces avancements est donné par [Balachandar and Eaton, 2010]. Ce progrès a été accompagné d'avancés dans la simulation numérique. De nombreux modèles et méthodes numériques ont été développés. Ils sont capables de prendre en compte une vaste gamme de problèmes d'écoulements particuliers.

On peut distinguer trois grandes familles qui se différencient par leur *état d'esprit*. Leurs hypothèses de travail étant complètement différentes.

Tout d'abord, l'approche Euler-Euler considère la phase dispersée comme une phase continue. Chaque volume de contrôle contient toute l'information nécessaire pour modéliser le comportement de cette phase. Pour ce faire, ces méthodes utilisent des lois de transfert globales prenant en compte un grand nombre des particules.

L'approche Euler-Lagrange, ou encore DPS (pour *Discrete Particles Simulation*), considère des particules ponctuelles. Chaque particule est suivie de manière lagrangienne à l'aide de l'équation (I.10). Les échanges entre le fluide et le milieu dispersé se modélisent à l'aide des lois de transfert qui supposent que les particules sont isolées. Ces forces sont estimées à partir de l'écoulement non perturbé par la particule considérée, équation (I.11). La figure II.1 montre cette approche. Les forces prises en compte dépendent des régimes considérés.

Dans ces deux approches, on suppose une séparation d'échelle entre la taille des particules et celles de l'écoulement turbulent. De ce fait, dans le cas de la simulation des particules dans un écoulement turbulent, le diamètre des particules considérées par ces méthodes doit être beaucoup plus faible que l'échelle de Kolmogorov.

La troisième approche correspond aux méthodes directes qui résolvent l'intégralité de l'interaction entre le fluide et les particules. Celles-ci sont de taille supérieure au volume élémentaire représentatif de la modélisation (on parle de particules résolues). Chaque particule est suivie et transportée. Aucun modèle de transfert n'est utilisé. L'échange d'énergie entre les phases se passe sur la frontière. En effet, la frontière est traitée directement ou indirectement par ces méthodes. Néanmoins, la façon dont cet échange est fait donne naissance à différentes méthodes.

Afin de comprendre l'interaction entre une particule et la phase porteuse il est nécessaire de réaliser des simulations dans lesquelles l'écoulement autour des particules est résolu. La différence

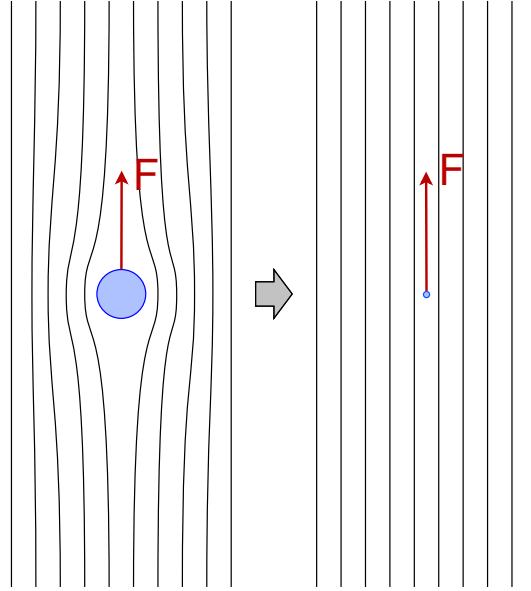


FIGURE II.1 – Lignes de courant pour un écoulement de Stokes autour d’une particule de taille finie et d’une particule ponctuelle.

avec l’approche précédente qui considère le couplage entre les deux phases à l’aide des lois de transfert c’est qu’ici ce couplage se fait au niveau de l’interface fluide-solide. De ce fait, le rayon des particules doit être plus grand que l’échelle de résolution utilisée pour les équations du fluide porteur.¹ Ces particules sont considérées comme des obstacles. La frontière entre le solide et le fluide peut donc être prise en compte et l’écoulement autour de la particule résolu (ou partiellement résolu).

On va voir dans ce chapitre plusieurs méthodes de résolution directe. On commence par l’approche ALE (pour *Adaptative Lagrangian Eulerian*) qui se base sur une adaptation du maillage au domaine fluide Ω_f selon la position des particules. Ensuite, différentes méthodes à maillage fixe sont expliquées. Celles-ci utilisent un maillage indépendant des positions des particules. Le comportement solide est imposé soit à la frontière Γ_i , soit dans tout le volume solide Ω_s .

II.1 Approche ALE pour la simulation des écoulements particuliers

Ici on présente la méthode ALE (pour *Arbitrary Lagrangian Eulerian*) qui a pour caractéristique principale un maillage adapté au domaine fluide $\Omega_f(t)$. Le maillage est régénéré ou déplacé à chaque itération. La figure II.2 montre un maillage de ce type. Pour pouvoir prendre en compte le déplacement du maillage la « vitesse du domaine » \mathbf{c} est calculée. Cette vitesse est égale à la vitesse de la frontière de la $i^{\text{ème}}$ particule pour les points appartenant à cette frontière et nulle ailleurs :

$$\mathbf{c}(M) = \begin{cases} \mathbf{U}_i + \mathbf{O}_i \mathbf{M} \wedge \boldsymbol{\omega}_i & \exists i, M \in \Gamma_i \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{II.1})$$

1. C’est dans ce sens qu’on peut assimiler cette famille de méthodes à de la DNS (*Direct Numerical Simulation*). Néanmoins, il ne faudra pas confondre la DNS utilisé pour l’interaction entre les phases avec la DNS du fluide seul. En effet, on peut réaliser des DNS pour le fluide et considérer des particules ponctuelles.

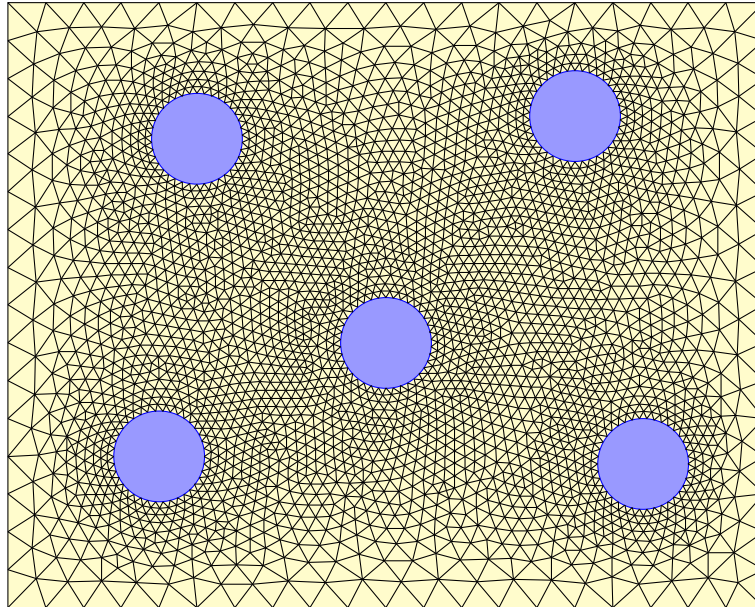


FIGURE II.2 – Maillage ALE pour une ensemble de particules.

Une simplification peut être faite quand les particules sont sphériques car la rotation de celles-ci ne modifie pas le domaine fluide.

Cette vitesse du domaine permet d'estimer la vitesse fluide dans le maillage mobile $\tilde{\mathbf{u}}$. La dérivée partielle de la vitesse fluide est calculée à partir de la vitesse dans le maillage mobile :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} + \mathbf{c} \nabla \tilde{\mathbf{u}} \quad (\text{II.2})$$

On peut alors remplacer II.2 dans les équations de Navier-Stokes. On définit pour cela la pression ALE \tilde{p} . On obtient alors le système :

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} = 0 \quad \text{sur } \Omega_f \quad (\text{II.3})$$

$$\rho_f \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} + ((\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{c}_\tau) \cdot \nabla) \tilde{\mathbf{u}} = -\nabla \tilde{p} + \nabla \cdot (\nu_f (\nabla \tilde{\mathbf{u}} + \nabla^t \tilde{\mathbf{u}})) + \mathbf{S} \quad \text{sur } \Omega_f \quad (\text{II.4})$$

L'inclusion du terme convectif dérivé de la vitesse \mathbf{c} permet de prendre en compte le déplacement des mailles.

Contrairement à la méthode ALE utilisée pour des petites déformations, (voir par exemple [Brändle de Motta and Baj, 2009]), dans le cas des écoulements particulières le domaine fluide subit des fortes déformations et donc doit être remaillé fréquemment. De ce fait, le coût de calcul peut devenir prohibitif, surtout en 3 dimensions. En deux dimensions ce coût de calcul reste raisonnable, [Hu et al., 1992a, Johnson and Tezduyar, 1996, Hu, 1996, Maury, 1999, Cho et al., 2005]. Néanmoins, dans [Johnson and Tezduyar, 1997] on retrouve des simulations 3D. Des améliorations sur la vitesse de remaillage d'un domaine tridimensionnel peuvent aussi rendre cette méthode viable [Dobrzynski and Frey, 2008].

En 2D ce modèle a été utilisé pour étudier un écoulement de Poiseuille chargé en particules [Cho et al., 2005]. En 3D, une simulation de 101 sphères en sédimentation dans un tube a été réalisée, [Johnson and Tezduyar, 1997].

II.2 Approches de type domaines fictifs pour la simulation des écoulements particuliers

Dans cette famille de méthodes les particules sont introduites dans un maillage fixe. Le champ de vitesse est défini dans tout le domaine Ω . Le domaine solide (domaine fictif) doit être repéré. Dans la résolution des équations de Navier-Stokes avec plusieurs phases il existe de nombreuses approches pour repérer chacune des phases. Par exemple, l'approche Level-Set utilise la distance de chaque noeud à la frontière entre les phases. La méthode de Front-Tracking utilise des traceurs à la frontière entre les phases. Ces méthodes vont donner naissance à différentes approches pour simuler des écoulements particuliers.

Les différents modèles présentés dans cette partie montrent différentes méthodes pour introduire ou imposer le comportement solide dans les équations de Navier-Stokes.

II.2.1 Méthode de pénalisation par maille

La première méthode consiste à forcer la vitesse solide $\bar{\mathbf{u}}$ à l'intérieur de la partie solide. Le champ de vitesse solide $\bar{\mathbf{u}}$ est nul dans le domaine fluide Ω_f et correspond à la vitesse à noeud de la $i^{\text{ème}}$ particule \mathbf{u}_i , quand ce noeud appartient à Ω_s^i . Le domaine solide est repéré à l'aide de la fonction couleur C .

Un terme de pénalisation $\lambda C (\bar{\mathbf{u}} - \mathbf{u})$ est introduit dans l'équation de quantité de mouvement :

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot (\nu (\nabla \mathbf{u} + \nabla^t \mathbf{u})) + \mathbf{S} + \lambda C (\bar{\mathbf{u}} - \mathbf{u}) \quad (\text{II.5})$$

Quand le coefficient de pénalisation λ est suffisamment grand, on obtient la vitesse solide dans le domaine solide $C = 1$. La vitesse dans le domaine fluide reste inchangée.

Afin d'obtenir le champ de vitesse solide, le champ de vitesse global est intégré avant la résolution de II.5 :

$$\mathbf{u}_i(M) = \mathbf{U}_i + \mathbf{O}_i \mathbf{M} \wedge \boldsymbol{\omega}_i \quad \text{pour } M \text{ dans } \Omega_s^i \quad (\text{II.6})$$

$$\mathbf{U}_i = V^{-1} \int_{\Omega_s^i} \mathbf{u} dV \quad (\text{II.7})$$

$$\boldsymbol{\omega}_i = J^{-1} \int_{\Omega_s^i} \mathbf{u} \wedge \mathbf{O}_i \mathbf{M} dV \quad (\text{II.8})$$

$$\bar{\mathbf{u}} = \sum_i \mathbf{u}_i \quad \text{sur } \Omega \quad (\text{II.9})$$

Les vitesses solides doivent être obtenues avant la résolution de II.5. Ceci provoque un découplage temporel dans la résolution (*time splitting*) qui est un des points faibles de cette méthode.

Finalement, la fonction couleur C est advectée à l'aide du champ de vitesses solide. Ceci permet d'éviter la déformation du contour solide.

Numériquement, [Coquerelle and Cottet, 2008] implémentent cette méthode dans un solveur basé sur la vorticit . Ce m me article donne quelques cas qui montrent qualitativement la capacit  de cette m thode   r soudre des probl mes de couplage fluide-solide.

Il faut voir dans cette m thode une vision de p nalisation semblable   celle pr sent e dans [Arquis, 1984] et [Caltagirone and Arquis, 1986]. La diff rence est qu'au lieu d'imposer une vitesse nulle on impose la vitesse fluide comme fait par [Angot, 1989] pour l' quation de transfert de chaleur.

Le d faut de cette m thode est qu'il faut conna tre *a priori* la vitesse des solides.

II.2.2 Méthode DLM

L'idée principale de la méthode DLM (pour *Distributed Lagrange Multiplier*) consiste à introduire des multiplicateurs de Lagrange qui permettent d'accumuler la contrainte solide à l'interface fluide-solide. De la même façon que la pression garantit la divergence nulle, on introduit une vitesse fictive intermédiaire $\tilde{\mathbf{u}}$ pour assurer la contrainte solide.

Une première approche [Glowinski et al., 1999] utilise la contrainte II.10 pour imposer le comportement solide.

$$\mathbf{u}_i(M) = \mathbf{U}_i + \mathbf{O}_i \mathbf{M} \wedge \boldsymbol{\omega}_i \text{ pour } M \text{ dans } \Omega_s^i \quad (\text{II.10})$$

Dans une deuxième approche, on remplace cette contrainte par une contrainte sur le gradient de vitesses, [Patankar et al., 2000, Patankar, 2001, Sharma and Patankar, 2005] :

$$\nabla \mathbf{u} + \nabla^t \mathbf{u} = 0 \text{ in } \Omega_s \quad (\text{II.11})$$

L'équivalence mathématique entre ces deux contraintes est expliquée dans le paragraphe III.2.4-iii.,

Cette contrainte est équivalente à [Patankar et al., 2000] :

$$\nabla \cdot (\nabla \mathbf{u} + \nabla^t \mathbf{u}) = 0 \text{ in } \Omega_s \quad (\text{II.12})$$

$$(\nabla \mathbf{u} + \nabla^t \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ in } \Gamma_s \quad (\text{II.13})$$

Comme dans le cas de la résolution des équations de Navier-Stokes, on peut faire un *splitting* pour imposer la contrainte. Dans une première étape on résout les équations de Navier-Stokes pour obtenir $\tilde{\mathbf{u}}$ à divergence nulle :

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} = 0 \quad (\text{II.14})$$

$$\rho \left(\frac{\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + (\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \tilde{\mathbf{u}} \right) = -\nabla \tilde{p} + \nabla \cdot (\nu (\nabla \tilde{\mathbf{u}} + \nabla^t \tilde{\mathbf{u}} + \mathbf{S})) \quad (\text{II.15})$$

Ici, ρ est la densité locale obtenue à partir de la fonction couleur. Dans une deuxième étape on impose la contrainte solide. Pour ce faire, on obtient $\boldsymbol{\lambda}$ en résolvant l'équation de Poisson suivante :

$$\nabla \cdot \left(\nabla \left(\tilde{\mathbf{u}} + \frac{\boldsymbol{\lambda} \Delta t}{\rho_s} \right) + \nabla^t \left(\tilde{\mathbf{u}} + \frac{\boldsymbol{\lambda} \Delta t}{\rho_s} \right) \right) = 0 \quad (\text{II.16})$$

Le calcul de $\boldsymbol{\lambda}$ permet alors d'actualiser la vitesse tout en respectant la contrainte II.12 :

$$\mathbf{u}^{n+1} = \tilde{\mathbf{u}} + \frac{\boldsymbol{\lambda} \Delta t}{\rho_s} \quad (\text{II.17})$$

Dans la première approche le multiplicateur de Lagrange prend une forme plus complexe. Il faut remarquer que c'est la deuxième approche qui a été retenue car elle est plus rapide mais aussi plus simple à implémenter [Sharma and Patankar, 2005].

La méthode DLM a été implémentée avec succès dans un code spectral, [Dong et al., 2004].

II.2.3 Méthode de pénalisation visqueuse

Comme pour la méthode DLM on impose ici la contrainte solide :

$$\nabla \mathbf{u} + \nabla^t \mathbf{u} = 0 \text{ in } \Omega_s \quad (\text{II.18})$$

Pour ce faire, il suffit de voir que dans l'équation de quantité de mouvement cette contrainte est obtenue quand la viscosité est suffisamment grande, voir [Ritz and Caltagirone, 1999b].

Dans cette méthode on utilise deux viscosités. La viscosité fluide, ν_f , et une viscosité solide équivalente, $\nu_s \gg \nu_f$.

Le solide est donc considéré comme un fluide avec une rhéologie particulière. Dans la pratique la viscosité ne peut pas être considérée comme infinie pour des raisons numériques.

Deux problématiques principales se posent dans l'utilisation de cette méthode.

La première est d'assurer que les particules solides ne se déforment pas du fait que la viscosité n'est pas infinie. Une solution est de considérer la forme initiale du solide et de déplacer de façon lagrangienne (par son centre de masse) cette forme à l'aide du champ de vitesses.

La deuxième est d'assurer cette contrainte dans la résolution numérique. En effet, le très grand ratio des viscosités demande un solveur suffisamment robuste. La méthode du Lagrangien Augmenté pour la résolution des équations de Navier-Stokes, avec l'utilisation de l'algorithme Uzawa s'est montrée suffisamment robuste pour cette problématique [Randrianarivelo et al., 2005b, Randrianarivelo, 2005]

II.2.4 Méthode Physalis

La méthode Physalis [Prosperetti and Oğuz, 2001] consiste à utiliser la solution de Stokes autour de la particule et avec une technique de raccord avec la solution externe calculée par le solveur de Navier-Stokes.

La première phase de cette méthode consiste à écrire les équations de Navier-Stokes dans le repère lié à la particule. Si on note \mathbf{x} le vecteur reliant au centre de la particule à un point donné, \mathbf{V} la vitesse de la particule, $\boldsymbol{\Omega}$ la vitesse de rotation de la particule et \mathbf{u}_N la vitesse du fluide dans le repère fixe au point considéré, on peut écrire alors la vitesse du fluide dans le repère non newtonien lié à la particule : $\mathbf{u} = \mathbf{u}_N - \mathbf{V} - \boldsymbol{\Omega} \wedge \mathbf{x}$. Les équations de Navier-Stokes s'écrivent pour ce champ :

$$\rho_f \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + 2\boldsymbol{\Omega} \wedge \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot (\nu (\nabla \mathbf{u} + \nabla^t \mathbf{u})) - \rho_f \left(\frac{d\mathbf{V}}{dt} + \frac{d\boldsymbol{\Omega}}{dt} \wedge \mathbf{x} + \boldsymbol{\Omega} \wedge (\boldsymbol{\Omega} \wedge \mathbf{x}) \right) \quad (\text{II.19})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (\text{II.20})$$

La condition de non glissement s'écrit $\mathbf{u} = 0$ sur la frontière de la particule. Ici, $\frac{d}{dt}$ est la dérivée lagrangienne suivant la particule.

Les changements de variables

$$\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u} - \frac{r^4 - R^4}{8\nu r^2} \frac{\boldsymbol{\Omega}}{dt} \wedge \mathbf{x} \quad (\text{II.21})$$

et,

$$\tilde{p} = p - \frac{1}{2} \rho_f \left(\tilde{\boldsymbol{\Omega}} \wedge \mathbf{x} \right)^2 + \rho_f \frac{d\mathbf{V}}{dt} \cdot \mathbf{x} \quad (\text{II.22})$$

permettent d'obtenir une nouvelle forme de l'équation de quantité de mouvement dans le repère de la particule :

$$\rho_f \left(\frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} + (\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \tilde{\mathbf{u}} + 2\tilde{\boldsymbol{\Omega}} \wedge \tilde{\mathbf{u}} \right) = -\nabla \tilde{p} + \nabla \cdot (\nu (\nabla \tilde{\mathbf{u}} + \nabla^t \tilde{\mathbf{u}})) \quad (\text{II.23})$$

Ici, $\tilde{\mathbf{u}} = 0$ à l'interface avec la particule. Proche de la particule la vitesse relative \mathbf{u} est proche de zéro. L'équation II.23 se réduit à la résolution des équations de Stokes pour les variables $(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{p})$:

$$-\nabla \tilde{p} + \nabla \cdot (\nu (\nabla \tilde{\mathbf{u}} + \nabla^t \tilde{\mathbf{u}})) = 0 \quad (\text{II.24})$$

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} = 0 \quad (\text{II.25})$$

Cette première phase nous permet de voir qu'il suffit de résoudre ces équations pour avoir une solution approchée de la solution en proche paroi. La solution de l'équation de Stokes est établie à partir de la fonction courant ψ . Grâce à une décomposition en harmoniques sphériques on peut exprimer l'expression analytique de la fonction de courant de cet écoulement de Stokes à partir des coefficients de Fourier A_n . A partir de la fonction courant on peut obtenir le champ de pression \tilde{p} et de vorticité, $\tilde{\omega}$. Ces champs sont exprimés à partir d'une décomposition dont les coefficients sont calculés à partir des coefficients de Fourier issus de la décomposition de la fonction courant A_n .

L'algorithme Physalis utilise ces coefficients. Il se décompose dans les étapes suivantes :

0. A partir de la position de la particule on établit un réseau des noeuds autour de l'interface permettant le calcul de la pression, la vitesse et la vorticité. La figure II.3 montre les noeuds de vitesse, pression et vorticité utilisés autour d'une particule.
1. L'itération précédente nous donne la pression et la vorticité dans les noeuds correspondants. En connaissant ces valeurs aux points, on obtient les premiers coefficients A_n en résolvant le système linéaire correspondant.
2. On utilise ces valeurs pour obtenir la vitesse aux noeuds de vitesse autour de la particule.
3. On résout les équations de Navier-Stokes dans tout le domaine en imposant la vitesse aux noeuds de vitesse obtenus dans l'étape précédente.
4. Finalement on obtient des nouvelles valeurs de la pression et de la vorticité aux mêmes noeuds que dans l'étape initiale. On peut ainsi évaluer si l'algorithme est convergé. Le cas échéant on recommence la première étape avec les nouvelles valeurs aux noeuds de vitesse et vorticité.

A la fin de cette boucle, la force et le couple exercés sur chaque particule sont obtenus directement à partir des coefficients A_n . On peut alors advecter la particule à grâce à un bilan des forces. La résolution du couplage peut être vue comme un algorithme de Schwartz entre la condition de Stokes et l'écoulement. On comprend alors que dans cet algorithme le nombre d'itération de l'algorithme augmente avec le nombre d'itérations, [Takagi et al., 2003]. Il s'agit d'une première limite dans le code. La deuxième limite provient du fait que cette méthode se base sur une connaissance à priori de la solution de Stokes autour d'une particule. Ceci rend cette méthode difficilement généralisable à des particules de forme quelconque.

La méthode Physalis a servi à la simulation de 100 particules dans une turbulence décroissante, [Zhang and Prosperetti, 2005].

II.2.5 Méthode IB

La méthode IB (*Immersed Boundary*) a été développée initialement par Peskin, [Peskin, 1972a, Peskin, 1972b, Peskin, 2002]. Cette méthode permet d'introduire dans le fluide des forces au niveau de la frontière qui représente la présence d'un solide, d'une membrane et même d'un organisme vivant [Fauci and McDonald, 1995]. Une première adaptation pour le cas des particules mobiles a été faite avec la méthode IB initiale, [Fogelson and Peskin, 1988].

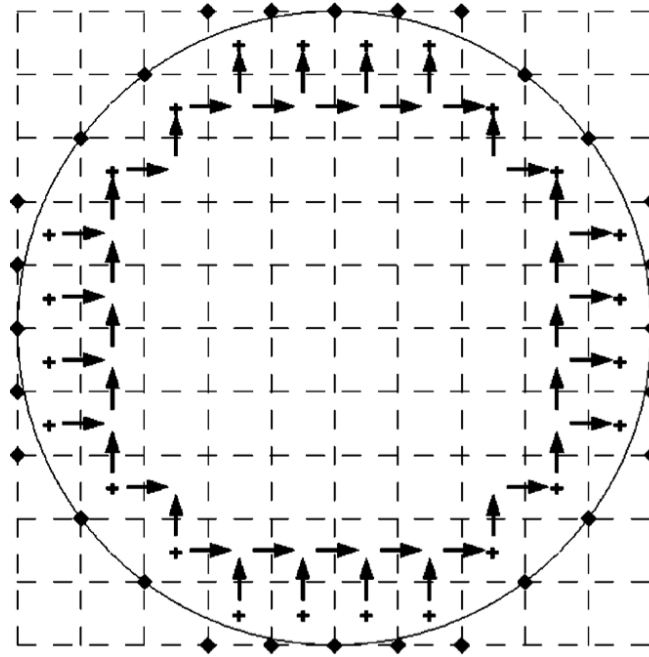


FIGURE II.3 – Réseau de noeuds utilisés pour la résolution de l'équation de Stokes autour d'une particule. Les croix représentent les noeuds de pression, les fleches les noeuds de vitesse et les losanges les noeuds de vorticité. Source : [Zhang and Prosperetti, 2003].

Comme son nom l'indique, cette méthode impose le comportement solide au niveau de la frontière. L'idée principale commune à ces méthodes est d'établir une relation entre un maillage lagrangien associé à la frontière \mathbf{X}_l et le maillage eulérien servant à résoudre les équations de Navier-Stokes, \mathbf{x}_e . Pour cela, une fonction de Dirac discrète est construite δ_h respectant un certain nombre de conditions mathématiques, [Peskin, 2002].

Dans l'équation de la quantité de mouvement on introduit une force additionnelle \mathbf{f}_δ .

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot (\nu (\nabla \mathbf{u} + \nabla^t \mathbf{u})) + \mathbf{S} + \mathbf{f}_\delta \quad (\text{II.26})$$

Dans les premières implémentations de la méthode IB, cette force était évaluée à partir des forces exercées sur la frontière, \mathbf{F} . Les forces évaluées sur le maillages lagrangien sont donc projetées sur le maillage eulérien :

$$\mathbf{f}_\delta(\mathbf{x}_e) = \sum_{\mathbf{X}_l} \mathbf{F}(\mathbf{X}_l) \delta_h(\mathbf{x}_e - \mathbf{X}_l) \Delta s \quad (\text{II.27})$$

Ici, Δs représente la longueur de l'abscisse curviligne le long de la frontière correspondant au point \mathbf{X}_L . En trois dimensions il s'agit de la surface associée à ce point.

Pour advecter la frontière, on utilise les mêmes fonctions afin d'évaluer la vitesse en chaque point du maillage lagrangien :

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \sum_{\mathbf{x}_e} \mathbf{u}(\mathbf{x}_e) \delta_h(\mathbf{x}_e - \mathbf{X}_l) \Delta x^3 \quad (\text{II.28})$$

avec Δx pas d'espace du maillage.

Cette première approche s'est avérée instable pour le cas où la frontière est solide.

Une deuxième approche établit directement une force \mathbf{f}_δ qui est donnée par une vitesse souhaitée [Fadlun et al., 2000, Uhlmann, 2005]. Cette force servant à imposer la vitesse eulérienne pour les cellules coupées par des éléments de la surface solide, représentée par des points lagrangiens. La force f_δ annule tous les termes de l'équation du mouvement sauf le terme de transport $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}$ et un terme de forçage qui introduit la vitesse désirée \mathbf{u}_d . L'équation II.29 montre cette force sans discrétisation.

$$\mathbf{f}_\delta = \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \nabla \cdot (\nu (\nabla \mathbf{u} + \nabla^t \mathbf{u})) - \mathbf{S} + \rho f(\mathbf{u}_d - \mathbf{u}) \quad (\text{II.29})$$

La fonction f dépend de la discrétisation temporelle. Pour le cas d'une discrétisation d'Euler, $f(\mathbf{u}_d - \mathbf{u}) = \frac{\mathbf{u}_d - \mathbf{u}^n}{\Delta t}$, ce qui implique $\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}_d$.

Dans le cas des particules mobiles, la vitesse souhaitée est à son tour déterminée à partir des contraintes obtenues à la frontière.

Cette dernière approche, nommée, *direct forcing* est actuellement très répandue. Plusieurs améliorations ont été faites de sorte à augmenter la précision et l'ordre de la méthode, [Breugem, 2012, Kempe et al., 2009].

Dans sa première version la méthode s'est avéré instable pour des rapports de densité proches de l'unité, $\frac{\rho_p}{\rho_f} < 1.2$. Cette limite a été levée suite aux améliorations de [Breugem, 2012].

La méthode IB a permis la simulation d'un canal vertical comportant 4096 particules, [Uhlmann, 2008].

II.2.6 Méthode IIM

La méthode IIM (pour *Immersed Interface Method*) utilise la connaissance de l'interface entre les deux phases pour l'intégrer dans les opérateurs. La position de l'interface est connue comme pour le cas de l'IBM. Une façon de repérer l'interface est au moyen de la fonction *Level-Set* qui donne à chaque noeud la distance à l'interface. La différence majeure avec l'IBM est qu'ici l'interface est utilisée afin d'établir un saut dans le champ ou une condition limite. Aucune force n'est explicitée ni répartie dans les noeuds autour de l'interface. Ainsi, dans l'IBM l'interface est lissée du fait de la méthode elle-même, alors que dans le cas de l'IIM la solution est discontinue à travers de l'interface. Dans certains cas, on lisse cette solution afin de gagner en stabilité, mais, il s'agit d'une raison numérique et non de la nature de la méthode.

Dans le cas d'un solide, l'opérateur à l'interface introduit la condition de Neumann sur la pression et de non glissement pour la vitesse.

Chaque opérateur doit être réécrit selon les conditions limites [Marella et al., 2005]. Dans le cas d'un solide on impose la condition de Dirichlet pour la vitesse à la frontière à partir des noeuds fluides. La figure II.4 montre un exemple pour le champ des vitesses selon l'axe horizontal u . Dans les noeuds fluides l'opérateur $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ s'écrit au premier ordre $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x^2} - \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x^2}$. Afin d'exprimer cet opérateur aux noeuds qui entourent la frontière un développement de Taylor est fait. La vitesse à l'interface u_Γ est ainsi forcé. Au premier ordre ce développement donne au point i :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{2}{\chi(\chi + 1)} \frac{u_\Gamma - u_i}{\Delta x^2} = \frac{2}{(\chi + 1)} \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x^2} \quad (\text{II.30})$$

Pour la condition de Neumann un traitement semblable est réalisé. Seulement, cette condition met en jeu la normale à la surface, il faut alors interpoler la pression dans des points sur la normale, voir figure II.5. Pour l'écriture au premier ordre il suffit d'introduire deux points fantômes. Ces points servent à faire un développement de Taylor de $\frac{\partial p}{\partial n}$, et ainsi imposer la condition de Neumann

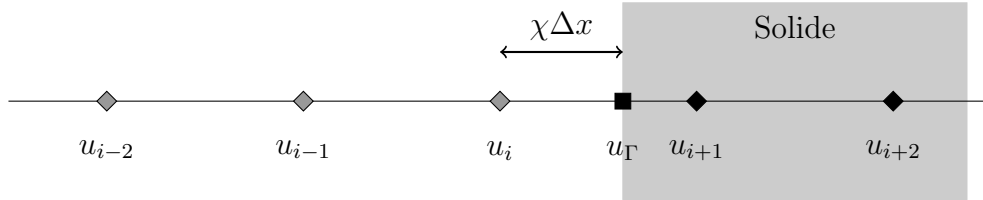


FIGURE II.4 – Maillage 1D d’une interface pour la méthode IIM.

au point de l’interface. La gestion des interpolations doit être consistante avec la méthode de discretisation de l’équation de Poisson, [Marella et al., 2005].

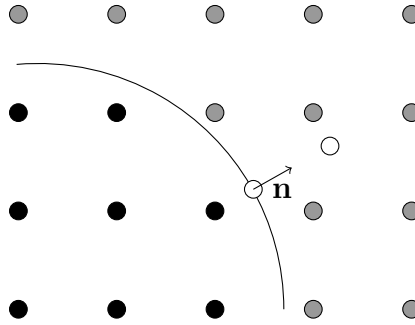


FIGURE II.5 – Maillage décalé et points d’interpolation permettant l’imposition de la condition de Neumann .

Les différents opérateurs deviennent non symétriques ce qui implique qu’il faut utiliser des solveurs adaptés pour des matrices non symétriques. Dans ces méthodes, contrairement aux méthodes IBM, on ne résout pas les équations du fluide à l’intérieur de l’obstacle.

Dans la bibliographie on n’a pas trouvé d’auteurs qui utilisent la méthode IIM pour la résolution d’écoulements particuliers.

II.2.7 Méthodes basées sur une résolution Lattice Boltzmann

Contrairement aux approches classiques de résolution des équations de Navier-Stokes, qui se basent sur des grandeurs macroscopiques, la méthode de résolution de Lattice Boltzmann est basée sur l’équation de Boltzmann sur des grandeurs mesoscopiques. Elle considère l’évolution des particules dans un réseau donné (*lattice*). Ce réseau comporte des positions et des vitesses discrètes, \mathbf{x}_{ij} et \mathbf{e}_a respectivement. Pour des écoulements en deux dimensions on utilise généralement le réseau D2Q9, utilisant 9 vitesses différentes, voir figure II.6.

Sur chaque direction \mathbf{e}_a on considère l’équation de Boltzmann sur la distribution de vitesses selon f_a :

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + \mathbf{e}_a \cdot \nabla f_a = \Omega_a \quad (\text{II.31})$$

Ici Ω_a représente l’évolution due aux collisions. Il est souvent modélisé à l’aide d’un modèle à partir de la distribution des vitesses pour l’équilibre du gaz, f_a^{eq} . Pour la méthode BGK, [Bhatnagar et al., 1954], $\Omega_a = \frac{f_a^{eq} - f_a}{\tau_{LB}}$. Le temps τ_{LB} est le temps de relaxation propre à la méthode. La définition de f_a^{eq} et τ_{LB} dépend de la discrétisation. Ils sont définis analytiquement de sorte que les équations de Navier-Stokes sont retrouvées quand on passe de l’échelle

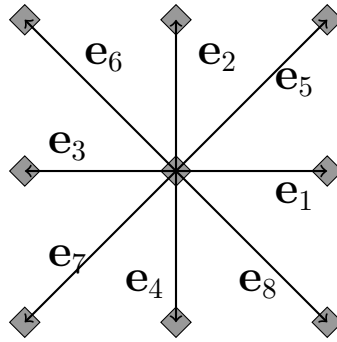


FIGURE II.6 – Réseau D2Q9 de discrétisation .

mésoscopique à celle macroscopique. Certaines hypothèses sont nécessaires, comme par exemple une variation de masse volumique modéré. On obtient les équations macroscopiques à partir des identités suivantes : $\rho = \sum_a f_a$ et $\rho \mathbf{u} = \sum_a f_a \mathbf{e}_a$.

L'équation II.31 s'écrit suite à la discrétisation lagrangienne :

$$f_a(\mathbf{x} + \mathbf{e}_a \Delta t, t + \Delta t) = f_a(\mathbf{x}, t) + \Delta t \frac{f_a^{eq}(\mathbf{x}, t) - f_a(\mathbf{x}, t)}{\tau} \quad (\text{II.32})$$

Afin de prendre en compte le solide il faut utiliser une méthode *bounce-back*, qui considère des rebonds sur la paroi. Dans une première approche les noeuds à l'intérieur du solide sont utilisés comme des « miroirs ». Ces noeuds doivent avoir une distribution des vitesses nulle. Une fois la distribution actualisée à l'aide de l'équation II.32, la condition aux limites consiste à inverser la direction de chaque distributions de vitesses dans les noeuds solides. Par exemple, la distribution f_1 deviens f_3 . Cette inversion fait que lors de l'actualisation des distributions suivante, cette composante devient nulle. La figure II.7 a) schématise cette première approche.

Néanmoins, cette première approche a deux défauts majeurs. Le premier est que la particule prend une forme de damier. La seconde étant que la vitesse des particules n'est pas prise en compte. Pour répondre à ces deux problématiques, [Ladd, 1994] propose deux solutions.

Tout d'abord, afin d'améliorer la description du solide, il propose d'introduire des points supplémentaires à la frontière (*boundary nodes*). Ces points servent à réaliser la réflexion des distributions de vitesses. La figure II.7 b) permet de comprendre ce nouveau maillage.

Ensuite, pour tenir compte la vitesse de la particule, il propose de prendre en compte la vitesse du noeud au moment de la réflexion des fonctions de vitesse. La distribution dans chaque direction après la prise en compte de la condition aux limites dépend alors de la projection dans la direction considérée de la vitesse du noeud. Dans la figure II.8 les deux distributions de vitesses arrivant sur un noeud de frontière sont représentées avant et après réflexion. Trois cas de figure sont repris, selon que la vitesse du noeud soit nulle, parallèle à la direction considérée ou selon une direction quelconque. La distribution après le rebond augmente du côté vers lequel le noeud de frontière se déplace.

Une dernière amélioration est proposée par [Gao et al., 2011, Gao and Wang, 2010] qui utilise l'interpolation au second ordre proposée par [Bouzidi et al., 2001, Lallemand and Luo, 2003] pour améliorer la prise en compte de la position de la frontière. [Gao et al., 2011] utilise cette méthode pour simuler 2304 particules dans une turbulence décroissante.

En plus de la méthode basée sur le *bounce-back*, [Cate et al., 2004] propose une adaptation de la méthode IB de [Goldstein et al., 1993] dans un solveur de type Lattice Boltzmann. Cette méthode a permis la simulation de 3868 particules dans une turbulence homogène et isotrope.

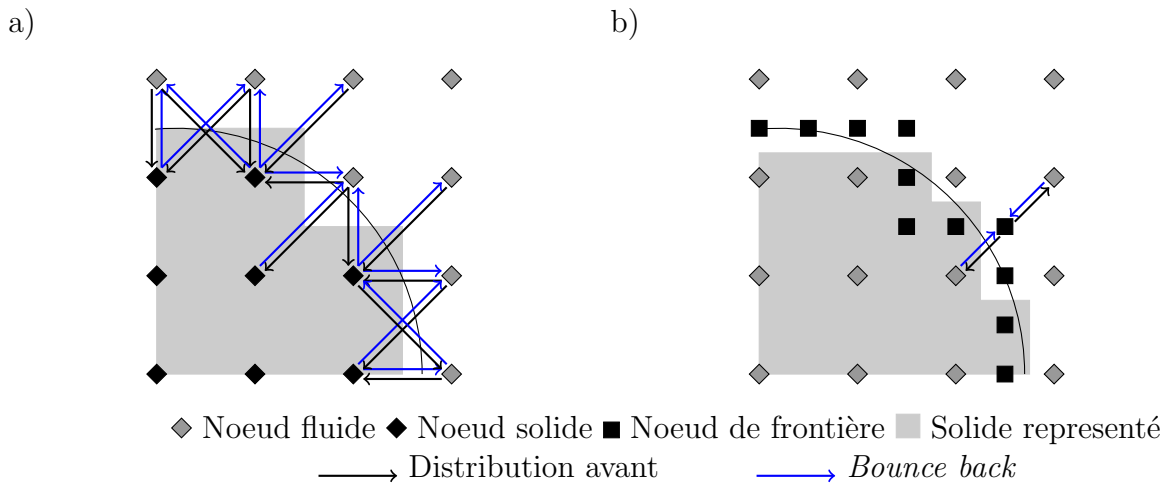


FIGURE II.7 – Prise en compte d’une particule dans un maillage LB. .

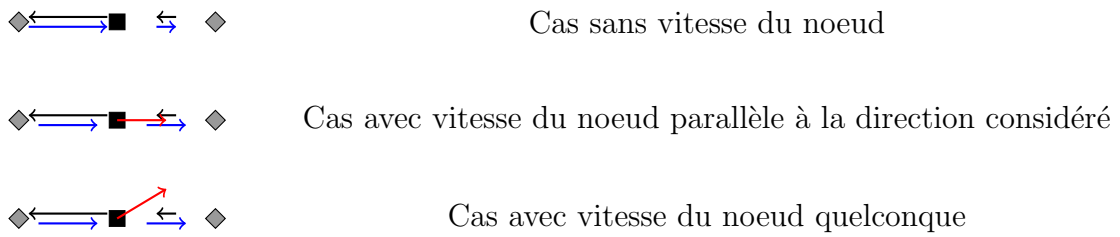


FIGURE II.8 – Prise en compte de la vitesse du noeud. .

De même, [Feng and Michaelides, 2004] intègre la méthode IB dans un solveur de Lattice-Boltzmann.

II.3 Choix de notre méthode

Pour la simulation des particules dont la taille est de l'ordre de grandeur des échelles de l'écoulement il est nécessaire d'utiliser des méthodes de résolution directe. En effet, les perturbations créées par les particules ne peuvent plus être calculées *a priori*.

L'approche ALE permet une bonne résolution de l'écoulement autour d'une particule. Ceci est dû au fait que le maillage est adapté pour prendre en compte les frontières finement. Néanmoins, notre but est de simuler des milliers de particules. Plus on a des particules plus la fréquence de remaillage de la méthode ALE augmente. Le coût des simulations en ALE est donc prohibitif pour notre problématique.

Le choix d'une méthode avec des domaines fictifs est donc naturel.

La méthode par pénalisation par maille était peu connue au début de la thèse. En plus, peu de précisions sont données quant à l'ordre en espace de la méthode. En principe, on s'attend à avoir l'ordre 1. De même, la méthode IB présentait à l'époque des difficultés qui n'étaient pas résolues. Parmi celles-ci, le traitement des particules neutres. En ce qui concerne la méthode IIM, aucune implémentation n'avait été réalisée. On aurait donc du adapter cette méthode aux écoulements particuliers, avec tous les difficultés que cela implique.

Le temps de convergence de l'algorithme dans la méthode Physalis dépend du nombre des particules. De ce fait, on peut s'attendre à ce que le temps soit extrêmement long dans le cas qui nous intéresse.

Le choix entre les méthodes restantes a été motivé par le savoir faire au sein des équipes de l'I2M et de l'IMFT sur la méthode de pénalisation visqueuse. Cette méthode avait montré ses performances avec un ordre 1 de convergence en espace. Seulement, il fallait améliorer le traitement de chaque étape afin d'améliorer l'ordre de la méthode et implémenter le traitement massivement parallèle des particules. Ceci dans l'objectif de pouvoir traiter des milliers de particules avec une résolution suffisante.

La méthode numérique utilisée est détaillée dans le chapitre suivant.

**Methode de simulation VoFLag pour la
simulation directe des écoulements
fluide/particule**

Développement de la méthode VoFLag pour la simulation directe des écoulements fluide/particule

Ce chapitre a été extrait d'un article en cours de publication [Vincent et al., 2013]. C'est pourquoi il est en anglais. L'article n'étant pas encore publié on a préféré l'intégrer en l'adaptant aux numérotations de la thèse. Un chapitre à part est ajouté de sorte à donner quelques précisions sur le traitement des collisions.

III.1 Introduction

Interactions between solid particles and a surrounding viscous fluid occurs in many environmental and industrial applications such as combustion devices [Minutolo et al., 2009], oil cracking [Bissell et al., 1985], fluidized beds in coal stations and nuclear reactors [Sefidvash, 1996], erosion of sediments on beaches [Shyuer-Ming and Komar, 1994] or hygiene and safety [Holton et al., 1987]. In all these applications, the interaction between the particles and the fluid flow is associated to unsteadiness or turbulence in a complex and not yet well understood manner concerning the drag laws of particles [Hölzer and Sommerfeld, 2008] or wall laws of the particulate flow as soon as the particle density is significant. On the one hand, leading simulations at the reactor scale for fluidized beds or combustion chambers require the implementation of macroscopic Eulerian-Eulerian models [Moreau et al., 2009, Druzhinina and Elghobashi, 1999] in which a separation scale is assumed between the particle and the flow scales. These models require drag laws and wall boundary conditions for the flow and the particles which are not yet well posed for dense particle flows. On the other hand, the Direct Numerical Simulation (DNS) of resolved particle flows, for which the grid size is smaller than the particle diameter, are generally restricted to academic configurations including a maximum of thousand of particles. The present work aims at presenting a numerical modeling strategy for the DNS of dense particle flows, validated on various physical test cases including particle-particle and particle-wall interactions or particle settling as well as numerical convergence studies. This DNS particle flow solver will be devoted to simulating the interaction between unsteady or turbulent flows and dense whole of particles to understand the particle response to turbulent flows and the modification of turbulence due to the presence of the particles [Squires and Eaton, 1990]. The DNS tool will allow to extract Lagrangian and Eulerian quantities such as the Lagrangian time scale of the

particles, their drag laws or the auto-diffusion coefficients [Corre et al., 2010].

Simulating unsteady particle-laden flows where particle and fluid have the same characteristic scales, *i.e.* resolved scale particle flows, is the scope of the present work. The Direct Point Simulation (DPS) approaches based on a Lagrangian modeling of the particles does not remain valid for that purpose [Ferrante and Elghobashi, 2003, Ahmed and Elghobashi, 2001, Fede and Simonin, 2006]. The field of numerical methods devoted to the simulation of particulate flows involving finite size particles was widely developed the last 20 years concerning the study of the flow over a small number of fixed or moving particle [Hu et al., 1992a, Fadlun et al., 2000, Kim et al., 2001, Takagi et al., 2003, Coquerelle and Cottet, 2008, Simeonov and Calantoni, 2011] or a fixed arrangement of spheres [Höfler and Schwarzer, 2000]. All the previously mentioned works were developed on fixed grids. The unstructured Arbitrary Eulerian-Lagrangian (ALE) grid simulations were developed for particle flows in the 90's by Hu *et al.* [Hu et al., 1992b] concerning two-dimensional flows involving two particles. The works of Maury [Maury, 1999] with the ALE method are also to be noticed concerning the flow of 1000 non spherical particles in a two-dimensional biperiodic domain. With the same type of approach, two-dimensional ALE simulations of particle motions involving 320 cylinders in a channel have been studied by Cho *et al.* [Cho et al., 2005]. However, few of the existing research works have been extended to the simulation of particle flows involving thousand of particles in three dimensions. The work of Hu *et al.* concerning three-dimensional ALE simulations of the segregation of 90 particles in a vertical channel are among the most advanced results with adapted unstructured grids [Hu et al., 2001]. A majority of the particulate flow simulations were carried out on structured grids to avoid the complexity of managing an evolving adapted mesh. Among them, the most relevant existing works concern the distributed Lagrangian multiplier (DLM) method of Glowinski and co-workers [Glowinski et al., 2001], the Physalis CFD code of Zhang and Prosperetti [Zhang and Prosperetti, 2005], the Immersed Boundary (IB) with direct forcing approach proposed by Uhlmann [Uhlmann, 2005, Uhlmann, 2008], the lattice Boltzmann scheme [Cate et al., 2004, Gao and Wang, 2010, Gao et al., 2011], the modified version of Uhlmann IB method published by Lucci *et al.* [Lucci et al., 2010, Lucci et al., 2011] and the viscous penalty techniques of Ritz and Caltagirone [Ritz and Caltagirone, 1999b] and Randrianarivelo *et al.* [Randrianarivelo et al., 2005a, Randrianarivelo et al., 2007].

To begin with, the DLM method [Glowinski et al., 2001] uses a variational formulation of the Navier-Stokes equations on a fixed grid and the Newton-Euler equations in the solid medium to model the particulate flow. On the interface between the particles and the fluid, Lagrange multipliers are integrated in the variational formulation to satisfy the rigid body motion inside the moving bodies. The force resulting from the interaction between particles is treated by an explicit modification of the particle positions after advection in order to avoid particle overlapping. A short range repulsive force is added in the right hand side of the Newton-Euler equations which is decreasing according to the distance between the center of mass of two particles [Glowinski et al., 2001]. The DLM method was utilized to simulate with success the fluidization of 1024 spheres in a square shape tank [Pan et al., 2002]. As for the Physalis approach [Zhang and Prosperetti, 2005], fixed grids for the flow solving are combined with analytical Stokes solutions in the vicinity of the particles in order to model the fluid-particle interaction. A cage surrounding the particle shape is used to match the flow solutions arising from a finite difference discretization with the spectral solutions of the Stokes flow. In their approach, Zhang and Prosperetti track in a Lagrangian manner the particles which

are subjected to hydrodynamic and external forces. The interaction between the particles is not explicitly modeled. They have applied their numerical method to simulate the interaction between a Homogeneous Isotropic Turbulence (HIT) and particles in a periodic cubic box [Zhang and Prosperetti, 2005]. They have studied the effect of a two-way coupling procedure on the decaying of the turbulent kinetic energy and the mean particle displacement. Their works were restricted to low Taylor-microscale Reynolds number around 29 as their flow simulation grid was 256^3 . The largest particle simulations dealing with turbulent flow at a resolved particle scale have been proposed by Uhlmann concerning the sedimentation of 1000 particles in a periodic box on a $512^2 \times 1024$ grid [Uhlmann, 2005] and the turbulent interactions inside a vertical particulate channel flow [Uhlmann, 2008] on a $2048 \times 513 \times 1024$ grid. The numerical methods developed in these works are based on the addition of a direct forcing in the momentum equations to account of the particle presence. The particles are tracked in a Lagrangian manner and the forcing term is also estimated with a Lagrangian approach at the center of the particles. It is redistributed as an Eulerian force thanks to kernel or discrete Dirac functions, according to Peskin work [Peskin, 2002]. The particle interaction is treated by means of the repulsive force introduced by Glowinski [Glowinski et al., 2001]. A modified version of the IB method of Uhlmann has been proposed by Lucci *et al.* [Lucci et al., 2010, Lucci et al., 2011] to perform finite sized particle simulations. On a numerical point of view, their modifications concerned the time integration of the Navier-Stokes equations and the management of the two-way coupling force applied on the particles. Lucci and co-workers have investigated the modulation of a HIT flow by particles laying in the range 16 to 35 times the Kolmogorov scale at various Stokes numbers for Taylor-microscale Reynolds numbers of 75 and 110 respectively on 256^3 and 512^3 grids. Parametric studies on the density ratios between particles and fluid with a volume fraction in the range 0.01 to 0.1 have demonstrated for example that the turbulent kinetic energy was reduced by the particles compared to a reference single phase HIT flow. A different finite-size particle modeling has been proposed by Ten Cate *et al.* [Cate et al., 2004] which is related to lattice Boltzmann approaches. In their approach, the interaction between particles and fluid and the so the no-slip solid boundary condition is enforced through a body force added to the momentum equations. This force accounts for lubrication and repulsive effects during particle interactions. With the lattice Boltzmann model, Ten Cate and co-workers have studied the energy spectra and particle distribution functions for particles placed in a forced homogeneous turbulence for various Stokes numbers at a Taylor microscale $Re = 61$ on a 256^3 grid. Other authors have used a classical bounce-back technique for simulating the sedimentation of turbulent particle-laden flows [Gao et al., 2011]. To finish with, a wide literature has been devoted to the numerical modeling of finite size particle flows by means of fictitious domains and penalty methods [Ritz and Caltagirone, 1999a, Randrianarivelo et al., 2005a, Coquerelle and Cottet, 2008, Pianet et al., 2007]. The penalty techniques consist in playing on the magnitude of the dynamic viscosity to impose the local solid character of the medium. In recent works, an Implicit Tensorial Penalty Method (ITPM), based on a decomposition of the viscous stress tensor, has been proposed to deal with particulate flows with an accuracy between 1 and 2 in space convergence [Vincent et al., 2004, Vincent et al., 2007, Brändle de Motta et al., 2010]. The ITPM has been applied to the DNS of fluidized beds containing 2133 particles by Corre *et al.* [Corre et al., 2010].

The present work proposes a second order in space penalty method for the DNS of particulate flows based on the ITPM. The objective is to build an as implicit as possible approach in which the particle positions are not modified after tracking with the single fluid velocity obtained on structured Cartesian mesh, even in the case where particle collisions are present.

The penalty method is chosen, instead of the DLM or direct forcing approaches, for its fully coupled character, robustness and easy implementation, as it is based on the existing physical terms in the momentum conservation equations. In addition, Lagrangian VOF approaches are implemented and the single fluid formulation of Kataoka [Kataoka, 1986] is extended to the framework of fluid-solid particle interactions. The whole algorithms are parallelized with MPI instructions for dealing with large grid simulations.

The article is organized as follows. In the first part, the models and numerical methods are detailed paying attention to describing the original part of the numerical algorithms. In particular, a mixed Lagrangian-Eulerian VOF technique is used to follow the particle during time and an implicit treatment of the particle to particle or particle to wall interaction is implemented. An augmented Lagrangian approach and viscous penalty techniques are also proposed for dealing with the velocity-pressure coupling and the solid body motion. All these features are extended to parallel computations. The third section is devoted to numerical convergence exercises and physical validations. An application to a fluidized bed in a cylindrical tank is presented in the forth section. Conclusions and perspectives are finally drawn in the last section.

III.2 A tensorial penalty approach for finite size particulate flows

III.2.1 Fictitious domain framework

The numerical simulation of a particulate flow interacting with a surrounding fluid can be investigated following two different numerical strategies : unstructured or structured grids. This important choice is motivated by the representation of the complex shape involved by the interface between a fluid and thousand of moving particles. On the one hand, the more natural solution seems to be the implementation of an unstructured body-fitted grid to simulate the fluid area in the two-phase particle flow [Hu et al., 1992a, Hu et al., 2001, Maury, 1999, Cho et al., 2005]. Building such a finite-volume or finite-element mesh in three-dimensions is not easy and requires automatic mesh generators as the solid particles move according to time and space. The remeshing process at each calculation step is time consuming and can be very difficult to manage automatically in computer softwares when global shape of the fluid-solid interface is complex [Dobrzynski and Frey, 2008]. On the other hand, it can be imagined to develop a fixed structured grid to simulate particle flows. In this case, the mesh is not adapted to the fluid-solid interfaces and includes both phases. The difficulty lies in the taking into account of the presence of particles in the fluid whose interface is not explicitly tracked by the non conforming mesh. This type of modeling and numerical problem belongs to the class of fictitious domains [Glowinski et al., 2001, Khadra et al., 2000]. The modeling strategy developed hereafter is based on this approach.

Instead of solving two sets of equations, *i.e.* the classical Navier-Stokes equations in the fluid phase and the Newton-Euler equations in the solid phase, and connecting the solutions at the fluid-solid interface thanks to jump equations, as proposed for example by Delahaye [Delahaye, 1974] for fluid interfaces or by Maury [Maury, 1999] for particle flows, the fictitious domain method consists in introducing a phase function C to locate each medium and to formulate a global model valid in the fluid and solid parts of the flow. According to the local value of C , the physical characteristics

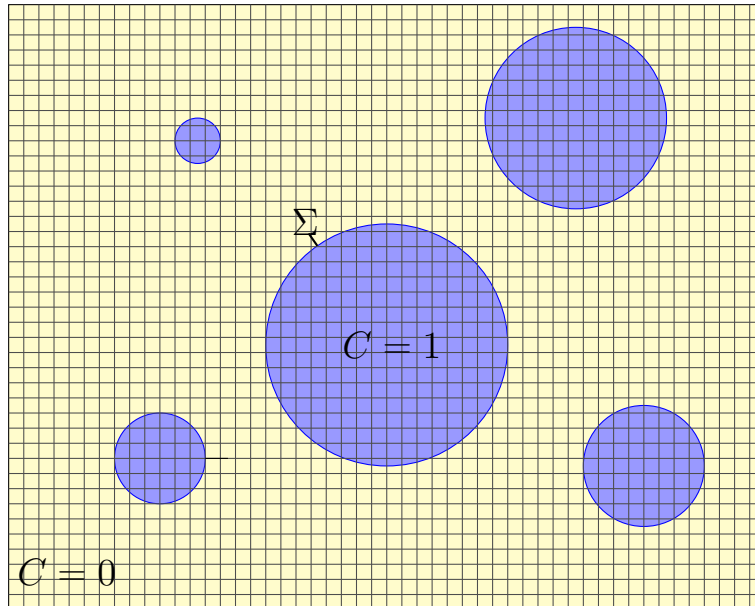


FIGURE III.1 – Definition sketch of the fictitious domain approach for a finite size particulate flow. The underlying grid, the phase function C and the fluid-particle interface Σ are plotted.

and the conservation equations are adapted to fulfill the correct physical behavior. By definition, $C = 1$ in the solid, $C = 0$ in the fluid and the interface Σ between the fluid and solid phases is associated to the isosurface $C = 0.5$. A two-dimensional definition sketch is illustrated in figure III.1 for the DNS of finite size particle flows.

III.2.2 Generalized one-fluid model for particulate flows

Incompressible two-phase flows involving a carrier fluid and a solid phase can be modeled by solving the incompressible Navier-Stokes equations together with a phase function C describing the particle phase shape evolutions through an advection equation on the corresponding phase function. As explained by Kataoka [Kataoka, 1986, Kataoka et al., 1986], the resulting model takes implicitly into account the jump relations at the interface [Delahye, 1974, Scardovelli and Zaleski, 1999] and the fluid-solid interface evolutions are taken into accounts in an Eulerian manner by the advection equation on C :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (\text{III.1})$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot (\mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla^t \mathbf{u})) + \mathbf{F}_{si} \quad (\text{III.2})$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla C = 0 \quad (\text{III.3})$$

where \mathbf{u} is the velocity, p the pressure, t the time, \mathbf{g} the gravity vector, ρ and μ respectively the density and the viscosity of the equivalent fluid. Concerning the turbulence modeling, it is assumed that all the space and time scales of the flow are solved and so that direct numerical simulations are performed with the present particulate one-fluid model. Deterministic Large Eddy Simulation (LES) models could also be used to take into account the under-resolved sub-grid scale turbulence structures [Sagaut, 1998]. However in this case, a specific attention should be paid in the vicinity of the particle-fluid interface, as specific subgrid stress tensors arise

in these zones [Vincent et al., 2008]. The two-way coupling between particle and fluid motions is ensured in the momentum equations by the presence of a solid interaction force \mathbf{F}_{si} which will be detailed and discussed in the following section III.2.5. This interaction force will be activated as soon as a collision between two particles or a particle and a wall will occur.

The one-fluid model is almost identical to the classical incompressible Navier-Stokes equations, except that the local properties of the equivalent fluid (ρ and μ) depends on C , the interface localization requires the solving of an additional equation on C . A specific volume force is added at the interface to account for particle collision effects. Satisfying the solid constraint in the particles requires to develop a specific model. A penalty approach on the viscosity is proposed and detailed in the next section.

III.2.3 Penalty methods for solid behavior and incompressibility

i. Second order implicit tensorial penalty method

As explained in the previous sections, the one-fluid model and the fictitious domain approach formulated for dealing with particle flows require to consider each different phase (fluid, solid) as a fluid domain with specific rheological property. Each sub-domain is located by a phase function C . Ensuring the solid behavior in the solid zones where $C = 1$ requires to define a specific rheological law for the rigid fluid without penalizing the velocity, as the particle velocities are not known *a priori* in the problems considered here (particle sedimentation, fluidized beds, turbulence particle interaction).

A specific model is designed for handling the solid particle behavior in the one-fluid Navier-Stokes equations. It is based on a decomposition of the stress tensor σ , which reads for a Newtonian fluid (see [Ryhming, 1985] and [Happel and Brenner, 1963]) :

$$\sigma_{ij} = -p \delta_{ij} + \lambda \nabla \cdot \mathbf{u} \delta_{ij} + 2\mu \mathbf{D}_{ij} \quad (\text{III.4})$$

where λ et μ are respectively the compression and shearing viscosities and \mathbf{D} is the tensor of deformation rate.

Following the work of Caltagirone and Vincent [Caltagirone and Vincent, 2001], the stress tensor can be reformulated so as to distinguish several natural contributions of the stress tensor dealing with compression, tearing, shearing and rotation. The interest of this decomposition is then to allow a distinct penalization of each term in order to strongly impose the associated stress. If we assume that the Navier-Stokes equations for a Newtonian fluid contain all physical contributions traducing compressibility effects, shearing or rotation, their splitting allows to act differentially on these effects by modifying the orders of magnitude of each term, through the related viscosity coefficients, directly in the motion equations.

Decomposing σ_{ij} according to the partial derivative of the velocity in Cartesian coordinates, we obtain [Caltagirone and Vincent, 2001]

$$\begin{aligned} \sigma = & \begin{bmatrix} -p + \lambda \nabla \cdot \mathbf{u} & 0 & 0 \\ 0 & -p + \lambda \nabla \cdot \mathbf{u} & 0 \\ 0 & 0 & -p + \lambda \nabla \cdot \mathbf{u} \end{bmatrix} + \kappa \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial v}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix} \\ & + \zeta \begin{bmatrix} 0 & \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial u}{\partial z} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & 0 & \frac{\partial v}{\partial z} \\ \frac{\partial w}{\partial x} & \frac{\partial w}{\partial y} & 0 \end{bmatrix} - \eta \begin{bmatrix} 0 & \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial w}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} & 0 & \frac{\partial v}{\partial z} - \frac{\partial w}{\partial y} \\ \frac{\partial w}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial z} & \frac{\partial w}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial z} & 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (\text{III.5})$$

This decomposition of the stress tensor in which new viscosity coefficients appear artificially is written in compact form as

$$\sigma_{ij} = (-p + \lambda \nabla \cdot \mathbf{u}) \delta_{ij} + \kappa \Lambda_{ij} + \zeta \Theta_{ij} - \eta \Gamma_{ij} \quad (\text{III.6})$$

where λ is the compression viscosity, κ is the tearing viscosity, ζ is the shearing viscosity and η is the rotation viscosity

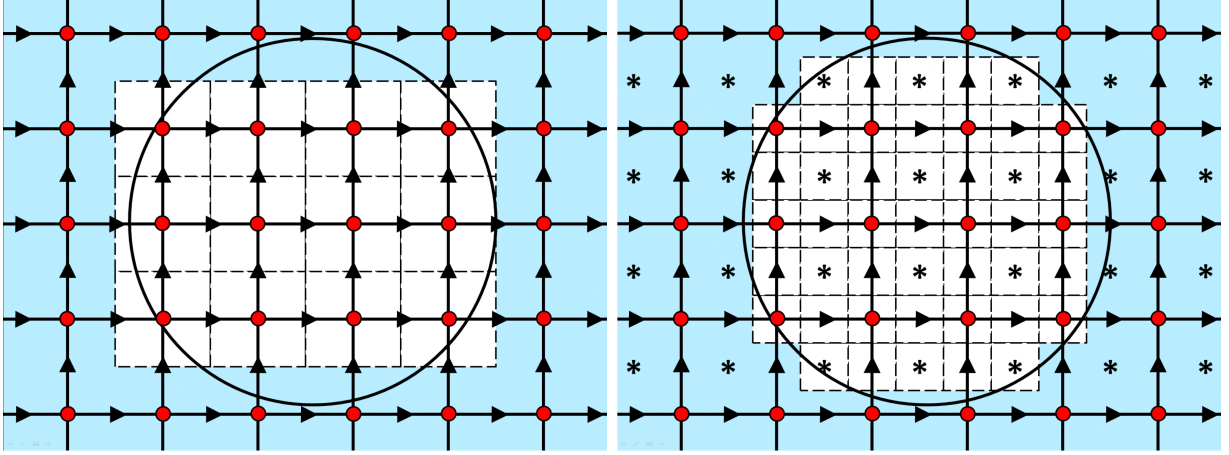


FIGURE III.2 – Discrete interpretation of the direct viscous penalty method (top) and split viscous penalty approach (bottom) on staggered grids - the pressure points are plotted in red circles, the velocities as arrows and the pure shearing and rotations viscosities as stars. The black line represents the interface between a particle and the carrier fluid.

The usual form of σ is easily recovered by stating $\lambda = -2/3\mu$, $\kappa = 2\mu$, $\zeta = 2\mu$ and $\eta = \mu$. As only incompressible particle flow configurations will be considered here, λ will be taken equal to zero. Finally, the divergence of the viscous stress tensor for a Newtonian fluid appearing in the one-fluid model (III.2) reads

$$\nabla \cdot (\mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla^t \mathbf{u})) = \nabla \cdot [\kappa \mathbf{\Lambda}(\mathbf{u})] + \nabla \cdot [\zeta \mathbf{\Theta}(\mathbf{u})] - \nabla \cdot [\eta \mathbf{\Gamma}(\mathbf{u})] \quad (\text{III.7})$$

The main interest of the formulation (III.7) is to dissociate stresses operating in a viscous flow and then to make the implementation of a numerical penalty method easier. The use of the viscosities κ , ζ and η allows to impose a solid behavior in the zones where $C = 1$ by stating for example $\eta \gg 1$, $\kappa = 2\eta$ and $\zeta = 2\eta$ in these zones. In this case, it is imposed that the local solid flow admits no shearing, no tearing and a constant rotation according to the surrounding flow constraints. These flow constraints are implicitly transmitted to the particle sub-domain as they are solved with the fluid motion at the same time. The previous viscous penalty method is formally equivalent to choosing $\mu \gg 1$ to impose a solid behavior. However, on a discrete point of view, the two formulations are not equivalent. Indeed, on a staggered grid, the elongation viscosity is located on the pressure nodes whereas the pure shearing and rotation viscosities lie on a specific grid, at the center of the mesh grid cells, as illustrated in figure III.2. If the dynamic viscosity μ is used to impose the solid behavior in the zones where $C = 1$, a first order convergence in space is obtained as the entire grid cell is assumed solid in this case. A rasterization effect is in this way produced at the particle-fluid interface Σ by the Direct Viscous Penalty technique

(DVP). When the viscous stress tensor splitting (III.7) is used to impose the solid behavior, the belonging of each viscosity point to the particle can be considered (elongation viscosity on the pressure points and pure shearing and rotation viscosities on the viscous points). A more accurate accounting of the fluid-solid interface is so involved in this case thanks to the introduction of a dual grid for the pure shearing and rotation viscosities. The rasterization effect is so reduced. A second order convergence in space is obtained with the Split Viscous Penalty (SVP) formulation. These viscous penalty approaches will be discussed and compared in the validation section.

ii. Augmented Lagrangian methods for multi-phase flows

Following a similar walkthrough as in the work on Stokes and Navier-Stokes equations proposed by Fortin and Glowinski [Fortin and Glowinski, 1982], the augmented Lagrangian method can be applied to the unsteady Navier-Stokes equations dedicated to particulate flows. The main objective is to deal with the coupling between the velocity and pressure and to account of fluid and solid constraints. Starting with $\mathbf{u}^{*,0} = \mathbf{u}^n$ and $p^{*,0} = p^n$, the standard augmented Lagrangian solution reads

while $\|\nabla \cdot \mathbf{u}^{*,m}\| > \epsilon$, solve

$$\begin{aligned} & (\mathbf{u}^{*,0}, p^{*,0}) = (\mathbf{u}^n, p^n) \\ & \rho \left(\frac{\mathbf{u}^{*,m} - \mathbf{u}^{*,0}}{\Delta t} + \mathbf{u}^{*,m-1} \cdot \nabla \mathbf{u}^{*,m} \right) - \nabla(r \nabla \cdot \mathbf{u}^{*,m}) \\ & = -\nabla p^{*,m-1} + \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot [\mu(\nabla \mathbf{u}^{*,m} + \nabla^T \mathbf{u}^{*,m})] + \mathbf{F}_{si} \\ & p^{*,m} = p^{*,m-1} - r \nabla \cdot \mathbf{u}^{*,m} \end{aligned} \quad (\text{III.8})$$

where r is the augmented Lagrangian parameter used to impose the incompressibility constraint, m is an iterative convergence index and ϵ a numerical threshold controlling the constraint. Usually, a constant value of r is used, for example equal to the average between the minimum and maximum eigenvalues of the linear system for Stokes flows [Fortin and Glowinski, 1982]. From numerical experiments, optimal values are found to be of the order of ρ_i and μ_i in each phase (fluid or solid) to accurately solve the motion equations in the related zone [Vincent et al., 2004, Vincent et al., 2007]. The momentum, as well as the continuity equations, are accurately described by the solution (\mathbf{u}^*, p^*) coming from (III.8) in the medium to which the value of r is adapted. However, high values of r in the other zones act as penalty terms inducing the numerical solution to satisfy the divergence-free property only. Indeed, if we consider for example $\rho_1/\rho_0 = 1000$ (characteristic of a solid particle in air) and a constant $r = \rho_1$ to impose the divergence-free property in the particles, the asymptotic equation system solved is :

$$\begin{aligned} & \rho \left(\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + (\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^* \right) - \nabla(r \nabla \cdot \mathbf{u}^*) \\ & = \rho \mathbf{g} - \nabla p^n + \nabla \cdot [\mu(\nabla \mathbf{u}^* + \nabla^T \mathbf{u}^*)] + \mathbf{F}_{si} \quad \text{in } \Omega_1 \\ & \frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} - \nabla(r \nabla \cdot \mathbf{u}^*) = 0 \quad \text{in } \Omega_0 \end{aligned} \quad (\text{III.9})$$

where Ω_0 and Ω_1 refer respectively to the fluid and solid phases. The idea of locally estimating the augmented Lagrangian parameter in order to obtain satisfactory equivalent models and solutions in all the media was first developed in [Vincent et al., 2004] and [Vincent et al., 2007]. Instead of choosing an empirical constant value of r fixed at the beginning of the simulations, and to avoid the main remaining drawback of the adaptive methods published in [Vincent et al., 2004] and [Vincent et al., 2007] which are linked to the *a priori* definition of dimensionless parameters for

defining $r(t, M)$, it has been proposed in [Vincent et al., 2011] to define the augmented Lagrangian parameter as an algebraic parameter which increases the magnitude of specific coefficients in the linear system in order to verify the divergence free constraint, while solving at same time the conservation equations. The main interests of the algebraic adaptive augmented Lagrangian method are the following : it does not require any *a priori* physical information, it applies to any kind of geometry and grid and it takes into account the residual of the linear solver and the fulfilment of incompressible and solid constraints. This version of the algebraic adapted augmented Lagrangian (3AL) method will be used in the present work, coupled to viscous penalty methods and particle interaction models. The main interest of the 3AL is that its formulation, as proposed in [Vincent et al., 2011], is directly adapted to the penalization of the viscous stress tensor through the dynamic viscosity penalty or the split viscous penalty as it lies on a scanning of the matrix resulting from the discretization of the penalized conservation equations. The algorithm (III.8) remains valid for particulate flows with r a function of time and space of the form [Vincent et al., 2011]

$$r(t)_i = \mathcal{K} \max(A_{ij}, j = 1..N) \quad (\text{III.10})$$

where i is the index of the discrete velocity solution on a grid containing N velocity points and j the index for the discretization stencil of the equation for a given i^{th} velocity unknown. The discretization matrix containing the viscous penalty contributions is referred to as A , A_{ij} being the coefficient of A at the line i and the column j . The constant \mathcal{K} is used to strengthen the penalization of the divergence free constraint in the momentum equations. It is generally chosen between 100 and 1000.

iii. Physical characteristics of the equivalent fluid

The fictitious domain approach used in the present work considers the solid part of the particulate flow as a fluid with specific rheological properties whose evolutions are modeled by the Navier-Stokes equations. The present section explains how the characteristics of the solid equivalent fluid are defined to ensure a deformation free behavior in the related zones. See also [Joseph et al., 1990, Patankar et al., 2000].

Classically, for any point \mathbf{P} belonging to the solid zones of the calculation domain Ω , *i.e.* the zones where $C = 1$, the solid behavior is characterized by a translation and a rotation. For any particle, constant translation and rotation velocities \mathbf{u}_0 and \mathbf{w} exist such that

$$\forall \mathbf{P} \in \Omega^I, \exists \{\mathbf{w}, \mathbf{u}_0\}, \mathbf{u}(\mathbf{P}) = \mathbf{u}_0 + \mathbf{X}_{\mathbf{B}}^I \mathbf{P} \wedge \mathbf{w} \quad (\text{III.11})$$

where $\mathbf{X}_{\mathbf{B}}^I$ is the barycenter of the considered particle I and Ω^I the related solid subdomain. The solid constraint is intrinsically maintained if the deformation tensor is nullified :

$$\forall \mathbf{P} \in \Omega^I, \nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u} = 0 \quad (\text{III.12})$$

In other words, if we assume that (III.12) is satisfied, the following systems are obtained :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \\ \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \end{array} \right. \quad (\text{III.13})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{\partial w}{\partial y} \\ \frac{\partial w}{\partial x} = -\frac{\partial u}{\partial z} \end{array} \right. \quad (\text{III.14})$$

Then, equations (III.13) give the direction dependencies of each velocity components as

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}(y, z), \mathbf{v} = \mathbf{v}(x, z), \mathbf{w} = \mathbf{w}(x, y) \quad (\text{III.15})$$

By using equations (III.14), three functions $\omega_1(x)$, $\omega_2(y)$ and $\omega_3(z)$ can be defined such that

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u(y, z)}{\partial y} = -\frac{\partial v(x, z)}{\partial x} = \omega_3(z) \\ \frac{\partial v(x, z)}{\partial z} = -\frac{\partial w(x, y)}{\partial y} = \omega_1(x) \\ \frac{\partial w(x, y)}{\partial x} = -\frac{\partial u(y, z)}{\partial z} = \omega_2(y) \end{array} \right. \quad (\text{III.16})$$

If it is assumed that the rotation velocity components have the necessary regularity, the Schwarz theorem gives a constant second order derivative of the velocities :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial^2 u(y, z)}{\partial y \partial z} = \frac{\partial \omega_3(z)}{\partial z} = -\frac{\partial \omega_2(y)}{\partial y} = W_1 \\ \frac{\partial^2 v(x, z)}{\partial x \partial z} = \frac{\partial \omega_1(x)}{\partial x} = -\frac{\partial \omega_3(z)}{\partial z} = W_2 \\ \frac{\partial^2 w(x, y)}{\partial x \partial y} = \frac{\partial \omega_2(y)}{\partial y} = -\frac{\partial \omega_1(x)}{\partial x} = W_3 \end{array} \right. \quad (\text{III.17})$$

It can be verified that the second order derivatives are equal to zero by solving the following system :

$$\left\{ \begin{array}{l} W_2 = -W_3 \\ W_3 = -W_1 \\ W_1 = -W_2 \end{array} \right. \quad (\text{III.18})$$

As a consequence, the functions ω_1 , ω_2 and ω_3 are constant and therefore continuous and derivable with continuous derivatives. Finally, by integrating equations (III.17), we obtain

$$\left\{ \begin{array}{l} u = u_0 + \omega_3 y - \omega_2 z \\ v = v_0 + \omega_1 y - \omega_3 z \\ w = w_0 + \omega_2 y - \omega_1 z \end{array} \right. \quad (\text{III.19})$$

The equation (III.11) is so verified if (III.12) is true. In this way, relations (III.11) and (III.12) are equivalent. Then, a solid constraint can be solved by computing $\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u} = 0$. For the

resolution of the momentum conservation equation (III.2) in the Navier-Stokes equations, this condition is asymptotically verified when $\mu \rightarrow +\infty$, as explained in the section i..

According to the decomposition of the viscous stress tensor introduced in section i., an equivalent condition to (III.11) or (III.12) is to satisfy

$$\Lambda(\mathbf{u}) = 0 \quad (\text{III.20})$$

$$\Gamma(\mathbf{u}) = 2\Theta(\mathbf{u}) \quad (\text{III.21})$$

Indeed, it can be verified that $\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u} = 2\Lambda(\mathbf{u}) + 2\Gamma(\mathbf{u}) - \Theta(\mathbf{u})$. For any Newtonian fluid or solid media, the relations $\kappa = 2\mu$, $\zeta = 2\mu$ and $\eta = \mu$ must be satisfied, as proposed in section i., together with $\mu \gg 1$ in the particles.

Numerically, equations (III.12), (III.20) and (III.21) have to be implemented on the split viscous penalty grid described in section i. in figure III.2. For internal solid nodes (those where $C = 1$) the solid viscosity is chosen to be 100 to 1000 times the viscosity of the carrier fluid. This choice will be discussed in the validation section concerning the accuracy of the simulations and the effect on the cost of the linear solvers. The previous remarks on the order of magnitude of the viscosity inside the solid parts stand for the continuous point of view.

On a discrete point of view, the flow grid cells cut by the fluid-solid interface Σ must be distinguished compared to those entirely included in the particles. For these last nodes, the dynamic viscosity is chosen equal to $\mu_\infty \approx K\mu_{carrierfluid}$ with $100 \leq K \leq 1000$. For the fluid-solid cells, different methods can be used to define the homogenized viscosity. First, to avoid any direct interpolation of the viscosity coefficients associated to off diagonal viscous stress tensor components, an interpolation C_μ of the volume fraction is defined at the viscosity nodes, *i.e.* stars in figure III.2 on the split viscous penalty grid :

$$C_\mu = \frac{1}{4} \sum_N C_N \quad (\text{III.22})$$

where N denotes the indices of the pressure nodes located at the vertices of the cell to which C_μ belongs. Four different numerical viscous laws have been investigated according to C for the diagonal viscous stress tensor terms, *i.e.* red circles in figure III.2, C_μ and also a conditional indicator function I_C satisfying $I_{C < 0.5} = 1$ if $C < 0.5$ or $I_{C \geq 0.5} = 1$ if $C \geq 0.5$:

1. Numerical viscous law 1 (NVL1), the viscosity is defined in a discontinuous way according to C_μ :

$$\begin{aligned} \kappa &= 2 [\mu_f I_{C < 0.5} + \mu_s I_{C \geq 0.5}] \\ \zeta &= 2 [\mu_f I_{C_\mu < 0.5} + \mu_s I_{C_\mu \geq 0.5}] \\ \eta &= \mu_f I_{C_\mu < 0.5} + \mu_s I_{C_\mu \geq 0.5} \end{aligned}$$

2. Numerical viscous law 2 (NVL2), the viscosity is given by an arithmetic average :

$$\begin{aligned} \kappa &= 2 [(1 - C)\mu_f + C\mu_s] \\ \zeta &= 2 [(1 - C_\mu)\mu_f + C_\mu\mu_s] \\ \eta &= (1 - C_\mu)\mu_f + C_\mu\mu_s \end{aligned}$$

3. Numerical viscous law 3 (NVL3), the viscosity is given by a harmonic average :

$$\kappa = 2 \left[\frac{\mu_f \mu_s}{C\mu_f + (1 - C)\mu_s} \right]$$

$$\zeta = 2 \left[\frac{\mu_f \mu_s}{C_\mu \mu_f + (1 - C_\mu) \mu_s} \right]$$

$$\eta = \frac{\mu_f \mu_s}{C_\mu \mu_f + (1 - C_\mu) \mu_s}$$

4. Numerical viscous law 4 (NVL4), the viscosity is defined with a mixed average as proposed by Benkenida and Magnaudet [Benkenida and Magnaudet, 2000] :

$$\kappa = 2 [(1 - C) \mu_f + C \mu_s]$$

$$\zeta = 2 \left[\frac{\mu_f \mu_s}{C_\mu \mu_f + (1 - C_\mu) \mu_s} \right]$$

$$\eta = \frac{\mu_f \mu_s}{C_\mu \mu_f + (1 - C_\mu) \mu_s}$$

Concerning the density, an arithmetic average is used whatever its location on the discretization grid. The most clever choice of viscosity average for the ITPM will be discussed in the validation section.

III.2.4 Eulerian-Lagrangian VOF method for particle tracking

Once the particle center of mass is known in the computations, it has been explained that the ITPM requires to locate the interior and exterior of the particle thanks to a phase function C in order to build the physical properties of the equivalent fluid such as the dynamic viscosity. This section explains how at each time step the finite size particles are advected and how the solid fraction C is obtained on the Eulerian flow grid.

At each time step, the mass and momentum equations are solved by using the augmented Lagrangian approach explained before including the particle-particle collision forces \mathbf{F}_{si} detailed in section III.2.5. Thanks to the ITPM, the one-fluid velocity field provides the solid velocity field inside the particles. Then, instead of using a classical Eulerian VOF approach [Hirt et al., 1974, Youngs, 1982, Vincent et al., 2011] to obtain the new solid fractions in each Eulerian cells by solving equation (III.3), the Lagrangian velocities $\mathbf{V}^{I,L}$ of each particle, located in a Lagrangian way by their position $\mathbf{X}^{I,L}$, are computed at reference points (the four green points in figure III.3, in the two-dimensional configuration) located inside each particle by using an interpolation method explained in section i.. The new positions of the particles are then updated in a Lagrangian manner, as developed in section V.7 and finally the new Eulerian solid fractions are estimated by means of a projection of the exact shape of the particles on the flow grid. This last step is detailed in section iii.. The interest of using a Lagrangian scheme to advect the particles and to project their shape on the Eulerian mesh is to avoid any distortion of the particle shape over time, as would be induced by a classical Eulerian VOF scheme.

i. Computation of particle velocity

The Lagrangian particle velocity located at the center of each solid sphere is computed by using 4 or 6 points respectively in two or three dimensions. The same procedure allows to estimate the rotation velocity if required. In figure III.3, the position of the velocity calculation point, colored in green, is represented for the two-dimensional case. These points are positioned on the axis parallel to the Cartesian coordinate system axis, at half the radius of the particles on each side of the center of the spheres. We have observed that it was more accurate to define the Lagrangian velocity of the particles by using fixed points located inside the frame of the particles compared to

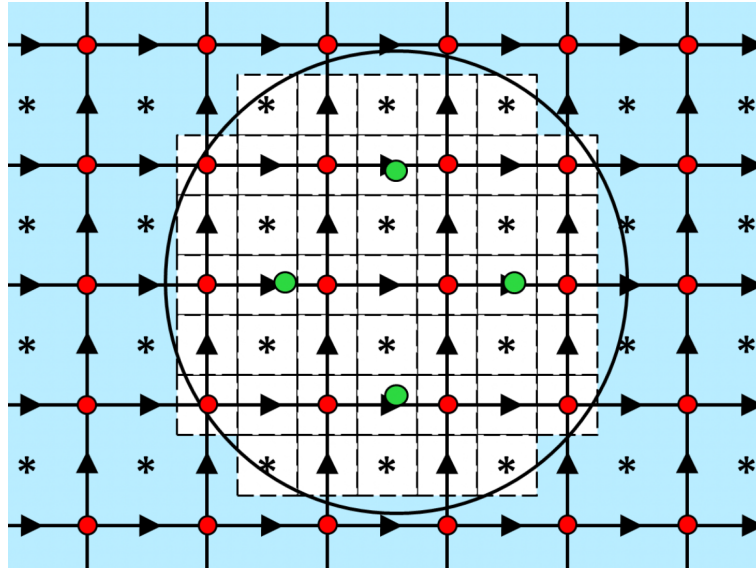


FIGURE III.3 – Position in two dimensions of the reference Lagrangian points (green points) used to interpolate the Lagrangian velocity at the barycenter of the particles.

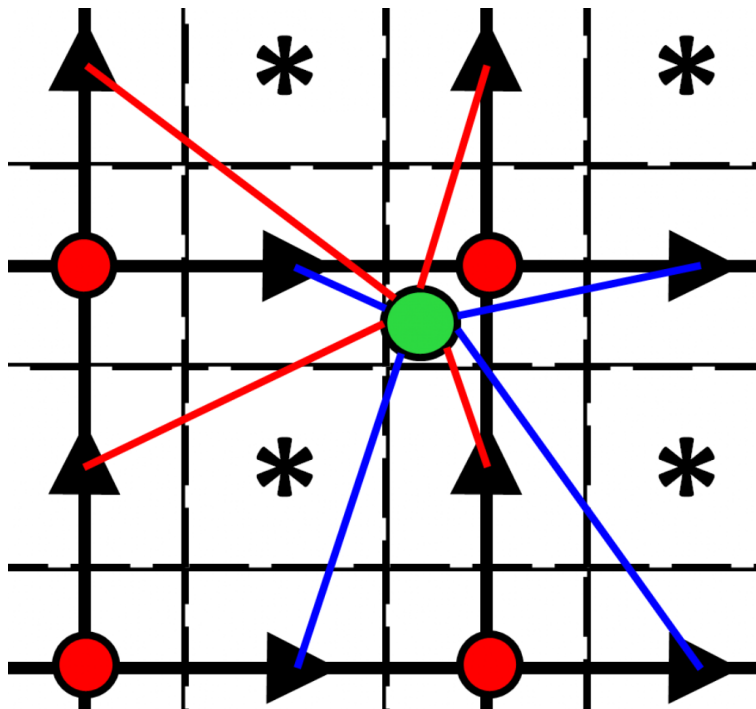


FIGURE III.4 – Eulerian velocity kernel (u-components in blue and v-components in red) used in two dimensions to estimate the components of the interpolation Lagrangian velocity points (green point).

an Eulerian average of the velocity field inside each solid sphere. A lower accuracy has been also obtained with the use of a kernel based interpolation [Cabezón et al., 2008]. With the proposed four or six point approach, the idea is to estimate the Lagrangian velocity $\mathbf{V}^{I,L}$ at the barycenter of the spheres by interpolating it at the $\mathbf{X}_k^{I,L}$ locations according to the surrounding Eulerian solid velocity field. Index I stands for the number of the particle and $k = 1..N$ for the number of the interpolation point associated to particle I , with $N = 4$ in 2D and $N = 6$ in 3D. The velocity is interpolated from the nearest Eulerian velocity node values as shown in figure III.4 for the two-dimensional case. The relative positions $\tilde{\mathbf{X}}$ of the interpolation points compared to the Eulerian velocity components $X_{\mathbf{u}}$ and particle center $\mathbf{X}^{I,L}$ is first calculated as

$$\tilde{\mathbf{X}} = \begin{pmatrix} \tilde{x} \\ \tilde{y} \\ \tilde{z} \end{pmatrix} = \frac{\mathbf{X}_k^{I,L} - \mathbf{X}_{\mathbf{u}}}{\mathbf{DX}^{I,L}} \quad (\text{III.23})$$

where for a given interpolated Lagrangian velocity component, $\mathbf{DX}^{I,L}$ refers to the distance vector in each Cartesian coordinate between two opposite points of the box (parallelepiped in three dimensions) formed by the Eulerian velocity components used for the interpolation. In two dimensions, the surrounding Eulerian components used to interpolate $\mathbf{V}_k^{I,L}$ are represented in figure III.4 with blue (u component) and red (v component) lines joining the Lagrangian interpolation position $\mathbf{X}_k^{I,L}$.

The basis P_m , $m = 1..N$ of the bilinear interpolation is then built according to the n ($n = 4$ in 2D and $n = 8$ in 3D) Eulerian velocity components V_n as follows

$$P_1 = V_1 \quad (\text{III.24})$$

$$P_2 = V_2 - V_1 \quad (\text{III.25})$$

$$P_3 = V_4 - V_1 \quad (\text{III.26})$$

$$P_4 = V_1 + V_3 - V_2 - V_4 \quad (\text{III.27})$$

in two dimensions and

$$P_1 = V_1 \quad (\text{III.28})$$

$$P_2 = V_2 - V_1 \quad (\text{III.29})$$

$$P_3 = V_4 - V_1 \quad (\text{III.30})$$

$$P_4 = V_5 - V_1 \quad (\text{III.31})$$

$$P_5 = V_3 + V_1 - V_2 - V_4 \quad (\text{III.32})$$

$$P_6 = V_6 + V_1 - V_2 - V_5 \quad (\text{III.33})$$

$$P_7 = V_8 + V_1 - V_4 - V_5 \quad (\text{III.34})$$

$$P_8 = V_7 - V_6 - V_8 + V_5 \quad (\text{III.35})$$

in three dimensions. The l^{th} component of the Lagrangian interpolated velocity is obtained by

$$V_{k,l}^{I,L} = P_1 + P_2\tilde{x} + P_3\tilde{y} + P_4\tilde{x}\tilde{y} \text{ in 2D} \quad (\text{III.36})$$

$$V_{k,l}^{I,L} = P_1 + P_2\tilde{x} + P_3\tilde{y} + P_4\tilde{z} + P_5\tilde{x}\tilde{y} + P_6\tilde{x}\tilde{z} + P_7\tilde{z}\tilde{y} + P_8\tilde{x}\tilde{y}\tilde{z} \text{ in 3D} \quad (\text{III.37})$$

Finally, the Lagrangian velocity at the barycenter of the particle reads

$$\mathbf{V}^{I,L} = \frac{\sum_N \mathbf{V}_k^{I,L}}{N} \quad (\text{III.38})$$

ii. Transport of the particles

Once the Lagrangian particle velocity is known by (III.38), the particles are advected in a Lagrangian manner by an update of the position of their mass center $\mathbf{X}^{I,L}$ as follows

$$\mathbf{X}^{I,L,n+1} = \mathbf{X}^{I,L,n} + \Delta t \mathbf{V}^{I,L,n+1} \quad (\text{III.39})$$

with the second order Lagrangian velocity extrapolation at time $(n+1)\Delta t$ being given by

$$\mathbf{V}^{I,L,n+1} = \frac{\mathbf{V}^{I,L,n} + \mathbf{V}^{I,L,n+1/2}}{2} \quad (\text{III.40})$$

The intermediate Lagrangian particle velocity is defined according to the interpolated position of the particle I at time $(n+1/2)\Delta t$, which is given by $\mathbf{X}^{I,L,n+1/2} = \mathbf{X}^{I,L,n} + \Delta t \mathbf{V}^{I,L,n}$, as follows

$$\mathbf{V}^{I,L,n+1/2} = \frac{\sum_N \mathbf{V}_k^{I,L,n+1/2}}{N} \quad (\text{III.41})$$

The Lagrangian particle advection scheme (III.39-III.41) corresponds to a second order accurate in time Runge-Kutta scheme.

iii. Update of the solid fraction

The one-fluid model used to simulate the particle flow does not explicitly use the Lagrangian positions or velocities of the solid spheres. As a fictitious domain approach, it requires the accounting of the Eulerian solid fraction C in each Eulerian grid cell. The phase function C have to be computed according to the Lagrangian position of particles at time $(n+1)\Delta t$ instead of solving explicitly the Eulerian advection equation on C . This is achieved by generating a set of virtual test points on a regular network inside each pressure control volume, as described for the two-dimensional case in figure III.5. On a statistical point of view, the local solid fraction in a given control volume is naturally defined by the number of virtual points belonging to the interior of the particle normalized by the total number of virtual points used in the control volume.

The effect of the number of virtual points on the accuracy of the surface of the particle projected on the Eulerian flow grid is proposed in figure III.6. Various Eulerian grids are considered, *i.e.* G_1, G_2, G_3, G_4 and G_5 , containing respectively 5, 10, 20, 40 and 80 discretization points along a particle diameter. It is observed that even with only 5 Eulerian grid points for a particle diameter, the relative error on the particle shape is less than 0.1%. Increasing the number of virtual points reduces the error on the particle surface, with a convergence order between 1 and 2. The network of virtual points which will be considered in our simulations will be composed of $25^{N_{dim}}$ points, with N_{dim} the number of dimensions of the problem. Indeed, it can be observed that in this case, the error on the solid fraction estimate is always less than 0.1% whatever the computational flow grid. This constraint is important to deal with DNS of particulate flows as only a moderate number of Eulerian cells along a particle diameter can be used in three-dimensional simulations to simulate realistic problems.

III.2.5 Numerical modeling of particle interaction

Leading fully resolved particulate simulations requires to manage the contact and collisions between particles in order to prevent overlapping between particles or particles and walls. This

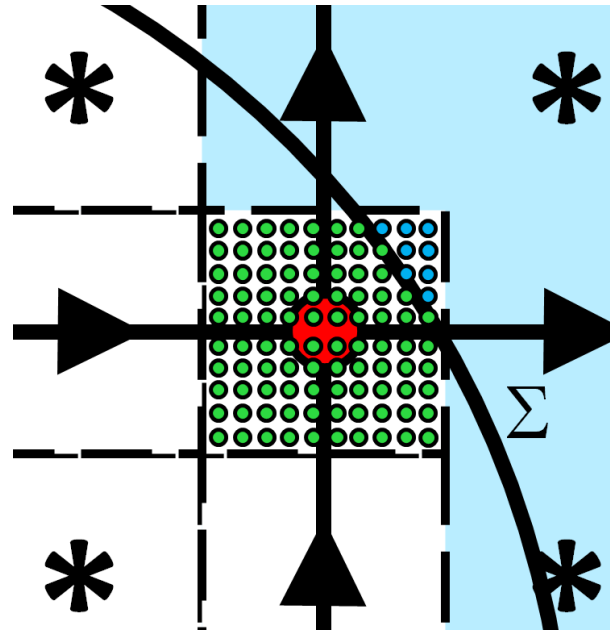


FIGURE III.5 – Two dimensional network of $10^{N_{dim}}$ virtual points used to estimate the local solid fraction C^{n+1} thanks to a Lagrangian position $\mathbf{X}^{I,L,n+1}$ of a particle, whose interface is noted Σ . In green are plotted the virtual points belonging to the particle and in blue the other ones. In the example, $C^{n+1} = 92/100 = 0.92$.

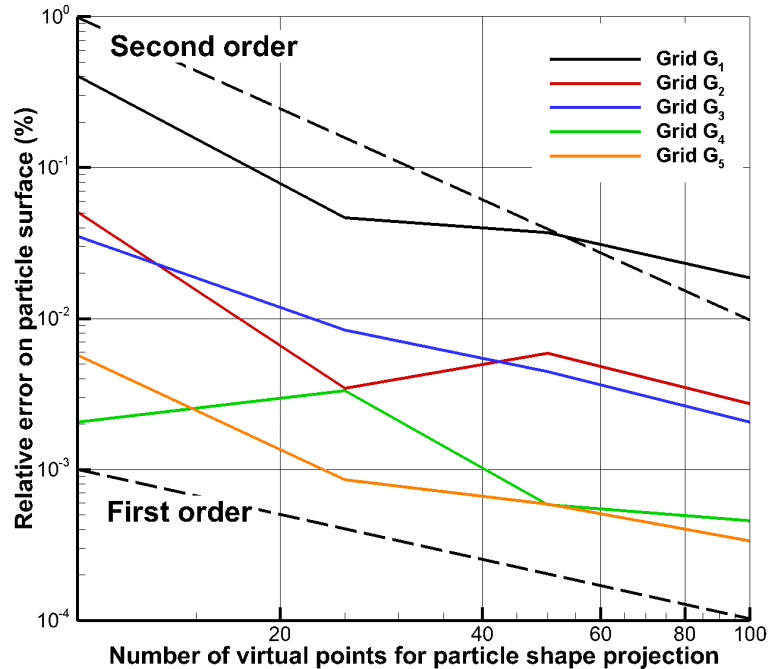


FIGURE III.6 – Error on the projected surface of a circular shape particle according to the number of virtual points in each space direction and to the Eulerian grid used.

spurious numerical phenomenon is in particular induced by the approximation of the particle trajectories and the projection of the spherical shape on the Eulerian grid. For volume ratios of particles lower than 0.1%, collisions are often assumed negligible [Truesdell and Elghobashi, 1994, Poelma et al., 2007]. As soon as a general particulate flow model is built for low and high solid fractions, the collisions can be a major physical phenomenon, such as in fluidized beds. The fully resolved numerical simulations have to integrate a collision model to prevent unphysical adhesion of particles and try to represent reality. This point is developed in the present section.

i. Existing models for particle interaction

A first approach consists in defining a mass-damping force [Glowinski et al., 2001, Corre et al., 2010] or an exponential repulsive force [Coquerelle and Cottet, 2008] that ensures that particles do not collide. These methods do not include *a priori* the explicit modeling of the influence of the lubrication effects. Several solutions exist to account for lubrication : the first one is based on a local refinement of the flow grid in order to resolve the lubrication effect [Lefebvre, 2007, Ardekani and Rangel, 2008]. Therefore, this approach is very expensive in three dimensions. Another solution consists in adding an equivalent force to the repulsive component in order to reproduce the lubrication force. We have chosen this strategy, based on the work of Breugem [Breugem, 2010b].

ii. Solid/solid collision

A normal solid/solid collision is characterized by the dry coefficient of restitution (in air), e_d , defined as the ratio between the velocity after and before the collision. The energy absorbed by the collision is represented by the e_d coefficient. For a solid collision between steel spheres, the collision time is around 10^{-9} seconds. This time is too small to be reproduced by the fluid simulation with a time step chosen according to macroscopic hydrodynamic effects, with Δt laying in the range $10^{-6} - 10^{-2}s$ in most of the fluid mechanics problems involving particles such as a fluidized bed or a sedimentation flow. The solution in which a repulsive force is used to prevent from particle numerical adhesion is known as smooth spheres [Crowe et al., 1998]. The main drawback of this model is that it artificially separate particles or walls as soon as they are distant from one grid cell. In this way, the collision effect is not accurately modeled and the restitution coefficient is generally underestimated.

In order to account explicitly for the restitution coefficient, a damping-mass force is used, instead of a standard smooth sphere repulsive force, according to equation (V.1) where $N_c\Delta t$ represents the collision time, which is always overestimated. Preliminary tests have shown that using $N_c = 8$ is a good compromise to get a correct collision model. More details on the numerical implementation are given in [Brändle de Motta et al., 2013] (given in appendix A) and developed in chapter V.

$$\mathbf{F}_s = \frac{m_e (\pi^2 + \ln(e_d)^2)}{[N_c\Delta t]^2} \mathbf{d} - \frac{2m_e \ln(e_d)}{[N_c\Delta t]} \dot{\mathbf{d}} \quad (\text{III.42})$$

where m_e is the reduced mass verifying $m_e = (m_1^{-1} + m_2^{-1})^{-1}$ for inter-particle collision and $m_e = m$ for particle wall collision, \mathbf{d} is the distance vector in each Cartesian direction between the particles or the particle and the wall and $\dot{\mathbf{d}}$ is the time derivative of \mathbf{d} . Notations m_1 and m_2 stand for the masses of particle 1 and 2 whereas m denotes the mass of the particle in a

particle/wall collision configuration. The restitution coefficient is given by the user depending on the material and particle properties. This input parameter have to be measured experimentally.

iii. Lubrication

Many authors propose models that include the lubrication effects [Maury, 1997, Lefebvre, 2007, Dance and Maxey, 2003]. The principle consists in utilizing the analytical development given by [Brenner, 1961] or the lower order development provided by [Crowe et al., 1998] of the forces exerted by a viscous fluid between two particles or a particle and a wall. The following formulation of the lubrication force is considered here :

$$\mathbf{F}_1(\epsilon_i, \mathbf{u}_n) = -6\pi\mu_f R \mathbf{u}_n [\lambda(\epsilon_i) - \lambda(\epsilon_{al})] \quad (\text{III.43})$$

with λ being defined for particle-particle interaction as λ_{pp} or as λ_{pw} for particle-wall interaction

$$\lambda_{pp} = \frac{1}{4\epsilon_i} - \frac{9}{40} \log(\epsilon_i) - \frac{3}{112} \epsilon_i \log(\epsilon_i) + 0.995 + \mathcal{O}(\epsilon_i) \quad (\text{III.44})$$

$$\lambda_{pw} = \frac{1}{\epsilon_i} - \frac{1}{5} \log(\epsilon_i) - \frac{1}{21} \epsilon_i \log(\epsilon_i) + 0.9713 + \mathcal{O}(\epsilon_i) \quad (\text{III.45})$$

where \mathbf{u}_n is the normal relative velocity between the particles or the particle and the wall, and $\epsilon_i = \frac{\|\mathbf{d}\|}{R}$ is the dimensionless distance between them. The activation distance ϵ_{al} is given by numerical assumptions. The entire collision model is explained in section V.

iv. Four-way coupling

The modeling and simulation of fully resolved particles is intrinsically based on two-way coupling approaches, in which the effect of the fluid on the particles and the modification of the carrier fluid due to the particle motions are explicitly solved. Several reference works exist on this topic [Ritz and Caltagirone, 1999b, Uhlmann, 2005, Uhlmann, 2008, Lucci et al., 2010, Lucci et al., 2011, Randrianarivelo et al., 2005a, Zhang and Prosperetti, 2005, Vincent et al., 2007]. In these models, it is assumed that the flow grid is refined enough to undertake the lubrication or collision effects or that the solid concentrations are sufficiently low [Elghobashi, 1994, Poelma et al., 2007] such that the collision frequency is low too.

As soon as the flow grid and time steps are coarse compared to the lubrication and collision characteristic time and space scales, an explicit modeling of the collision and lubrication forces have to be added to the particle flow model, as discussed for example by [Lain et al., 2002]. When relevant particle/particle interactions such as turbulent dispersion, transverse lift forces, wall collisions with roughness or inter-particle collisions, are explicitly accounted by the models, the particle model is called four-way coupling. Our finite size particle flow model belongs to this class of approaches, as previously published by [Glowinski et al., 2001, Randrianarivelo et al., 2007]. To our opinion, the works of [Uhlmann, 2005, Uhlmann, 2008, Lucci et al., 2010, Lucci et al., 2011] are also four-way coupling based finite size particle models, even if their authors consider them as two-way coupling, as they explicitly account for particle collision. The main originality of our particle collision modeling is the implicit treatment of the collision forces directly in the momentum equations.

Instead of taking into account the particle collisions explicitly during the particle tracking step, it has been chosen to directly plug the resulting interaction forces \mathbf{F}_s and \mathbf{F}_1 into the momentum equations. The Lagrangian collision force for a particle I is $\mathbf{F}_{si}^I = \mathbf{F}_s + \mathbf{F}_1$. It is projected as a volume force in the momentum equations so as to implicitly prevent particle sticking or penetration during the global one-fluid velocity solving. The two forces \mathbf{F}_s and \mathbf{F}_1 are estimated thanks to an extrapolated position of each particle $\mathbf{X}^{I,L,n+1}$ at time $(n+1)\Delta t$ with the use of the velocity at the preceding time step. This choice avoids a time splitting error induced by an explicit treatment of the collision, as in the works of [Glowinski et al., 2001, Randrianarivelo et al., 2005a, Randrianarivelo et al., 2007, Zhang and Prosperetti, 2005, Uhlmann, 2005, Uhlmann, 2008, Lucci et al., 2010, Lucci et al., 2011, Corre et al., 2010]. This point is the main difference between our implementation and the implementation of the collision force given by [Breugem, 2010a]. Then, the Lagrangian forces for each particle I are distributed in the Eulerian cells included inside the particle shape by

$$\mathbf{F}_{si}(M) = \mathbf{F}_{si}^I / (V_p) \quad (\text{III.46})$$

if Eulerian grid point M is inside particle I . The particle volume is referred to as V_p . The implicit treatment of lubrication and solid-solid collision forces has been validated in [Brändle de Motta et al., 2013] against the experiments and correlation of [Legendre et al., 2005] concerning the restitution coefficient of a particle after a collision with a solid wall.

III.2.6 General numerical methods

From a general point of view, the one-fluid Navier-Stokes equations are discretized in Thétis, a CFD code developed in the I2M Institute in the TREFLE Department, with implicit finite-volumes on an irregular staggered Cartesian grid. A second-order centered scheme is used to approximate the spatial derivatives while a second-order Euler or Gear scheme is used for the time integration. All the terms are written at time $(n+1)\Delta t$, except the inertial term which is linearized as follows :

$$\mathbf{u}^{n+1} \cdot \nabla \mathbf{u}^{n+1} \approx (2\mathbf{u}^n - \mathbf{u}^{n-1}) \cdot \nabla \mathbf{u}^{n+1}. \quad (\text{III.47})$$

It has been demonstrated that this approximation allows to reach a second-order convergence in time [Poux et al., 2011]. The coupling between velocity and pressure is ensured with an implicit algebraic adaptive augmented Lagrangian method. The augmented Lagrangian methods presented in this work are independent on the chosen discretization and could be implemented for example in a finite-element framework [Bertrand et al., 1997]. In two-dimensions, the standard augmented Lagrangian approach [Fortin and Glowinski, 1982] can be used to deal with two-phase flows as direct solvers [Schenk and Gärtner, 2004] are efficient in this case. However, as soon as three-dimensional problems are under consideration, the linear system resulting from the discretization of the augmented Lagrangian terms has to be treated with a BiCG-Stab II solver [Gustafsson, 1978], preconditioned by a Modified and Incomplete LU method [Vorst, 1992]. Indeed, in three-dimensions, the memory cost of direct solvers makes them impossible to use. The 3AL method presented before is a kind of general preconditioning which is particularly efficient when multi-phase or multi-material flows are undertaken, *i.e.* when sharp density or viscosity gradients occur. The numerical methods and the one-fluid model have been validated by the authors concerning single particle flows in [Randrianarivelo et al., 2005a] and [Vincent et al., 2007].

III.2.7 Parallel implementation

Thétis simulation tool has been parallelized for distributed memory architectures with MPI procedures. The parallelism is based on a grid decomposition to which the same simulation algorithm is applied on each processor. Each processor possesses its own data with specific node covering zones used to exchange the solutions at the boundaries of the processor data blocs. On each processor data block, a standard BiCG-Stab II solver is used which is preconditioned thanks to the local available unknowns through a Modified and Incomplete LU (MILU) method. The grid splitting is simply achieved by using a Cartesian cutting in each direction of the global mesh covering all the mesh blocks associated to each processor. More details on the parallelism is given in [Ahusborde and Glockner, 2010].

Specific developments have been investigated concerning the tracking of the particles over time in processor discrete space. Indeed, to build the phase function describing the local solid fraction and to update at each time step the physical characteristics of the one-fluid equations, the searching of particles interacting with a solid sphere belonging to a given processor must be undertaken. This type of algorithms has been often studied for many applications as the simulation of granular flows, the molecular dynamics or the universe gravitational forces. The algorithms change depending on the range of the interactions. For short range interactions the existing methods are able to find collisions between millions of particles. The most common algorithms use linked list approach [Alder and Wainwright, 1959, Alder and Wainwright, 1960], Verlet list [Verlet, 1967] or a combination of the two [Fang et al., 2007]. These algorithms are designed to deal with millions of particles efficiently. In our case they are not straightforwardly required because the number of considered particles is around several thousands and the number of CPU used for the simulations is determined by the needs of the fluid solver and the expected precision of the physical solution. However, brute force algorithm that search all the collisions between all the particles have a complexity of $\mathcal{O}(N_p^2)$ if N_p is the number of particles. The time spent in searching collisions becomes important, *i.e.* comparable or larger than the solving time of the Navier-Stokes equations, for $N_p \geq 500$ with such a direct approach. A finer implementation using for example octree structures will be required in the future to improve this aspect.

As a consequence, it has been decided to implement a cell-list approach to reduce the CPU time involved by the particle searching. The main idea is to split the physical space in boxes, and to search for collisions between particles only in a given box and the boxes around, as illustrated in figure III.7. Two conditions are necessary, the particles cannot pass through a box during a time step and the length of the boxes cannot be lower than the particle radius. The first condition is satisfied by assuming a CFL condition less than 1. The second condition have to be respected by the definition of the boxes. In our case, the CPU boxes generated by the Cartesian splitting of the global mesh are optimum for the solver with a number of cells of about 30^3 . As the particle considered in our simulations have between 8 and 15 grids cells per radius, this condition is always fulfilled. Therefore, the use of the CPU boxes for the searching algorithm is a simple and efficient solution. In addition, this choice minimizes the communications between CPU.

III.2.8 Sum up of the implemented Eulerian-Lagrangian Algorithm

The global algorithm used to solve one time iteration of fluid-particle interaction with the ITPM, the augmented Lagrangian approach and the Lagrangian VOF particle tracking is summarized in figure III.8. The first part of this work flow is devoted to predicting the position of the

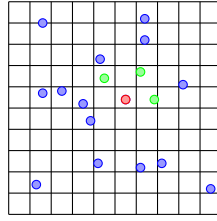


FIGURE III.7 – Searching of particle collision inside a CPU box distribution of 10×10 in two dimensions - the red particle is detected to interact with green particles whereas no interaction is considered with the blue ones.

particle at time $(n + 1)\Delta t$ through an extrapolation of their trajectories. The four-way coupling forcing terms \mathbf{F}_{si}^n are deduced from the particle interaction at this tentative position. The mass and momentum equations are then solved in both fluid and solid zones to obtain the pressure and velocities at time $(n + 1)\Delta t$. The particles are finally advected in a Lagrangian way with the new velocity field. At the end of each time iteration, Lagrangian positions of the particles are projected on the Eulerian grid to build C^{n+1} and the local densities and viscosities are updated according to C^{n+1} before starting the next physical time iteration. This last procedure allows to penalize the solid behavior according to penalty viscosities in the cells belonging to the particles and also to account for buoyancy effects through the density variations.

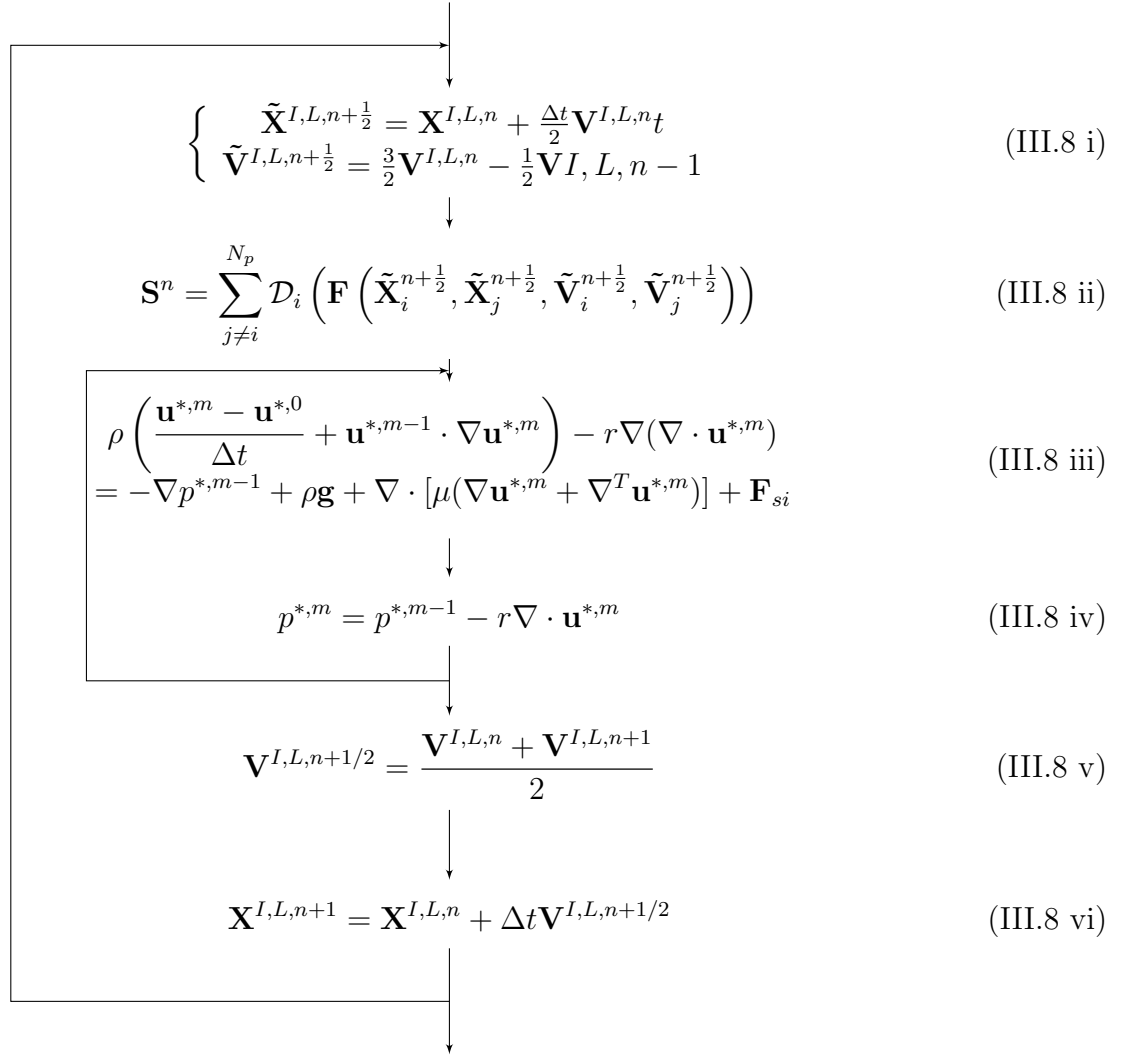


FIGURE III.8 – Work-flow of the four-way coupling with the ITPM associated to augmented Lagrangian approach and Lagrangian VOF particle tracking.

Etude du domaine de validité de la méthode VoFLag sur des cas simples

La validation de la méthode numérique est nécessaire non seulement pour vérifier que le code reproduit les phénomènes réels, mais aussi pour déterminer les besoins numériques en terme de maillage. Ainsi, on pourra déterminer le minimum de mailles nécessaires pour chaque phénomène. On s'est donc intéressé à valider la trainée exercée et la rotation forcée d'une particule sphérique. Le cas d'une particule cylindrique dans un écoulement de Poiseuille bidimensionnel nous a permis d'estimer l'ordre de la méthode.

Les validations sont aussi extraites de l'article soumis [Vincent et al., 2013], comme pour le chapitre III. Dans un soucis de concision certains paragraphes n'étaient pas transcrits dans l'article, on reproduit ici une version complète des validations.

IV.1 Chute d'une particule à faible nombre de Reynolds

The numerical simulation of the settling of a spherical particle for various Reynolds numbers is considered under the experimental conditions of [Cate et al., 2002]. Compared to the Faxen test case where $Re \ll 1$, the interest of the present configuration is to investigate a particle flow in which inertial effects exist and also to compare numerical results to measurements. This problem has already been simulated by other authors with a first order penalty method [Pianet et al., 2007], a Boltzmann approach [Cate et al., 2002, Pianet et al., 2007], a fractional step fully resolved simulation technique [Apte et al., 2009] or an immersed boundary method [Kempe and Fröhlich, 2010]. The numerical parameters used in this section are a penalty viscosity 100 times larger than the fluid viscosity, 25 virtual particles per direction, viscous law *NVL3*, $\mathcal{K} = 100$ and an iterative solver.

The definition sketch of the particle sedimentation have been presented into details in [Cate et al., 2002]. A single spherical particle is released without initial velocity in a parallelepiped box and it reaches a limit sedimentation velocity after a characteristic time. The Reynolds 1.5, 4.1, 11.6 and 32.2 are considered here. Results in terms of settling velocity over time are reported in figure IV.1 according to the number of Eulerian grid cells for a particle diameter $N_d = D_p/\Delta x$. The simulated velocities are compared to the measurements. It can be observed that the unsteady behavior of the particle velocity as well as the limit settling velocity are nicely recovered by the simulations for all investigated Reynolds numbers. After a certain time, the numerical velocity

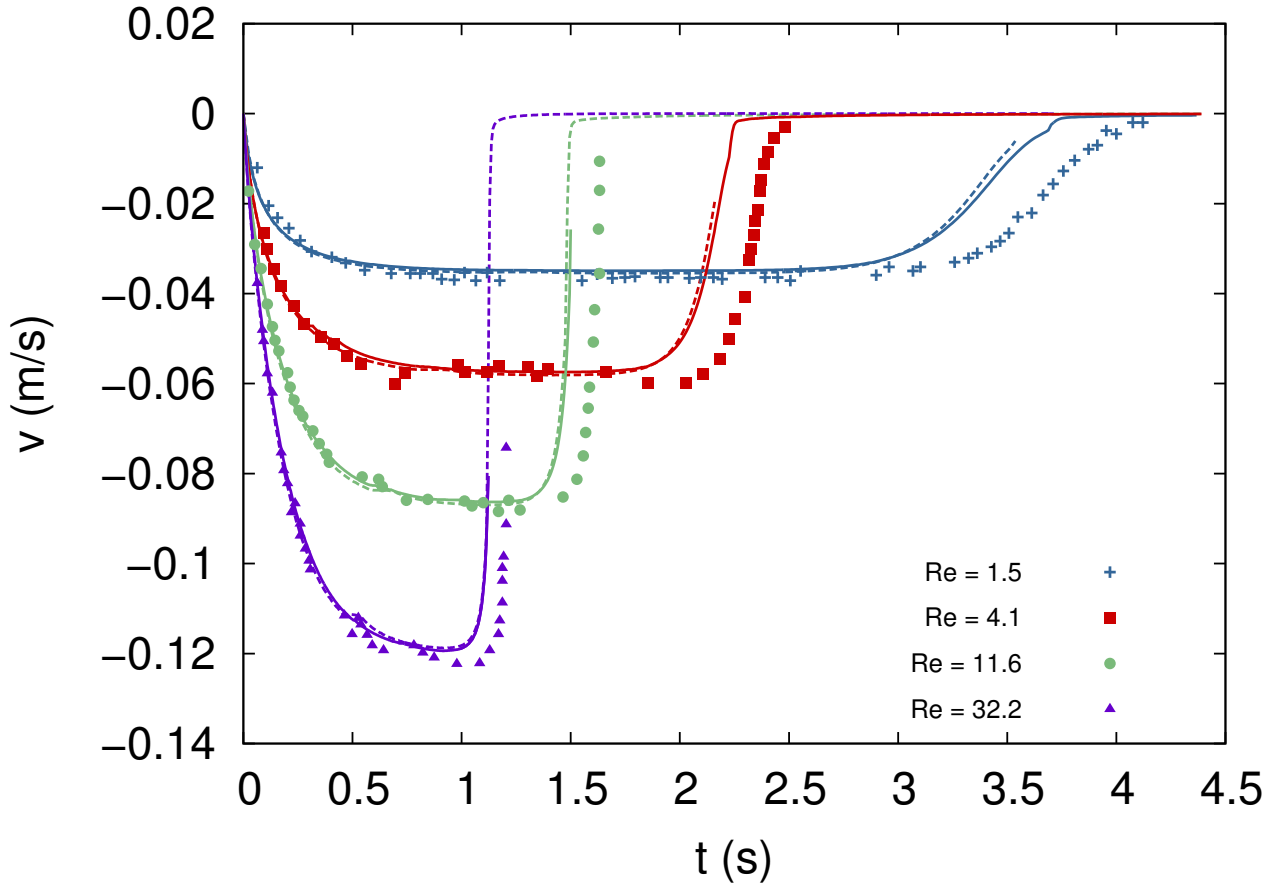


FIGURE IV.1 – Settling velocity over time for the test case of [Cate et al., 2002] - Long dashed line is associated to $N_d = 8$, straight line to $N_d = 16$ and symbols to experiments [Cate et al., 2002]. Colors are related respectively to $Re = 1.5$, $Re = 4.1$, $Re = 11.6$ and $Re = 32.2$.

tends to zero when the particle reaches the bottom of the tank whereas this deceleration is measured later in the experiments. These differences have previously been obtained by other authors [Pianet et al., 2007, Kempe and Fröhlich, 2010] whereas these discrepancies are not reported in the works of [Cate et al., 2002, Apte et al., 2009]. It seems that the initial position of the particle is not exactly the same in our simulations than in the reference experiments. However, the acceleration of the particle as well as the settling velocity are correct and weakly dependent on the number of Eulerian grid cell used to simulate the problem, which is an important feature of the ITPM approach as three-dimensional simulations of finite size particles are limited by the number of flow grid cells that can be investigated in real particle flow problems.

IV.2 Rotation forcée d'une particule dans un milieu infini

The previous test cases have demonstrated that the ITPM allows for solving a particle flow by considering the Navier-Stokes equations in the fluid and solid zones of the problem. The particle motion can be split into two constant velocity components, related to translation and angular rotation. Each particle trajectory is computed as explained in chapter i. by means of the

translation velocity of the sphere barycenter. This computation is used to update the particle positions and also to build the four-way coupling force in multiple particle configurations. In this approach, as soon as the particle shape is spherical, the rotation velocity is not required. Although the angular velocity is not necessary to our method, it can be calculated as explained in i.. The angular velocity can be useful to understand the particle-fluid interactions. If a friction model between particles is implemented, the collision torque will be deduced from the angular velocity. A specific test case is considered in this section to validate both the ITPM method when particles rotate and the computation of angular velocities.

The flow generated by a rotating particle has been studied since the beginning of the modern fluid mechanic science [Stokes, 1845]. When the flow becomes steady and the angular velocity of the particle remains constant, the torque exerted by the fluid on the particle have the same magnitude as the torque necessary to maintain the angular velocity. If a buoyant particle surrounded by an incompressible fluid is considered in a large fluid container, the angular velocity of the particle ω depends only on the fluid and solid densities, the fluid dynamic viscosity and the torque T exerted on the particle. The Vaschy-Buckingham π theorem shows that the problem can be reduced to a relation between the angular Reynolds number ($Re_\omega = \frac{R^2\omega\rho_f}{\mu_f}$) and the dimensionless torque ($M = \frac{2T}{\rho R^5\omega^2}$). The analytical study carried out by [Lamb, 1932] shows that for small Re_ω , the relation between those two dimensionless numbers is $Re_\omega = \frac{16\pi}{M}$. Since, many studies have been achieved using powers of the Reynolds number [Dennis et al., 1980] for finite Re numbers conditions. The retained solution is : $Re_\omega = 2.3810^{-2}M^2$. In order to know the evolution from low to larger Reynolds numbers, two reference solutions can be considered : the first is the experiment of [Sawatzki, 1970] and the second the calculations provided by [Dennis et al., 1980].

The flow around the particle can be split into two contributions :

- An azimuthal velocity that decreases with the distance to the particle.
- A recirculation flow occurring near the meridian of the particle due to the centrifugal force.

This flow contribution reaches back the particle near its rotation axis.

An isolated particle is considered in a box full of a viscous fluid. As previously explained, only two parameters characterize the problem, the Reynolds number and the dimensionless torque. In the present simulations, the particle radius and its density are fixed to unity. In order to limit boundary effects on the particle, the box width is taken 24 times the particle radius. This value was proposed by [Climent et al., 2007].

In order to investigate a parametric study without introducing specific numerical parameters, several cases are built to maintain the angular velocity near the unity. All parameters are fixed except :

- The viscosity, $\mu = 10^n$, with $n \in \{0, -\frac{1}{2}, -1, -\frac{3}{2}, -2, -\frac{5}{2}, -3\}$.
- The torque, that is based on the viscosity $T = 8\pi\mu R^3$. This formula respects the constraint ω equal to the unity when the Lamb law [Lamb, 1932] is valid, *i.e.* for low Reynolds numbers.

The translation of the particle is not activated. Some tests with a free particle have been carried out and no major differences were noticed except for the lowest viscosities for which the particle position becomes unstable during time. An exponential grid has been used in each direction to concentrate calculation efforts in the vicinity of the particle, as illustrated in figure IV.2. A numerical parametric study has been achieved with 10, 20 and 40 Eulerian grid points per particle diameter N_d and time steps of 0.1, 0.05 and 0.025 s respectively. Other numerical parameters are viscous law *NVL3*, $\mathcal{K} = 100$ and viscous ratio of 100.

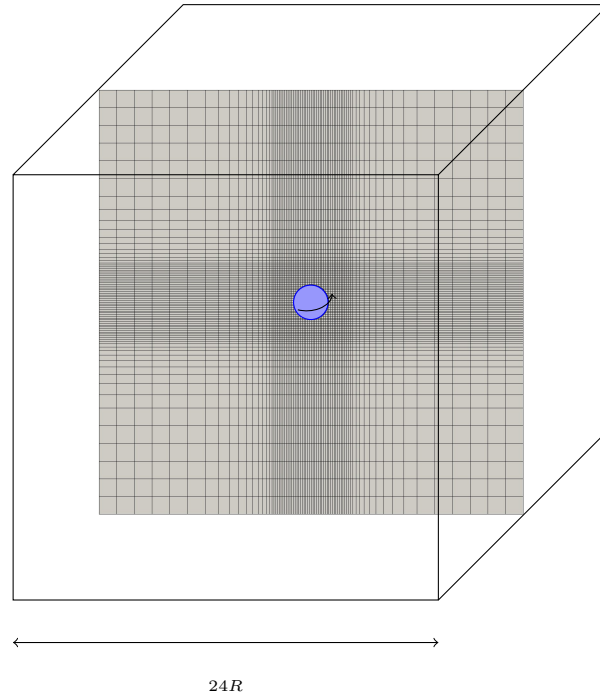


FIGURE IV.2 – Typical Eulerian grid used to simulate the rotation of a particle in a box with $N_d = 20$.

The fluid velocity is initialized with the analytical solution for Stokes flow :

$$\mathbf{u}(t = 0) = \frac{R^3 \omega}{r^2} \mathbf{n}_\sigma \quad (\text{IV.1})$$

where r is the spherical radial coordinate and \mathbf{n}_σ the angular vector direction. In the reference article [Dennis et al., 1980], the angular velocity is imposed as a boundary condition. Then, a study of the steady flow around the particle is carried out, the torque being computed from the flow. On the contrary, with the ITPM method, the torque is imposed, as the particle-fluid interface is not supported by mesh points in the 1-fluid approach, and the angular velocity is deduced from simulations. Figure IV.3 illustrates the radial velocity around the particle. The lines represent the stream function of the velocity projected in a plane perpendicular to the particle shape.

The simulated flow can be compared with that presented by [Dennis et al., 1980]. The comparison of radial velocity at the meridian of the particle is presented for different Navier-Stokes numbers in figure IV.4. For $Re < 25$ the results agree nicely. For higher Reynolds, the solutions exhibit noticeable differences. These differences can be explained by the different boundary conditions used in the two approaches. However, even if the ITPM flow seems to disagree with the solution proposed by [Dennis et al., 1980], the relation between the Reynolds number Re_ω and the dimensionless torque is respected in our approach. As was explained at the beginning of this section, a relation exists between the Reynolds number and the dimensionless torque. In order to calculate the angular velocity, the torque is maintained. When the angular velocity remains constant, the simulations are stopped and the angular velocities evaluated.

To finish with, figure IV.5 shows the relation between the Reynolds and Torque numbers opposed to the theoretical correlations and experiments, [Dennis et al., 1980, Sawatzki, 1970, Lamb, 1932, Banks, 1965]. The various colors are for different viscosities whereas each symbol

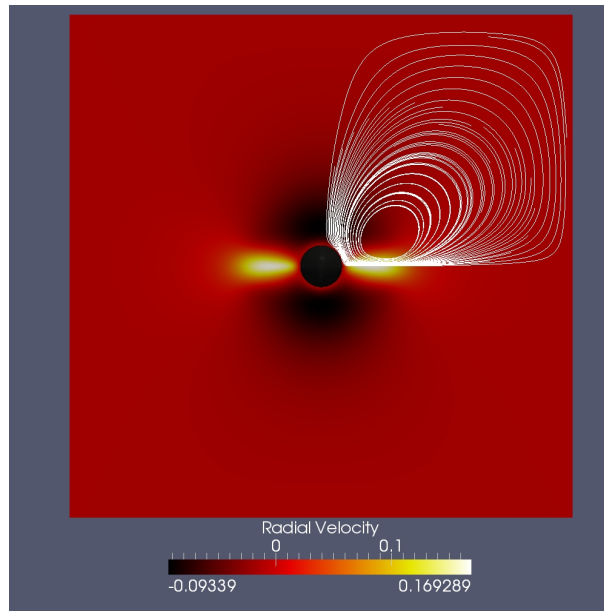


FIGURE IV.3 – Radial velocity magnitudes and streamlines in a slice for the case $\mu = 10^{-2} Pa.s$.

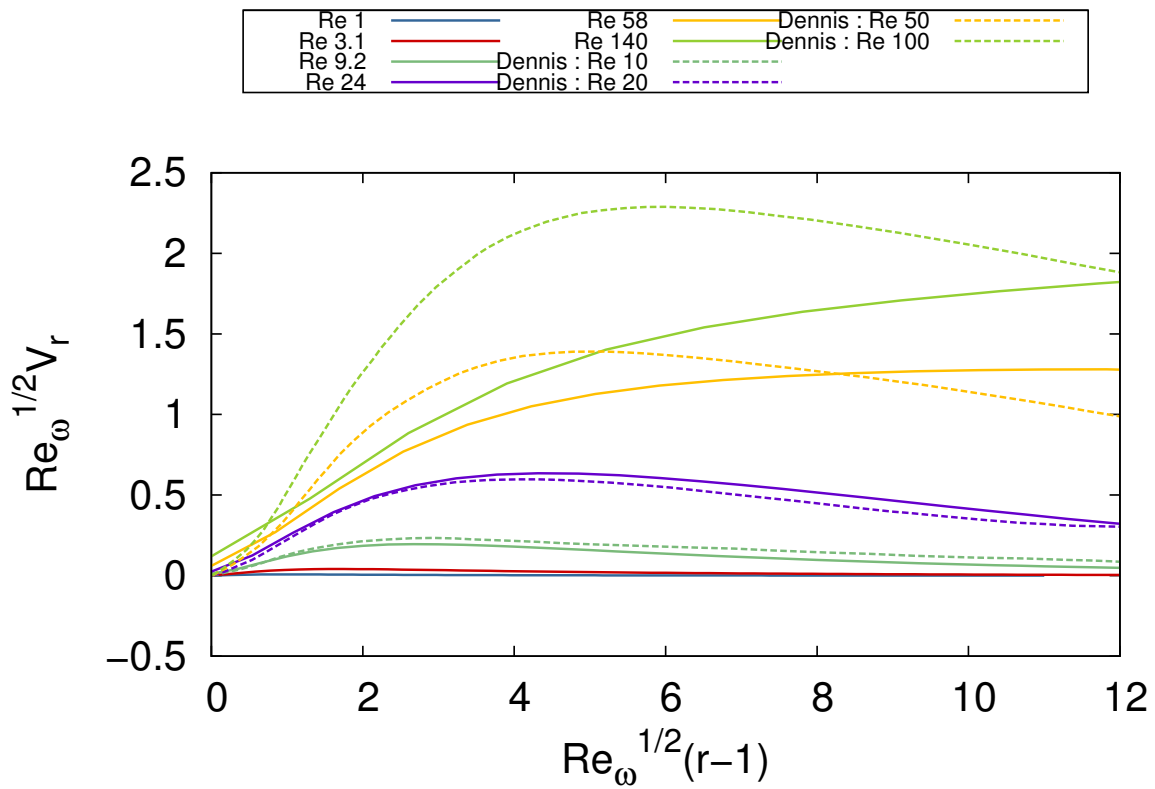


FIGURE IV.4 – Radial velocity at the meridian.

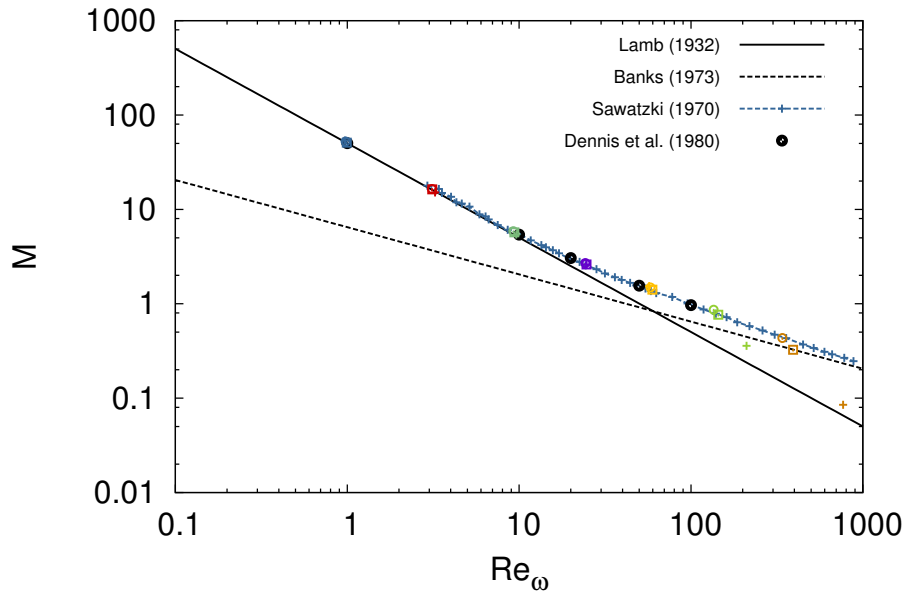


FIGURE IV.5 – Relation between the Reynolds number and the dimensionless torque. Lines correspond to references cited below. Symbols correspond to actual for different refinements (cross, circle and square for 10, 20 and 40 nodes per diameter). Colors are respectively for $\mu = 10^b$, $b = \{0, 0.5, \dots, 3\}$.

corresponds to a specific grid refinement. The numerical results show that for low Reynolds numbers the rotation is well represented on coarse and fine meshes while when the Reynolds number is important, a high grid resolution is necessary to obtain correct results. It has been demonstrated that the ITPM approach reproduces the rotation correctly for a wide range of angular Reynolds numbers. In the cases presented after, this Reynolds number will be in the range where the ITPM agrees with the physics, *i.e.* for $8 \leq N_d \leq 16$. The torque distributed inside the particle volume seems to be a correct solution for future implementations of rotational contributions such as the Coulomb forces.

IV.3 Etude des paramètres et modèles numériques dans le cas d'une particule bidimensionnelle dans un écoulement de Poiseuille

A particle surrounded by a shear flow is now considered. It is moved by the mean velocity and is rotated by the shear. This typical flow configuration is present in most of real particle flows. In the cases presented in chapters IV.1 and IV.2, the displacement and the rotation of the particle was induced by a volume force, namely gravity or torque. It is necessary to verify that the ITPM is able to reproduce also the surface forces induced by a flow on a particle. The chosen problem permits to validate the displacement and rotation induced by the fluid on the solid sphere.

This configuration presents three major advantages : the particle will be displaced and rotated by the flow, the case is well documented and some two-

dimensional solutions exist. This case was first studied by Segré and Silberberg [Segré and Silberberg, 1961, Segré and Silberberg, 1962a, Segré and Silberberg, 1962b]. They noticed that when a particle is placed in a tube submitted to a Poiseuille flow, the solid sphere reaches an equilibrium position after a certain time. This position was in their case 0.6 times the tube radius. This equilibrium position is associated to an angular velocity and a translation velocity along the axis of the tube. Many studies followed up the study made by Segré and Silberberg. The purpose being to understand the dependency of the equilibrium position on various parameters such as the Reynolds number or the density ratios. The influence of the pattern of the tube was also studied. Differences were noticed between circular tubes, squared tubes and a planar Poiseuille flow [Tachibana, 1973]. Matas [Matas et al., 2004] summarizes many of those cases in his introduction.

The motion of a particle in a Poiseuille flow is present in many domains : andrology [Douglas-Hamilton et al., 2005], chemical engineering [Karnis et al., 1966], aerodynamics, rheology [Han et al., 1999], which explains that it is very well documented. The configuration under consideration in two dimensions is the case proposed by [Inamuro et al., 2000] which was simulated by [Pan and Glowinski, 2002]. A two-dimensional particle is placed in a staggered flow. The domain is a square for which the bottom and floor boundaries are walls and the left and right boundaries are periodic. The Poiseuille flow is forced by a pressure gradient. The liquid and the particle densities are fixed and equal, $\rho_l = \rho_s = 1 \text{ kg.m}^{-3}$. The length of the box is the unity too, $L = 1 \text{ m}$. The particle radius is $R = L/8 = 0.125 \text{ m}$. The initial vertical position of the particle is $y = 0.4 \text{ m}$. The definition sketch describing this configuration is presented in figure IV.6 and in [Pan and Glowinski, 2002] concerning their first case of table I page 269. The liquid viscosity is $\mu_l = 3.250 \times 10^{-3} \text{ Pa.s}$ whereas the pressure difference Δp in the horizontal direction is chosen equal to $1.763 \times 10^{-3} \text{ Pa}$.

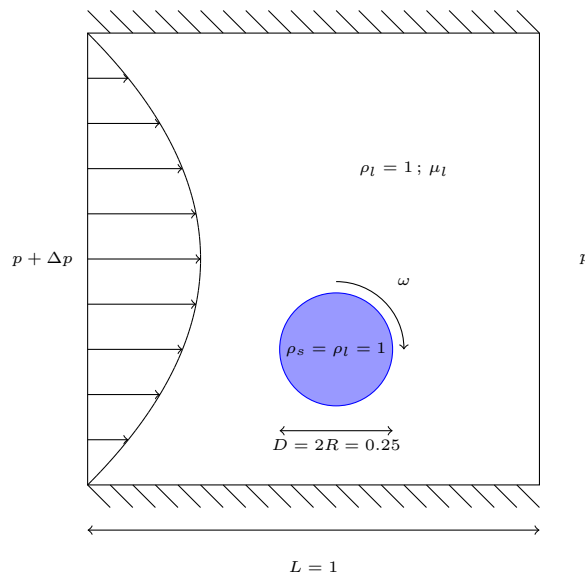


FIGURE IV.6 – Definition sketch of the Poiseuille flow corresponding to the first configuration of [Pan and Glowinski, 2002].

The different numerical viscous laws NVL1 to NVL4 are compared here in order to discriminate the best choice for future simulations. A comparison concerning the vertical position Y_p and

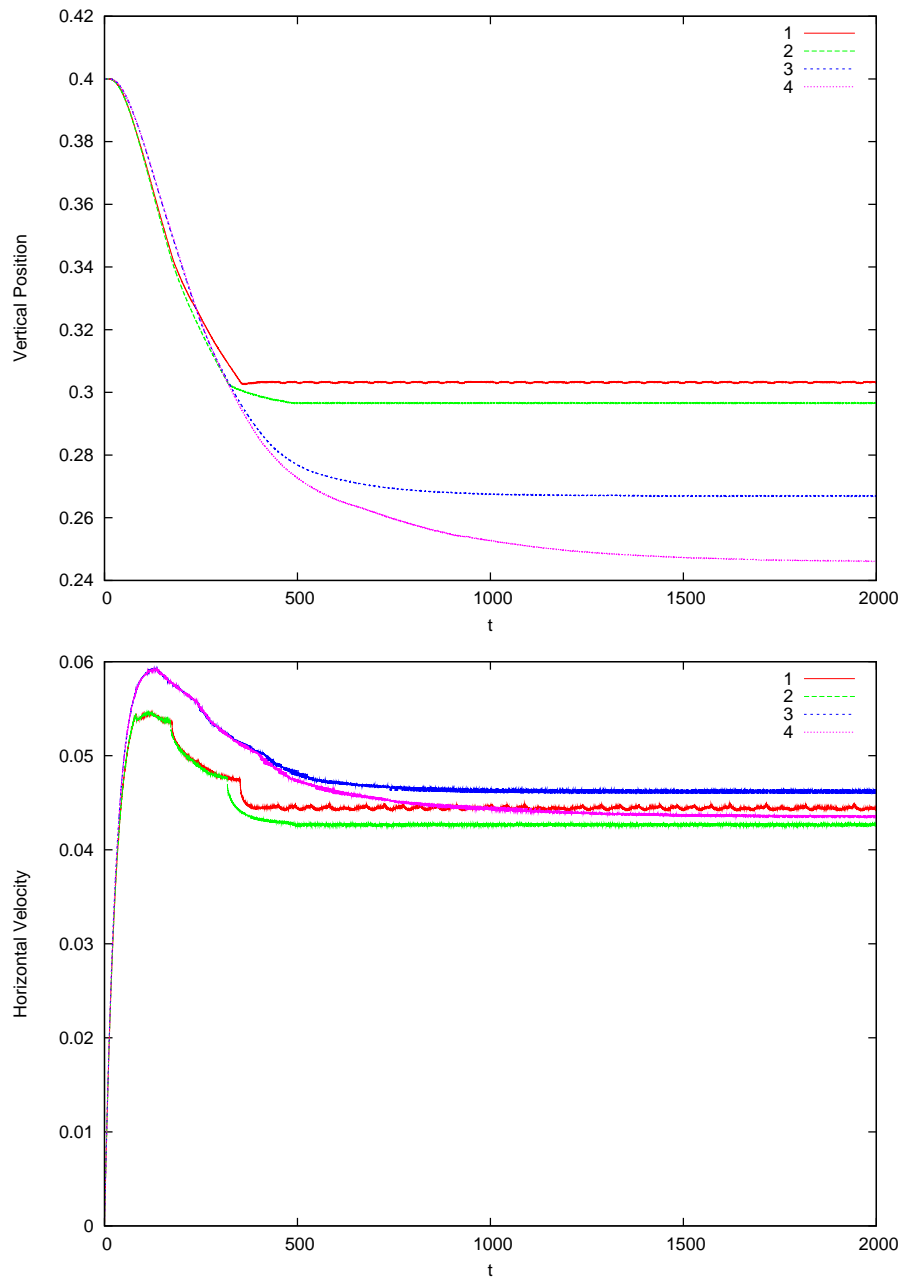


FIGURE IV.7 – Time evolution of the vertical position (top) and horizontal velocity component (bottom) of the particle for viscous laws *NVL1* (red line), *NVL2* (green line), *NVL3* (blue line) and *NVL4* (pink line).

horizontal velocity component U_p of the particle are presented in figure IV.7 after an equilibrium position is reached. The reference values obtained by [Inamuro et al., 2000] are $Y_p = 0.2745 m$ and $U_p = 0.04137 m.s^{-1}$ whereas results of [Pan and Glowinski, 2002] were $Y_p = 0.2732 m$ and $U_p = 0.04155 m.s^{-1}$. For $N_d = 25$, $\mu_s = 1 Pa.s$ and $\mathcal{K} = 100$, it can be observed that the discontinuous and arithmetic numerical viscous laws *NVL1* and *NVL2* involve asymptotic values for $Y_p \approx 0.3m$ and $0.044 \leq U_p \leq 0.045 m.s^{-1}$, which is not correct. Moreover, when the particle crosses a grid cell, a discontinuity is observed in the velocity for these numerical viscous laws. In addition, discontinuities are observed on the velocity history which is not a physical behavior. The two other numerical viscous laws does not produce velocity discontinuities, $Y_p = 0.27m$ being better with *NVL3* while $U_p = 0.043 m.s^{-1}$ is better with *NVL4*. In the rest of the article, we have chosen to use *NVL3*. Concerning space convergence orders, a Richardson analysis have been investigated as in the previous sections. Orders 1.83, 1.83 and 1.64 have been obtained respectively for translation velocity, vertical position and rotation velocity of the particle. A time step sensitivity study is also provided concerning Y_p after a stabilized regime is reached. The CFL number based on the constant space step and reference particle velocity is investigated. Results are proposed in figure IV.8. It can be concluded that the ITPM approach is weakly dependent on the choice of the time step as soon as the CFL number is lower than 0.5.

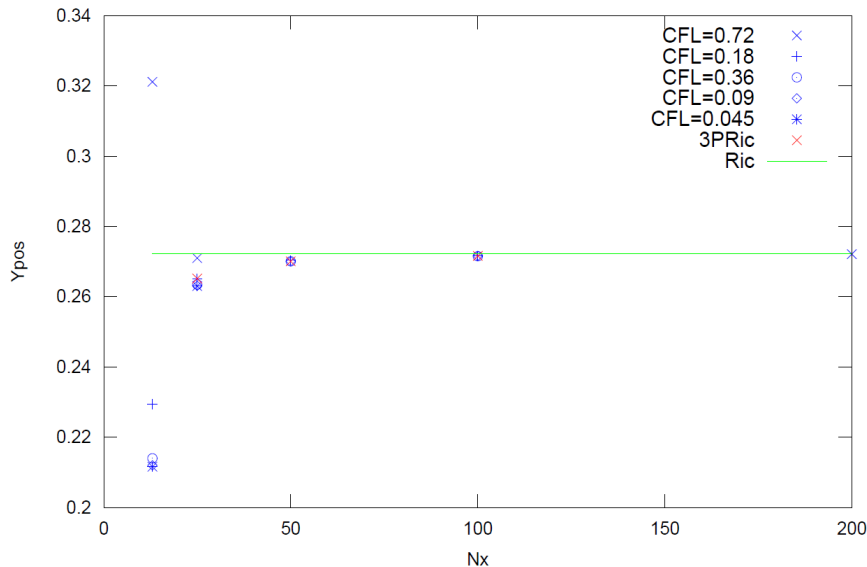


FIGURE IV.8 – Time evolution of the vertical position of the particle for various CFL numbers. The asymptotic numerical values 3PRic and Ric stands for extrapolation of Y_p through the Richardson theory [Richardson and Zaki, 1954] on 3 points (3PRic) and 4 points (Ric).

IV.4 Besoins numériques

L'ensemble des validations numériques nous a permis de déterminer que les différents phénomènes sont bien reproduits avec seulement 8 mailles par diamètre.

Cette contrainte numérique est semblable à celle obtenue pour la méthode IBM [Uhlmann, 2005, Lucci et al., 2010] et aussi pour la méthode LB [Gao et al., 2011].

Ces contraintes numériques sont une limitation dans la définition de nos simulations. Dans le chapitre suivant on va s'intéresser à l'établissement de ces cas.

Développement et adaptation d'une méthode de collisions pour des particules de taille finie

Dans toutes les méthodes abordées au chapitre II, on résout l'écoulement particulaire sans modèle de trajectoires. Comme le prescrivent [Glowinski et al., 1999] ces méthodes doivent intégrer des modèles de collision afin de représenter la physique des interactions directes entre particules. La méthode VoFLag intègre un algorithme de recherche de collision qui permet de détecter l'interpénétration des particules et de restituer physiquement les collisions. Pour des fractions solides dépassant 1%, les collisions peuvent jouer un rôle important dans la dynamique de la suspension, que cela soit dans la modification de la turbulence, mais surtout dans les différentes grandeurs statistiques observables. Ceci rend le choix du modèle de collision essentiel pour notre étude.

Afin de limiter la taille du maillage, il est indispensable d'intégrer dans ces modèles des lois de collision qui prennent en compte les forces hydrodynamiques dans le régime de lubrification. En effet, pour nos simulations on veut garder un raffinement de maillage égal à 12 mailles par diamètre, ce qui est insuffisant pour mailler et donc résoudre ces échelles hydrodynamiques. Dans la figure V.1, on montre l'écoulement dans une couche de lubrification bidimensionnelle obtenue à l'aide de Thétis . Pour réaliser une simulation équivalente en 3D il faudrait 10^6 mailles juste autour du point de contact. C'est donc absolument inabordable pour des simulations avec des centaines de particules.

Dans la suite, nous présentons un modèle multicouches qui permet de prendre en compte simultanément des collisions solides et les effets de la lubrification non résolus par le maillage utilisé lors de la résolution des équations de Navier-Stokes.

Cette méthode est présentée dans l'article [Brändle de Motta et al., 2013] qui est donné en annexe.

V.1 Collision de particules dans un fluide visqueux

Quand deux corps solides se rapprochent librement dans un fluide visqueux quatre mécanismes d'interaction se succèdent.

Tout d'abord une interaction à longue distance a lieu. Elle est associée à la modification de l'écoulement par la présence des particules. Cette interaction est sensible sur des distances de l'ordre de plusieurs fois la taille des objets. Un exemple de cette interaction longue distance est mise en évidence dans le phénomène de *drafting, kissing and tumbling* expliqué dans

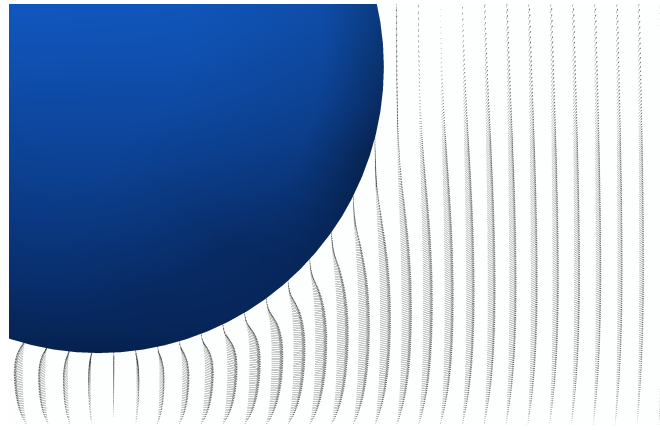


FIGURE V.1 – Champ de vecteur vitesse hautement résolu lors d’une collision particule-paroi. (150 mailles par diamètre de particules et 40 mailles dans le film fluide.)

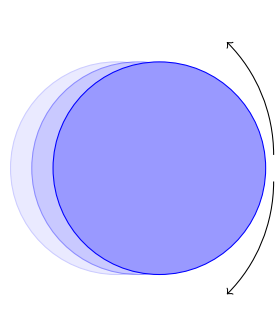


FIGURE V.2 – Illustration de l’origine de la force de lubrification dans le cas d’une collision particule-paroi.

[Fortes et al., 1987]. Dans cette séquence d’interactions le sillage d’une particule affecte la trajectoire de la deuxième. Ces interactions sont capturées par la résolution des équations de Navier-Stokes autour des objets en mouvement. L’intérêt d’utiliser une méthode de résolution directe pour la résolution de l’écoulement est de ne pas introduire d’approximation quant à ces interactions à longue distance.

Quand la distance entre les interfaces solides devient suffisamment petite, de l’ordre d’un quart du rayon de la particule, un autre mécanisme rentre en jeu. Le nombre de Reynolds basé sur l’épaisseur du film et la vitesse de collision devient petit et les effets de lubrification augmentent considérablement. Cette augmentation est due aux forces hydrodynamiques nécessaires pour évacuer le fluide de l’espace interparticulaire. La figure V.2 illustre ce principe. Les forces issues de ces interactions peuvent être approchées par des solutions analytiques, [Brenner, 1961, Crowe et al., 1998]. Ces lois seront détaillées dans ce chapitre car elles sont à la base de notre méthode.

Avant que la collision solide n’ait lieu, plusieurs phénomènes entrent en jeu. Dans le cas particulier (théorique) de surfaces parfaitement lisses, la théorie de la lubrification pour les écoulements à petit Reynolds prédit que le contact ne peut avoir lieu. En effet, la force de répulsion hydrodynamique (drainage du film liquide) diverge lorsque l’épaisseur du film liquide tend vers zéro. En pratique, les surfaces ne sont pas complètement lisses et lorsque l’échelle caractéristique de la rugosité

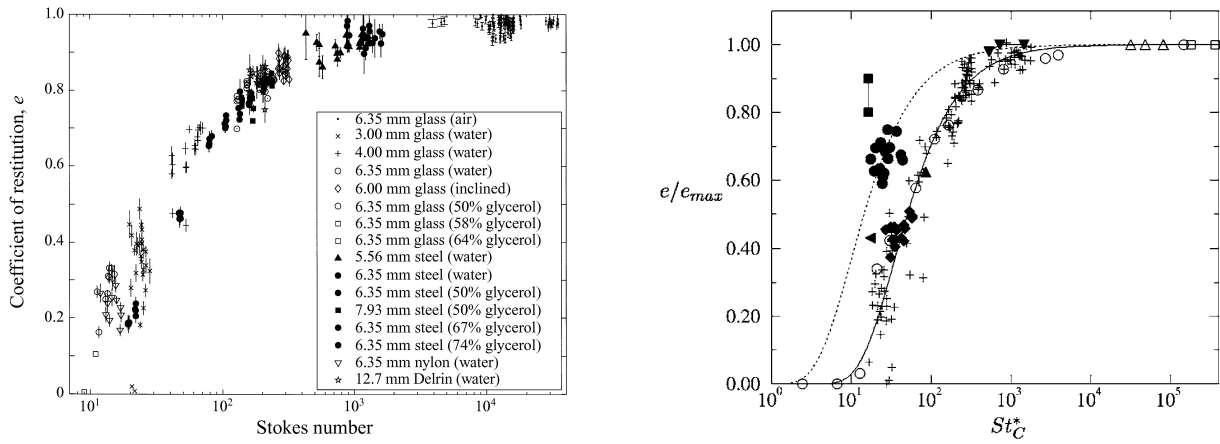


FIGURE V.3 – À gauche, expériences de [Joseph et al., 2001]. À droite, expériences de [Legendre et al., 2005] sur des gouttes confrontées à la loi $\frac{e}{e_d} = \exp\left(-\frac{35}{St}\right)$ en trait continu.

est de l'ordre de grandeur de la distance entre les surfaces moyennes, le contact physique peut avoir lieu [Davis, 1992]. Une autre hypothèse qui ne se vérifie plus quand la distance entre les surfaces devient petite est l'hypothèse de milieu continu. Les équations de Navier-Stokes (ou de Stokes) doivent être remplacées par une approche qui tient compte de la physique des milieux raréfiés. Des simulations basées sur la Dynamique Moléculaire [Sundararajakumar and Koch, 1996] ont permis de montrer que la force de traînée ne diverge plus mais sature quand la distance inter-surface tend vers zéro. Ceci conduit à un contact en un temps fini. Dans tous les cas, le contact solide est précédé par une forte augmentation de la pression du fluide. Cette forte augmentation des efforts normaux peut engendrer des déformations locales des solides que l'on peut alors considérer comme une étape de pré-contact. Ces déformations dépendent de la nature des solides et du fluide.

Finalement, les particules se déforment. Cette déformation est due soit à l'augmentation de la pression du fluide dans le film liquide, [Davis et al., 1986, Barnocky and Davis, 1989], soit au contact solide. On appelle cette phase la collision solide. Durant cette étape les particules restituent une partie de l'énergie et rebondissent. L'énergie perdue durant la collision solide dépend des matériaux composant les particules. Cette énergie peut être quantifiée à l'aide du coefficient de restitution solide, e_d . Il est défini comme le rapport entre les vitesses après et avant le choc. Un coefficient de restitution proche de l'unité représente une collision élastique.

On peut définir un coefficient de restitution effectif pour une collision dans un fluide visqueux, e . Ce coefficient ne prend en compte que l'effet de la lubrification lors de la collision [Joseph et al., 2001, Gondret et al., 2002, Yang and Hunt, 2006]. La figure V.3 présente la synthèse de différentes expériences des choc particule-paroi. L'évolution de ce coefficient de rebond effectif est fonction du nombre de Stokes d'impact, $St = \frac{2}{9} \frac{Ru\rho_p}{\mu}$. u est la vitesse normale avant collision, R le rayon de la particule, ρ_p la masse volumique du solide et μ la viscosité du fluide. [Davis et al., 1986] avait déjà proposé ce nombre pour caractériser les collisions.

Comme on peut le voir dans la figure V.3, [Legendre et al., 2005] propose la corrélation $\frac{e}{e_d} = \exp\left(-\frac{35}{St}\right)$, qui est en bon accord avec les résultats expérimentaux. La même corrélation peut être utilisée pour des collisions particule-particule avec une définition adaptée du nombre de Stokes, [Yang and Hunt, 2006].

Par la suite, on va préciser comment notre modèle intègre les différents mécanismes afin de

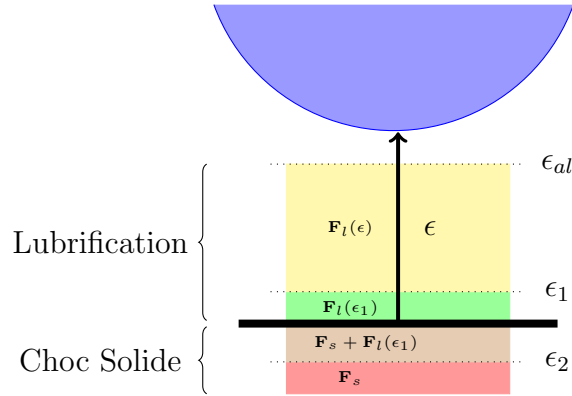


FIGURE V.4 – Différentes zones pour la force de collision.

pouvoir reproduire ces phénomènes numériquement.

V.2 Description de la méthode

Dans la méthode que nous proposons, les différents étapes existantes lors d'une collision vont être introduites en terme de forces exercées sur les particules. Les différentes distances d'activation de ces forces sont présentées dans la figure V.4. Les distances sont adimensionnées par le rayon de la particule, ϵR étant la distance particule-particule ou particule-paroi. Cette méthode est inspirée de celle proposée par [Breugem, 2010b].

Tout d'abord la particule est soumise aux interactions longue distance. Les forces mises en jeu sont prédites par la méthode de résolution des équations de Navier-Stokes. Ensuite, les interactions hydrodynamiques à courte distance prennent de l'importance et donnent lieu à une force de lubrification, F_l . Cette force est utilisée au delà d'une distance d'activation ϵ_{al} . Dans la zone de pre-contact la divergence de la force de lubrification est bloquée et on permet le recouvrement, soit pour $\epsilon_1 < \epsilon < \epsilon_2$. Finalement, au lieu de déformer les particules on admet un léger recouvrement similaire au modèle de sphères molles. Pendant que les particules se recouvrent, une force de répulsion, F_s est activée.

Chacune de ces forces va être explicitée dans les paragraphes suivants. Ensuite, on expliquera l'intégration de cette méthode dans le code.

V.3 Collision solide-solide

Les chocs entre particules solides ont été traités par de nombreux auteurs pour des écoulements de milieux granulaires, par exemple [Lacaze et al., 2008]. Dans le cadre d'un rebond sans fluide visqueux, le paramètre le plus important est le coefficient de restitution à vide, e_d . Il s'agit du rapport entre la vitesse après rebond et celle avant rebond.

Durant un rebond, les particules se déforment et restituent une partie de l'énergie cinétique incidente. Il est impossible d'utiliser les forces réelles subies par des solides déformables car cela impliquerait des pas de temps de l'ordre de 10^{-9} s. La méthode la plus répandue est d'autoriser un certain recouvrement entre les solides. Le temps durant lequel le recouvrement a lieu, associé au temps du choc, est alors largement supérieur au temps physique du choc, [Crowe et al., 1998]. Un des résultats observés par [Lacaze et al., 2008] lors de la simulation pour des écoulements

granulaires, est que, sous la condition que le temps du choc soit négligeable par rapport aux temps caractéristiques de l'écoulement granulaire, il est possible d'utiliser ces modèles sans affecter le résultat global. Notre méthode se base sur l'hypothèse que la durée du choc reste petite devant le temps caractéristique de l'écoulement.

On introduit une force ressort-amortisseur qui permet de reproduire le coefficient de restitution caractéristique des matériaux. L'équation V.1 donne la forme de cette force.

$$F_s = -\frac{m_e (\pi^2 + [\log e_d]^2)}{[N_c \Delta t]^2} R \epsilon - \frac{2m_e [\log e_d]}{[N_c \Delta t]} R \dot{\epsilon} \quad (\text{V.1})$$

La force dépend du coefficient de restitution, e_d , et de la masse réduite des particules, qui vaut $m_e = (m_1^{-1} + m_2^{-1})^{-1}$ quand il s'agit d'un choc entre deux particules et qui vaut la masse de la particule quand il s'agit d'un choc particule-paroi.

Cette force reproduit un choc dont le coefficient de restitution et la durée sont donnés. La durée est déterminée par N_c itérations en temps. Pour bien reproduire la physique il faut utiliser une durée de choc suffisamment petite. Il faut donc utiliser un minimum d'itérations afin d'assurer un découplage temporel entre le choc et l'écoulement. D'autre part, des tests numériques réalisés durant la thèse ont montré que pour moins de 8 itérations cette force ne reproduit pas le bon coefficient de restitution. Le choix $N_c = 8$ est donc retenu car c'est le minimum d'itérations nécessaires pour reproduire la bonne vitesse après choc.

V.4 La force de lubrification

Grâce aux travaux analytiques réalisés par Brenner, [Brenner, 1961, Cooley and O'Neil, 1969], on peut exprimer analytiquement la force exercée par un fluide sur une particule sphérique se déplaçant au voisinage d'une surface plane. Cette force est la force de lubrification. Dans le cinquième chapitre de [Crowe et al., 1998] on peut trouver aussi une expression au premier ordre de cette force. L'équation V.2 donne une forme générale de cette force dépendant de la vitesse normale, \mathbf{u}_n , et de la distance adimensionnée. Dans le cas d'une collision particule-particule \mathbf{u}_n est la projection sur l'axe qui relie les deux centres de la vitesse de la particule dans le référentiel relatif (référentiel barycentrique). Cette force dépend de la viscosité du fluide, μ_f , et du rayon de la particule, R . On voit qu'il s'agit d'une correction $\lambda(\epsilon)$ de la traînée de Stokes valable en milieu infini sur une particule isolée. Dans tous les cas, il s'agit d'une force qui agit comme un amortisseur. L'expression de (V.2) dépend de la configuration géométrique : pour une collision entre deux particules λ est donné par l'équation (V.3), pour une collision entre une particule et une paroi cette fonction est définie par (V.4).

$$F_l(\epsilon, u_n) = -6\pi\mu_f R u_n [\lambda(\epsilon) - \lambda(\epsilon_{al})] \quad (\text{V.2})$$

$$\lambda_{pp} = \frac{1}{2\epsilon} - \frac{9}{20} \log(\epsilon) - \frac{3}{56} \epsilon \log(\epsilon) + 1.346 + \mathcal{O}(\epsilon) \quad (\text{V.3})$$

$$\lambda_{pw} = \frac{1}{\epsilon} - \frac{1}{5} \log(\epsilon) - \frac{1}{21} \epsilon \log(\epsilon) + 0.9713 + \mathcal{O}(\epsilon) \quad (\text{V.4})$$

À partir de la distance d'activation $\epsilon = \epsilon_{al}$, la force de lubrification est utilisée. Il est essentiel de déterminer cette distance d'activation. Elle est activée sur des distances plus petites que les cellules du maillage car le modèle de lubrification vient remplacer la couche fluide qui n'est pas résolue. On propose ici $\epsilon_{al} = 0.75 \frac{\Delta x}{R}$.

Cette force tend vers l'infini quand ϵ tend vers zéro. La force est bloquée à $\epsilon_1 = 10^{-3}$ et reste constante jusqu'à $\epsilon_2 = -10^{-2}$.

Afin de déterminer les valeurs optimales de ces paramètres, une étude paramétrique extensive a été réalisée à l'aide du code monodimensionnel (voir section V.5). Le but est de comparer nos résultats avec la corrélation proposée par Legendre [Legendre et al., 2005], $\frac{e}{e_d} = \exp\left(-\frac{35}{St}\right)$. Les conclusions suivantes ont été obtenues :

- La valeur de ϵ_{al} ne joue pas un rôle déterminant sur la valeur du coefficient de restitution.
- Pour $\epsilon_1 < 10^{-4}$, on n'obtient pas une solution physique.
- Tout étant égal par ailleurs, augmenter ϵ_1 augmente le coefficient de restitution. Ceci est clair dans la figure V.5, qui montre une série de calculs avec différents ϵ_1 .
- Le paramètre ϵ_2 ne modifie pas le coefficient de restitution. En effet, quand le recouvrement survient la vitesse de la particule diminue, et c'est la force solide qui prédomine. (voire figure V.6).

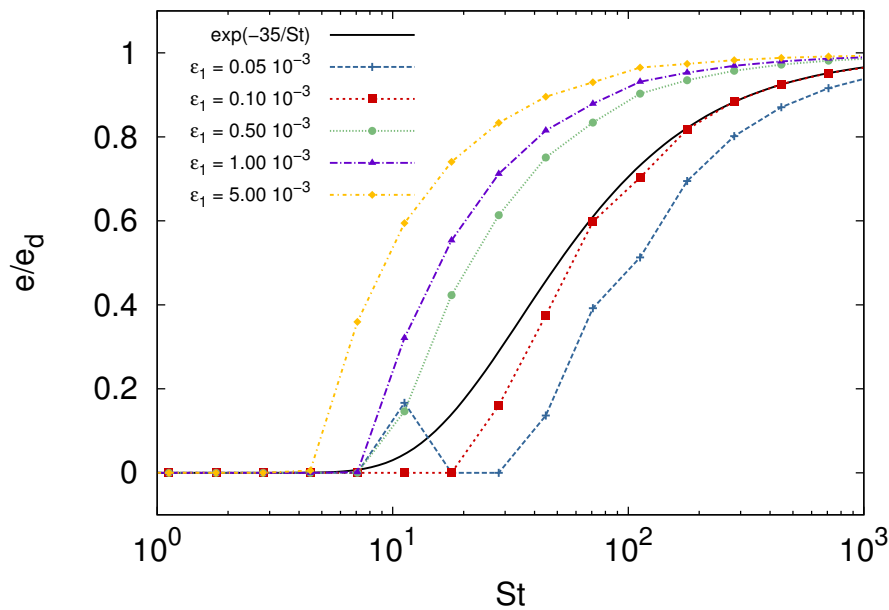


FIGURE V.5 – Influence du paramètre de blocage de la lubrification ϵ_1 sur le coefficient de restitution. ($N_c = 8$, $e_d = 0.97$, $\epsilon_{al} = 0.25$ et $\epsilon_2 = -1 \cdot 10^{-2}$).

V.5 Implémentation de la méthode

Comme on l'a exposé lors de la présentation de la méthode de résolution VoFLag, la force issue de l'algorithme de recherche de collisions est estimée *a priori*. Pour estimer les forces on prédit la position des particules au demi pas de temps de sorte à augmenter l'ordre de la méthode. Ensuite, on distribue la force dans le volume de la particule sur le maillage de calcul des équations de Navier-Stokes. Cette prédiction de la force ainsi que son implémentation sont les principales différences entre notre approche et celle de [Breugem, 2010b] sur laquelle on s'est basé. Dans leur implémentation, la force calculée est définie au temps n et est utilisée pour l'équation de Newton qui régit le mouvement de chaque particule.

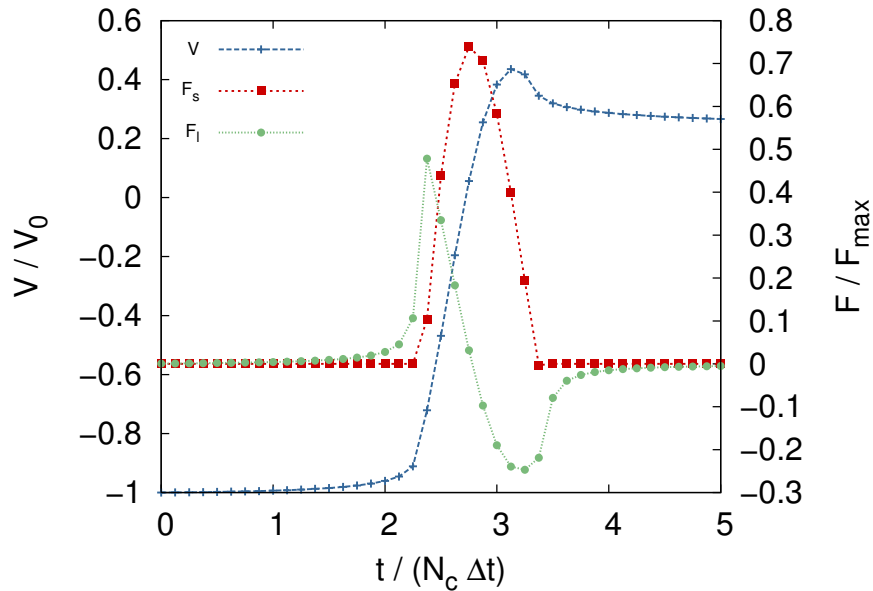


FIGURE V.6 – Comparaison des forces durant une collision. Les paramètres de la simulation sont : $St = 18$, $\epsilon_{al} = 0.12$, $N_c = 8$, $\epsilon_1 = 10^{-3}$ et $\epsilon_2 = -10^{-2}$. On obtient $\frac{e}{e_d} = 0.24$.

Si on néglige l'effet de la viscosité du fluide entourant les particules, on obtient alors une modélisation granulaire unidimensionnelle selon le schéma suivant :

$$\begin{array}{c}
 \downarrow \\
 \left\{ \begin{array}{l} \tilde{\mathbf{X}}_i^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{X}_i^n + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{V}_i^n t \\ \tilde{\mathbf{V}}_i^{n+\frac{1}{2}} = \frac{3}{2} \mathbf{V}_i^n - \frac{1}{2} \mathbf{V}_i^{n-1} \end{array} \right. \quad (V.5) \\
 \downarrow \\
 \mathbf{V}_i^{n+1} = \mathbf{V}_i^n + \Delta t \left(\frac{1}{m_i} \sum_{j \neq i}^{N_p} \mathbf{F} \left(\tilde{\mathbf{X}}_i^{n+\frac{1}{2}}, \tilde{\mathbf{X}}_j^{n+\frac{1}{2}}, \tilde{\mathbf{V}}_i^{n+\frac{1}{2}}, \tilde{\mathbf{V}}_j^{n+\frac{1}{2}} \right) + \mathbf{g} \right) \quad (V.6) \\
 \downarrow \\
 \mathbf{X}_i^{n+1} = \mathbf{X}_i^n + \Delta t \left(\frac{\mathbf{V}_i^{n+1} + \mathbf{V}_i^n}{2} \right) \quad (V.7) \\
 \downarrow
 \end{array}$$

Une fois le champ fluide et solide résolu grâce aux équations de Navier-Stokes, on fait une prédiction sur la position et la vitesse des particules au pas de temps $\frac{1}{2}$ (équations (V.5)). Celle-ci sert à évaluer la force d'interaction entre deux particules \mathbf{F} . Ensuite, nous résolvons l'équation de Newton pour chaque particule, (V.6). Finalement, on actualise la position des particules de façon lagrangienne, (V.7).

Le fait d'estimer la force avec une prédiction (V.5), permet de ne pas faire dépendre le coefficient de restitution de la position de la particule lors de l'activation de la force. En effet, si on utilise la force avec les positions à l'itération précédente on va avoir des solutions différentes selon le positionnement initial des particules. En plus, cela nous permet d'avoir un pas de temps moins content en terme de CFL, $\Delta t < 0.2 \frac{\epsilon_{al} R}{V_0}$.

Dans le code multiphasique, l'étape de résolution de l'équation de Newton (V.6) est remplacée par la résolution des équations de Navier-Stokes incompressibles. La force d'interaction entre particules est distribuée dans le volume interne des particules. On obtient alors un champ de vitesse global pour les particules et le fluide. Afin d'obtenir la vitesse des particules pour l'étape V.7, on calcule, par interpolation du champ fluide, la vitesse des particules.

V.6 Validations

En complément de l'utilisation du code monodimensionnel ((V.5), (V.6) et (V.7)), nous avons réalisé des simulations avec cette méthode intégrée dans la méthode VoFLag. Dans tous les cas le domaine est étendu pour ne pas influencer le coefficient de restitution.

Les cas suivantes sont répertoriés dans la figure V.7 et sont comparés à la corrélation de Legendre $\frac{e}{e_d} = \exp\left(-\frac{35}{St}\right)$:

- Une particule bidimensionnelle sans gravité ayant une vitesse initiale en direction d'une paroi. Les caractéristiques du fluide sont, $\rho_f = 1000 \text{ kg m}^{-3}$ et $\mu_f = 3.82 \cdot 10^{-3} \text{ Pa s}$. On considère des particules de rayon $R = 0.003 \text{ m}$ en acier, $\rho_s = 7780 \text{ kg m}^{-3}$. La vitesse initiale varie de sorte à parcourir différentes valeurs du nombre de Stokes à l'impact. Ces cas sont représentés dans la figure par des triangles violets.
- Une série tridimensionnelle avec les mêmes paramètres que le précédent est représentée par des losanges jaunes.
- Le cas traité par [Breugem, 2010b] a été aussi simulé. Dans ce cas la gravité fait tomber une particule bidimensionnelle $g = 9.8 \text{ m s}^{-2}$. Le fluide considéré est caractérisé par $\rho_f = 953 \text{ kg m}^{-3}$ et $\mu_f = 2.00 \cdot 10^{-3} \text{ Pa s}$. La densité des particules vaut, $\rho_s = 7795 \text{ kg m}^{-3}$. Cette fois, le rayon des particules change de sorte à faire varier le nombre de Stokes. Ces cas sont représentés par des cercles verts, et les résultats de [Breugem, 2010b] par des carrés rouges. On voit que dans tous les cas on approche la corrélation de Legendre de façon très satisfaisante.

V.7 Conclusion

La méthode proposée ici pour permettre de simuler des écoulements relativement denses puisque les collisions sont traitées de façon adéquate pour diverses configurations d'impact. On a montré que la lubrification est le facteur prépondérant pour la restitution de la vitesse.

Néanmoins, il faut signaler que notre méthode ne s'est pas avérée efficace pour des collisions triples. De plus, la rotation et les forces tangencielles n'ont pas été prises en compte durant les collisions. Pour ce dernier point Breugem [Breugem, 2010b] propose une approche similaire pour le traitement de la force de lubrification tangentielle. Cette force est toujours basé sur le développement analytique de l'équation de Stokes [Dance and Maxey, 2003]. Une approche similaire est donnée dans [Rosa et al., 2011]. En ce qui concerne le couple exercé par la collision solide il faut tenir en compte le coefficient de Coulomb statique et dynamique ce qui permet de calculer la friction entre les solides, [Lacaze et al., 2008].

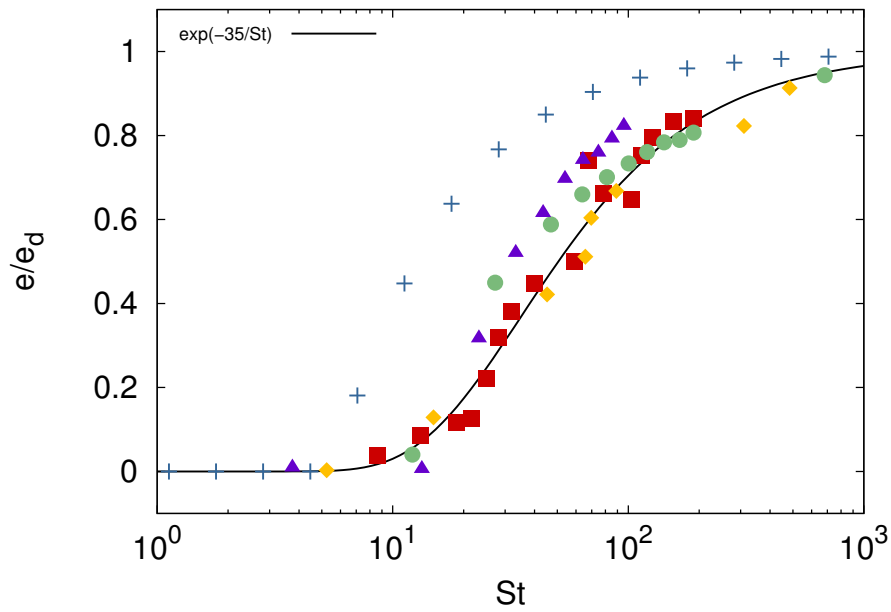


FIGURE V.7 – Validation du modèle sur différentes configurations. Croix bleu : code 1D avec paramètres retenus; Carré rouge : Résultats obtenus par [Breugem, 2010b]; Cercle vert : Résultats obtenus avec Thétis pour le cas de [Breugem, 2010b]; Triangle violet : Cas bidimensionnel; Losange jaune : cas tridimensionnel.

Simulation des écoulements turbulents avec des particules de taille finie

Chapitre VI

Description des simulations réalisées

VI.1 Rappels sur la turbulence

Une des premières études systématiques de la turbulence fut celle de Reynolds. Il étudia le passage des régimes laminaires aux régimes turbulents dans le cas d'un écoulement dans une conduite [Reynolds, 1883]. Cette étude permet de prévoir ce passage pour n'importe quel fluide et n'importe quel conduit à partir du nombre adimensionnel de Reynolds qui compare les effets des termes d'inertie par rapport aux termes visqueux. Néanmoins cette étude ne permet pas d'établir une compréhension complète de la turbulence.

L'un des plus importants avancements dans la compréhension de la turbulence est la prise en compte d'une cascade énergétique. Cette cascade fut initialement proposée par Richardson [Richardson, 1922] : « big whirls have little whirls that feed on their velocity, and a little whirls have lesser whirls and so on to viscosity – in the molecular sense » . Les grands tourbillons étant instables, ils se décomposent en plus petits, et ainsi de suite, jusqu'à leur dissipation par la viscosité moléculaire. Cette cascade donne naissance à des tourbillons de toutes tailles.

Cette cascade est en 1941 mise en équation dans le travail de Kolmogorov, [Kolmogorov, 1941]. Ses travaux forment l'avancée la plus importante en ce qui concerne la modélisation de la turbulence. Il établit des comportements universels et quantifiables à travers une analyse dimensionnelle. Bien que certaines hypothèses soient nécessaires, l'actuel paradigme en turbulence est issu de ses travaux.

Dans les écoulements turbulents, la turbulence est créée par un écoulement moyen. Cette écoulement moyen donne naissance à des grands tourbillons qui vont s'étirer et donner naissance à des tourbillons plus petits. Les grands tourbillons peuvent avoir des directions privilégiés. C'est le cas par exemple de la turbulence atmosphérique qui montre une anisotropie dans l'axe vertical, ou la turbulence en canal qui montre aussi des anisotropies près des parois. Toutefois, quand on descend dans la cascade énergétique, et qu'on s'intéresse aux plus petites échelles, les directions deviennent équivalentes et l'on obtient une turbulence isotrope. Dans cette thèse on s'intéresse à la turbulence isotrope qui est représentative des écoulements turbulents les plus simples. De plus, on considère le cas homogène où toute point du domaine est équivalent à un autre. On appelle ce type d'écoulement, Turbulence Homogène et Isotrope, THI.

VI.1.1 Transfert et dissipation de l'énergie

D'un point de vue spectral, on peut mettre en évidence trois zones pour les transferts d'énergie cinétique dans un cas de THI. Tout d'abord les grands tourbillons sont produits par l'écoulement

moyen. Ces grands tourbillons ont une grande énergie cinétique. Ensuite, ces tourbillons se décomposent en tourbillons de plus en plus petits dans un processus principalement non visqueux. Finalement, l'agitation moléculaire dissipe ces tourbillons aux petites échelles.

Ce processus se retranscrit dans le spectre d'énergie, $E(k)$. Le spectre montre la densité spectrale d'énergie présente dans l'écoulement pour chaque nombre d'onde. Dans la figure VI.1 on présente un spectre « type » de la THI. Pour les petits nombres d'onde (i.e. pour les grands tourbillons) l'énergie est très grande. Ensuite, l'énergie diminue en loi puissance pendant plusieurs nombres d'onde. Le transfert d'énergie se fait ainsi vers les petits nombres d'onde. Puis l'énergie est dissipée en forme de chaleur. L'échelle spatiale de cette dissipation est appelée échelle de Kolmogorov.

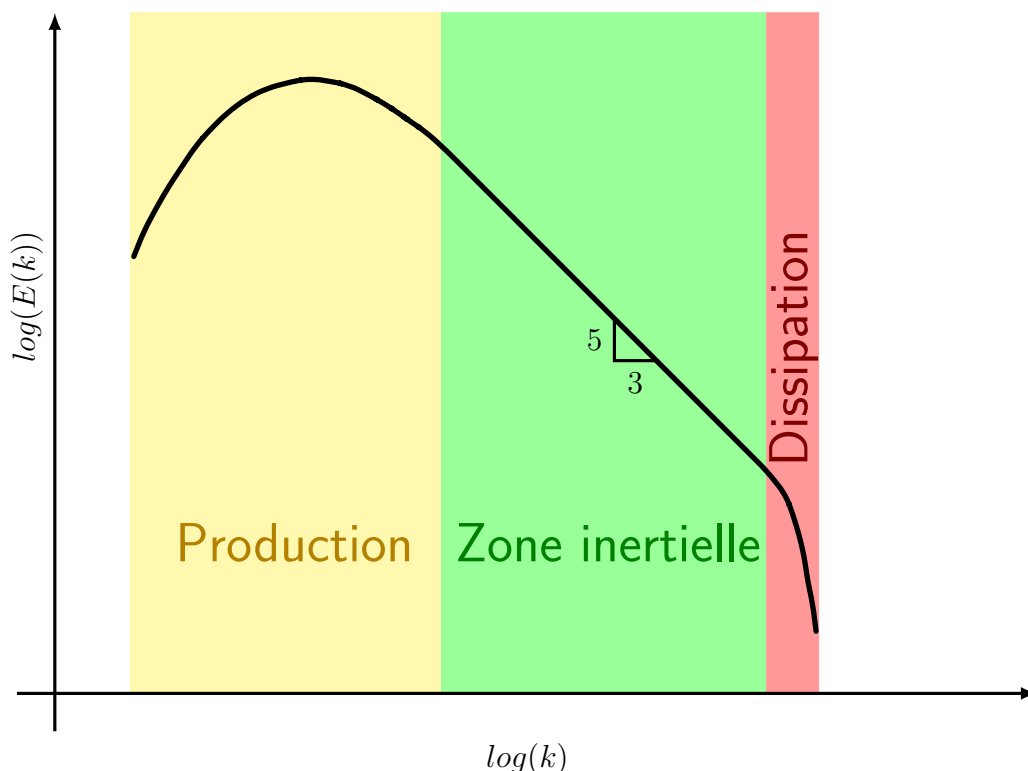


FIGURE VI.1 – Spectre spatial de la turbulence.

Echelle de Kolmogorov

La cascade énergétique se développe jusqu'à la dissipation moléculaire à l'échelle spatiale de Kolmogorov η_K . Celle-ci est de l'ordre de grandeur des plus petits tourbillons présents dans l'écoulement. On associe à cette échelle spatiale l'échelle de vitesse u_K , et le temps τ_K avec la relation $u_K = \frac{\eta_K}{\tau_K}$.

Pour ces échelles les différents termes de l'équation de quantité de mouvement peuvent être négligés. Seuls la variation temporelle de vitesse, $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \sim \frac{u_K}{\tau_K}$, et le terme visqueux, $\nu \nabla \cdot ((\nabla \mathbf{u} + \nabla^t \mathbf{u})) \sim \nu \frac{u_K}{\eta_K^2}$, restent. Cela implique l'approximation suivante :

$$\frac{u_K \eta_K}{\nu} \sim 1 \quad (\text{VI.1})$$

L'énergie dissipée localement est estimée à l'aide de la fonction de dissipation visqueuse, ϵ .

$$\epsilon = \frac{\nu}{2} \left\langle \sum_{i,j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 \right\rangle \quad (\text{VI.2})$$

Dans le cas d'une THI, la dissipation peut s'exprimer sous la forme, [Chassaing, 2000] :

$$\epsilon = \nu \left\langle \sum_{i,j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right\rangle \quad (\text{VI.3})$$

Cette énergie dissipée est approximée pour ces petites échelles par $\epsilon \sim \nu \frac{u_K^2}{\eta_K} \sim \frac{\nu^3}{\eta_K^4}$.

De fait, les différentes échelles de Kolmogorov sont définies à l'aide de la viscosité et de la dissipation visqueuse :

$$\eta_K = \frac{\nu^{\frac{3}{4}}}{\epsilon^{\frac{1}{4}}} \quad (\text{VI.4})$$

$$\tau_K = \left(\frac{\nu}{\epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{VI.5})$$

VI.1.2 Approche corrélatrice de la turbulence

Le champ de vitesse et son évolution répondent aux équations de Navier-Stokes. De ce fait, tous les champs aléatoires ne peuvent pas être représentatifs d'un champ turbulent. Par exemple, la divergence d'un bruit blanc tridimensionnel est infinie, ce qui est incompatible avec l'équation de la conservation de la masse. Une des conséquences est qu'entre deux points infiniment voisins on a toujours une vitesse proche.

Dans cette partie on considère une turbulence homogène et isotrope afin de simplifier les calculs tout en gardant les résultats principaux. En plus, on ne considérera que les fluctuations de vitesse.

Sous ces hypothèses, on s'intéresse à la corrélation existant entre deux points à l'aide de la fonction d'autocorrélation. Pour une distance donnée r le tenseur d'autocorrélations, $Q_{ij}(r, t)$:

$$Q_{ij}(r, t) = \langle u_i(\mathbf{x}, t) u_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}r, t) \rangle \quad (\text{VI.6})$$

Ici, les moyennes $\langle . \rangle$ se font sur l'ensemble du domaine fluide et sur l'ensemble de directions \mathbf{e} . Les vitesses sont écrites en prenant ce vecteur comme premier vecteur de la base orthonormale : $u_1 = \mathbf{u} \cdot \mathbf{e}$.

Sous l'hypothèse de THI occupant tout le domaine, on peut faire l'approximation on a $\langle u_i(\mathbf{x}, t)^2 \rangle = \langle u_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}r, t)^2 \rangle = u'^2$. On peut donc normaliser Q_{ij} en le remplaçant par :

$$R_{ij} = Q_{ij}/u'^2 \quad (\text{VI.7})$$

A partir de ce tenseur on établit la fonction de corrélation longitudinale $f(r, t) = R_{11}(r, t)$ et transversale $g(r, t) = R_{22}(r, t)$. Elles représentent la corrélation spatiale entre deux points selon la direction longitudinale et transversale, voir figure VI.2.

Ces deux fonctions sont liées dans une THI incompressible par la relation de Kármán et Howarth, [Kármán and Howarth, 1938] :

$$g(r, t) = f(r, t) + \frac{r}{2} \frac{\partial f(r, t)}{\partial r} \quad (\text{VI.8})$$

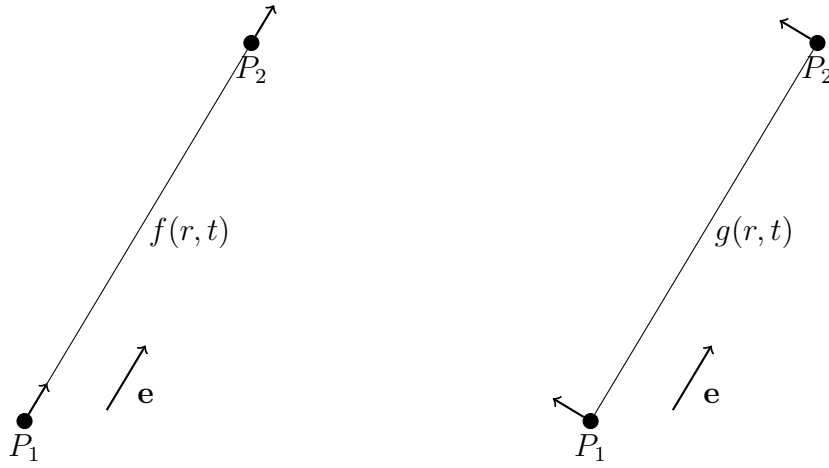


FIGURE VI.2 – Représentation des fonctions d'autocorrelation entre deux points.

Cette relation permet d'établir que la fonction $g(r, t)$ est négative pour r suffisamment grand, [Chassaing, 2000].

Ces fonctions permettent de savoir si deux points sont très corrélés ou pas. On va donc établir des échelles spatiales associées à ces distances.

Echelles de Taylor

Tout d'abord on s'intéresse au comportement des points proches. Deux points très proches sont complètement corrélés. Pour r petit on réalise un développement limité des fonctions d'autocorrelation spatiales. Ces fonctions étant symétriques, les termes d'ordre impair sont nuls. Les micro-échelles de Taylor, longitudinale λ_f et transversale, λ_g sont obtenues à partir du second ordre du développement :

$$f(r, t) = f(0, t) + \frac{r^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 f(r, t)}{\partial r^2} \right)_{r=0} + \mathcal{O}(r^4) \sim 1 - \frac{r^2}{\lambda_f^2} \quad (\text{VI.9})$$

$$g(r, t) = g(0, t) + \frac{r^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 g(r, t)}{\partial r^2} \right)_{r=0} + \mathcal{O}(r^4) \sim 1 - \frac{r^2}{\lambda_g^2} \quad (\text{VI.10})$$

Grâce à la relation (VI.8) on obtient $\lambda_f = \sqrt{2}\lambda_g$. Ces échelles permettent de connaître la corrélation entre deux points proches. D'usage on utilise la micro-échelle transversale, qui est appelée micro-échelle de Taylor, que l'on notera $\lambda = \lambda_g$.

Pour les longues distances, on définit une longueur qui sert à établir une distance à partir de laquelle deux points sont considérés comme décorrélés. Pour cela on établit les macro-échelles de Taylor (ou échelles intégrales) à partir de l'intégrale de ces fonctions :

$$\Lambda_f = \Lambda = \int_0^\infty f(r, t) dr \quad (\text{VI.11})$$

$$\Lambda_g = \int_0^\infty g(r, t) dr \quad (\text{VI.12})$$

Comme pour les micro-échelles, l'équation (VI.8) nous permet d'établir une relation entre les échelles longitudinales et transversales : $\Lambda_f = 2\Lambda_g$. On appelle macro-échelle de Taylor l'échelle intégrale longitudinale $\Lambda = \Lambda_f$.

Le nombre de Reynolds basé sur la micro-échelle de Taylor, $Re_\lambda = \frac{u'\lambda}{\nu}$ permet d'établir la séparation entre ces deux échelles :

$$Re_\lambda = 15 \frac{\Lambda}{\lambda} \quad (\text{VI.13})$$

VI.1.3 Approche spectrale de la turbulence

Une deuxième façon d'analyser la turbulence est d'utiliser l'espace de Fourier. Les fluctuations sont étudiées selon leur nombre d'onde et non leur position spatiale. Ainsi, on peut voir la turbulence comme une superposition continue de tourbillons de différentes longueurs d'onde, $\kappa = \frac{2\pi}{r}$. Le passage entre l'espace de phases et l'espace physique se fait à l'aide de la transformée de Fourier :

$$\mathcal{F}[\psi](\boldsymbol{\kappa}, t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int \psi(\mathbf{x}, t) \cdot e^{-i\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{x} \quad (\text{VI.14})$$

On définit la densité spectrale à l'aide de la transformée de Fourier des corrélations de vitesses :

$$E(\boldsymbol{\kappa}, t) = \frac{1}{2} \mathcal{F}[\langle u_i(\mathbf{x}, t) u_j(\mathbf{x} + \mathbf{r}, t) \rangle](\boldsymbol{\kappa}, t) \quad (\text{VI.15})$$

Cette fonction de densité spectrale permet de considérer les tourbillons à chaque nombre d'onde. Ici, le vecteur d'onde permet d'établir les directions d'anisotropie de la turbulence. Dans le cas d'une THI, les hypothèses d'homogénéité et d'isotropie permettent de considérer le spectre d'énergie :

$$E(\kappa, t) = 2\pi\kappa^2 \mathcal{F}[R_{ii}](\kappa, t) \quad (\text{VI.16})$$

Ici la transformée de Fourier est monodimensionnelle et prend en compte la longueur d'onde κ ; k est l'énergie totale.

Comme on l'a vu, le spectre permet d'établir plusieurs zones, voir figure VI.1. Dans la suite on va voir que les grandeurs caractéristiques peuvent être obtenues à partir du spectre.

L'équation (VI.3) permet de calculer la dissipation à partir de l'espace physique. On peut également l'obtenir à partir du spectre en rappelant que $\mathcal{F}[\frac{\partial\psi}{\partial x}] = \kappa\mathcal{F}[\psi]$.

$$\epsilon = 2\nu \int_0^\infty \kappa^2 E(\kappa, t) d\kappa \quad (\text{VI.17})$$

De la même façon, et partant de l'équation VI.11, on obtient :

$$\Lambda = \frac{\pi}{2u'^2} \int_0^\infty \frac{E(\kappa, t)}{\kappa} d\kappa \quad (\text{VI.18})$$

VI.1.4 Approche lagrangienne de la turbulence

La turbulence peut être étudiée à l'aide des statistiques lagrangiennes. Pour cela on introduit des traceurs, qui sont des particules fluides. A partir des fluctuations de vitesses des particules fluides, \mathbf{V}' , on s'intéresse à différentes grandeurs. La fonction d'autocorrélation $R_L(\tau)$ montre le temps de décorrélation des particules :

$$R_L(\tau) = \frac{\langle \mathbf{V}'(t_0) \mathbf{V}'(t_0 + \tau) \rangle}{\sqrt{\langle \mathbf{V}'^2(t_0) \rangle} \sqrt{\langle \mathbf{V}'^2(t_0 + \tau) \rangle}} \quad (\text{VI.19})$$

La moyenne $\langle . \rangle$, est une moyenne d'ensemble. Selon le cas traité, elle représente la moyenne sur l'ensemble des particules ou la moyenne sur des réalisations différentes. Dans le cas d'une turbulence forcée, il peut s'agir d'une moyenne sur des temps initiaux différents pour une même réalisation. Dans ce cas, il faut que les différents temps initiaux soient décorrélés. Les particules sont corrélées pour des temps courts, $\lim_{\tau \rightarrow 0} R(\tau) = 1$, et décorrélés pour les longs temps, $\lim_{\tau \rightarrow \infty} R(\tau) = 0$.

Dans le cas d'une THI, la fonction d'autocorrélation peut être approchée par une exponentielle, [Hinze, 1975, Yeung and Pope, 1989] :

$$R_L(\tau) \cong \exp^{-\frac{\tau}{T_L}} \quad (\text{VI.20})$$

où T_L est l'échelle temporelle intégrale lagrangienne du fluide. Inversement, on peut définir pour un cas donné le temps d'autocorrélation lagrangien à partir de la fonction d'autocorrélation :

$$T_L = \int_0^{\infty} R_L(\tau) d\tau \quad (\text{VI.21})$$

A partir de cette fonction d'autocorrélation on peut aussi obtenir le spectre temporel :

$$E(\omega) = \frac{1}{2} \mathcal{F}(R_L) \mathcal{F}^*(R_L) \quad (\text{VI.22})$$

Ce spectre présente des caractéristiques semblables au spectre spatial (continuité, décroissance logarithmique).

VI.2 Méthode de forçage de la turbulence

Afin de pouvoir réaliser des statistiques sur un temps suffisamment long il est nécessaire d'avoir un écoulement dont les caractéristiques n'évoluent pas dans le temps. Les équations de Navier-Stokes sont naturellement dissipatives. Cela implique que si aucune force n'introduit de l'énergie dans l'écoulement celui-ci perd de l'énergie jusqu'à arriver au repos. Pour réaliser cette étude il est donc nécessaire d'introduire dans nos équations un mécanisme de forçage de la turbulence.

Traditionnellement on introduit dans les codes spectraux une force aléatoire dans les premiers modes, [Eswaran and Pope, 1988]. Cette force n'a donc que des petits nombres d'onde. Ainsi, cet ajout d'énergie dans le système mime le comportement réel. En effet, la production de la turbulence se passe dans les petits nombres d'onde.

La difficulté dans les codes qui travaillent dans l'espace physique est que pour inclure une force dans les premiers modes il faut réaliser une FFT (*Fast Fourier Transform*) des vitesses puis, une FFT inverse pour la force à chaque itération. Le coût pour réaliser ces opérations est prohibitif. Il faut donc utiliser une autre méthode de forçage.

Plusieurs solutions ont été envisagées pour forcer la turbulence :

- La première méthode consiste à réaliser un forçage sur les premiers modes, comme on le fait dans le forçage spectrale. La différence est qu'au lieu de réaliser une FFT sur tous les modes on réalise une transformée de Fourier classique ($\int_0^{L_b} u(x) e^{-i\kappa x} dx$) sur les premiers modes $\kappa = \{0, \frac{2\pi}{L_b}, \dots\}$. Ceci permettant d'économiser en temps de calcul, [Uhlmann, 2010].
- La deuxième méthode consiste à insérer une force aléatoire dans l'espace physique. En tirant un nombre aléatoire ψ tiré d'un processus gaussien. On introduit la force $\Pi = \mathcal{C} \sqrt{\frac{2}{3} k_f \psi}$. Ici, k_f est l'énergie que l'on veut introduire et \mathcal{C} un préfacteur à déterminer, [Fede, 2012].

- La troisième méthode consiste comme dans la méthode précédente à introduire une force aléatoire dans l'espace physique. Seulement, afin de prendre en compte l'inertie du système, cette force est issue d'un processus de Langevin. A chaque itération la force dépend de celle de l'itération précédente : $\Pi(t + \Delta t) = \left(1 - \frac{\Delta t}{T_f}\right) \Pi(t) + \mathcal{C} \sqrt{\frac{2}{3} k_f} \psi$. Cette méthode ainsi que la précédente n'ont jamais été explorées, [Fede, 2012]. Toutefois, une implementation semblable de cette dernière version est donné dans [Boivin et al., 1998].
- La dernière méthode consiste à maintenir l'énergie cinétique du système. Pour ce faire on multiplie la vitesse à la sortie de chaque itération par un préfacteur : $\mathbf{u}^+ = \sqrt{\frac{\int_{\Omega} \mathbf{u}_0^2}{\int_{\Omega} \mathbf{u}^2}} \mathbf{u}$. On peut voir cette méthode comme un forçage sur tous les modes. Il s'agit d'un forçage linéaire dans le sens où tout le spectre est affecté de la même façon.

Dans le cadre de cette thèse seule la dernière méthode a été utilisée. Le choix de cette méthode vient du fait qu'elle est bien documentée [Rosales and Meneveau, 2005] et qu'elle a déjà donné des résultats satisfaisants [Corre et al., 2008]. En plus, cette méthode a l'avantage d'être simple à mettre en oeuvre. Le grand désavantage est qu'on introduit de l'énergie dans tout le spectre. De ce fait, on ne pourra pas analyser en détail la modification du spectre due strictement aux particules. Une adaptation de cette méthode a été utilisée aussi par [Luret, 2010] pour le cas d'un écoulement diphasique avec des gouttes liquides. Dans le cas où l'on introduit des particules solides l'on a observé l'augmentation de la vitesse moyenne dans chaque direction. On a donc retranché la vitesse moyenne à chaque itération.

Le seul paramètre qui détermine le forçage est l'énergie totale du système \mathbf{u}_0^2 . Le maillage détermine la longueur de coupure. Quelque soit le spectre d'initialisation et pour un même maillage, le spectre résultant sera le même. Néanmoins, il faut essayer d'avoir un état initial le plus proche possible du spectre final afin de réduire le temps nécessaire pour converger le spectre.

Quand on réalise ce forçage à partir d'un état initial basé sur une solution à priori on observe en début de simulation une augmentation du nombre de Reynolds Re_λ associé à une augmentation de l'échelle spatiale de Kolmogorov η_K . Puis, une relaxation jusqu'à un état où ces quantités oscillent. Ces oscillations se traduisent dans le spectre par des oscillations temporelles pour les grandes longueurs d'onde. Elles persistent pendant plusieurs temps de retournement.

Cet état après relaxation est quasi convergé. Dans le cadre de nos simulations on introduit les particules après cette relaxation.

VI.3 Champ fluide initial

Comme cela a été indiqué dans la section qui précède, l'on doit initialiser le champ fluide de sorte a avoir un spectre aussi proche que possible du spectre convergé et cela afin de réduire le temps d'attente. Dans Thétis l'initialisation du spectre s'est fait à partir du spectre de [Mansour and Wray, 1994] :

$$E(\kappa) = \frac{q^2}{2A} \frac{\kappa^\gamma}{\kappa_p^{\gamma+1}} \exp\left(-\frac{\gamma}{2} \left(\frac{\kappa}{\kappa_p}\right)^2\right) \quad (\text{VI.23})$$

Les paramètres permettant l'initialisation sont $q^2 = 1$, $\gamma = 4$, $A = 0.1175$ et $\kappa_p = 6$.

Cet spectre nous a permis de converger vers le spectre final en moins de deux temps de retournement. L'algorithme utilisé pour générer le champ fluide à partir du spectre est celui proposé par [Trontin, 2009]. Il utilise une base orthonormée pour l'espace spectrale assurant la

contrainte d'incompressibilité dans le fluide. Des nombres aléatoires sont tirés de sorte à avoir les composantes dans cette base. Une FFT inverse permet alors de récupérer le champ fluide.

Notre objectif est d'étudier des particules dont la taille est dans la zone inertielle. Afin d'établir un cas représentatif des THI à grand nombre de Reynolds il est nécessaire que les particules aient une taille négligeable par rapport aux grandes échelles. Comme le montre la formule (VI.13) on a besoin d'augmenter au maximum le nombre de Reynolds basé sur l'échelle de Taylor de façon à augmenter la zone inertielle et séparer les échelles. Comme le montre [Pope, 2000], le rapport entre les tailles intégrales et l'échelle de dissipation dépend des moyens numériques disponibles. Le nombre de Reynolds que l'on est capable de simuler augmente en puissance deux tiers du nombre de noeuds disponibles.

Il faut donc chercher un compromis de façon à pouvoir augmenter le nombre de Reynolds sans renoncer à la physique du problème. Dans notre cas, les ressources numériques se limitaient à 512 processeurs. Afin de ne pas trop alourdir la charge de calcul de chaque processeur on a donc simulé un domaine avec 256^3 noeuds.

La condition $\frac{\eta_k}{\Delta x} \sim \frac{1.5}{\pi} = 0.47$ est considérée comme une résolution suffisante pour un code spectral [Yeung and Pope, 1988]. Le spectre obtenu après convergence permet d'obtenir ϵ à l'aide de l'équation (VI.17) et η_k à partir de la formule (VI.4). On obtient ainsi $\frac{\eta_k}{\Delta x} = 0.56$. Les simulations faites sont donc proches d'une simulation DNS au niveau du fluide.

D'autre part, pour assurer la décorrélation des vitesses il faut avoir un domaine suffisamment grand, autrement, on n'a pas assez de grands tourbillons. Pour vérifier ce point on calcule l'échelle intégrale de Taylor à partir du spectre convergé, voir équation (VI.18). On obtient ainsi le rapport $\frac{L_b}{\Lambda} = 2\pi$ qui est largement satisfaisant [Pope, 2000].

Dans la figure VI.3 on montre le spectre initial de la simulation. Le tableau VI.1 récapitule les caractéristiques du spectre initial.

Grandeur	Equation	Valeur
L_b	-	2π
E	$\int_0^\infty E(\kappa) d\kappa$	1.3358
u'^2	$\frac{2}{3}E$	0.89051
ν		0.003
ϵ	$2\nu \int_0^\infty \kappa^2 E(\kappa) d\kappa$	0.74375
Λ	$\frac{\pi}{2u'^2} \int_0^\infty \frac{E(\kappa)}{\kappa} d\kappa$	1.0032
τ_k	$\sqrt{\frac{\nu}{\epsilon}}$	0.063511
η_k	$\left(\frac{\nu^3}{\epsilon}\right)^{\frac{1}{4}}$	0.013803
T_e	$\frac{\Lambda}{u'}$	1.1266
λ	$\sqrt{15}u'^2 \frac{\nu}{\epsilon}$	0.23212
Re_λ	$\frac{u'\lambda}{\nu}$	73.015
Re_Λ	$\frac{u'\Lambda}{\nu}$	315.57

TABLE VI.1 – Grandeurs obtenues à partir du spectre initial.

Une fois que cet écoulement initial est établi on introduit les particules dans le domaine. Le but de notre étude est d'étudier l'évolution des particules de taille finie dans une THI. De ce fait, il ne faut pas que les statistiques de nos particules soient perturbées par un nombre des chocs trop élevé. Dans la thèse de Deutsch [Deutsch, 1992] et plus récemment celle de Fede [Fede, 2004] une étude sur l'influence des chocs est proposée. D'un autre côté, si l'on met peu de particules il

faut faire plusieurs réalisations afin de faire converger les différentes statistiques. C'est pour cela que l'on a fixé la fraction solide à 3%. On s'est placé au delà de la limite de ce qu'on considère comme un écoulement dilué [Elghobashi, 1991, Balachandar and Eaton, 2010].

Un autre contrainte vient du fait que notre but est d'étudier des particules plus grandes que l'échelle de Kolmogorov mais suffisamment petites pour que le nombre de Stokes soit modéré. En effet, on peut s'attendre à ce que des particules trop grandes ne soient pas suffisamment réactives à l'écoulement. De ce fait, on se place à la limite imposée par nos validations, soit 12 mailles par diamètre. Le rayon des particules vaut $R = 0.15$. En tout, on introduit donc 512 particules dans le domaine. La figure VI.3 montre la taille des particules dans le spectre initial.

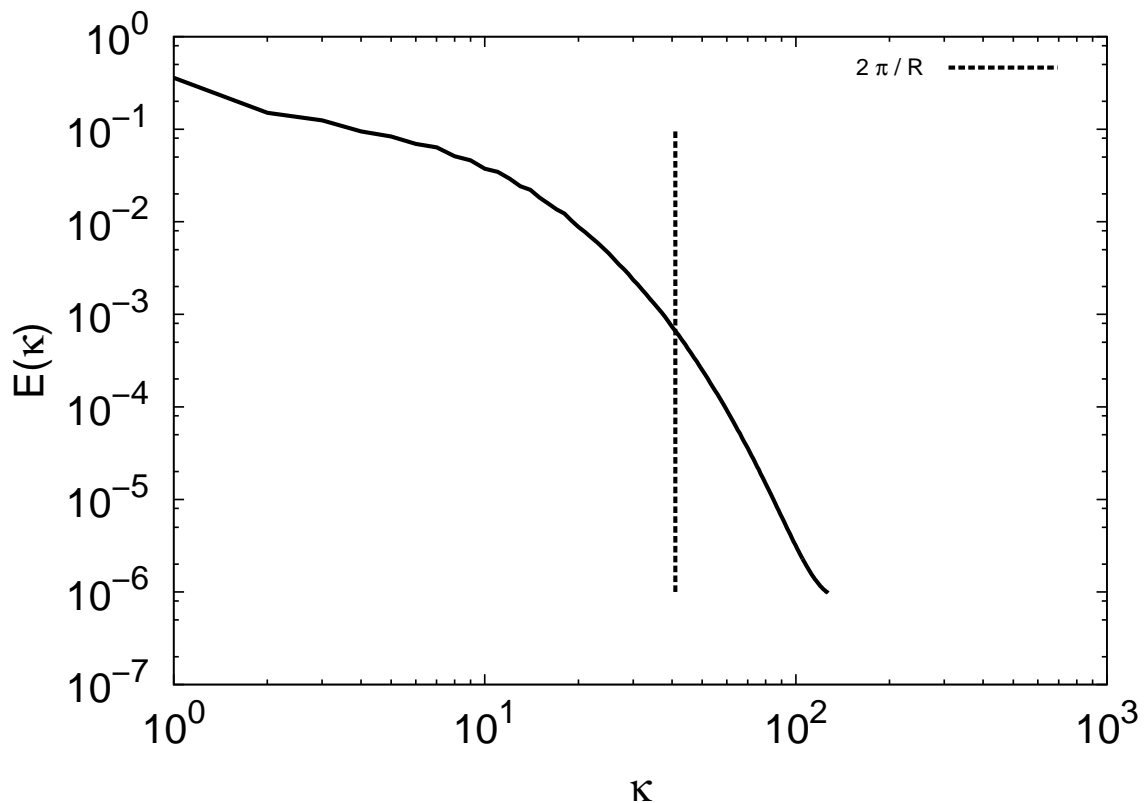


FIGURE VI.3 – Spectre initial convergé.

Pour des particules neutres (même rapport de densité) cela fait un nombre de Stokes basé sur l'échelle de temps de Kolmogorov τ_K assez grand : $St_k = 26$. Bien que ce nombre perde son sens pour des particules de taille finie, il est important de rappeler qu'il permet d'estimer si les particules se comporteront comme des traceurs ou pas. Afin d'étudier l'évolution dépendant de l'inertie, on a réalisé 3 cas avec des masses volumiques pour le solide différentes. Les rapports de masses volumiques est : $\frac{\rho_p}{\rho_f} = \rho = \{1, 2, 4\}$, ce qui correspond donc à $St_k = \{26, 52, 104\}$. Le nombre de Stokes basé sur le temps de retournement étant $St_E = \frac{\tau_p}{T_e} = \{1.5, 3, 6\}$ respectivement. La figure VI.5 récapitule dans le plan $\{St_k, \Phi_v\}$ un grand nombre d'études faites en THI particulière. On inclut les simulations réalisées pour cet étude.

La figure VI.4 reprend les figures I.11 et I.12 en incluant nos simulations. On peut voir que l'on est proche des simulations de [Lucci et al., 2011]. Ceci n'est pas une surprise. D'un côté les méthodes numériques sont semblables. De l'autre côté la puissance de calcul est restreinte aux technologies actuelles. De ces faits, la fenêtre de simulations possibles pour étudier des particules

de taille finie est réduite. Bien que les nos simulations et celles de Lucci et *al.* soient dans des régimes proches les objectifs sont différents. Dans leur cas, le régime turbulent est en décroissance ce qui entraîne l'impossibilité d'étudier le régime statistique des particules et des collisions. Toutefois, l'écoulement autour des particules pourra être comparé avec leurs résultats. En plus, comme le montre la figure I.8 nos simulations ont aussi une fraction volumique de l'ordre de grandeur de celles de [Lucci et al., 2011].

Nos simulations sont aussi proches de l'étude expérimentale réalisée durant la thèse de Qureshi, [Qureshi, 2009]. Dans leur cas les particules considérées sont des bulles de savon isolées soumises à une turbulence développée dans une soufflerie. Nos simulations vont permettre une comparaison dans le régime statistique des particules.

VI.4 Description de la turbulence en diphasique

Une fois les particules introduites on maintient le forçage de sorte à garder $\int_{\Omega} \mathbf{u}^2$ constant. Pour les cas où $\rho_p = \{2, 4\}$ cela fait augmenter légèrement l'énergie cinétique totale $\int_{\Omega} \rho \mathbf{u}^2$.

La figure VI.6 montre l'évolution du spectre initial pour les trois rapports de densité. On constate que la modification du spectre est peu significative et se concentre surtout dans les longueurs d'onde supérieures au rayon de la particule.

La modification pour les grands nombres d'onde peut provenir des diverses sources :

- La présence des parties solides fait que dans l'espace physique on a des zones avec un comportement solide. Ceci peut s'assimiler à un plateau. Or, la transformée de Fourier d'un plateau est oscillatoire. De ce fait, réaliser la transformée de Fourier dans tout le domaine physique introduit des oscillations dans le spectre dues à la transformée d'une fonction en plateau. Ce problème est déjà évoqué dans [Lucci et al., 2010]. La figure VI.7 montre la transformée de Fourier de la fonction plateau afin de montrer l'effet qui peuvent avoir les particules sur le calcul du spectre.
- Le forçage de la turbulence se fait dans tout le domaine, particules incluses. Ceci accélère la vitesse des particules, ce qui induit une augmentation de la turbulence.

L'apport de chacune des sources n'est pas définie pour nos simulations. Afin de pouvoir accéder aux caractéristiques du champ du fluide porteur sans avoir à considérer les zones solides, on a introduit des traceurs dans la phase porteuse. Ainsi, on peut réaliser une étude lagrangienne de la turbulence de la partie fluide.

VI.4.1 Étude des grandeurs lagrangiennes de la turbulence

Dans chaque simulation 20000 particules fluides sont introduites dans l'écoulement. Dans le cas où une particule fluide rencontre une particule solide, la première est supprimée des statistiques et remplacée ailleurs. L'agitation des particules fluides obtenue est $q_f^2 = 1.48 \text{ m}^2 \text{ s}^{-2}$. Cette agitation est égale à l'agitation obtenue à partir du spectre spatiale. La fonction d'autocorrélation des particules fluides est donnée dans la figure VI.8.

La fonction d'autocorrélation pour des nombres de Reynolds suffisamment grands se comporte comme une fonction exponentielle, [Hinze, 1975, Yeung and Pope, 1989], équation (VI.20). L'équation (VI.21) nous permet d'évaluer le temps d'autocorrélation des particules fluides qui est semblable dans les différentes configurations : $T_L^f = 0.93 \pm 0.03$. Cette valeur est proche de la valeur obtenue par [Yeung and Pope, 1989] qui obtient $\frac{T_L^f}{T_e} \sim 0.72$. Ici, $\frac{T_L^f}{T_e} \sim 0.82$.

La figure VI.9 permet de comparer les spectres temporels obtenus à partir des particules fluides. On remarque ici encore que le spectre ne subit pas de modification significative du fait de

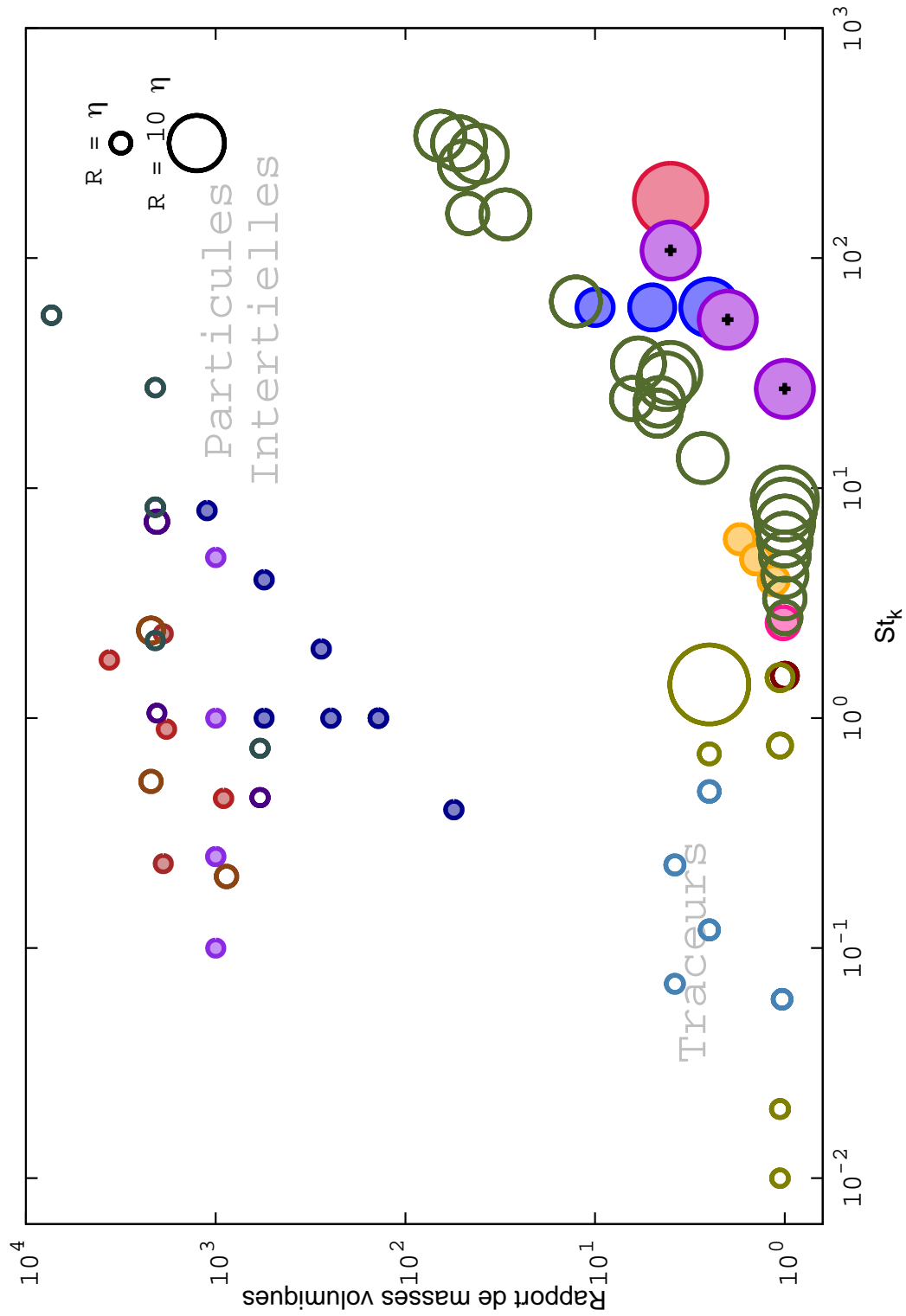


FIGURE VI.4 – Reprise de la figure I.11 donnée dans l'introduction. Ici les cercles pleins en violet avec une croix au centre représentent nos simulations.

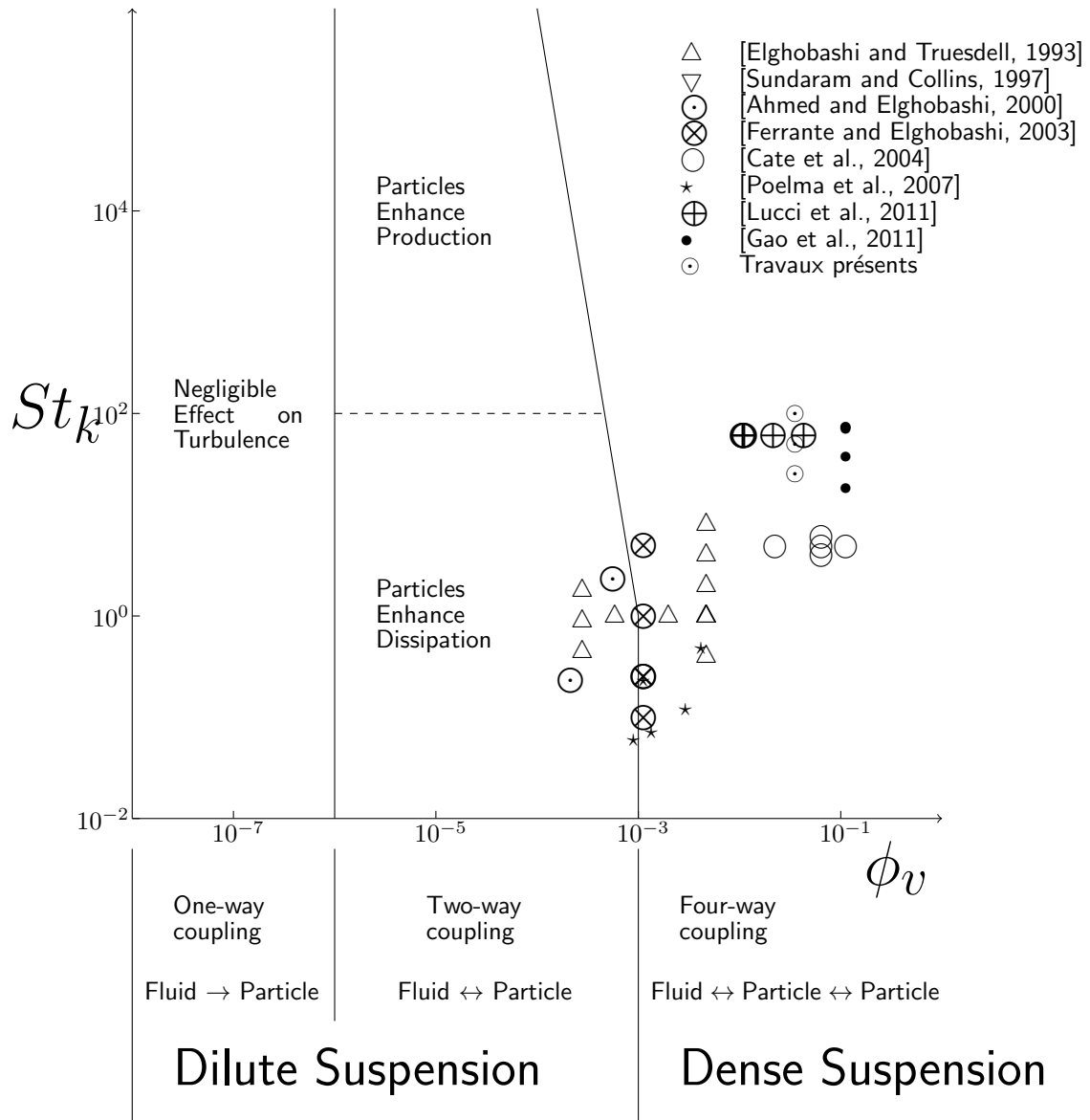


FIGURE VI.5 – Figure inspirée de celle présentée dans [Elghobashi, 1991] et [Elghobashi, 1994]. Même base que la figure I.8.

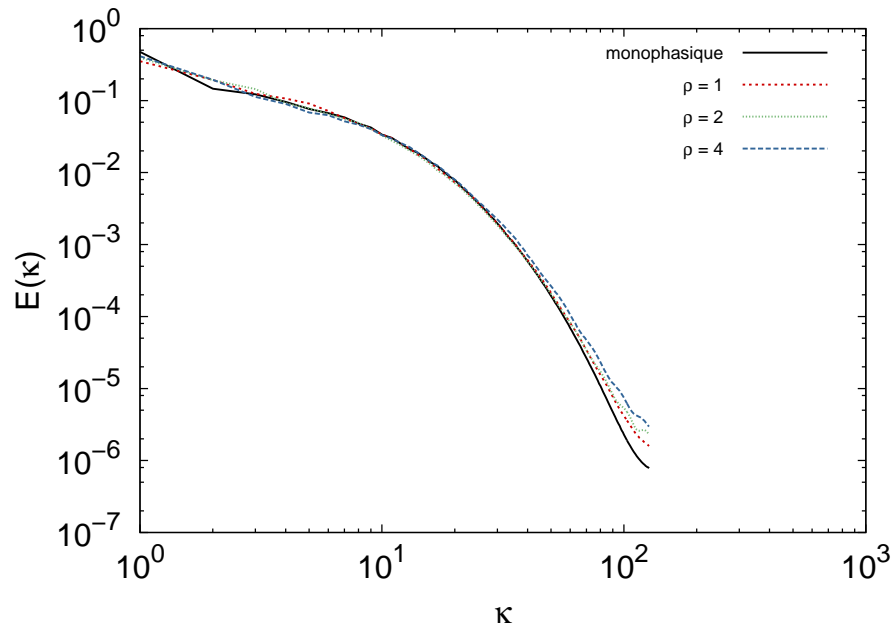


FIGURE VI.6 – Modification du spectre par la présence des particules en fin de simulation, soit environ 20 temps de retournement.

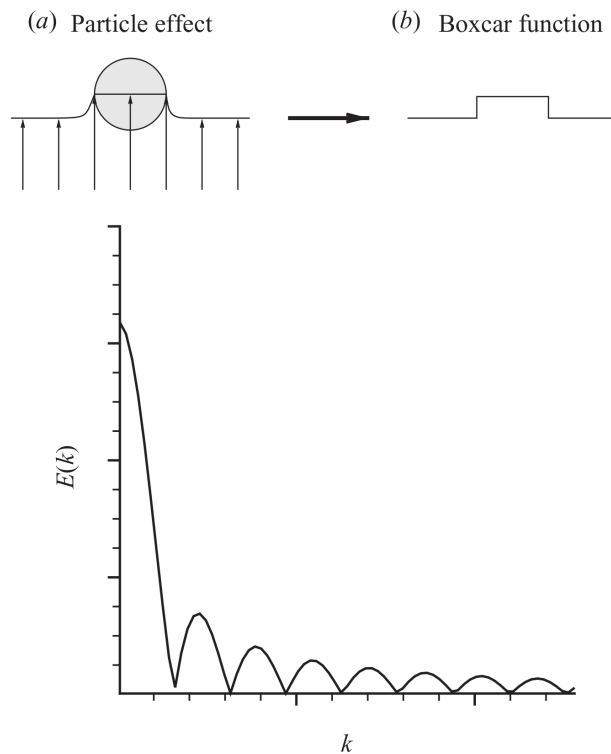


FIGURE VI.7 – Représentation d'une particule par sa fonction plateau. Transformée de Fourier de cette fonction. Source : [Lucci et al., 2010].

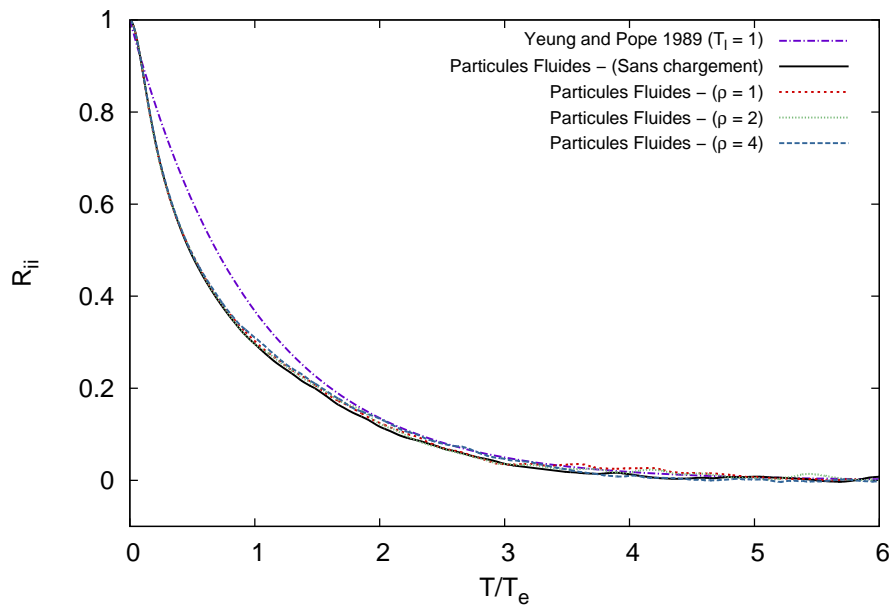


FIGURE VI.8 – Autocorrelation des particules fluides.

la présence des particules.

En conclusion on peut considérer que l'état initial décrit dans le paragraphe VI.3 reste valable tout au long de la simulation. En plus, la turbulence reste identique pour les trois cas traités ce qui va faciliter la comparaison entre les différents cas.

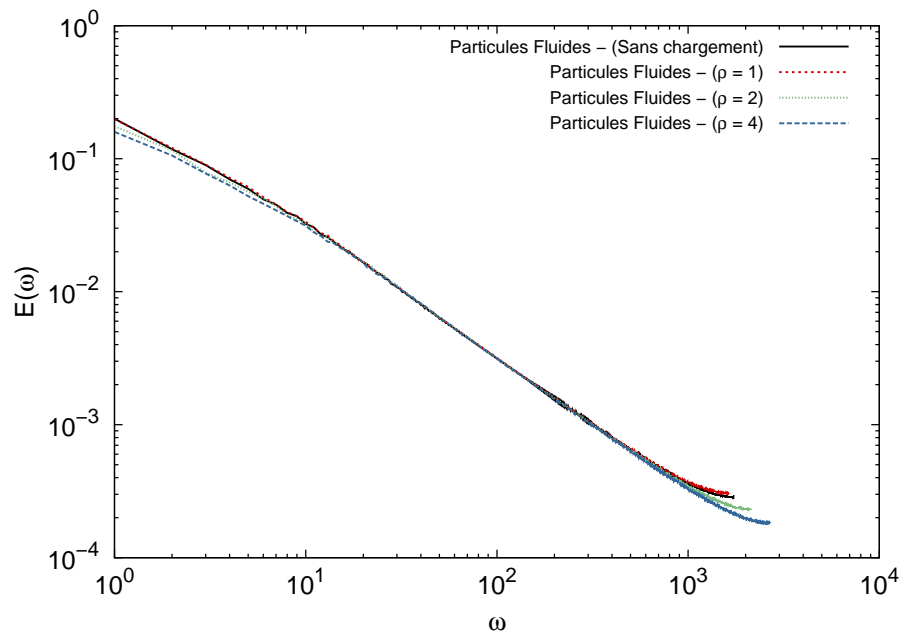


FIGURE VI.9 – Spectre temporel des particules fluides.

Chapitre VII

Analyse de la dynamique des particules

Les simulations présentées dans le chapitre précédent ont été réalisées dans des régimes mettant en jeu plusieurs phénomènes. D'un côté, le mouvement des particules est influencé par le fluide ce qui fait qu'elles se dispersent (*one-way*). Ensuite, les particules étant de taille finie et de densité différente de celle du fluide elles modifient l'écoulement porteur (*two-way*). Finalement, la fraction volumique étant fixée à 3% les particules rentrent en collision ce qui modifie leur dynamique (*four-way*).

Afin de comprendre chaque phénomène on analyse ici les statistiques des particules. Une première section est dédiée aux statistiques sur les particules (dispersion et collisions) et l'autre à l'influence sur le fluide porteur.

VII.1 Description du mouvement de la phase dispersée

Dans cette section on décrit les caractéristiques de la phase dispersée. Dans un premier temps on analyse les statistiques des particules sur les trois simulations présentées dans le chapitre précédent. Tout d'abord on utilise le modèle de collision élastique sans activation de la force de lubrification. On a donné un coefficient de restitution à vide de 0.97. La distance pour laquelle cette force répulsive est activée est de $1.1 R$ afin d'éviter l'interaction à courte distance entre les particules. Ceci nous permet de déterminer la dispersion des particules ainsi que le régime collisionnel et le comparer aux différentes références et théories.

Une fois ces trois cas analysés on montre le besoin de considérer la force de lubrification pour le cas des particules dont la masse volumique est égale à celle du fluide. Une étude comparative entre le cas sans lubrification et avec lubrification est donnée en fin de section.

VII.1.1 Etude sur la dispersion des particules solides

Les simulations présentées ici correspondent à des particules dont la taille est plus grande que l'échelle de Kolmogorov. De ce fait l'agitation et la dispersion des particules ne peuvent pas être directement prédites à partir de la connaissance de la phase porteuse. On rappelle que la théorie de Tchen-Hinze permet d'établir une relation entre l'agitation des particules fluides et celle de particules solides pour le cas de particules ponctuelles. Dans notre simulation, si l'on compare l'agitation des particules solides aux résultats prédits par la théorie de Tchen-Hinze on trouve des valeurs éloignées des valeurs théoriques. Dans le tableau VII.1 on donne le rapport entre les agitations fluides et solides obtenues $\frac{q_p^2}{q_f^2}$, et celles obtenues à partir de l'équation (I.14) en utilisant

le temps d'autocorrélation des particules fluides, $\left(\frac{q_p^2}{q_f^2}\right)_{\text{T.-H.}}$. Pour les particules neutres ($\rho = 1$) on observe que l'agitation obtenue est inférieure à celles des particules fluides. L'explication provient du fait que les particules solides étant plus grandes que la plus petite échelle de l'écoulement celles-ci ne répondent pas à toutes les fluctuations du fluide. Pour les deux autres cas l'agitation est supérieure à la théorie pour des particules ponctuelles. Plusieurs raisons peuvent être à l'origine de cette différence. La première est l'effet de taille finie qui n'est pas pris en compte par la théorie de Tchen-Hinze. Une deuxième hypothèse de la théorie de Tchen-Hinze qui pourrait être à l'origine de cette différence entre l'agitation observée et celle prédite par la théorie est que dans nos simulations les particules ne sont pas isolées et rentrent en collision élastique entre elles. La tendance observée dans l'agitation des particules est la même que pour les particules ponctuelles : l'agitation diminue avec la masse volumique des particules solides.

ρ	q_p^2 ($m^2 s^{-2}$)	$\frac{q_p^2}{q_f^2}$	$\left(\frac{q_p^2}{q_f^2}\right)_{\text{T.-H.}}$	T_L (s)	$\frac{T_L}{T_L^f}$	D ($m^2 s^{-1}$)	$\frac{D}{D_f}$	$\sqrt{\langle \omega^2 \rangle}$ ($rad s^{-1}$)
1	1.27	0.85	1	1.22	1.31	3.10	1.13	2.5
2	1.17	0.79	0.5	1.35	1.45	3.16	1.15	2.2
4	1.10	0.74	0.2	1.53	1.65	3.37	1.23	2.0

TABLE VII.1 – Statistiques lagrangiennes des particules solides.

Pour étudier la dispersion des particules on s'intéresse à la fonction d'autocorrélation des vitesses. Dans la figure VII.1 est présentée la fonction d'autocorrélation des particules solides. On peut constater que les particules solides sont plus corrélées aux temps courts que les particules fluides. En effet, si on compare la courbure à l'origine on voit que pour les particules solides elle est plus large. La fonction d'autocorrélation de vitesses ne peut plus être approchée par une fonction exponentielle. Ceci est dû au fait que les particules ont une inertie propre. Sur le long terme les particules sont d'autant plus corrélées que le rapport de masse volumique est grand. Ceci s'explique car les particules étant plus inertielles elles répondent moins aux fluctuations environnantes. L'intégrale de la fonction d'autocorrélation T_L est donnée dans le tableau VII.1. Elle exprime le temps caractéristique d'autocorrélation d'une particule. Comme on l'avait constaté pour la fonction d'autocorrélation, T_L augmente avec le rapport de masses volumiques.

Pour comprendre la dispersion des particules on peut regarder la variance du déplacement des particules $\langle |\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}_0|^2 \rangle$.

Dans notre cas le faible nombre de particules ne permet pas d'obtenir des moyennes convergées. C'est pourquoi on établit la fonction d'autocorrélation des vitesses et la moyenne pour la dispersion en utilisant comme temps de départ tous les temps de la simulation $T = T_0 = i\Delta T$.

La figure VII.2 (gauche) montre comment cette grandeur évolue en fonction du temps. On peut distinguer deux régimes caractéristiques. Ces deux régimes peuvent être compris à l'aide de l'équation de Taylor (I.13). Si l'on considère que la fonction d'autocorrélation de vitesses est proche de l'unité pour les temps courts on aperçoit que la dispersion moyenne évolue selon une loi en T^2 . Il s'agit du régime balistique. Ensuite, pour les temps longs, l'intégrale de la fonction d'autocorrélation converge vers T_L . On obtient alors une évolution linéaire de la dispersion des particules en fonction du temps, il s'agit du régime diffusif. Le coefficient d'autodiffusion permet de caractériser ce régime final. Pour le cas isotrope ce coefficient s'écrit $D = \frac{1}{2} \frac{d\langle |\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|^2 \rangle}{dt}$. L'équation de Taylor permet d'estimer la convergence de ce coefficient vers $2q_p^2 T_L$. La diffusion des particules est due à deux effets. D'un côté, l'augmentation de l'agitation des particules augmente leur diffusion. D'un autre côté, les trajectoires des particules restent très corrélées dans le

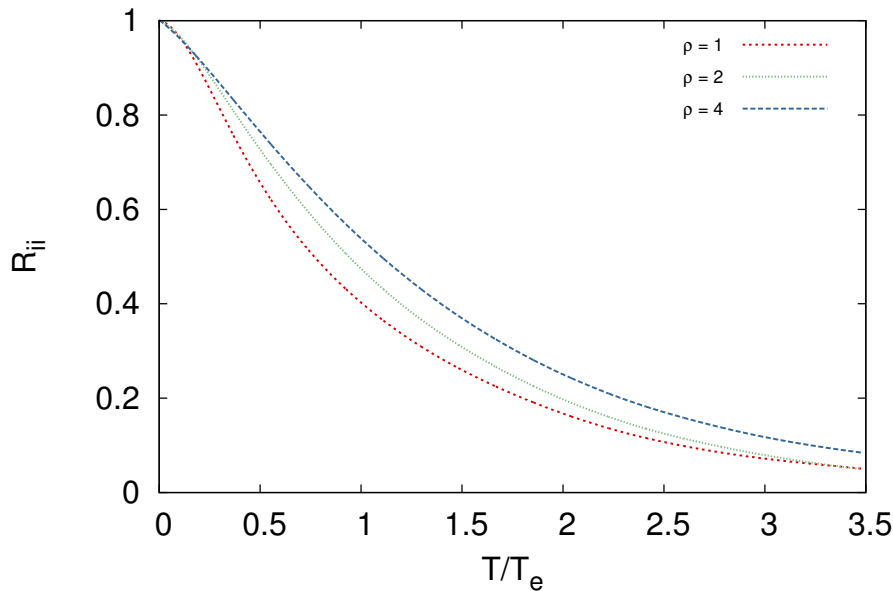


FIGURE VII.1 – Autocorrelation des vitesses particules solides.

temps, elles gardent une même direction ce qui amplifie leur distance parcourue. Dans notre cas l'augmentation de la masse volumique diminue l'agitation et augmente le temps d'autocorrelation. Ces deux effets se compensent. Dans le tableau VII.1 le coefficient d'autodiffusion obtenu à partir de l'agitation et le temps d'autocorrélation est reporté pour les trois simulations. On peut voir que les trois cas ont une diffusion proche avec une diffusion plus prononcée pour le cas de rapport volumique 4. La diffusion est du même ordre que celle obtenue pour le cas monophasique avec des particules fluides. Dans ce cas $D_f = 2q_f^2 T_L^f = 2.75 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$. Malgré une agitation plus importante, la dispersion est plus petite dans le cas des particules fluides car le temps d'autocorrélation est nettement inférieur. La figure VII.2 montre l'évolution de ce coefficient calculé grâce à la dispersion de particules $D(t) = \frac{1}{2} \frac{\langle |\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}_0|^2 \rangle}{t}$. On constate encore les mêmes conclusions sur la dispersion des particules.

VII.1.2 Analyse des accélérations des particules solides

La densité de probabilité des accélérations et des vitesses permet d'analyser le caractère aléatoire des mouvements des particules, voir figure VII.3. La vitesse des particules a une répartition Gaussienne. Cette forme est celle observée pour les écoulements turbulents avec particules. Dans notre cas, l'isotropie des p.d.f. permet de représenter ici que la p.d.f. moyennée sur les trois directions. Celle-ci étant mieux convergée que celles par direction.

En ce qui concerne la densité de probabilité des accélérations on peut distinguer dans la figure VII.3 que la répartition des accélérations présente deux tendances différentes sur deux zones. Une première zone suit une loi exponentielle ($\exp^{-|a|}$), suivie par une deuxième zone où l'on observe une autre pente exponentielle mais moins prononcée. Dans le tableau VII.2 on donne l'accélération pour laquelle on obtient ce changement de pente, a_{inf} . On voit clairement que l'accélération pour laquelle ce changement se produit diminue avec le rapport volumique. Ce changement de pente est dû aux collisions entre particules. Lors d'une collision les accélérations subies par une particule sont grandes. Pour démontrer cette hypothèse on a réalisé la p.d.f. des accélérations en ne prenant

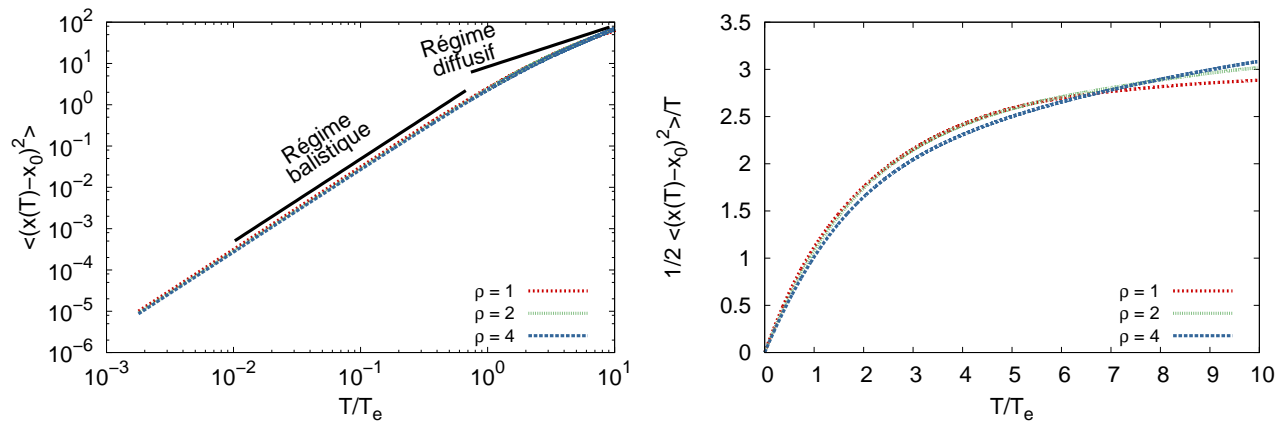


FIGURE VII.2 – Variance du déplacement parcouru par les particules (gauche) et dispersion des particules solides (droite).

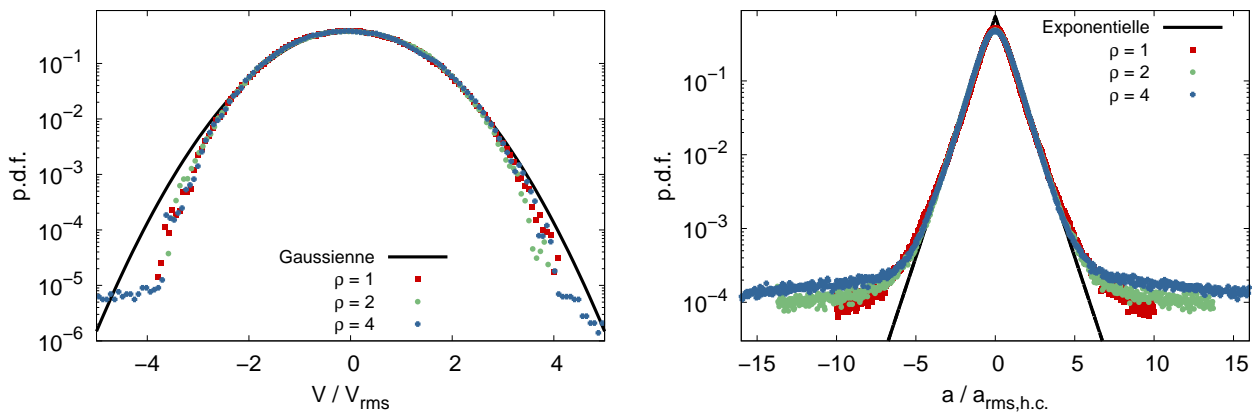


FIGURE VII.3 – Densité de probabilité (p.d.f.) des vitesses (gauche) et des accélérations (droite) des particules.

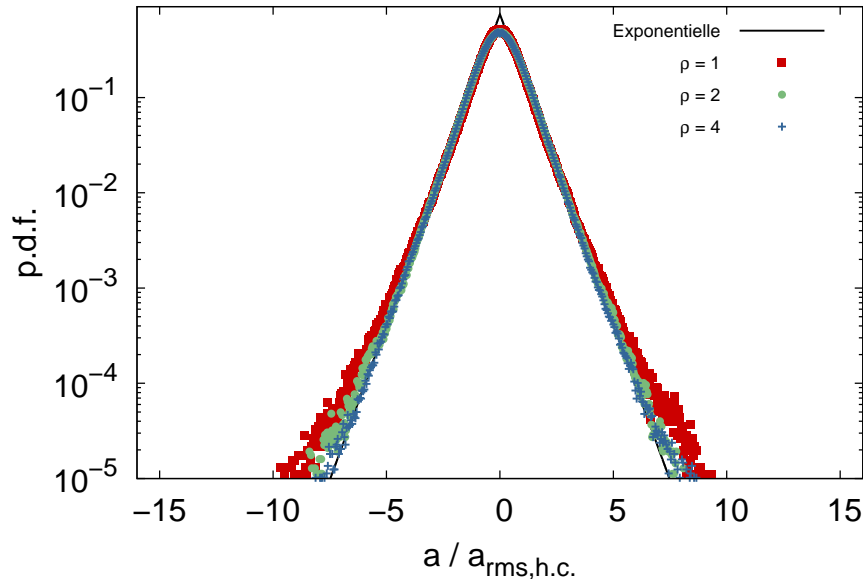


FIGURE VII.4 – Densité de probabilité (p.d.f.) des accélérations des particules sans prendre en compte les accélérations lors des collisions.

en compte que des accélérations obtenues hors collision (figure VII.12).

La forme obtenue pour des particules de taille finie numériquement et expérimentalement [Voth et al., 2002, Qureshi et al., 2008, Calzavarini et al., 2009] correspond à une fonction du type $exp^{-|a|^\beta}$, $\beta < 1$. Comme l'ont présenté de Bec et al. [Bec et al., 2006], les courbes se rapprochent de plus en plus de la loi exponentielle au fur et à mesure que l'inertie grandit. Afin de quantifier ce passage vers le régime exponentiel il propose l'utilisation de l'aplatissement $\frac{\langle a^4 \rangle}{\langle a^2 \rangle^2}$ qui est d'autant plus petit que la courbe s'approche de la loi exponentielle. Cette grandeur est donnée dans le tableau VII.2 en ne considérant que les accélérations hors collision. En accord avec les simulations pour des particules ponctuelles réalisées par Bec et al. l'aplatissement diminue avec l'augmentation de l'inertie.

Afin d'adimensionnaliser la p.d.f. des accélérations on calcule l'accélération r.m.s. hors collisions, $a_{rms,h.c.}^2$. Cette valeur est plus petite que l'accélération r.m.s. totale, a_{rms} . On voit qu'alors que l'accélération r.m.s. totale augmente avec le rapport des masses volumiques, celle obtenue à l'intérieur de la zone exponentielle intérieure diminue. Ceci est dû à la diminution de la zone exponentielle intérieure avec l'augmentation du rapport des masses volumiques. L'évolution de $a_{rms,h.c.}^2$ est proportionnelle aux masses volumiques. Un résultat similaire est avancé par [Qureshi et al., 2008]. Il propose une corrélation de l'évolution des accélérations r.m.s. sous la forme $A_0 = \frac{a_{rms,x}^2}{\epsilon^{-2/3} \nu^{1/2}} = \alpha \rho^{-\beta}$. Si on rend adimensionnelle l'accélération dans la zone intérieure comme dans l'article de [Qureshi et al., 2008] on obtient pour nos trois rapports de masse volumique : $A_0 = \frac{a_{rms,h.c.}^2}{3\epsilon^{-2/3} \nu^{1/2}} = \{15.2, 7.93, 3.93\}$. Nos valeurs pour l'autocorrélation proposée par Qureshi seraient donc $(\alpha, \beta) = (0.8, 0.94)$. Pour des faibles rapports de masse volumique, [Qureshi et al., 2008] obtient $(\alpha, \beta) = (2.8, 0.6)$.

Finalement, on s'intéresse à la rotation des particules afin d'évaluer si cette dernière est bien résolue dans nos simulations. Peu d'information est donnée dans la bibliographie sur cette grandeur. Dans l'article de [Lucci et al., 2010] les auteurs réalisent une simulation dans laquelle les

ρ	a_{rms}^2 ($m^2 s^{-4}$)	a_{inf} ($m^2 s^{-4}$)	$a_{rms,h.c.}^2$ ($m^2 s^{-4}$)	$\left(\frac{\langle a^4 \rangle}{a_{rms,h.c.}^2}\right)_{h.c.}$ -
1	23.24	10.3	4.00	5.13
2	29.48	6.2	2.12	4.25
4	30.98	4.3	1.05	4.16

TABLE VII.2 – Grandeurs sur les accélérations des particules solides.

particules ont un mouvement de translation sans rotation. Cette simulation a été reprise en prenant en compte la rotation, tout étant égal par ailleurs. Les auteurs ont montré alors que la rotation n'a qu'un effet mineur sur l'écoulement. Dans notre méthode numérique on ne peut pas découpler rotation et translation. Toutefois, si on regarde le nombre de Reynolds de rotation on voit que l'on attend au maximum $Re_\omega = \frac{R^2 \omega \rho_f}{\mu} \sim 100$. Grâce à la validation sur une particule isolée présentée dans la section IV.2, on peut conclure que la rotation est bien prise en compte dans nos simulations. En effet, pour ce nombre de Reynolds la perturbation de vitesse était bien reproduite avec seulement 10 mailles par diamètre. Dans le tableau VII.1 les données sur la vitesse de rotation r.m.s. sur l'ensemble de la simulation sont reportées. Les particules plus légères ayant un moment d'inertie inférieur ont une vitesse de rotation supérieure.

VII.1.3 Etude de la concentration préférentielle

L'apparition de zones de concentration n'a pas encore été très étudiée pour des particules de taille finie. Tout d'abord on peut s'attendre à ce que les particules de taille finie ne répondent pas aux perturbations dont l'échelle spatiale est inférieure à leur taille. En plus de l'échelle spatiale, il faut que la durée de vie des zones d'accumulation soit suffisamment longue pour permettre aux particules de migrer vers ces zones.

Afin de vérifier si dans nos simulations il y a de la concentration préférentielle on s'est intéressé à deux grandeurs. La première est la moyenne de la distance au plus proche voisin. Cette grandeur oscille dans toutes nos simulations autour de $3.2 R$. L'évolution de cette grandeur tout le long de la simulation permet de déterminer si les particules se regroupaient. Aucune tendance d'évolution n'est constatée. Dans nos simulations il y a seulement 512 particules. Le faible nombre de particules fait que les oscillations observées dans cette grandeur sont de l'ordre de 2 %. Il est donc difficile de voir une évolution nette.

Une autre façon de quantifier la concentration préférentielle est d'établir la fonction de distribution radiale. Dans la figure VII.5 cette fonction est moyennée sur plusieurs itérations. On peut voir qu'elle reste constante jusqu'au contact, ce qui signifie que la distribution reste homogène dans le domaine. Les oscillations pour des faibles distances sont dues au fait que dans ces zones le volume de contrôle est inférieur, ce qui réduit le nombre d'événements. Afin de confirmer cette hypothèse on donne dans la même figure la distribution obtenue pour le même nombre de particules pour une distribution uniforme. La fonction de distribution radiale semble augmenter pour les faibles distances allant jusqu'à 1.2 rayons.

D'un côté cette augmentation pour les petites distances est difficilement différenciée des oscillations. On peut supposer que le temps fini des collisions fait que pour ces petites distances on a une augmentation de la fonction de distribution radiale. A titre comparatif, dans l'étude numérique réalisée avec des particules ponctuelles par [Wang et al., 2000] la fonction des distributions radiales augmente sur plusieurs rayons et jusqu'à 12 rayons. Pour des expériences avec

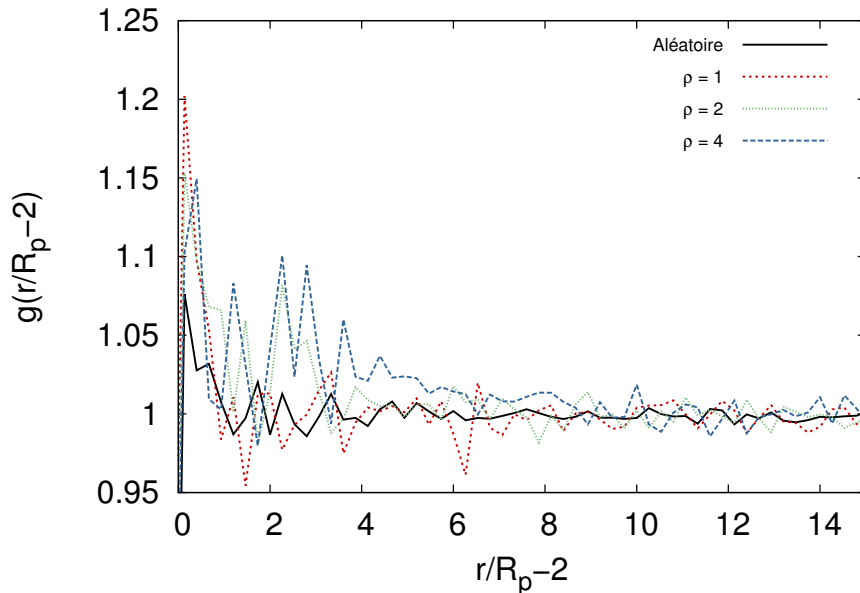


FIGURE VII.5 – Nombre de particules dans des coques par rayon.

des particules de taille finie [Salazar et al., 2008] montre que l'augmentation sur la fonction de distribution radiale est étalée sur 10 fois la taille de Kolmogorov, et leur maximum vaut 2.2. Ici l'augmentation n'est pas aussi importante et s'étale sur moins de 6 fois la taille de Kolmogorov.

Dans nos simulations on ne peut donc pas affirmer qu'il y a des zones de concentration préférentielle. Trois raisons permettent d'expliquer cette absence. La première est que dans nos simulations on va jusqu'à 25 temps de retournement, ce qui n'est peut être pas suffisant pour que les particules migrent vers ces zones de concentration préférentielle. Une autre cause pourrait être que ces zones n'ont pas une durée de vie suffisante. Finalement, l'inertie trop grande de nos particules peut faire qu'elles ne sont pas sensibles aux mécanismes de ségrégation préférentielle.

VII.1.4 Régime collisionnel

La connaissance du régime collisionnel est essentielle dans un grand nombre d'applications.

Dans un premier temps on peut faire une description qualitative du régime en traçant les trajectoires des particules. Dans la figure VII.6 on montre quelques trajectoires pour les trois simulations. Sur cette figure les collisions sont mises en évidence par la présence d'un symbole carré sur les trajectoires des particules. Tout d'abord on peut voir que la direction d'avancement des particules change entre deux collisions à cause de l'écoulement turbulent. On peut donc conclure que les particules n'ont pas un régime collisionnel du type gaz raréfié. Ensuite, on aperçoit parfois des collisions consécutives. Etudier en détail le temps entre deux collisions nous permettra par la suite de mieux comprendre ces collisions consécutives. On peut observer aussi sur cette figure que certaines collisions ne changent pas la direction de la particule. Ceci s'explique par le fait que les particules ne rentrent pas en collision de façon frontale ni avec une grande énergie.

Le temps de collision interparticulaire τ_c est le temps moyen entre deux collisions le long d'une trajectoire de particule. Plus il est grand moins les collisions sont nombreuses. La fréquence de collisions se calcule à partir de l'inverse du temps de collision, $f_c = \frac{n_p}{\tau_c}$. Où n_p est la densité en nombre des particules. Dans la pratique le temps de collisions sur un temps donné ΔT est donné

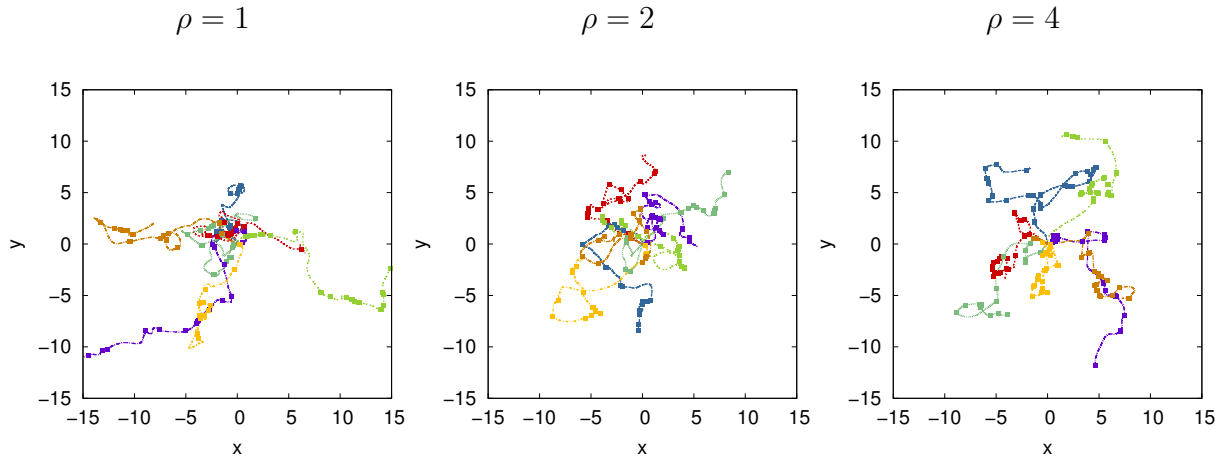


FIGURE VII.6 – Trajectoires des particules affichées pendant 21 temps de retournement. Les carrés représentent les collisions.

par $\tau_c = \frac{N_p}{2N_{coll}} \Delta T$. Le nombre de collisions N_{coll} est le nombre de collisions binaires et N_p le nombre de particules.

Théoriquement le taux de collisions peut être évalué à partir de la moyenne des vitesses relatives entre paires de particules, $\langle |\mathbf{V}_p^a - \mathbf{V}_p^b| \rangle = \langle |\mathbf{w}| \rangle$:

$$\frac{1}{\tau_c} = n_p \pi d_p^2 \langle |\mathbf{w}| \rangle \quad (\text{VII.1})$$

Si on fait l'hypothèse que lors des collisions on a des vitesses décorréées à l'impact, on peut exprimer la moyenne des vitesses relatives entre particules à partir de l'agitation des particules. Le temps de collision interparticulaire peut être alors écrit sous la forme :

$$\frac{1}{\tau_c^{th}} = n_p \pi d_p^2 \sqrt{\frac{16}{\pi} \frac{2}{3} q_p^2} \quad (\text{VII.2})$$

Cette évaluation minore le temps de collision interparticulaire. Ce modèle est vérifié pour les gaz raréfiés. Dans le cas des particules ponctuelles introduites dans une turbulence homogène et isotrope, ce modèle est vérifié quand l'inertie des particules (caractérisé par leur nombre de Stokes) est suffisamment élevée.

Le cas opposé (Stokes faible) est aussi à la base d'un des modèles permettant de prévoir le temps de collision interparticulaire. Pour des particules dont la masse volumique est égale à celle du fluide Saffman et Turner [Saffman and Turner, 1956] proposent un modèle permettant d'exprimer la moyenne des vitesses relatives pour le cas des particules dont le diamètre n'est pas nul. Dans ce modèle on fait l'hypothèse que les particules suivent les lignes de courant du fluide. Comme elles ont un rayon non nul elles peuvent entrer en collision. Comme l'illustre la figure VII.7 ces collisions sont dues au cisaillement du fluide.

Le modèle de Saffman utilise le cisaillement moyen dans l'écoulement turbulent pour estimer le temps de collision interparticulaire. Le temps de collision interparticulaire s'exprime alors en fonction de la dissipation et de la viscosité du fluide :

$$\frac{1}{\tau_c^{S-T}} = n_p d_p^3 \sqrt{\frac{8\pi}{15} \frac{\epsilon}{\nu}} \quad (\text{VII.3})$$

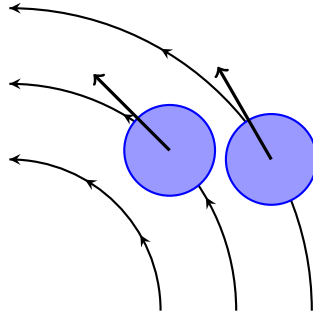


FIGURE VII.7 – Représentation d'une collision due au cisaillement des vitesses.

Dans les deux premières colonnes du tableau VII.3 on compare le temps de collision interparticulaire obtenu selon ces deux modèles. Pour le modèle approchant les écoulements des gaz raréfiés on utilise l'agitation des particules mesurée sur les particules solides pour chaque simulation. La théorie de Safmann et Turner met en jeu le taux dissipation visqueux dans le fluide. On utilise la valeur obtenue pour la simulation monophasique. Le diamètre utilisé est celui des particules $d_p = 0.3 m = 21.7 \eta_k$. Entre parenthèses on donne la valeur corrigée si l'on considère le diamètre utilisé pour la détection des collisions, $\tilde{d}_p = 0.33 m = 1.1 d_p$.

Dans nos simulations, l'agitation diminue légèrement en augmentant la masse volumique des particules. Ceci diminue le temps de collision théorique pour le premier modèle. Pour le modèle de gaz raréfiés par exemple on vérifie bien que moins on a de l'agitation moins on aura des collisions.

En ce qui concerne le modèle de Safmann et Turner on ne donne que la valeur pour le cas des particules neutres car il s'agit d'un modèle basé sur cette hypothèse. La proximité entre la valeur obtenue pour le modèle de Safmann et celle issue de l'hypothèse de décorrélation n'est peut être ici qu'un hasard. Le premier modèle étant basé sur l'agitation effective des particules et le second sur l'agitation prédit sur des particules sans masse et ne générant aucune perturbation autour d'elles. On rappelle que les hypothèses du premier modèle considèrent une décorrélation totale entre les particules lors du contact alors que dans l'autre cette hypothèse est loin d'être vérifiée.

Afin d'identifier le régime existant dans nos simulations on a cherché à mesurer le temps de collision interparticulaire. Le problème pour mesurer ce temps est que dans nos simulations le temps que dure une collision est fini. Afin de voir cet effet dans le temps de collision interparticulaire on a calculé deux temps. Le premier minore notre grandeur et consiste à mesurer le temps passé durant lequel une particule n'est pas en collision, Δt . Puis moyenner par le nombre d'intervalles considérés. Ainsi, on exclut le temps fini de la collision solide. Le deuxième majore cette mesure et consiste à comptabiliser le nombre de collisions et utiliser le temps total de la simulation. On utilise alors l'équation précédente, $\tau_c^m = \frac{N_p}{2N_{coll}} \Delta T_{simu}$. Dans le tableau VII.3 on donne l'intervalle obtenu pour ces deux méthodes.

ρ	τ_c^{th}/τ_k	$\tau_c^{S.-T.}/\tau_k$	τ_c^m/τ_k	$\langle \theta_{coll} \rangle$
1	60.1 (49.3)	63.8 (47.8)	[103.6..113.0]	44 °
2	62.3 (51.4)	-	[89.1..95.6]	59 °
4	64.5 (52.9)	-	[73.9..79.0]	69 °

TABLE VII.3 – Caractérisation des collisions. Les temps sont adimensionnés par l'échelle temporelle de Kolmogorov $\tau_k = 0.013803 s$.

La comparaison du temps de collision interparticulaire avec nos simulations montre une sous-estimation par les deux modèles de cette grandeur. On peut expliquer la sous-estimation produite par le premier modèle par le fait que nos particules d'une masse volumique proche de celle du fluide porteur suivent celui-ci. Ainsi, on ne peut plus considérer que deux particules soient complètement décorréelées car elles suivent un même écoulement porteur. On voit d'autre part que l'écart entre la valeur du modèle et celle mesurée diminue avec l'augmentation du rapport de masses volumiques. En effet, les particules sont d'autant plus décorréelées du fluide qu'elles ont une inertie importante.

En ce qui concerne la sous-estimation du modèle de Safmann et Turner pour le cas des particules neutres on peut donner une première explication. Contrairement aux hypothèses du modèle, les particules de taille finie, bien qu'elles soient neutres, perturbent le fluide porteur. Ainsi, elles ne suivent plus le fluide porteur et le cisaillement ne peut plus être assimilé à celui moyenné dans le fluide.

Il faut donc comprendre quels sont les phénomènes qui font que l'on a une fréquence de collision inférieure à la prédiction théorique.

Un étude complémentaire pour comprendre le régime de collision consiste à étudier la répartition statistique des temps écoulés pour chaque particule entre deux collisions. La moyenne de ce temps, τ_c ayant été étudiée précédemment. Pour analyser ce temps écoulé entre deux collisions on étudie la probabilité d'une particule à passer un temps Δt_{coll} sans entrer en collision. Dans le cas où les particules sont décorréelées et dans un mouvement aléatoire semblable à celui des gaz raréfiés une forme exponentielle permet d'exprimer la distribution de temps entre deux collisions :

$$P(\Delta t_{coll}) = \frac{1}{\tau_c} \exp\left(-\frac{\Delta t_{coll}}{\tau_c}\right) \quad (\text{VII.4})$$

Cette équation traduit que plus le temps est long plus la probabilité qu'une particule passe autant de temps sans rentrer en collision est faible. La figure VII.8 montre l'histogramme des temps de parcours des particules. Le temps de collision interparticulaire utilisé pour l'adimensionalisation est celui obtenu en moyennant les temps de parcours. On peut voir que les trois simulations réalisées répondent à l'équation (VII.4). Ceci confirme le caractère aléatoire du régime ainsi que la décorrélation des mouvements entre les particules durant leur parcours libre. Pour les grands temps de parcours les valeurs obtenues ne sont pas convergées du fait que le nombre d'événements pour ces longs temps n'est pas suffisant.

Le temps de parcours moyen est semblable à celui obtenu sur l'hypothèse de particules en mouvement aléatoire et non corrélés dans leur parcours libre. Il faut donc chercher une autre cause pour expliquer que la fréquence de collisions soit inférieure pour nos simulations vis-à-vis de la théorie.

Une possibilité est d'étudier la corrélation entre particules lors des collisions. En effet, dans le premier modèle théorique, l'augmentation du rapport de masses volumiques augmente le temps de collision interparticulaire alors que la tendance inverse est constatée pour les valeurs relatives aux simulations. Comme l'on a dit, ceci peut se comprendre si l'on considère que lors de la collision les particules ont des vitesses d'autant plus corrélées entre elles que les particules ont une densité faible.

Afin de quantifier la corrélation existante entre les particules lors des collisions on s'intéresse à la densité de probabilité de l'angle θ_{coll} entre les vitesses des deux particules lors de collisions. Théoriquement, pour le cas des particules complètement décorréelées lors des collisions cette probabilité peut s'écrire sous la forme, [Lavieville, 1997]¹ :

1. Dans l'écriture de cette probabilité il y a une erreur dans le texte d'origine, on donne ici la version corrigée.

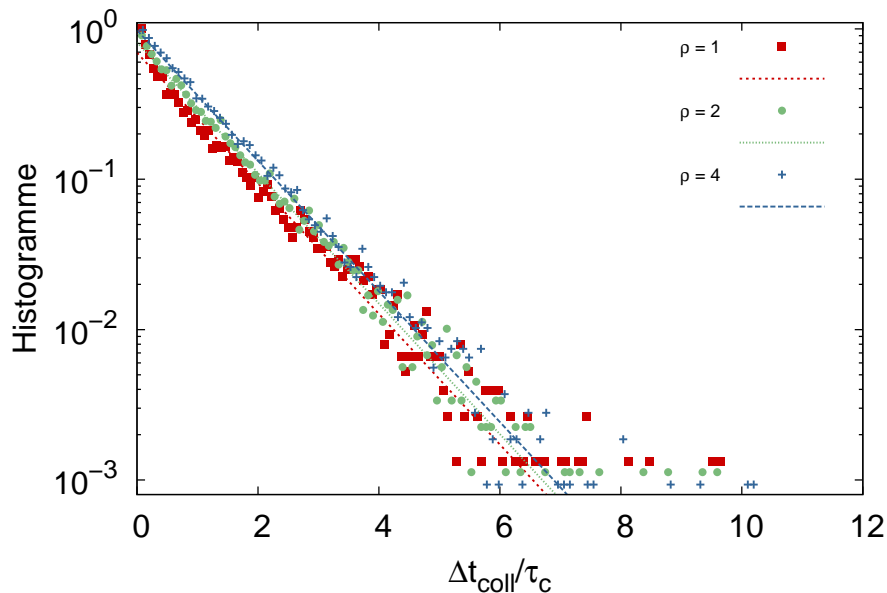


FIGURE VII.8 – Histogramme du temps entre deux collisions. Chaque symbole correspond à une simulation. Les lignes viennent de l'expression (VII.4).

$$f_{\theta}(\theta_{coll}) = \frac{\int_0^{\infty} \int_0^{\infty} 8\pi \sin(\theta_{coll}) V_a^2 V_b^2 \sqrt{V_a^2 + V_b^2 - V_a V_b \cos(\theta_{coll})} f(V_a) f(V_b) dV_a dV_b}{\int_0^{\pi} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} 8\pi \sin(\theta_{coll}) V_a^2 V_b^2 \sqrt{V_a^2 + V_b^2 - V_a V_b \cos(\theta_{coll})} f(V_a) f(V_b) dV_a dV_b} \quad (\text{VII.5})$$

Ici, V est la norme de la vitesse d'une particule et $f(V)$ représente la probabilité de trouver une particule avec cette vitesse.

Dans la figure VII.9 on montre la forme de cette courbe pour le cas d'une distribution des vitesses Gaussienne. On voit qu'il est alors plus probable d'avoir une collision pour des particules dont les vitesses sont orthogonales, que lorsque celles-ci sont alignées.

Afin de savoir si nos particules sont aussi décorrélés lors de collisions on a mesuré cette grandeur pour nos simulations. La figure VII.9 reprend la p.d.f. obtenue pour nos simulations. Tout d'abord on constate que pour nos particules on a un maximum pour des angles inférieurs à 90° . Le nombre de collisions est plus important pour les particules dont les vitesses sont parallèles (particules qui se suivent). Tenant compte que l'on a déjà vérifié la forme Gaussienne de la distribution des vitesses des particules solides, cette différence ne peut s'expliquer qu'à partir de l'autre hypothèse faite pour l'écriture de la forme théorique : la décorrélation des vitesses lors de la collision.

On voit que plus on augmente le rapport de densité plus on s'approche de la courbe théorique. Dans le tableau VII.3 on donne l'angle moyen à l'impact. On voit que plus on augmente la densité des particules plus cet angle augmente et plus la p.d.f. de l'angle entre les vitesses lors de collisions se rapproche de la forme théorique prévue pour des particules décorrélés et avec une agitation des vitesses distribuée en forme Gaussienne. Ceci est dû au fait que l'augmentation du rapport des masses volumiques entraîne une décorrélation des vitesses.

L'apparition des collisions avec un angle entre les vitesses inférieur à 90° peut s'expliquer en faisant une analogie avec le cas asymptotique proposé par Saffman et Turner [Saffman and Turner, 1956] pour des particules avec inertie nulle. Ces collisions seraient dues

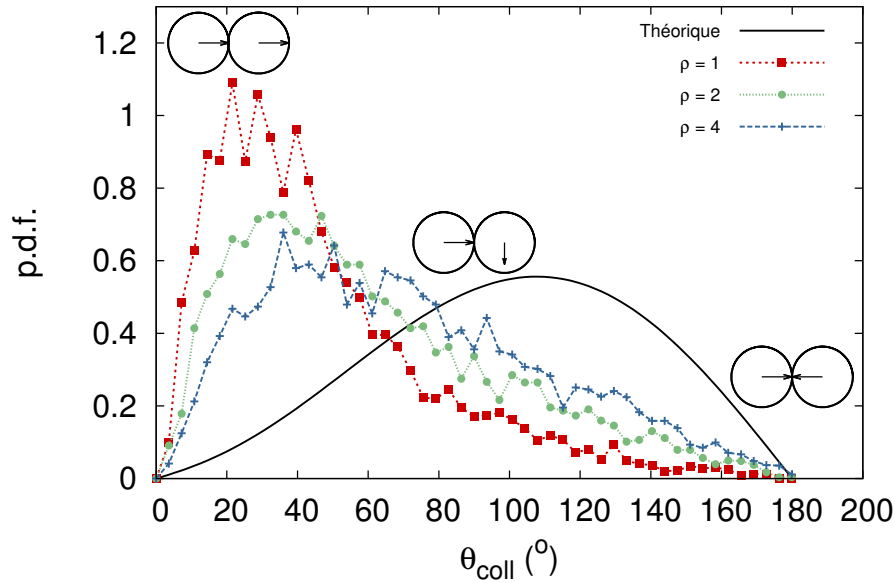


FIGURE VII.9 – Histogramme de l'angle entre les vitesses de deux particules au moment de l'impact.

au cisaillement de vitesse entre particules. La figure VII.7 donne un exemple de ce type de collision. Seulement, bien que les mécanismes soient semblables, nos particules, ayant un effet sur le fluide, ne répondent pas au modèle asymptotique.

Le fait que les particules se suivent lors de collisions entraîne que les collisions existantes vont être moins énergétiques que dans le cas de particules décorréées. Cet effet peut être quantifié grâce à la vitesse radiale moyenne lors d'une collision, $\langle |w_r| \rangle$. Comme dit précédemment cette grandeur peut être approchée pour le cas des particules décorréées par $\frac{1}{2} \sqrt{\frac{16}{\pi} \frac{2}{3} g_p^2}$. Dans la figure VII.10 (gauche) on donne l'historgramme de vitesses radiales lors du contact adimensionné par sa valeur théorique. Les vitesses obtenues sont inférieures à celles prédites par la théorie. Ceci montre que les collisions sont moins énergétiques que dans le cas des particules complètement décorréées. Lors des collisions, les particules entrent en contact en étant corrélées entre elles et avec le fluide environnant.

VII.1.5 Modification du régime collisionnel par la lubrification

Si on utilise l'historgramme des vitesses radiales lors du contact pour obtenir le nombre de Stokes de collision $St_{coll} = \frac{2}{9} \frac{R u_r \rho_p}{\mu}$ on s'aperçoit que bien que l'historgramme de vitesses radiales de collision montre des collisions avec des vitesses proches, le nombre de Stokes de collision augmente avec le rapport de masses volumiques, voir figure VII.10 (droite).

A partir de la distribution des nombres de Stokes de collision obtenue dans la figure VII.10 (droite) on peut déterminer la distribution des coefficients de restitution attendus lors des collisions. Pour ce faire on utilise la corrélation expérimentale permettant d'obtenir le coefficient de restitution effectif [Legendre et al., 2005], $\frac{e}{e_d} = \exp\left(-\frac{35}{St}\right)$. On montre alors que la réduction du nombre de Stokes lié à la diminution du rapport de masses volumiques a un effet important sur le coefficient de restitution attendu. La figure VII.11 montre l'historgramme des coefficients de restitution attendu pour nos simulations. Dans le cas des particules neutres ce coefficient de restitution

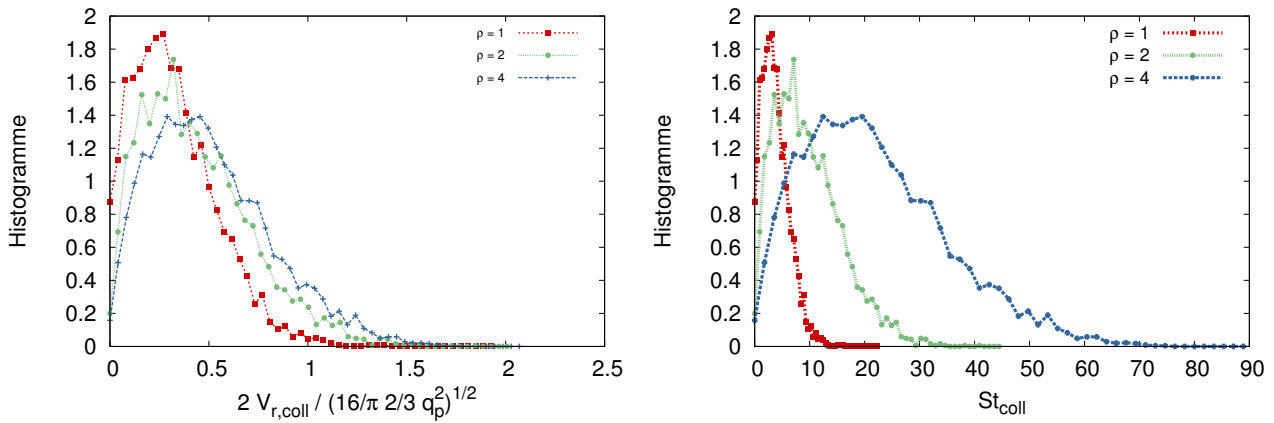


FIGURE VII.10 – Histogramme de la vitesse radiale lors des collisions (gauche) et histogramme du nombre de Stokes de collision (droite).

est proche de zéro. Ceci implique que, si l'on utilise le modèle de lubrification, les particules ne devraient pas repartir suite à une rencontre. C'est pour étudier ce phénomène qu'on a réalisé une deuxième simulation de ce cas ($\rho = 1$) mais en utilisant le modèle de collision développé durant la thèse et qui inclut l'effet de la lubrification.

Afin de simuler un cas avec lubrification on utilise le modèle présenté dans le chapitre V. Le coefficient de restitution à vide est fixé à 0.97. Dans les simulations précédentes la distance pour laquelle la collision solide s'active est de $1.1 R$. Cette distance est proche de celle pour laquelle on active la lubrification dans la simulation présentée dans cette section. Seul le cas critique $\rho = 1$ a été réalisé avec le modèle de lubrification.

Tout d'abord on s'intéresse à la dispersion des particules. L'agitation des particules q_p^2 reste presque identique au cas sans modèle de lubrification. Cela implique que bien que la vitesse relative entre particules soit réduite par la lubrification, cette réduction n'a aucune conséquence sur l'agitation globale des particules. La fonction d'autocorrélation des vitesses et le coefficient de dispersion restent aussi inchangés. La distribution des vitesses reste aussi proche d'une Gaussienne.

Si on s'intéresse à la p.d.f. des accélérations des particules avec lubrification on obtient une fonction identique si l'on supprime les accélérations durant l'activation du modèle de collision, voir figure VII.12.

Pour les particules avec lubrification une augmentation de la fonction de distribution radiale est observée pour les courtes distances. Comme pour le cas avec collision élastique on ne peut pas conclure sur cette augmentation car elle n'est pas suffisamment prononcée pour pouvoir la différencier des oscillations de la fonction. Toutefois, la moyenne de la distance au plus proche voisin diminue de 5% quand on active la lubrification. On peut pointer sur le modèle de collision pour expliquer cette diminution. En effet, la lubrification ralentit le départ après collision ce qui fait que des paires de particules restent collées pendant plusieurs itérations, diminuant ainsi la moyenne de la distance aux plus proches voisins.

Ensuite, si on regarde le régime de collisions on doit faire la différence entre rencontre entre particules et collision solide. Le temps de rencontre interparticulaire, i.e. le temps moyen passé entre deux activations du modèle de lubrification, est alors de $1.37 s = 99.3 \eta_k$. Cette valeur est proche du temps de collision interparticulaire obtenu pour le cas où l'on n'avait pas activé la lubrification, $1.43 s = 103.6 \tau_k$. Ceci montre que les particules se rencontrent sous les mêmes

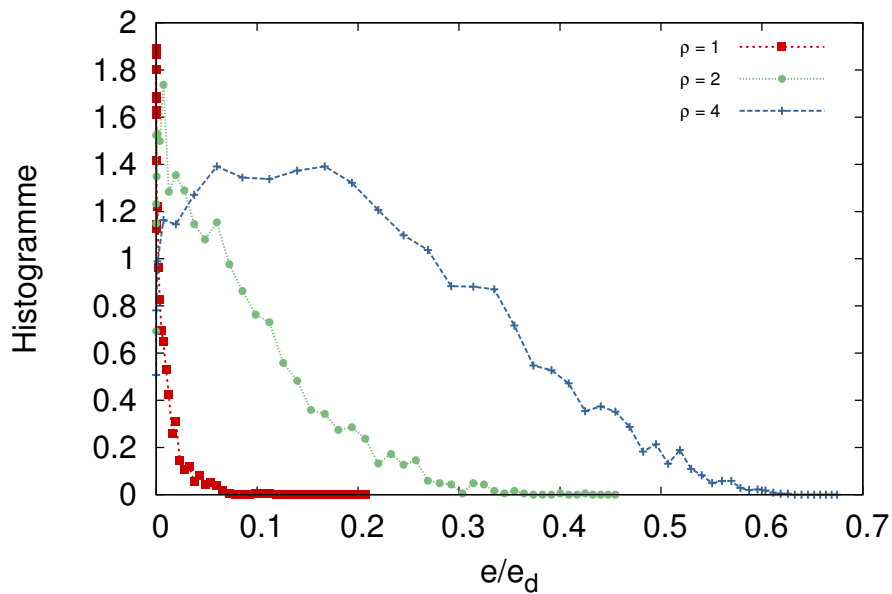


FIGURE VII.11 – Histogramme des coefficients de restitution prédits à partir de la corrélation de [Legendre et al., 2005], $\frac{e}{e_d} = \exp\left(-\frac{35}{St}\right)$.

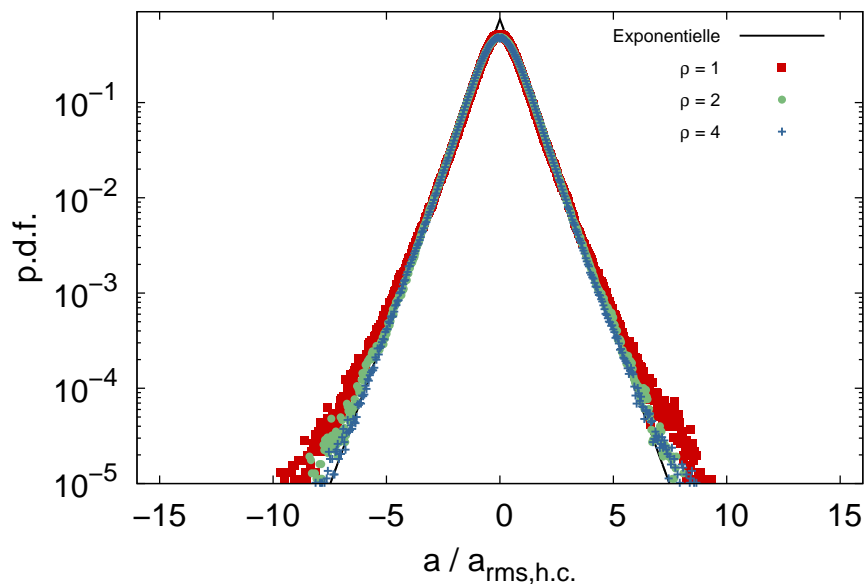


FIGURE VII.12 – Densité de probabilité (p.d.f.) des accélérations des particules sans prendre en compte les accélérations lors des collisions.

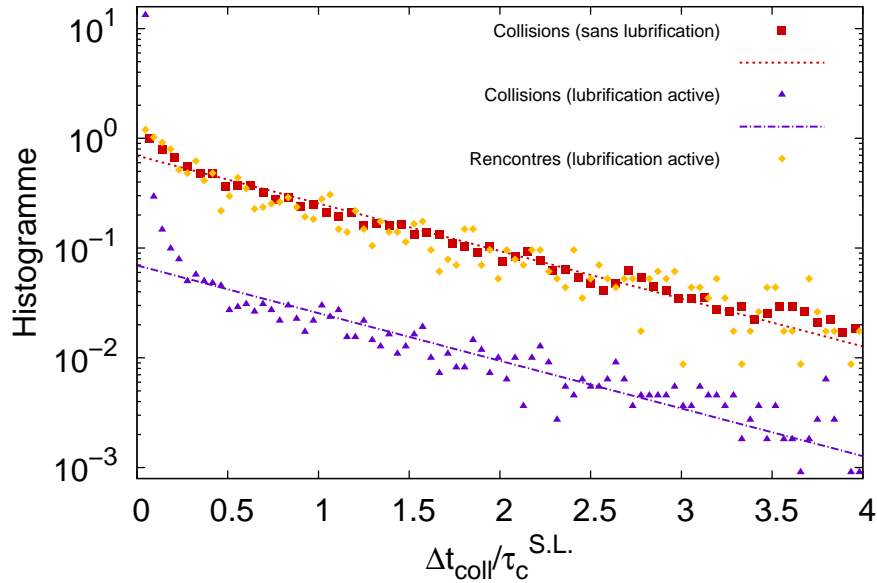


FIGURE VII.13 – Histogramme du temps entre deux collisions solides et histogramme des temps entre deux rencontres.

conditions que l'on ait ou pas de la lubrification. Si on regarde l'histogramme de rencontres pour le cas avec modèle de lubrification et que l'on compare à celui obtenu avec des collisions solides on observe une pente identique, voir figure VII.13. Ceci permet de conclure que les rencontres entre particules se produisent sous un même régime aléatoire.

Toutefois, si on s'intéresse au temps de collision interparticulaire dans le cas où on active la force de lubrification on observe une diminution radicale de celui-ci qui passe de $1.43 s = 103.6 \tau_k$ dans le cas sans lubrification à $0.16 s = 11.6 \tau_k$ dans le cas avec le modèle de lubrification activé. Ceci ne peut s'expliquer que si durant une rencontre (i.e. durant le temps que le modèle de lubrification reste activé) on a plusieurs collisions solides. Cette hypothèse est vérifiée si on regarde l'historique des collisions pour chaque particule. Dans la figure VII.13 on montre aussi l'histogramme des collisions solides pour le cas avec lubrification. On peut voir alors que l'histogramme des temps parcourus entre deux collisions augmente pour les petits temps. Durant une rencontre on a donc de nombreuses collisions qui se suivent. Ceci s'explique car la lubrification freine les particules quand elles s'éloignent, facilitant ainsi une nouvelle collision. Ce mécanisme a déjà été décrit par [Cate et al., 2004]. La figure VII.14 montre l'histogramme des temps entre collisions obtenu par les simulations de [Cate et al., 2004]. On peut voir le même comportement que dans nos simulations. Dans la nomenclature de l'article de Cate et *al.* on parle de collisions primaires et secondaires.

On peut observer que la pente de la distribution exponentielle pour les temps longs est la même pour les trois cas. Ceci montre que les régimes de rencontre sont ceux qui jouent un rôle essentiel pour les longs temps. En plus, cela montre que statistiquement quand on a une rencontre il y a une forte probabilité que durant cette rencontre on ait une collision solide.

Afin de séparer ces deux régimes [Cate et al., 2004] propose une loi de probabilité séparant les deux régimes :

$$P(\Delta t_{coll}) = \alpha P_1(\Delta t_{coll}) + (1 - \alpha) P_2(\Delta t_{coll}) \quad (\text{VII.6})$$

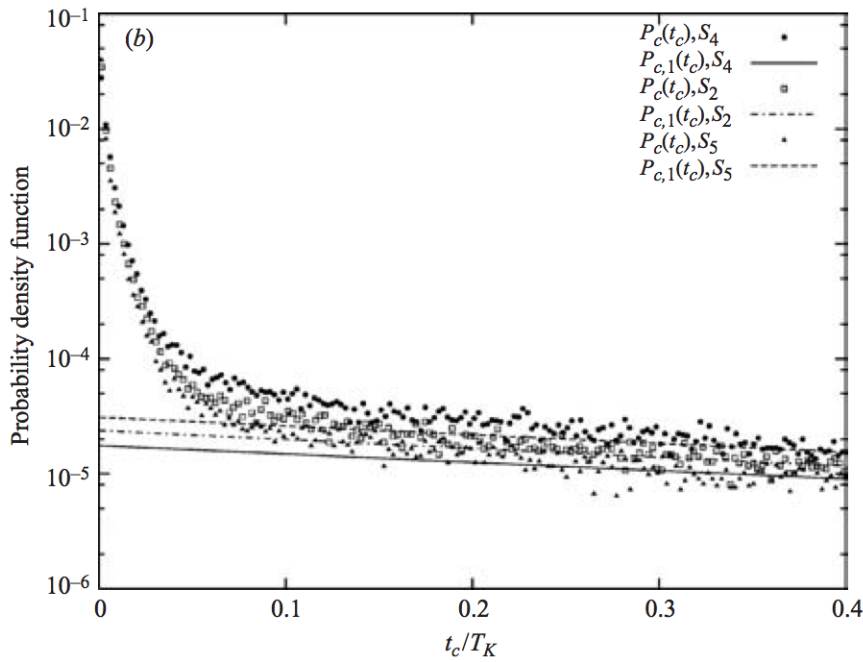


FIGURE VII.14 – Histogramme du temps entre deux collisions. Les symboles sont les résultats des simulations. Les lignes viennent de l’expression (VII.4). Les cas S4, S2 et S5 correspondent respectivement aux rapports de densité $\rho = \{1.146, 1.414, 1.728\}$. T_K est un temps caractéristique de la turbulence. Source : [Cate et al., 2004].

La loi P_1 est une loi exponentielle de la forme (VII.4), et la loi P_2 est obtenue à partir de la différence entre l’histogramme mesuré et P_1 . Dans ce modèle α représente la probabilité d’un intervalle à faire partie des collisions issues de la loi exponentielle. Plus α est grand moins l’effet de la lubrification est important.

Dans la simulation réalisée avec le modèle de lubrification on obtient αP_1 sous la forme $P(\Delta t_{coll}) = \frac{\alpha}{\tau_c} \exp\left(-\frac{\Delta t_{coll}}{\tau_c}\right)$. Pour cela on utilise le temps moyen de rencontres $\tau_c = \frac{1}{0.73} s$. Pour l’obtention du facteur α on réalise une régression parmi les valeurs obtenues pour les longs temps. Dans la figure VII.13 on voit que les collisions solides obtenues avec modèle de collision descendent d’une décade, ceci implique que l’on a $\alpha = 10\%$. Cela veut dire qu’en moyenne un dixième des parcours entre deux collisions se produit hors lubrification. Dans les simulations de Cate et al. α varie entre 8% et 11% ce qui montre que nos résultats sont cohérents avec les leurs.

L’existence de ces collisions secondaires a des effets importants sur le taux de collision. En plus, ces collisions secondaires n’ont pas la même dynamique que les collisions primaires (énergie mise en jeu, angle des vitesses au contact...). Il faut donc analyser ce phénomène pour pouvoir l’intégrer aux modèles présentés plus haut.

L’augmentation de la dissipation autour de la particule participe à la diminution de l’énergie présente dans l’écoulement pour des tailles inférieures à la taille de la particule. Dans la figure VI.6 on voit que l’augmentation de la masse volumique amplifie la différence entre le spectre monophasique et celui obtenu avec des particules.

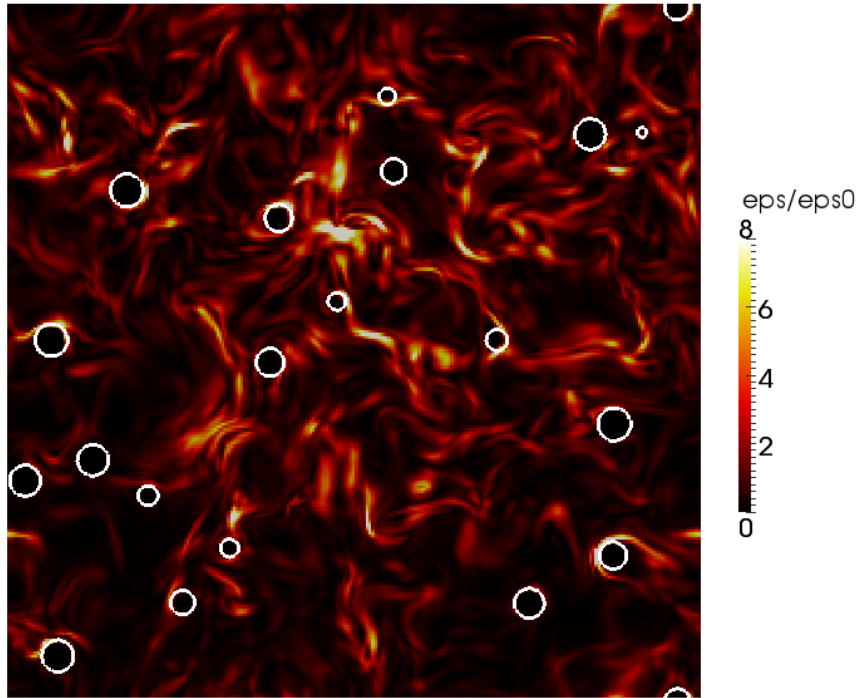


FIGURE VII.15 – Champ instantané de dissipation adimensionnée par la dissipation moyenne. Cas de rapport de densité 4.

VII.2 Etude de l'écoulement moyen autour des particules

Dans le cas des particules plus grandes que l'échelle de longueur de Kolmogorov on ne peut pas considérer que les particules sont dans un écoulement uniforme. La figure VII.15 montre la dissipation instantanée pour un cas chargé en particules dont la densité est 4 fois plus grande que celle de la phase porteuse. On peut voir que la taille des particules ne peut pas être négligée vis-à-vis de la taille des structures turbulentes. Il est donc intéressant d'extraire le champ moyen environnant les particules.

En plus, les champs instantanés ne permettent pas d'avoir une compréhension détaillée de la physique. C'est le cas de l'analyse de l'augmentation de la dissipation autour des particules. Dans plusieurs articles ([Cate et al., 2004]) on conclut l'existence d'une zone de dissipation autour de la particule à partir du champ instantané. En effet, si on regarde dans le détail la figure VII.15 on peut voir autour des particules des zones où la dissipation est importante. L'étude des champs instantanés reste qualitative ce qui rend cette approche insuffisante.

C'est donc dans le but de déterminer l'écoulement autour de la particule que l'on a mis en place une méthode permettant d'évaluer l'écoulement moyen autour des particules.

VII.2.1 Algorithme pour déterminer le champ moyen autour des particules solides

Afin de comprendre la nature des perturbations créées par une particule on s'intéresse au champ moyen autour des particules. Pour cela on définit un repère local cylindrique centré sur la particule permettant de prendre en compte la direction d'avancement de la particule. Le vecteur de base unitaire est le vecteur vitesse de la particule normalisé, $\mathbf{e}_{\mathbf{v}_p} = \frac{\mathbf{V}_p}{\|\mathbf{V}_p\|}$. Pour établir le champ

moyen on fait l'hypothèse que l'isotropie de l'écoulement permet de considérer que le champ moyen est inchangé par rotation autour de cet axe. Ainsi, on regarde le champ moyen dans le plan $\{\theta, r\}$, où θ est l'angle par rapport au vecteur $\mathbf{e}_{\mathbf{V}_p}$ et r la distance au centre de la particule.

Afin de créer ce plan on procède comme suit :

1. On calcule les grandeurs qui nous intéressent dans le maillage eulérien.
2. On interpole ces valeurs sur la surface d'une sphère dont le centre est le centre de la particule considérée et de rayon r_i .
3. Pour chaque point interpolé on calcule l'angle θ avec le vecteur unitaire $\mathbf{e}_{\mathbf{V}_p}$. Si $\theta \in [\theta_j, \theta_{j+1}]$, on ajoute ce point à la moyenne dans le maillage du plan au point $\{\theta_{j+1/2}, r_i\}$.

Ce processus est réalisé sur chaque particule et à différents instants de la simulation. Dans l'algorithme original seuls les angles $\theta \in [0..180]$ sont pris en compte. Par souci de lecture l'affichage des zones moyennées est réalisé avec une symétrie par rapport à l'axe d'avancement de la particule. La figure VII.16 reprend ces trois étapes pour la réalisation de la moyenne. Cet algorithme a été mis en place sous la plate-forme Python existant dans le logiciel open source Paraview.

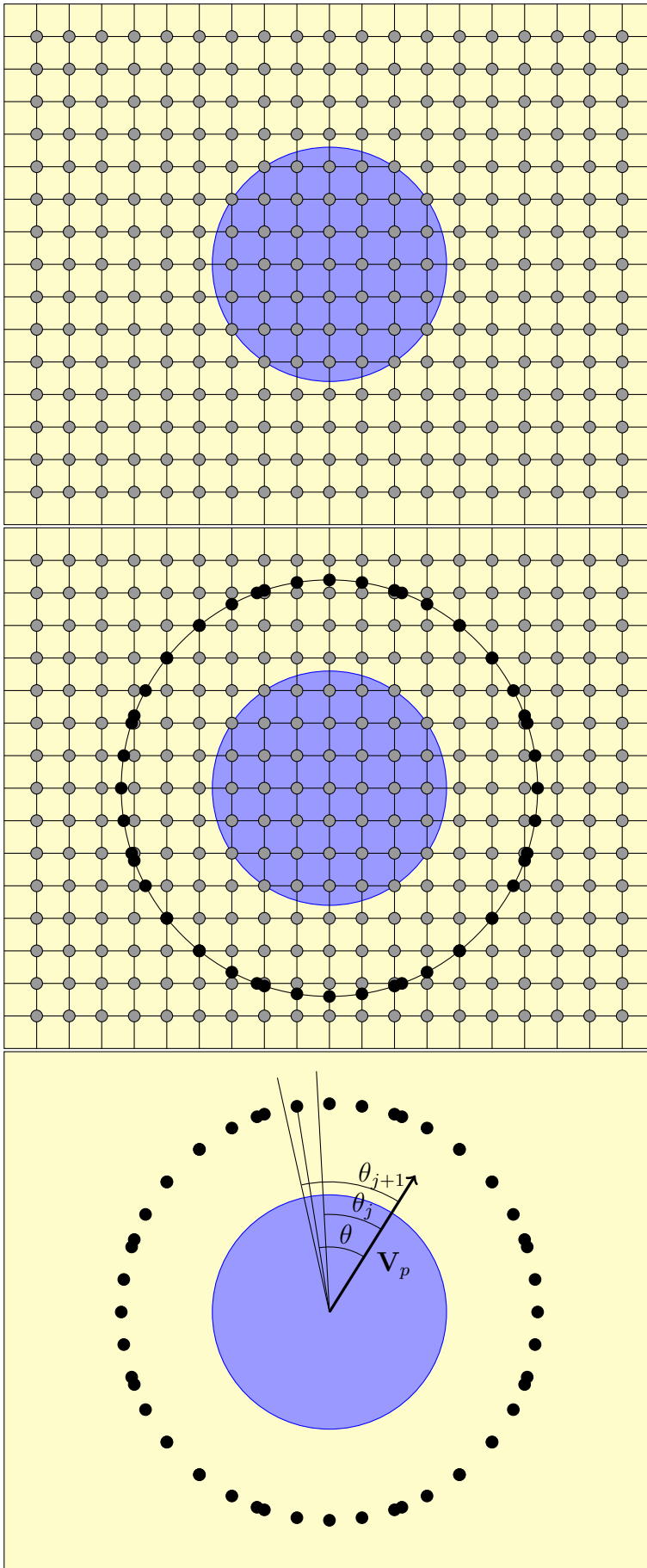
Pour chaque particule on a réalisé 13 sphères concentriques avec des rayons croissants. La dernière étant à 6 rayons de distance du centre. Les valeurs obtenues pour des distances au delà de 3 rayons doivent être traitées avec précaution car c'est la distance moyenne au plus proche voisin. Le maillage a été raffiné près de la sphère afin d'obtenir une description détaillée de la couche limite. Les angles θ_j ne sont pas non plus distribués de façon homogène. Ils sont placés de sorte à ce que pour un rayon donné on ait une surface égale pour chaque angle. La figure VII.17 montre le maillage obtenu par cette méthode.

VII.2.2 Description de l'écoulement moyen autour des particules

Afin de préciser le régime d'écoulement autour de la particule, il faut évaluer le nombre de Reynolds particulière : $Re_p = \frac{2R|\mathbf{V}_p - \mathbf{u}_\infty|}{\nu}$. La difficulté pour estimer ce nombre de Reynolds dans nos simulations est qu'il est impossible de connaître la vitesse de glissement. En effet, la taille des particules est de l'ordre de la micro-échelle de Taylor, et donc, l'écoulement autour ne peut pas être considéré comme uniforme.

La figure VII.18 présente un champ instantané de vitesses pour la simulation dont le rapport des masses volumiques vaut 4. On trouve autour de la particule des tourbillons qui ne semblent pas être affectés par les particules. On voit donc la difficulté d'estimer un écoulement moyen autour de la particule. D'autre part, on peut observer que derrière les particules (là d'où elles viennent) l'écoulement semble suivre la vitesse de la particule. En effet, on peut s'attendre à que les trajectoires des particules, ayant un faible rapport de densité par rapport au fluide, ne sont pas complètement décorréliées par rapport au mouvement du fluide autour.

Toutefois, on peut donner une majoration du Reynolds particulière en faisant l'hypothèse que le fluide est au repos. Cette hypothèse se justifie dans le fait que la moyenne des vitesses fluides est nulle. On regarde alors le nombre de Reynolds calculé à partir de la vitesse moyenne des particules $Re_p = \frac{2R\langle|\mathbf{V}_p|\rangle}{\nu}$. Dans nos trois simulations cette moyenne de la norme des vitesses vaut $\langle|\mathbf{V}_p|\rangle = \{1.49, 1.43, 1.38\} m s^{-1}$ respectivement. Si on calcule le nombre de Reynolds pour ces trois cas on obtient $Re_p = \{149, 143, 138\}$. On rappelle ici que dans le cas des particules dans un écoulement uniforme on a plusieurs régimes, [Clift et al., 1978]. Pour des faibles nombres de Reynolds particulières, inférieurs à 20, l'écoulement est non décollé autour de la particule. Pour des nombre de Reynolds intermédiaires, entre 20 et 130, une recirculation stable et axisymétrique apparaît derrière la particule. Finalement pour des nombres de Reynolds supérieurs cette recirculation devient non axisymétrique, puis instable pour des nombre de Reynolds encore supérieurs.



1. Calcul des grandeurs aux noeuds du maillage Eulérien.

2. Interpolation des grandeurs sur la sphère de rayon r_i .

3. Prise en compte de l'angle avec la direction d'avancement.

FIGURE VII.16 – Etapes de calcul pour réaliser les moyennes autour de la particule.

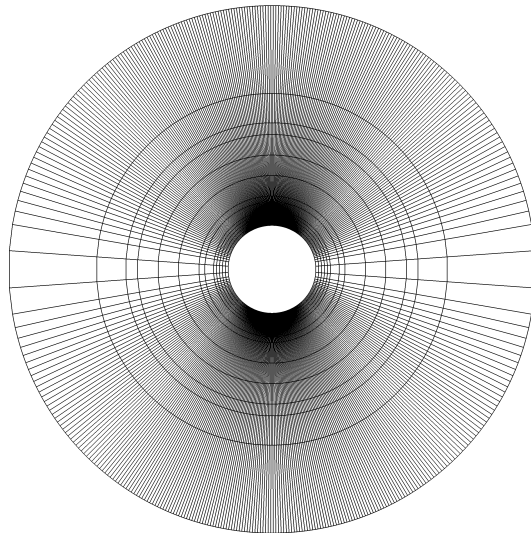


FIGURE VII.17 – Maillage résultant de notre méthode de moyennage.

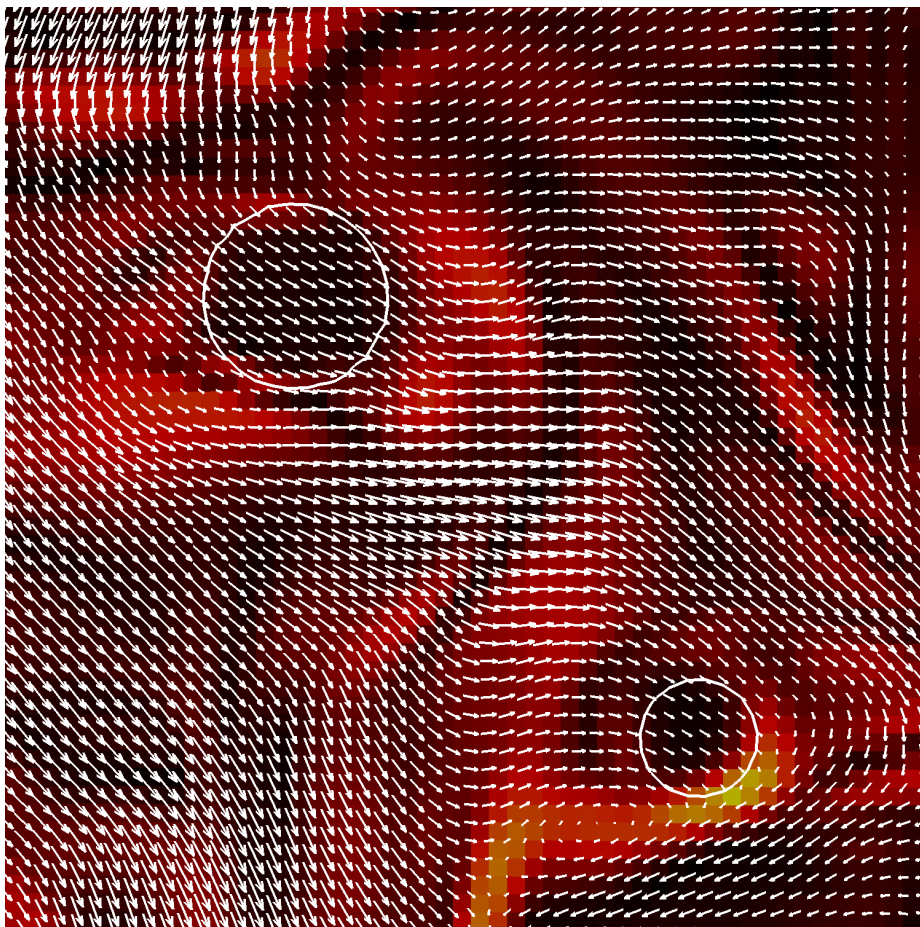


FIGURE VII.18 – Champ de vitesse et de vorticité instantanés autour de deux particules voisines.

La transition entre ces régimes varie d'un auteur à l'autre, voir [Johnson and Patel, 1999] par exemple. Sous cette hypothèse le nombre de Reynolds calculé pour chacune de nos simulations est tel que l'on s'attend à avoir déclenché une recirculation derrière les particules.

Il faut bien insister que cette majoration est loin du nombre de Reynolds de glissement effectif. Si on prend comme hypothèse l'écoulement au repos autour de la particule en haut à gauche dans la figure VII.18 cette particule aurait un nombre de Reynolds aux alentours de 200. Ceci impliquerait l'existence d'un sillage instable derrière la particule. On voit clairement que ce n'est pas le cas.

Le nombre de Reynolds basé sur la vitesse moyenne des particules étant inapproprié on doit étudier en détail l'écoulement autour des particules et s'intéresser au champ moyen de vitesse autour des particules. L'avantage de réaliser la moyenne autour des particules est que les tourbillons étant aléatoires ils disparaissent lors de l'opération de la moyenne. On obtient ainsi l'écoulement moyen perturbé par la présence des particules.

Dans la figure VII.19 on montre les lignes de courant construites à partir des vitesses moyennées autour des particules. On constate que les lignes de courant sont décollées de la particule. Ce décollement pourrait être associé dans une première approche à une recirculation, seulement quand on regarde les particules individuellement aucune recirculation n'est constatée. En plus, si on affiche des lignes de courant dans cette zone on n'observe pas des lignes fermées caractéristiques d'une zone de recirculation. L'écoulement ne peut donc pas être assimilé à celui correspondant au nombre de Reynolds calculé dans la majoration précédente.

L'écoulement moyenné autour de la particule a la même forme que celui d'une particule en régime de Stokes. Ceci peut être confirmé si l'on compare l'écoulement moyenné autour de la particule, figure VII.19, aux mêmes grandeurs pour un écoulement de Stokes, voir figure VII.20 (gauche). La vitesse diminue de part et d'autre de la particule (en haut et en bas dans la figure). Si l'on compare au régime potentiel la vitesse dans cette région augmente, voir figure VII.20 (droite). L'écoulement est perturbé sur une distance de l'ordre de quelques rayons.

Une différence majeure est constatée dans l'asymétrie des lignes de courant et de la vitesse entre l'aval et amont de la particule par rapport à un écoulement de Stokes. Cette asymétrie peut être comprise quand on regarde le champ de vitesse instantané autour des particules. Comme on a dit précédemment on voit dans la figure VII.18 que les deux particules semblent avoir une vitesse proche de celle du fluide dans son environnement.

Afin d'évaluer cette différence on compare les valeurs théoriques du régime de Stokes aux valeurs obtenues en moyennant autour des particules sur l'axe d'avancement de la particule, voir figure VII.21. La perturbation de nos particules s'étale sur une plus grande distance que dans le cas du régime de Stokes. En plus, l'asymétrie de l'écoulement se traduit par une vitesse du fluide moins importante derrière la particule comparativement au régime de Stokes. Ainsi, le fluide reste perturbé au delà de 6 rayons. Cette distance est proche de la macro-échelle de Taylor, Λ (distance d'autocorrélation spatiale longitudinale, équation (VI.11)). Ainsi, pour cette distance deux points devraient être décorrélés. L'effet des particules est donc de corréliser entre elles les vitesses. L'asymétrie entre la zone avant et arrière de la particule montre que les particules derrière la particule restent d'avantage corrélées avec la vitesse de la particule.

Dans nos simulations on retrouve une distance du fluide perturbé beaucoup plus grande que celle de la moyenne au plus proche voisin. De ce fait les conclusions que l'on peut tirer sur la perturbation restent à confirmer. Pour pouvoir conclure sur ce point il faudrait réaliser la même simulation mais en incluant très peu de particules afin de pouvoir isoler chacune d'elles jusqu'à son rayon de perturbation.

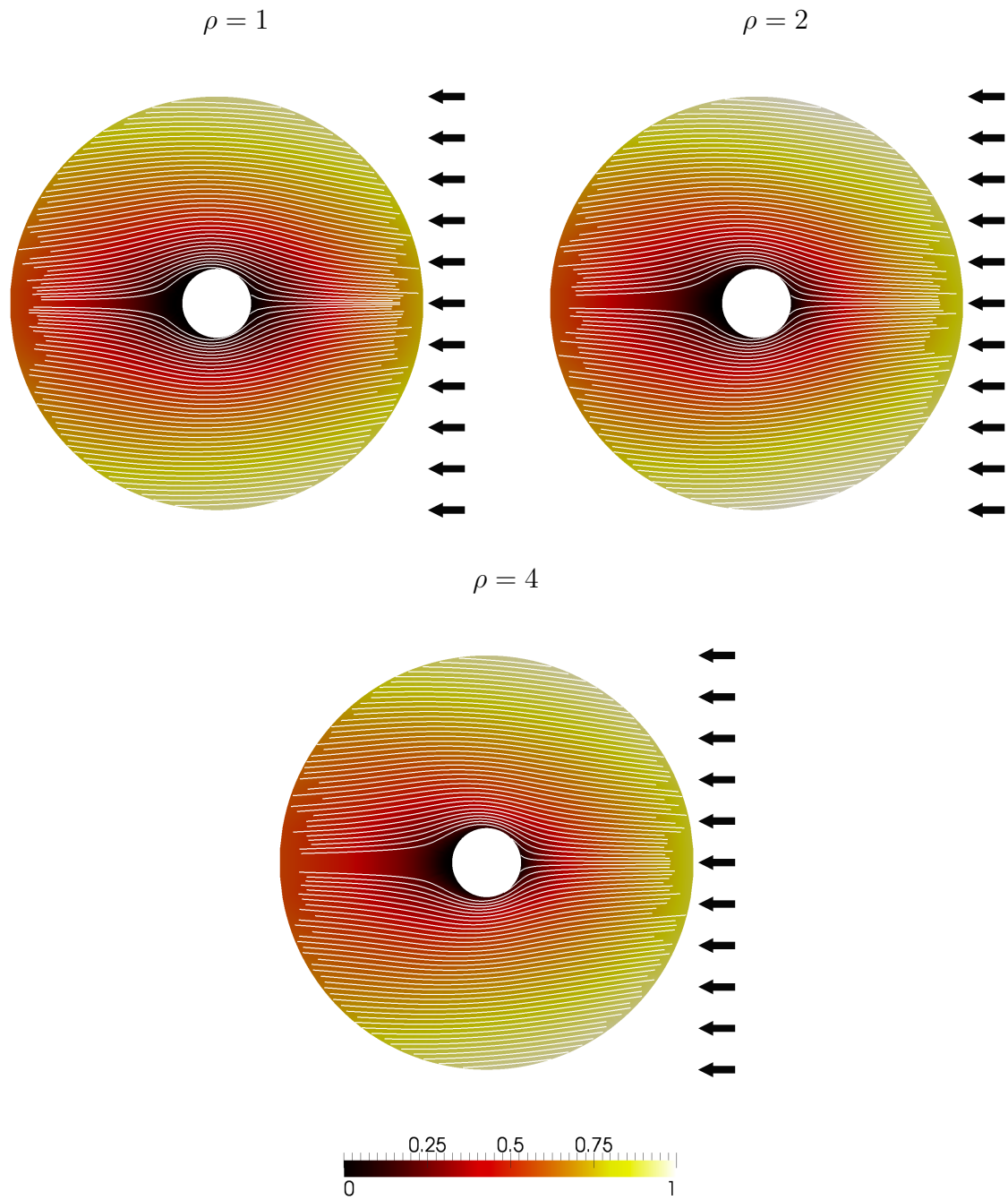


FIGURE VII.19 – Lignes de courant obtenues à partir du champ de vitesse moyen autour des particules. Champ de la norme de cette même vitesse adimensionnée par la vitesse caractéristique des particules $\langle |\mathbf{V}_p| \rangle$ (r.m.s. des fluctuations).

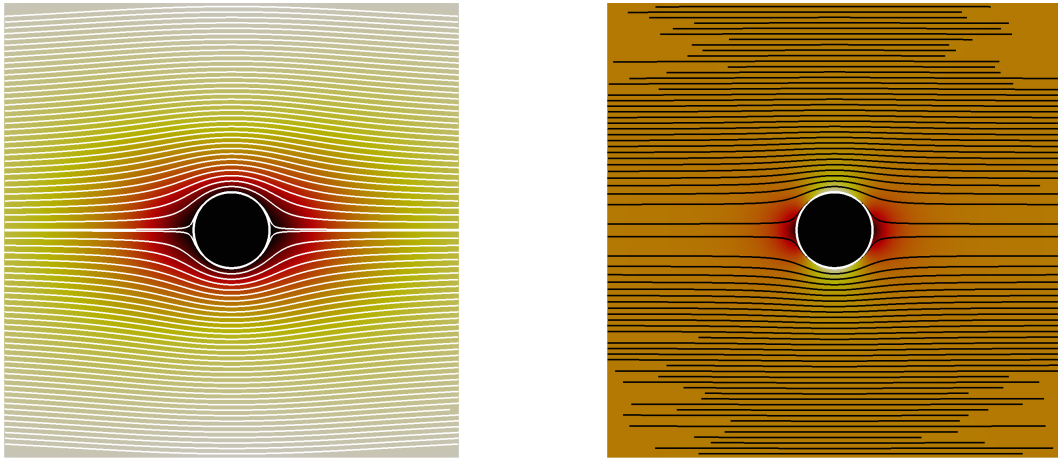


FIGURE VII.20 – Lignes de courant et norme de la vitesse pour une particule en régime de Stokes (à gauche) et en régime potentiel (à droite).

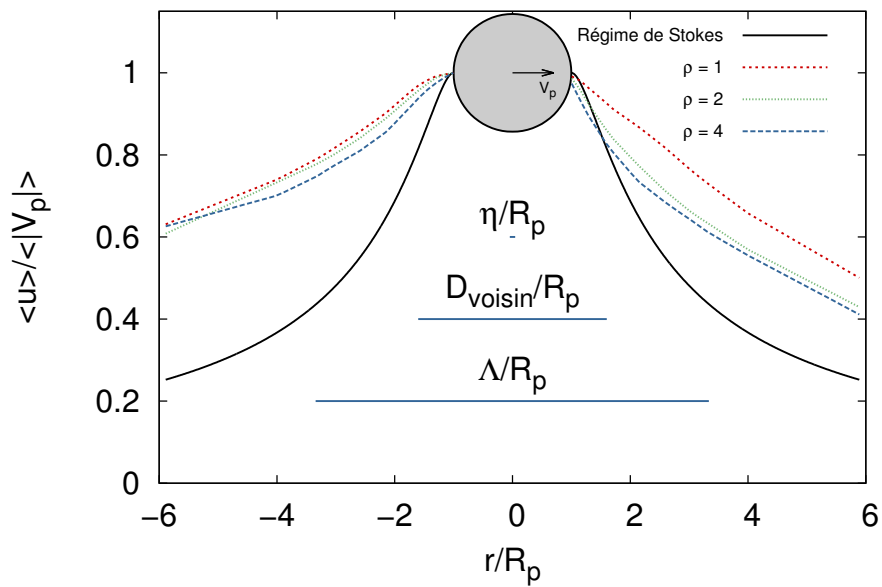


FIGURE VII.21 – Profil de vitesse moyenne autour de la particule dans la direction du déplacement. Comparaison au régime de Stokes. A titre indicatif on donne des tailles caractéristiques de l'écoulement fluide.

VII.2.3 Dissipation autour des particules de taille finie

La modulation de la turbulence par des particules est issue de la combinaison des trois mécanismes suivants. Le premier est le transfert d'énergie entre les différentes échelles qui est modifié par la présence des particules. Ce premier mécanisme n'a pas d'influence sur l'énergie totale de l'écoulement. Le second est le transfert d'énergie exercé par la force de trainée qui apporte ou enlève de l'énergie au fluide modifiant ainsi la turbulence. Le troisième mécanisme provient du fait que les particules génèrent autour d'elles une modification locale de l'écoulement, modifiant ainsi la dissipation locale.

Afin de caractériser ce dernier mécanisme [Lucci et al., 2010] proposent d'analyser la dissipation autour de la particule. Ils considèrent deux zones distinctes pour moyenner, une zone devant la particule et une zone derrière la particule. Pour obtenir cette moyenne, Lucci et *al.* utilisent chaque noeud du maillage pour lequel le terme $\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right)^2$ est calculé. Ce terme étant proportionnel à la dissipation. Ensuite ils cherchent la particule la plus proche et ils ajoutent ainsi la valeur obtenue sur ce noeud à la moyenne. Pour cela ils calculent la distance au centre de la particule et regardent si le noeud est devant ou derrière la particule. Cette approche réduit le problème de savoir si un point considéré est perturbé par l'une ou par l'autre des particules. Seulement, dans cette approche la distance maximale qui est considérée est limitée par la fraction volumique du solide.

Dans notre cas on calcule le terme $\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)^2$ dans tout le domaine puis on le moyenne avec la méthode décrite précédemment. La différence obtenue entre les termes $\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)^2$ et $\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right)^2$ est minime dans nos simulations. En effet, dans le cas d'une turbulence homogène et isotrope et d'un écoulement incompressible ces deux grandeurs sont égales. Notre choix provient du fait que, pour être précis près de la particule il est conseillé de garder l'écriture non simplifiée de la dissipation.

Une fois cette grandeur calculée sur les sphères d'analyse on sépare le domaine en 2 zones, $\theta < 90^\circ$ et $\theta > 90^\circ$. Ceci dans le but d'obtenir une grandeur équivalente à celles présentées par [Lucci et al., 2010]. La figure VII.22 (gauche) reprend les résultats obtenus par ce dernier et ceux obtenus par nos simulations. On adimensionnalise par la valeur obtenue pour la plus grande distance pour laquelle la dissipation est calculée.

Tout d'abord devant et derrière la particule, on constate une augmentation de la dissipation pour des distances allant jusqu'à 1 rayon. Cette augmentation de la dissipation est due à la perturbation créée par la couche limite de la particule. La dissipation augmente avec le rapport des masses volumiques. Ceci est dû au fait que les particules plus denses ont une inertie plus grande et qu'elles sont moins corrélées avec le fluide environnant. De ce fait, le cisaillement créé par la couche limite est plus grand, et donc la dissipation également. Dans la figure VII.21 on peut en effet constater que devant la particule la pente de la vitesse du fluide à la frontière de la particule augmente avec le rapport des masses volumiques, ce qui montre une augmentation du cisaillement.

Dans l'article de [Lucci et al., 2010] les auteurs montrent par ailleurs que cette dissipation locale ne dépend pas de la fraction volumique de solide. En outre, dans leur article ils montrent qu'en augmentant le rayon la dissipation augmente aussi. Toutefois, la distance sur laquelle cette dissipation se produit reste constante. Ceci s'explique par le fait que l'épaisseur de la couche limite autour de la particule ne dépend pas de la taille de celle-ci. Dans la figure VII.22 (droite) on adimensionnalise la distance à la particule par l'échelle de longueur de Kolmogorov. On peut voir que la couche dissipative apparaît pour $8 \eta_k$. On pourrait conclure donc que l'épaisseur

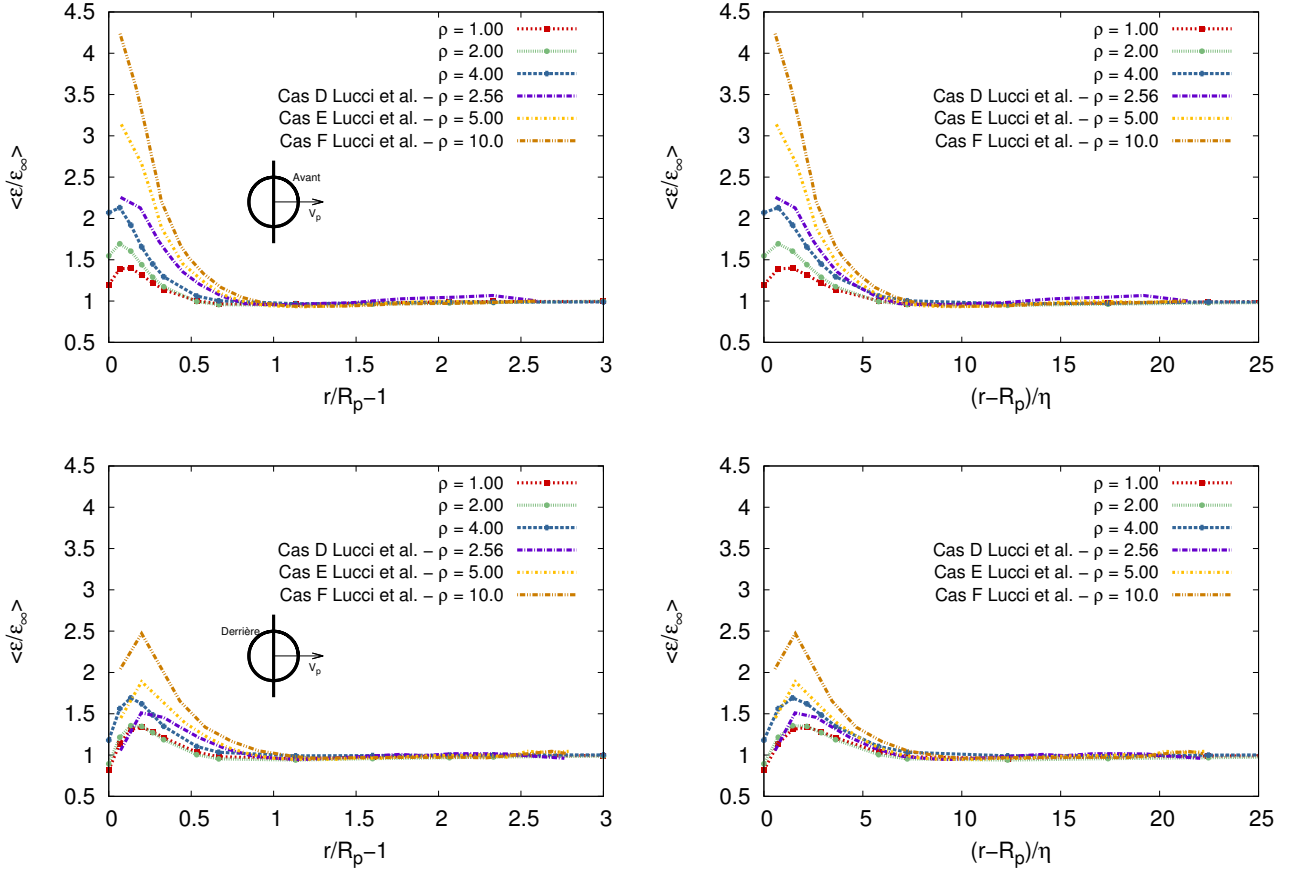


FIGURE VII.22 – Dissipation moyenne devant et derrière la particule en haut et en bas respectivement. On inclut les résultats de [Lucci et al., 2010]. A gauche on adimensionalise par l'échelle de Kolmogorov.

caractéristique est fonction de l'échelle de Kolmogorov (ces résultats étant compatibles avec ceux de Lucci et *al.*). Toutefois, le nombre de cas disponibles n'est pas suffisant pour déterminer une loi d'échelle claire de la dissipation selon le rayon ou selon les échelles de l'écoulement.

Une comparaison sur le champ de dissipation autour des particules peut être faite avec les expériences de [Tanaka and Eaton, 2010]. Dans la figure I.10 donnée dans l'introduction on peut voir l'un de ces résultats. Ils montrent que la dissipation autour des particules va jusqu'à 3 fois la dissipation moyenne. On peut estimer que cette dissipation est encore étalée sur un diamètre de particule (ce qui équivaut pour leur configuration à environ $2 \eta_k$). Tenant compte que dans leur configuration les particules sont en chute libre, on peut voir que comme pour nos simulations l'augmentation de la dissipation est plus importante devant la particule. Dans le champ instantané, on ne retrouve pas de dissipation derrière la particule.

On peut constater aussi que la dissipation produite derrière la particule est nettement inférieure à celle produite devant. Cette diminution peut être liée au sillage de la particule et notamment à la corrélation des vitesses qu'elle produit derrière elle. Afin de confirmer cette hypothèse on montre dans la figure VII.23 le champ de dissipation moyenné autour des particules. On constate que cette dissipation moyenne n'augmente pas derrière la particule dans la zone où les vitesses sont proches de la vitesse du fluide, voir la figure VII.19. En plus, si on regarde la pente de la vitesse du fluide calculé derrière les particules, figure VII.21 on constate que cette pente est nulle. Ceci montre que derrière la particule il y a peu de cisaillement.

Comprendre les mécanismes qui conduisent à cette augmentation de la dissipation est essentiel pour pouvoir prédire la modulation de la turbulence. On a montré ici que c'est un effet principalement dû à une couche limite générant un fort cisaillement. La dissipation totale sera d'autant plus grande que l'interface solide-fluide sera étendue. Elle augmente aussi quand le mouvement des particules est décorrélé de l'écoulement du fluide environnant.

VII.3 Conclusion

Le régime de suspension turbulente considéré met en jeu tous les phénomènes au même temps ce qui rend difficile l'analyse détaillée de chacun d'entre eux. Ainsi, l'absence de séparation d'échelles est une difficulté supplémentaire. On peut voir deux principales difficultés. La première est que le temps de parcours moyen entre deux collisions est proche du temps d'autocorrélation temporel des vitesses. Il est donc difficile de séparer dans l'étude l'influence des collisions de celle exercée par le fluide porteur. La deuxième est que la distance moyenne au plus proche voisin est de l'ordre des échelles intermédiaires de la turbulence. Ceci rend plus compliqué l'étude de l'écoulement moyen autour des particules.

Toutefois, l'analyse des différents phénomènes présents dans nos simulations a permis de contribuer à la compréhension de ces écoulements. Tout d'abord le régime de dispersion semble proche de celui obtenu pour des particules fluide. Seulement, du fait qu'elles ont une taille finie, l'agitation à laquelle elles sont soumises n'est pas celle des particules ponctuelles.

Le régime de collisions ne suit pas les modèles classiques. L'étude des collisions permet d'avancer que les particules sont corrélées lors des collisions. Cette corrélation joue un rôle important dans l'énergie de collision. En effet, on montre que les particules rentrent en collision en se suivant, ce qui diminue la vitesse relative lors de la collision. Ce résultat est essentiel car, dans les applications, la vitesse relative lors de la collision va déterminer le type de collision. Dans le cas des collisions dans un fluide visqueux on a pu constater que la faible vitesse relative fait que l'on retrouve des particules qui, suite à une rencontre, restent collées pendant longtemps. Plusieurs collisions solides se suivent avant la séparation des particules.

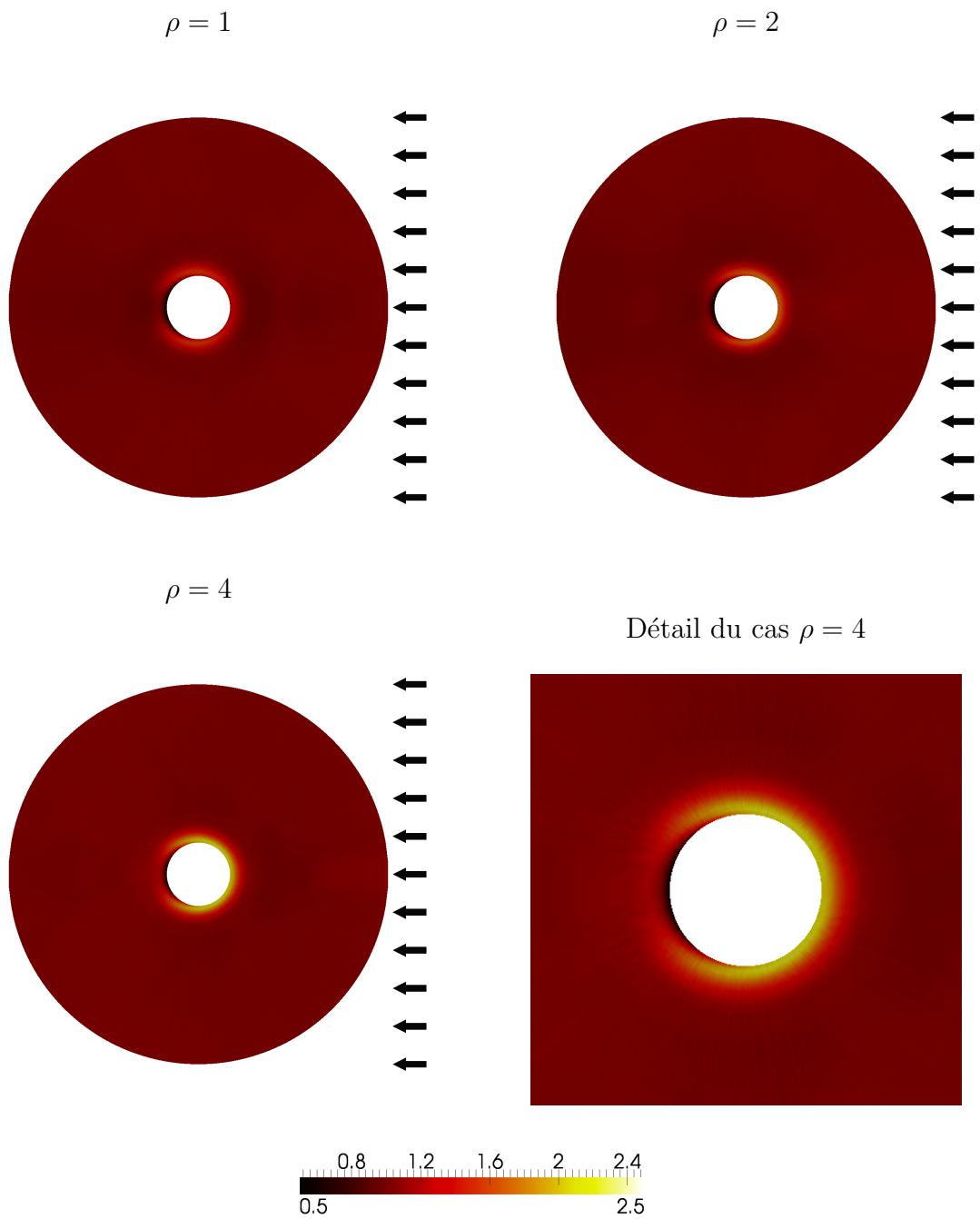


FIGURE VII.23 – Dissipation moyennée et adimensionnée par la dissipation à l'infini.

L'étude des champs instantanés des particules isolées permet d'apercevoir une corrélation entre les particules et le fluide environnant. Cette corrélation des trajectoires des particules avec le fluide environnant appuie l'explication donnée pour le faible taux de collisions. Néanmoins, pour avoir le détail sur cette corrélation, il faut réaliser une étude moyennée des vitesses autour des particules. Cette étude a permis de décrire la perturbation du fluide environnant dû à la présence des particules.

Finalement, on a pu confirmer l'existence d'une zone autour de la particule dans laquelle la dissipation augmente fortement. Cette zone contribue à la modulation de la turbulence.

Conclusions et perspectives

Les écoulements chargés en particules sont présents dans de nombreuses applications industrielles et dans plusieurs phénomènes naturels. La compréhension de ces écoulements est très aboutie quand les particules peuvent être considérées comme ponctuelles. Le nombre d'études pour des écoulements avec des particules de taille finie est beaucoup plus limité. Or, dans certains écoulements particuliers on ne peut pas considérer les particules comme ponctuelles. C'est pourquoi ces dernières années l'étude des écoulements avec des particules de taille finie est en plein essor. Il reste pourtant plusieurs mécanismes à comprendre.

Parmi ces mécanismes on en retient ici quelques uns : la dispersion et la ségrégation des particules dans un écoulement turbulent ne sont pas aussi bien détaillées pour des particules de taille finie que pour les particules ponctuelles. Aucune analyse du type de collisions existant dans les écoulements particuliers avec des particules de taille finie n'a pas encore été faite. Finalement, la modification d'un écoulement turbulent par la présence des particules n'a pas été approfondie et se limite à quelques études.

Afin d'améliorer la compréhension de ces mécanismes on a développé durant cette thèse une méthode originale capable de traiter ce type d'écoulements. Cet outil de simulation, complètement parallélisé, pourra dans le futur suivre l'augmentation progressive de la puissance de calcul, et permettra ainsi de réaliser des simulations inaccessibles de nos jours.

Cette méthode numérique est basée sur la pénalisation par maille des parties solides. Les zones solides sont représentées par des zones avec une grande viscosité. De ce fait, la résolution de la partie solide se fait en même temps que la résolution des équations de Navier-Stokes. Le code Thétis étant semi-implicite pour cette résolution, on obtient un couplage implicite entre la partie solide et la partie fluide. L'absence de *splitting* est le grand avantage de la méthode proposée et permet à cette méthode de s'approcher de l'ordre 2 en temps pour certains cas de validation. Le point faible de la méthode provient du fait que pour assurer la stabilité de l'algorithme de résolution des équations de Navier-Stokes il faut limiter le saut de viscosité entre le solide et le fluide. De ce fait, la zone où le solide est présent n'a pas un champ de vitesse solide. Pour translater la particule il faut donc approcher sa vitesse en réalisant une moyenne sur la zone solide.

Une attention particulière a été portée sur le modèle de collision entre particules. Lorsque les collisions sont nombreuses ces dernières jouent un rôle primordial dans l'analyse des grandeurs propres aux écoulements particuliers. Dans notre cas, on a adapté un modèle de collision permettant la prise en compte de la lubrification. Ce modèle permet de reproduire les résultats expérimentaux sur des collisions mur-particule dans un fluide visqueux.

Le développement de la méthode a été suivi d'une étude numérique. Cette étude visant à compléter la connaissance des phénomènes cités plus haut. L'étude d'une turbulence homogène et isotrope a été choisie car ce type d'écoulement est universel et ne met pas en jeu des phénomènes supplémentaires (couche limite, cisaillement moyen, ...). Notre but est d'établir des statistiques sur l'ensemble des particules (dispersion, taux de collision, ...). De ce fait, il faut utiliser une turbulence non décroissante. Notre choix pour assurer une turbulence de caractéristiques statistiques stables a été de forcer l'énergie cinétique présente dans l'ensemble du domaine durant la simulation. La taille des particules a été choisie de sorte à être de l'ordre de 10 fois l'échelle de Kolmogorov. Afin d'avoir des particules qui répondent aux sollicitations du fluide on a pris des particules dont la masse volumique correspond à des suspensions solide/liquide (1, 2 et 4 fois la densité du fluide). Pour ces trois simulations, la fraction volumique en particules est de l'ordre de 3%. Une concentration supérieure aurait fait que la dispersion aurait été fortement modifiée par les collisions, une concentration inférieure aurait diminué fortement le nombre de particules et on n'aurait pas pu converger les statistiques sur les particules.

Le taux de présence solide est petit, ainsi la modification de la turbulence due aux particules

se limite à une légère augmentation de la dissipation pour les échelles spatiales inférieures à celle de la particule.

Ces simulations ont dans un premier temps permis l'étude de la dispersion des particules. Quand on étudie la distance moyenne parcourue par les particules deux régimes sont bien différenciés. Pour les temps courts un régime balistique, pour les temps longs un régime diffusif. Ce régime diffusif est caractérisé par le coefficient de dispersion des particules. Dans le cas de nos trois simulations ce coefficient ne subit pas une grande variation. Toutefois le régime de dispersion est différent. En effet, le coefficient de dispersion s'obtient en multipliant l'agitation des particules et le temps d'autocorrélation. Dans nos simulations ces deux termes répondent à des tendances déjà constatées pour des particules ponctuelles : pour nos particules de taille finie, le temps d'autocorrélation augmente avec l'inertie des particules et l'agitation des particules diminue. Ces deux tendances se compensent faisant que le coefficient de dispersion reste du même ordre.

Bien que les tendances soient celles des particules ponctuelles, on n'a pas pu établir de lien évident avec la théorie de Tchen-Hinze.

L'analyse des accélérations des particules a permis de montrer l'existence d'un régime secondaire dû aux collisions. La forme des p.d.f. des accélérations des particules est exponentielle et l'accélération r.m.s. hors collision diminue avec l'inertie. Ces résultats confirment des résultats numériques et expérimentaux de la littérature.

En ce qui concerne la concentration préférentielle, les résultats restent ouverts car les différentes grandeurs mesurant ce phénomène n'ont pas donné une tendance suffisamment prononcée pour conclure. Ceci peut provenir du fait que nos simulations sont trop courtes pour permettre l'apparition des zones de concentration préférentielle. Toutefois, il n'est pas sûr que ces zones apparaissent puisque l'inertie des particules est relativement élevée et que la durée de vie des zones préférentielles n'est peut être pas assez longue pour permettre à ces particules de migrer.

L'étude des temps de collision interparticulaire montre des collisions aléatoires et décorréelées. Toutefois, la fréquence de collision observée reste inférieure à celle prédite pour la même agitation mais pour des particules agissant seulement sous l'effet des collisions (gaz raréfié). Pour expliquer cette diminution on a montré que les angles entre les vitesses entre deux collisions ne sont pas comparables à ceux des gaz raréfiés. Ainsi la corrélation des vitesses entre deux particules est modifiée de sorte que les collisions frontales sont plus rares que dans le cas de gaz raréfiés alors que celles où les particules se suivent sont les plus fréquentes. Ceci est dû au fait que les particules ayant un faible rapport de masse volumique avec le fluide suivent celui-ci. L'effet est d'autant plus important que ce rapport est faible.

La corrélation des vitesses entre les particules rentrant en collision fait que la majorité des collisions ont une faible énergie à l'impact. Ainsi, pour ces collisions on ne peut plus négliger l'effet de la lubrification lors de la collision. Afin de comprendre l'effet du modèle de lubrification sur l'écoulement, on a réalisé une simulation en utilisant le modèle développé durant la thèse pour le cas du rapport des masses volumiques le plus faible. Les résultats montrent peu de différences dans les différentes statistiques macroscopiques. Simplement, la distribution de temps entre deux collisions augmente pour les temps courts. Ceci s'explique car lors de l'interaction entre deux particules celles-ci restent plus longtemps « collées » à cause de la lubrification et entrent en collision solide plusieurs fois avant de se séparer définitivement. Ces résultats sont en accord avec les résultats numériques de [Cate et al., 2004].

Comme on l'a présenté précédemment le rapport des masses volumiques entre le fluide et les particules est faible. De ce fait, on peut s'attendre à une corrélation des vitesses entre les

particules et le fluide environnant. La difficulté pour confirmer ce point provient du fait qu'autour des particules on trouve un écoulement turbulent dont les échelles spatiales caractéristiques sont proches de la taille des particules. Afin de pouvoir comprendre l'écoulement autour des particules une méthode pour évaluer l'écoulement moyen autour d'une particule test a été développée.

L'étude de l'écoulement moyen autour des particules a permis de confirmer que le mouvement des particules n'est pas décorrélé de l'écoulement du fluide environnant malgré leur forte inertie. Cette corrélation spatiale rend difficile la détermination d'une vitesse de glissement. De ce fait on n'a pas pu tirer une loi macroscopique permettant de caractériser le transport des particules de façon lagrangienne. Cette étude a permis de décrire la forme de la perturbation due à la particule. La particule crée une perturbation asymétrique car derrière elle on retrouve un faible sillage.

La particule crée aussi autour d'elle une zone de dissipation. Cette dissipation entoure la particule sauf derrière elle, où le sillage uniforme réduit cette dissipation. L'épaisseur de la couche de dissipation est sensiblement constante pour tous les cas traités ainsi que pour les cas traités par [Lucci et al., 2010]. Dans nos simulations on voit que l'épaisseur de cette couche dissipatrice s'étale sur un rayon. L'étude de Lucci sur différentes tailles de particules montre que, pour une même turbulence initiale, l'épaisseur de couche reste uniforme. Elle peut être liée soit à la vitesse moyenne des particules, soit aux échelles de la turbulence. On a montré que cette dissipation augmente avec le rapport des masses volumiques. Une des explications possibles à cette augmentation est qu'elle soit due au fait que les particules sont d'autant plus décorrélées du fluide environnant que le rapport des masses volumiques est grand.

Le travail réalisé permet de mieux comprendre certains mécanismes existant pour des écoulements avec des particules de taille finie. Ces résultats sont toutefois insuffisants pour la compréhension complète des phénomènes. La limitation actuelle des moyens numériques fait que l'on a dû se limiter à des cas où plusieurs mécanismes co-existent de telle sorte qu'il est impossible de conclure définitivement. Une des apports de cette thèse est d'avoir mis en place un code permettant d'élargir le nombre de cas traités au fur et à mesure que les moyens numériques augmentent.

Tout d'abord il faut dire que la fraction volumique étudiée ne permet pas de considérer le cas des particules isolées. Il faudrait agrandir le domaine d'étude afin de minimiser l'effet des collisions sur nos différentes grandeurs statistiques et de pouvoir étudier un champ moyen autour des particules dans lequel on limite l'effet des particules voisines.

Ensuite, il faudrait pouvoir réaliser des calculs avec un nombre de Reynolds supérieur. Ainsi, l'échelle des particules serait petite par rapport à l'échelle spatiale de Taylor. Augmentant le nombre de Reynolds on pourrait mettre en évidence l'effet « filtre » des particules solides.

En ce qui concerne l'étude des collisions, on a montré l'importance de la couche de lubrification sur les collisions pour le cas de rapport des masses volumiques égal à un. Il faudrait par la suite étendre cette étude aux autres cas traités dans cette thèse.

Le code développé a servi de base pour des études qui font suite à ce travail. Notamment, l'étude d'un lit fluidisé a été réalisée [Özel et al., 2013] ainsi qu'une étude avec des particules non-sphériques [Chadil, 2012].

Annexes

Annexe **A**

Article sur le modèle de collisions

Cet annexe reproduit la version publiée de l'article soumis au journal *Physics of Fluids* [Brändle de Motta et al., 2013]. Il explique la méthode des collisions développée durant la thèse.

Collision force

Numerical modelling of finite-size particle collisions in a viscous fluid.

J.C. Brändle de Motta,¹ W.-P. Breugem,² B. Gazanion,³ J.-L. Estivalezes,^{1,3} S. Vincent,⁴ and E. Climent³

¹⁾ONERA - The French Aerospace Lab, F-31055 TOULOUSE, France

²⁾Delft University of Technology, Laboratory for Aero and Hydrodynamics, Leeghwaterstraat 21, NL-2628 CA Delft, The Netherlands

³⁾IMFT, Université de Toulouse - CNRS, 1 Allée du Professeur Camille Soula, 31400 TOULOUSE, France

⁴⁾Université de Bordeaux, I2M, 16 av. Pey-Berland, 33607 PESSAC, France

(Dated: 3 July 2013)

A general model is presented for short-range hydrodynamic interactions and head-on particle-particle/wall collisions. The model has been embedded in two distinct numerical methods for fully resolved simulation of finite-size particles in a viscous fluid. It accounts for the material properties of the particles and lubrication effects prior to collision that can not be fully resolved on a fixed grid. We demonstrate that the model is able to reproduce experimental data for the coefficient of restitution of particle-wall collisions over a wide range of Stokes number based on the particle impact velocity. The set of model parameters we selected and more generally the modelling approach we propose can be efficiently used for fully resolved simulations of moderately dense solid-liquid suspensions.

Keywords: collision, lubrication, finite-size particles

I. INTRODUCTION

Particulate flows are ubiquitous in industrial and natural processes, from coal combustors, reactive fluidized beds to sediment transport in coastal areas or rivers. According to the review paper of Elgobashi¹, collisions play a role for particle volume fraction larger than 0.1%. Direct hydrodynamic interactions and particle-particle or particle-wall collisions are important features which control the overall dynamics of the flow for moderately concentrated suspension². Efficient numerical models are highly desirable to predict the physics of those complex flows³ and to optimize the design of industrial devices involving dispersed two-phase flows. Recent numerical techniques⁴⁻⁶ provide useful tools to simulate suspension flows seeded with finite size particles. Although computing resources are continuously increasing, such simulations do not accurately capture short range hydrodynamic interactions and collisions. Indeed, for fixed grid methods (Immersed Boundary Method⁷, Fictitious Domain⁸, Penalty method...) the flow resolution to simulate film drainage becomes insufficient when the number of grid points within the particle-particle gap is below four. Local refinement of the grid (see^{9,10} and figure 1) would be required but is far too expensive for three dimensional simulations of thousands of particles. Alternatively, simplified models may be used to represent unresolved hydrodynamic interactions and solid collisions or simply to prevent numerical overlapping of particles. We propose a general approach to account simultaneously for lubrication forces and particle contact based on a multilayer soft sphere model.

The simulation of granular flows through discrete particle models is often used when hydrodynamic interaction are negligible. In such models the drag force on the particles is parameterized, possibly with a correction for a

finite volume fraction but the fluid flow is not solved. Particle contacts and collision events are modelled with spring-dashpot interaction forces^{11,12} whose parameters have to be determined based on material properties. In an other context, repulsive forces have been used to prevent particle overlapping¹³ and to mimic hydrodynamic lubrication forces¹⁴. In none of these studies, the local interaction between two approaching particles (or between a particle and a wall) has been compared to existing experiments on rebounds. When two solids are approaching and eventually collide, three interaction mechanisms are successively occurring for macroscopic particles. When the separation distance is large (more than one or two radii for spherical particles), fluid interactions generate a deceleration of the solid body. Those long range hydrodynamic interactions are readily captured by different methods (IBM, FD-DLM, ...) for finite size particles simulations. When the separation distance is lower than one fourth of the particle radius, the Reynolds number (based on the relative velocity, the gap width and the fluid kinematic viscosity) is often low and lubrication repulsive forces dramatically damp the impact velocity. Theoretically, for perfectly smooth surfaces actual contact never occur while the lubrication force becomes infinitely large in the limit of zero gap width. At very small gap width the continuum approach underlying the Navier-Stokes equations breaks down as molecular effects are not included and solid contact occurs. Several phenomena may lead to lubrication breakdown (non-continuum effect¹⁵, surface roughness¹⁶ or residual Brownian motion). Then, a local deformation of solid surfaces due to rapid pressure increase in the liquid film (^{17,18}) or solid contact occurs. The solid-solid collision can be characterized by a dry restitution coefficient e_d (ratio of rebound velocity to particle impact velocity in the absence of fluid such as in vacuum) which depends on particle material. Including the effect of hydrodynamic

interactions, several authors^{19–21} proposed to model the overall collision process with an effective restitution coefficient e . This coefficient depends on particle and fluid properties through an impact Stokes number defined as $St = \frac{2}{9} \frac{RU\rho_p}{\mu_f}$ where, U is the particle velocity prior to contact, μ_f the fluid viscosity, R the particle radius and ρ_p its density. The correlation given by Legendre *et al.*²², based on multiple experimental data sets, reproduces this evolution $\frac{e}{e_d} = \exp\left(-\frac{35}{St}\right)$ over a wide range of physical properties for particle-wall rebound or particle-particle collision¹⁹.

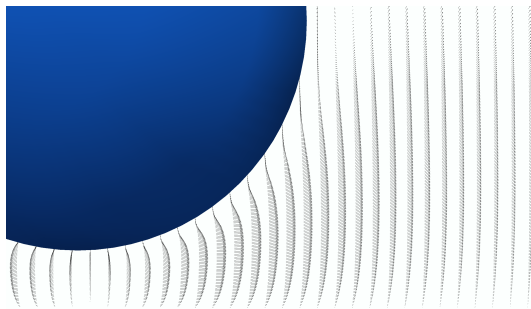


FIG. 1. Fully resolved drainage of an intervening film layer between a particle and a wall with 150 grid points over the particle radius and 40 grid points over the gap width.

In this letter, a general model including lubrication and collision forces is proposed and validated over the whole range of impact Stokes number (from complete viscous damping to dry collision). The interaction model will be detailed together with proposed parameters provided by extensive testing. The paper is concluded by simulations of particle colliding onto a plane wall for a wide range of impact Stokes number. We fix the particle diameter to be discretized with 16 grid points which is of common use for the simulation of finite size particles in a viscous fluid. A fictitious domain approach based on a Cartesian fixed grid has been chosen as a computational framework for the implementation of the complete collision model. An implicit tensorial penalty method allows to account for solid behavior in the volume occupied by particles, while the fluid incompressibility is achieved with an augmented Lagrangian method. To prevent particle deformations the solid volume fraction in each cell is updated assuming an exact spherical shape. A detailed presentation of the finite size particle simulations and precise validations are presented elsewhere²³. It is worthwhile to mention that the present model can be easily implemented in any code (based on IBM, IIM, etc.) accounting for finite size particles.

II. DESCRIPTION OF THE MODEL

The multilayer interaction model is sketched in figure 2 for particle-particle or particle-wall collision where ϵ is the ratio between the distance δ separating solid surfaces and the particle radius. It is positive before contact and negative when the particle overlaps the wall. Lubrication interaction prior to collision is supplemented by a soft-sphere model for solid contact which becomes active when the particle overlaps with the wall. Originally, this approach has been proposed by Breugem²⁴, who embedded the multilayer model in a direct-forcing Immersed Boundary Method for finite-size particles²⁵. We demonstrate the capability of the model to reproduce experimental data for the head-on collision of a spherical particle onto a plane wall with both numerical approaches of finite size particle simulation. Based on extensive testing and validation, we have derived optimal values for the model parameters, which can be used for fully resolved simulations of moderately concentrated particle suspensions.

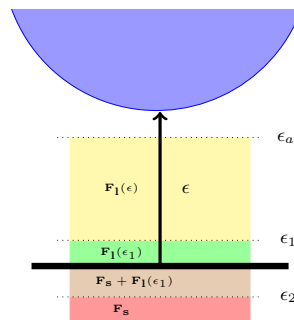


FIG. 2. Multilayer model for hydrodynamic interaction and head-on collision of a spherical particle onto a plane wall.

A. Lubrication effect

When two solid surfaces embedded in a viscous fluid come close to contact, lubrication theory^{26,27} provides analytical expressions of the hydrodynamic force (eq. 1) due to viscous fluid drainage. For a head-on or normal collision, the force is parallel to the line of centers of two colliding particles or orthogonal to the wall in case of a particle-wall collision. u_n is the particle velocity along the normal direction (for particle-particle collision u_n is the particle velocity in the relative framework). An extension to lubrication corrections for non-normal collision or with rotating particles could be achieved following Breugem²⁴. The amplification factor λ for the Stokes drag acting on a single sphere is given in equations 2

Collision force

and 3 for particle-particle and particle-wall interaction, respectively. The short range lubrication force is activated for a prescribed distance, ϵ_{al} (fig. 2). When $\epsilon > \epsilon_{al}$, no correction to the hydrodynamic interaction is needed ($F_l = 0$ for $\epsilon = \epsilon_{al}$) while the primary numerical simulation can resolve the dynamics sufficiently until lubrication dominates.

$$F_l(\epsilon, u_n) = -6\pi\mu_f R u_n [\lambda(\epsilon) - \lambda(\epsilon_{al})] \quad (1)$$

$$\lambda_{pp} = \frac{1}{2\epsilon} - \frac{9}{20}\log(\epsilon) - \frac{3}{56}\epsilon\log(\epsilon) + 1.346 + \mathcal{O}(\epsilon) \quad (2)$$

$$\lambda_{pw} = \frac{1}{\epsilon} - \frac{1}{5}\log(\epsilon) - \frac{1}{21}\epsilon\log(\epsilon) + 0.9713 + \mathcal{O}(\epsilon) \quad (3)$$

The lubrication force for smooth particles diverges as the separation distance tends to zero. Breakdown of continuum assumptions and/or roughness effects yields saturation of the hydrodynamic force. The lubrication force is kept constant (constant Stokes amplification factor when ϵ is lower than ϵ_1 and larger than ϵ_2) until it is largely dominated by solid-solid interaction corresponding to slight numerical overlapping of surfaces.

Surface roughness can be accounted for in the present model by adapting the Stokes amplification factor for ϵ lower than ϵ_1 . Note that we model surface roughness in this study, rather than resolving it for reason of computational feasibility as the typical height of the surface roughness elements is assumed to be very small compared to the sphere radius for polished spheres²⁰. The location of the solid surface can be thought as the nominal position of the rough wall.

B. Solid-solid interaction

For collision of steel spheres, the collision time is typically 10^{-9} seconds. This is much smaller than a typical time step for suspension flow simulation; resolving a collision in time is thus computationally not feasible. Instead, slight overlap (negative overlap distance δ) of solid surfaces is allowed for a limited number of time steps and the spring-dashpot model (eq. 4) provides a simple way to reproduce elastic ($e_d = 1$, where e_d is the dry collision coefficient) or inelastic collisions ($e_d < 1$), following the soft sphere approach. m_e characterizes the mass of solids involved in the collision, $m_e = (m_1^{-1} + m_2^{-1})^{-1}$ for particle-particle collision and $m_e = m$ for particle-wall collision.

$$F_s = -k_n\delta - \beta_n u_n \quad (4)$$

$$k_n = -\frac{m_e(\pi^2 + [\text{Log } e_d]^2)}{[N_c\Delta t]^2}, \quad \beta_n = -\frac{2m_e[\text{Log } e_d]}{[N_c\Delta t]} \quad (5)$$

k_n is the stiffness of the spring and β_n the damping coefficient of the dashpot. The numerical collision duration corresponds to N_c fluid time steps: $N_c\Delta t$. The spring-dashpot representation of particle-particle collision comes from the Hertz-Mindlin theory of elastic contact. Equation 4 is a linearized model and has the advantage to give an analytic expression²⁸ for β_n for a dry inelastic collision $e_d = \exp(-\beta_n t_n/2m_e)$ where $t_n = N_c\Delta t$ is the contact time. Therefore the physical properties of the solid (Young modulus, Poisson coefficient) are lumped in the dashpot coefficient. The value of k_n fixes the duration of the collision. It comes from a compromise between the computational cost (if the contact time is too short CPU overhead will be huge due to very small Δt) and the physics of the suspension flow. Granular flows²⁹ are well represented when the collision time is small compared to flow characteristic time scales (either collective or single particle dynamics). The collision time has to be at least one order of magnitude lower than the shortest time scale of the suspension flow dynamics. Therefore, N_c has to be selected as small as possible. Note that the collision can not be resolved on too few time steps, as otherwise the method becomes numerically inaccurate (dry collision will not be reproduced when N_c is too small). The determination of k_n and β_n proceeds as follows. Based on an estimate of the relevant time scales of the particulate flow, the collision time t_n is fixed which gives the value of k_n for a particular value of the dry restitution coefficient e_d (which accounts for the physical properties of the solid). Then, the dashpot parameter β_n is fixed accordingly.

III. NUMERICAL VALIDATION

The lubrication activation and deactivation region, ϵ_{al} and ϵ_2 , the region where the lubrication remains constant, ϵ_1 and the number of time steps per solid collision, N_c has to be determined. Next, we discuss how these parameters are selected. To test the response of the model to each parameter variation, we first neglected the effect of long range hydrodynamic interaction yielding simplified interaction in 1-D (eq. 6). It is then discretized in eqs. 7 and 8 which is similar to Lagrangian tracking coupled to the Navier-Stokes solver.

$$m\ddot{x} = F_l(x, \dot{x}) + F_s(x, \dot{x}) \quad (6)$$

$$V^{n+1} = V^n + \frac{\Delta t}{m} \left(F_l(\tilde{X}^{n+\frac{1}{2}}, \tilde{V}^{n+\frac{1}{2}}) + F_s(\tilde{X}^{n+\frac{1}{2}}, \tilde{V}^{n+\frac{1}{2}}) \right) \quad (7)$$

$$\tilde{V}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{3}{2}V^n - \frac{1}{2}V^{n-1}, \quad \tilde{X}^{n+\frac{1}{2}} = X^n + \frac{1}{2}\Delta t V^n \quad (8)$$

The time step Δt has to be adapted to the lubrication gap and the typical relative velocity V_0 . For the simulation of colliding particles, we limited the time step to $\Delta t < 0.2\frac{\epsilon_{al}R}{V_0}$. In complex situations, such as turbulent

flows, the time step will be evaluated by comparing this constraint to numerical stability criterion. The use of quasi-static lubrication theory requires two assumptions: low Reynolds number within the gap and momentum diffusive time scale much smaller than the time step. Both assumptions lead to the condition $St < \mathcal{O}(\rho^* \epsilon^{-1})$ where ρ^* stands for the ratio of particle to fluid density. The condition is fulfilled over a wide range of impact Stokes numbers for particles or droplets in air. It is more restrictive for liquid-solid suspensions. When the lubrication force is activated, we are surely on the upper bound of lubrication theory validity ($\epsilon_{al} = 0.1$ would restrict the simulations to $St < 3.5$) but very rapidly when $\epsilon < 0.01$ the limit on impact St number spans all the range of behaviors from $St \ll 1$ (no rebound) to $St \sim 400$ corresponding to $e/e_d = 0.9$.

IV. NUMERICAL TEST

Extensive testing has been carried out and the following conclusions are drawn:

- If $N_c < 8$, the dry collision corresponding to high Stokes number is not well reproduced. So, $N_c = 8$ has been chosen to keep the solid collision time as short as possible. Higher values can be used with an increased computational cost and no significant enhancement of the reliability of the results.
- The lubrication activation distance ϵ_{al} modifies the collision total time although it does not change significantly the restitution coefficient over the range $0.25 < \epsilon_{al} < 3 \cdot 10^{-2}$. $\epsilon_{al} = \frac{\Delta x}{R}$, is suitable for the simulation of finite size particles with $\frac{R}{\Delta x}$ ranging from 4 to 15 depending on the flow structure at the particle scale. In our case, $\frac{R}{\Delta x} = 8$ yields $\epsilon_{al} = 0.125$
- ϵ_1 accounts for the breakdown of the analytic lubrication solution due to the effect of surface roughness (and to a lesser extent elastic deformation). Extensive numerical tests gave a range of appropriate values for the model to give correct results over the full range of impact Stokes numbers. For $\epsilon_1 < 10^{-4}$, the model gives unphysical behavior of the particle-wall interaction. Above this value, the net effect of this parameter is an increase of the restitution coefficient. $\epsilon_1 = 10^{-3}$ has been selected.
- The value of ϵ_2 accounts for the complete breakdown of lubrication after many surface roughness elements have been connected with each other. Varying ϵ_2 does not modify the restitution coefficient. When the overlapping time is long enough, the solid-solid force dominates (see figure 3). The particle experiences successively fluid and solid interactions. The velocity and forces are continuous and evolve smoothly. $\epsilon_2 = -10^{-2}$ is adequate.

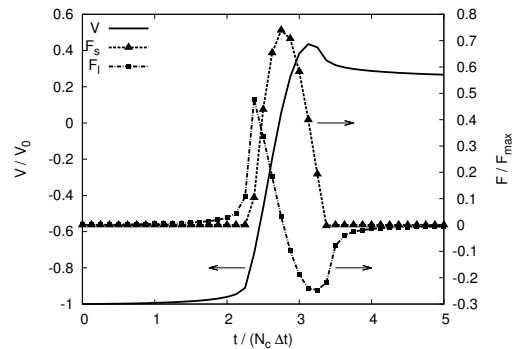


FIG. 3. Comparison of the different force contributions (F_s, F_l) during a collision onto a wall. V is the particle velocity. $St = 18$ and $\epsilon_{al} = 0.125$. The model parameters are: $N_c = 8$, $\epsilon_1 = 10^{-3}$ and $\epsilon_2 = -10^{-2}$.

To test the model we carried out simulations for the following physical parameters: a steel particle with a diameter $3 \cdot 10^{-3}$ m and density $7780 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ is approaching the wall with different initial velocities in a viscous fluid (density $\rho_f = 1000 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ and viscosity $\mu_f = 3.82 \cdot 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{s}$). The domain is large enough to prevent confinement effects.

In Fig. 4, we present our results together with simulations of Breugnot²⁴ for similar parameters. The agreement with experiments is very good over the full range of impact Stokes number. With the prescribed parameters, this simple model which accounts successively for long-range hydrodynamic interactions (by solving the Navier-Stokes equations with fully resolved particles), the short-range lubrication effect and finally the solid-solid collision is able to reproduce particle-particle or particle-wall collision. The dissipation of particle kinetic energy by the fluid is correctly reproduced. This is a major effect in solid-liquid suspensions. This approach is suitable for any numerical method handling finite size particles simulation in a viscous fluid.

Three or more particles interacting at the same time with each other is no problem. The contacts are treated one by one and the net collision force acting on a particle is the sum of the collision forces from each contact. The model have been used in configurations with volume fraction varying up to 40% without any problem.

V. PARTICLE COLLISIONS IN A TURBULENT FLOW

To test the collision model under realistic conditions encountered in particle laden flows, the response of finite size particles in isotropic homogeneous turbulence has been analyzed. Direct numerical simulations of the

Collision force

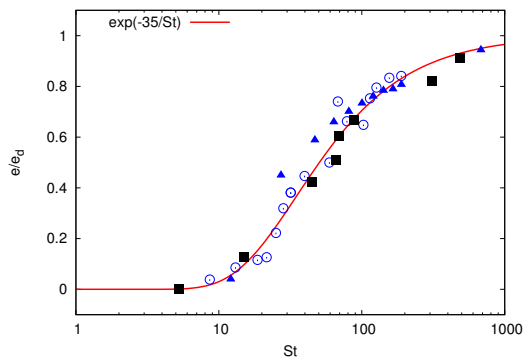


FIG. 4. Simulations results compared to the correlation²² based on experiments. Triangles (blue online), cases presented by Breugem²⁴ reproduced with our numerical approach and implicit scheme. Circles (blue online), results obtained by Breugem²⁴ with a direct-forcing IBM. Squares, our results with a Lagrangian VOF tensorial penalty method.

Navier-Stokes equations for a tri-periodic domain have been performed. The turbulence level is sustained by renormalization of the fluctuation intensity at each time step³⁰. This provides a base flow which is statistically steady although preserving the temporal and spatial fluctuations of the turbulent structures. The Reynolds number based on the Taylor microscale is equal to 73 with a total resolution of 256^3 grid cells. In this flow, 512 spherical particles (the solid material is characterised by a dry coefficient $e_d = 0.97$) have been randomly seeded (Fig. 5) and their dynamics followed over more than ten integral time scales to get converged statistics. Following the numerical requirements to obtain a precise representation of the particle induced perturbation and the correct simulation of collisions, the particle diameter has been fixed to 22 Kolmogorov length scales. The overall particle volumetric concentration is 3% which generates minor modification of the flow statistics when gravity is neglected. The particle to fluid density ratio is one which corresponds to Stokes numbers 26 based on the Kolmogorov time scale and 1.5 based on the large-eddy turnover time scale (in this context the Stokes number compares the particle relaxation time to the fluid flow time scale). For this moderate particle concentration, only binary collisions are likely to occur. Statistics of the two-phase flow correspond to a particle agitation close to the fluid velocity fluctuation ($\frac{u'_p}{u'_f} = 0.92$).

Due to the finite size of the particles and the presence of local shear and vortices, particle collisions do occur. The characteristic time between two collisions in the domain is one hundred Kolmogorov time scales. Examples of particle trajectories highlighting the occurrence of col-

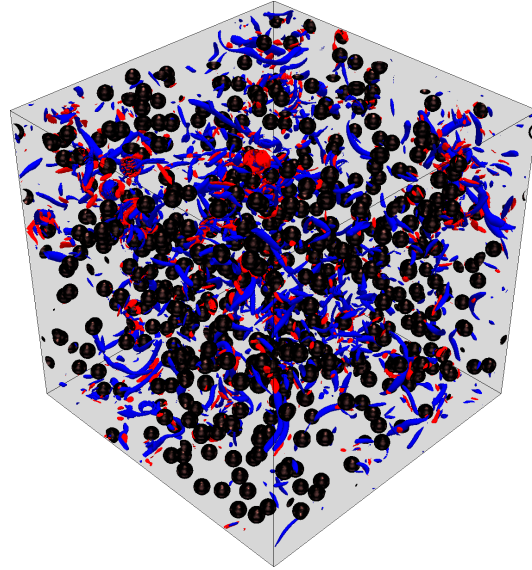


FIG. 5. Snapshot of 512 particles seeded in a tri-periodic cubic domain with vorticity contours in red and blue colours. The particulate volumetric fraction is 3%. (Colors online).

lisions are presented in Fig. 6.

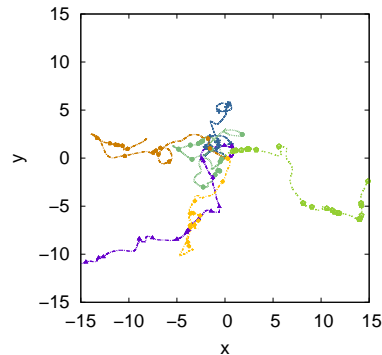


FIG. 6. Trajectories of six particles (colors online). The origin of each trajectory has been translated to coincide at the initial time. Symbols materialize collisions with another particle of the turbulent suspension.

Under the particle laden turbulence conditions we simulated, the major conclusion which can be drawn is that including the solid-fluid model of collision reduces the effective collision coefficient from $e_d = 0.97$ to below 0.1 on many collisions. This is an important

insight which can have dramatic effect of the turbulent suspension dynamics.

Assuming that the mesh grid is the same for single phase and two-phase simulations, the CPU overhead of our model will be simply related to the reduction of the time step to account for particle collisions. The CFL criterion and the requirement of ten time steps within a collision generates moderate CPU overhead to include particle collisions in the fluid flow solver. Further development of the model²⁴ will lead to a complete modelling of general rebounds including oblique collisions, rotation and friction (see Schäfer et al.²⁸, Rosa et al.,³¹ and Deen et al.³² for a review in the context of fluidized beds).

Acknowledgement - We are grateful for access to the computational facilities of CINES and CCRT under project number x2012026115. This work was also granted for HPC resources at CalMip under the project 2012-P0633. The authors thank L. Lacaze for fruitful discussions.

- ¹S. Elghobashi, "On predicting particle-laden turbulent flows," *Applied Scientific Research* **52**, 309–329 (1994).
- ²M. Abbas, E. Climent, J.-F. Parmentier, and O. Simonin, "Flow of particles suspended in a sheared viscous fluid: Effects of finite inertia and inelastic collisions," *AIChE Journal* **56**, 2523–2538 (2010).
- ³S. Balachandar and J. Eaton, "Turbulent dispersed multiphase flow," *Annual Review of Fluid Mechanics* **42**, 111–133 (2010).
- ⁴M. Uhlmann, "Interface-resolved direct numerical simulation of vertical particulate channel flow in the turbulent regime," *Physics of Fluids* **20**, 053305–27 (2008).
- ⁵A. T. Cate, J. J. Derksen, L. M. Portela, and H. E. A. Van Den Akker, "Fully resolved simulations of colliding monodisperse spheres in forced isotropic turbulence," *Journal of Fluid Mechanics* **519**, 233–271 (2004).
- ⁶X. Shao, T. Wu, and Z. Yu, "Fully resolved numerical simulation of particle-laden turbulent flow in a horizontal channel at a low Reynolds number," *Journal of Fluid Mechanics*, 1–26 (2012).
- ⁷M. Uhlmann, "An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows," *Journal of Computational Physics* **209**, 448–476 (2005).
- ⁸Z. Yu, X. Shao, and A. Wachs, "A fictitious domain method for particulate flows with heat transfer," *Journal of Computational Physics* **217**, 424–452 (2006).
- ⁹A. M. Ardekani and R. H. Rangel, "Numerical investigation of particle-particle and particle-wall collisions in a viscous fluid," *Journal of Fluid Mechanics* **596**, 437–466 (2008).
- ¹⁰M. Thompson, T. Lewke, and K. Hourigan, "Sphere-wall collisions: vortex dynamics and stability," *J. Fluid Mech.* **575**, 121–148 (2007).
- ¹¹P. A. Cundall and O. D. L. Strack, "A discrete numerical model for granular assemblies," *Geotechnique* **29**, 47–65 (1979).
- ¹²M. Van der Hoef, M. van Sint Annaland, and J. Kuipers, "Computational fluid dynamics for dense gas–solid fluidized beds: a multi-scale modeling strategy," *Chemical engineering science* **59**, 5157–5165 (2004).
- ¹³N.-Q. Nguyen and A. J. C. Ladd, "Sedimentation of hard-sphere suspensions at low Reynolds number," *Journal of Fluid Mechanics* **525**, 73–104 (2005).
- ¹⁴S. L. Dance and M. R. Maxey, "Incorporation of lubrication effects into the force-coupling method for particulate two-phase flow," *Journal of computational Physics* **189**, 212–238 (2003).
- ¹⁵R. R. Sundararakumar and D. L. Koch, "Non-continuum lubrication flows between particles colliding in a gas," *Journal of Fluid Mechanics* **313**, 283–308 (1996).
- ¹⁶R. H. Davis, "Effects of surface roughness on a sphere sedimenting through a dilute suspension of neutrally buoyant spheres," *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics* **4**, 2607–2619 (1992).
- ¹⁷R. H. Davis, J.-M. Serayssol, and E. J. Hinch, "The elastohydrodynamic collision of two spheres," *Journal of Fluid Mechanics* **163**, 479–497 (1986).
- ¹⁸G. Barnocky and R. H. Davis, "The influence of pressure-dependent density and viscosity on the elastohydrodynamic collision and rebound of two spheres," *Journal of Fluid Mechanics* **209**, 501–519 (1989).
- ¹⁹F.-L. Yang and M. L. Hunt, "Dynamics of particle-particle collisions in a viscous liquid," *Physics of Fluids* **18**, 121506–11 (2006).
- ²⁰G. G. Joseph, R. Zenit, M. L. Hunt, and A. M. Rosenwinkel, "Particle-wall collisions in a viscous fluid," *Journal of Fluid Mechanics* **433**, 329–346 (2001).
- ²¹P. Gondret, M. Lance, and L. Petit, "Bouncing motion of spherical particles in fluids," *Physics of Fluids* **14**, 643–652 (2002).
- ²²D. Legendre, C. Daniel, and P. Guiraud, "Experimental study of a drop bouncing on a wall in a liquid," *Physics of Fluids* **17**, 097105–13 (2005).
- ²³S. Vincent, J. C. Brändle de Motta, A. Sarthou, J.-L. Estivalvez, O. Simonin, and E. Climent, "A lagrangian VOF tensorial penalty method for the DNS of resolved particle-laden flows," *Journal of Computational Physics* (2013), in press.
- ²⁴W.-P. Breugem, "A combined soft-sphere collision for immersed boundary method for resolved simulations of particulate flows," in *Proceedings of the ASME FEDSM2010, Paper Number FEDSM-ICNMM2010-30634* (Montréal (Canada), 1–5 aug. 2010).
- ²⁵W.-P. Breugem, "A second-order accurate immersed boundary method for fully resolved simulations of particle-laden flows," *Journal of Computational Physics* **13**, 4469–4498 (2012).
- ²⁶H. Brenner, "The slow motion of a sphere through a viscous fluid towards a plane surface," *Chemical Engineering Science* **16**, 242–251 (1961).
- ²⁷M. D. A. Cooley and M. E. O’Neil, "On the slow motion generated in a viscous fluid by the approach of a sphere to a plane wall or stationary sphere," *Mathematika* **16**, 37–49 (1969).
- ²⁸J. Schäfer, S. Dippel, and D. E. Wolf, "Force schemes in simulations of granular materials," *Journal de physique I* **6**, 5–20 (1996).
- ²⁹L. Lacaze, J. C. Phillips, and R. R. Kerswell, "Planar collapse of a granular column: Experiments and discrete element simulations," *Physics of Fluids* **20**, 063302 (2008).
- ³⁰C. Rosales and C. Meneveau, "Linear forcing in numerical simulations of isotropic turbulence: Physical space implementations and convergence properties," *Physics of Fluids* **17**, 095106 (2005).
- ³¹B. Rosa, L.-P. Wang, M. Maxey, and W. Grabowski, "An accurate and efficient method for treating aerodynamic interactions of cloud droplets," *Journal of Computational Physics* **230**, 8109–8133 (2011).
- ³²N. Deen, M. V. S. Annaland, M. V. der Hoef, and J. Kuipers, "Review of discrete particle modeling of fluidized beds," *Chemical Engineering Science* **62**, 28 – 44 (2007).

Bibliographie

- [Abrahamson, 1975] Abrahamson, J. (1975). Collision rates of small particles in a vigorously turbulent fluid. *Chemical Engineering Science*, 30(11) :1371–1379.
- [Ahmed and Elghobashi, 2000] Ahmed, A. M. and Elghobashi, S. (2000). On the mechanisms of modifying the structure of turbulent homogeneous shear flows by dispersed particles. *Physics of Fluids*, 12(11) :2906.
- [Ahmed and Elghobashi, 2001] Ahmed, A. M. and Elghobashi, S. (2001). Direct numerical simulation of particle dispersion in homogeneous turbulent shear flows. *Physics of Fluids*, 13 :3346–3364.
- [Ahusborde and Glockner, 2010] Ahusborde, E. and Glockner, S. (2010). An implicit method for the Navier-Stokes equations on overlapping block-structured grids. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 62 :784–801.
- [Alder and Wainwright, 1959] Alder, B. J. and Wainwright, T. E. (1959). Studies in molecular dynamics. i. general method. *The Journal of Chemical Physics*, 31 :459.
- [Alder and Wainwright, 1960] Alder, B. J. and Wainwright, T. E. (1960). Studies in molecular dynamics. II. behavior of a small number of elastic spheres. *The Journal of Chemical Physics*, 33 :1439.
- [Aliseda et al., 2002] Aliseda, A., Cartellier, A., Hainaux, F., and Lasheras, J. C. (2002). Effect of preferential concentration on the settling velocity of heavy particles in homogeneous isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 468 :77–105.
- [Angot, 1989] Angot, P. (1989). *Contribution à l'étude des transferts thermiques dans des systèmes complexes : application aux composants électroniques*. PhD thesis, Université de Bordeaux.
- [Apte et al., 2009] Apte, S. V., Martin, M., and Patankar, N. A. (2009). A numerical method for fully resolved simulation (FRS) of rigid particle-flow interactions in complex flows. *Journal of Computational Physics*, 228 :2712–2738.
- [Ardekani and Rangel, 2008] Ardekani, A. and Rangel, R. (2008). Numerical investigation of particle-particle and particle-wall collisions in a viscous fluid. *Journal of Fluid Mechanics*, 596 :437–466.
- [Arquis, 1984] Arquis, E. (1984). *Convection mixte dans une couche poreuse verticale non confinée. Application à l'isolation perméodynamique*. PhD thesis, Université de Bordeaux.
- [Auton et al., 1988] Auton, T. R., Hunt, J. C. R., and Prud'Homme, M. (1988). The force exerted on a body in inviscid unsteady non-uniform rotational flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 197(1) :241–257.

-
- [Bagchi and Balachandar, 2003] Bagchi, P. and Balachandar, S. (2003). Effect of turbulence on the drag and lift of a particle. *Physics of Fluids*, 15(11) :3496.
- [Balachandar and Eaton, 2010] Balachandar, S. and Eaton, J. (2010). Turbulent dispersed multiphase flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 42 :111–133.
- [Banks, 1965] Banks, W. H. H. (1965). The boundary layer on a rotating sphere. *Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, 18 :443–454.
- [Barnocky and Davis, 1989] Barnocky, G. and Davis, R. H. (1989). The influence of pressure-dependent density and viscosity on the elastohydrodynamic collision and rebound of two spheres. *Journal of Fluid Mechanics*, 209(-1) :501–519.
- [Basset, 1888] Basset, A. (1888). *A treatise on hydrodynamics : with numerous examples*, volume 2. Deighton, Bell and Co.
- [Bec, 2003] Bec, J. (2003). Fractal clustering of inertial particles in random flows. *Physics of Fluids*, 15(11) :L81–L84.
- [Bec, 2005] Bec, J. (2005). Multifractal concentrations of inertial particles in smooth random flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 528 :255–277.
- [Bec et al., 2006] Bec, J., Biferale, L., Boffetta, G., Celani, A., Cencini, M., Lanotte, A., Musacchio, S., and Toschi, F. (2006). Acceleration statistics of heavy particles in turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 550 :349.
- [Bec et al., 2007] Bec, J., Biferale, L., Cencini, M., Lanotte, A., Musacchio, S., and Toschi, F. (2007). Heavy particle concentration in turbulence at dissipative and inertial scales. *Physical Review Letters*, 98(8) :084502.
- [Benkenida and Magnaudet, 2000] Benkenida, A. and Magnaudet, J. (2000). A method for the simulation of two-phase flows without interface reconstruction. *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences Série IIb Mécanique des Fluides*, 328 :25–32.
- [Bertrand et al., 1997] Bertrand, F., Tanguy, P., and Thibault, F. (1997). A three-dimensional fictitious domain method for incompressible fluid flow problems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 25 :719–736.
- [Bhatnagar et al., 1954] Bhatnagar, P., Gross, E., and Krook, M. (1954). A model for collision processes in gases. I. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Physical review*, 94(3) :511.
- [Bissell et al., 1985] Bissell, E. R., Burnham, A. K., and Braun, R. L. (1985). Shale oil cracking kinetics and diagnostics. *Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development*, 24 :381–386.
- [Boivin, 1996] Boivin, M. (1996). *Etude de l’influence des particules sur la turbulence à partir des simulations directes et de simulations des grandes échelles d’écoulements diphasiques gaz-solides homogènes isotropes stationnaires*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse.
- [Boivin et al., 1998] Boivin, M., Simonin, O., and Squires, K. (1998). Direct numerical simulation of turbulence modulation by particles in isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 375(1) :235–263.
- [Boussinesq, 1885] Boussinesq, V. (1885). Sur la résistance qu’oppose un liquide indéfini en repos. In *Acad Sci*, volume 100, pages 935–7.
- [Bouzidi et al., 2001] Bouzidi, M., Firdaouss, M., and Lallemand, P. (2001). Momentum transfer of a Boltzmann-lattice fluid with boundaries. *Physics of Fluids*, 13(11) :3452–3459.

- [Brändle de Motta and Baj, 2009] Brändle de Motta, J. C. and Baj, F. (2009). A numerical study of tube array vibrations under cross flow. In *Pressure Vessels and Piping Division Conference*, Pregel (Czech Republic). ASME.
- [Brändle de Motta et al., 2013] Brändle de Motta, J. C., Breugem, W.-P. and Gazanion, B., Estivalezes, J.-L., Vincent, S., and Climent, E. (2013). Numerical modelling of finite-size particle collisions in a viscous fluid. *Physics of Fluids*, 25.
- [Brändle de Motta et al., 2010] Brändle de Motta, J. C., Vincent, S., Estivalezes, J.-L., and Climent, E. (2010). Fictitious Domain Methods and Penalty Techniques for the Simulation of Turbulent Particulate Flows. *ASME Fluid Summer Meeting, Montreal, August 4-7*.
- [Brenner, 1961] Brenner, H. (1961). The slow motion of a sphere through a viscous fluid towards a plane surface. *Chemical Engineering Science*, 16(3-4) :242–251.
- [Breugem, 2010b] Breugem, W.-P. (1–5 aug. 2010b). A combined soft-sphere collision for immersed boundary method for resolved simulations of particulate flows. In *Proceedings of the ASME FEDSM2010, Paper Number FEDSM-ICNMM2010-30634*, Montréal (Canada).
- [Breugem, 2010a] Breugem, W.-P. (2010a). A Combined Soft-Sphere Collision for Immersed Boundary Method for Resolved Simulations of Particulate Flows. In *Proceedings of the ASME 2010 3rd Joint US-European Fluids Engineering Summer Meeting and*, Montréal.
- [Breugem, 2012] Breugem, W.-P. (2012). A second-order accurate immersed boundary method for fully resolved simulations of particle-laden flows. *Journal of Computational Physics*.
- [Bruyat, 2012] Bruyat, A. (2012). *Influence de l'évaporation de gouttes multicomposant sur la combustion et des effets diphasiques sur l'allumage d'un foyer aéronautique*. PhD thesis, Université de Toulouse.
- [Burton and Eaton, 2005] Burton, T. M. and Eaton, J. K. (2005). Fully resolved simulations of particle-turbulence interaction. *Journal of Fluid Mechanics*, 545 :67–111.
- [Cabezón et al., 2008] Cabezón, R. M., García-Senz, D., and no, A. R. (2008). A one-parameter family of interpolating kernels for smoothed particle hydrodynamics studies. *Journal of Computational Physics*, 227 :8523–8540.
- [Caltagirone and Arquis, 1986] Caltagirone, J. and Arquis, E. (1986). Recirculating flow in porous media. *Comptes Rendus-Academie des Sciences, Serie II*, 302(14) :843–846.
- [Caltagirone and Vincent, 2001] Caltagirone, J.-P. and Vincent, S. (2001). Tensorial penalisation method for solving Navier–Stokes equations. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences Paris, Série IIb*, 329 :607–613.
- [Calzavarini et al., 2008] Calzavarini, E., Kerscher, M., Lohse, D., and Toschi, F. (2008). Dimensionality and morphology of particle and bubble clusters in turbulent flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 607 :13–24.
- [Calzavarini et al., 2009] Calzavarini, E., Volk, R., Bourgoïn, M., LéVêQue, E., Pinton, J.-F., and Toschi, F. (2009). Acceleration statistics of finite-sized particles in turbulent flow : the role of Faxén forces. *Journal of Fluid Mechanics*, 630 :179.
- [Cate et al., 2004] Cate, A. T., Derksen, J. J., Portela, L. M., and Van Den Akker, H. E. A. (2004). Fully resolved simulations of colliding monodisperse spheres in forced isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 519 :233–271.
- [Cate et al., 2002] Cate, A. T., Nieuwstad, C., Derksen, J., and den Akker, H. V. (2002). Particle imaging velocimetry experiments and lattice-Boltzmann simulations on a single sphere settling under gravity. *Physics of Fluids*, 14 :4012–4025.

-
- [Chadil, 2012] Chadil, A. (2012). *Étude des interactions particules-fluide dans un canal turbulent chargé en particules non-sphériques*. PhD thesis, Université de Toulouse. Thèse en cours, ayant débuté en Septembre 2012.
- [Chassaing, 2000] Chassaing, P. (2000). *Turbulence en Mécanique des Fluides*. Collection Polytech. Cépaduès (INP Toulouse).
- [Cho et al., 2005] Cho, S., Choi, H., and Yoo, J. (2005). Direct numerical simulation of fluid flow laden with many particles. *International Journal of Multiphase Flow*, 31(4) :435–451.
- [Clark and Evans, 1954] Clark, J. and Evans, F. (1954). Distance to nearest neighbor as a measure of spatial relationships in populations. *Ecology*, 35(4) :445–453.
- [Clift et al., 1978] Clift, R., Grace, J. R., and Weber, M. (1978). *Bubbles, drops and particles*. Academic Press, New York.
- [Climent et al., 2007] Climent, E., Yeo, K., Maxey, M. R., and Karniadakis, G. (2007). Dynamic Self-Assembly of Spinning Particles. *Journal of Fluids Engineering*, 129 :379–387.
- [Cooley and O’Neil, 1969] Cooley, M. D. A. and O’Neil, M. E. (1969). On the slow motion generated in a viscous fluid by the approach of a sphere to a plane wall or stationary sphere. *Mathematika*, 16 :37–49.
- [Coquerelle and Cottet, 2008] Coquerelle, M. and Cottet, G.-H. (2008). A vortex level set method for the two-way coupling of an incompressible fluid with colliding rigid bodies. *Journal of Computational Physics*, 227(21) :9121–9137.
- [Corre et al., 2008] Corre, C., Estivalezes, J. L., Vincent, S., and Simonin, O. (2008). Direct numerical simulation of the motion of particles larger than the kolmogorov scale in a homogeneous isotropic turbulence.
- [Corre et al., 2010] Corre, C., Estivalezes, J.-L., Vincent, S., Simonin, O., and Glockner, S. (2010). Simulation of a fluidized bed using a hybrid Eulerian-Lagrangian method for particle tracking. *Notes On Numerical Fluid Mechanics And Multidisciplinary Design*, 110 :103–110.
- [Couderc, 2007] Couderc, F. (2007). *Développement d’un code de calcul pour la simulation d’écoulements de fluides non miscibles. Application à la désintégration assistée d’un jet liquide par un courant gazeux*. PhD thesis, Ecole nationale supérieure de l’aéronautique et de l’espace.
- [Crowe et al., 1977] Crowe, C., Sharma, M., and Stock, D. (1977). The particle-source-in cell (PSI-CELL) model for gas-droplet flows. *Journal of Fluids Engineering*, 99 :325–332.
- [Crowe et al., 1998] Crowe, C., Sommerfeld, M., and Tsuji, Y. (1998). *Multiphase flows with droplets and particles*. CRC.
- [Dance and Maxey, 2003] Dance, S. L. and Maxey, M. R. (2003). Incorporation of lubrication effects into the force-coupling method for particulate two-phase flow. *Journal of computational Physics*, 189(1) :212–238.
- [Davis, 1992] Davis, R. H. (1992). Effects of surface roughness on a sphere sedimenting through a dilute suspension of neutrally buoyant spheres. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 4(12) :2607–2619.
- [Davis et al., 1986] Davis, R. H., Serayssol, J.-M., and Hinch, E. J. (1986). The elastohydrodynamic collision of two spheres. *Journal of Fluid Mechanics*, 163(-1) :479–497.
- [Delahye, 1974] Delahye, J. (1974). Jump conditions and entropy sources in two-phase systems. Local instant formulation. *International Journal of Multiphase Flow*, 1 :395–409.

- [Dennis et al., 1980] Dennis, C., Singh, S., and Ingham, D. (1980). The steady flow due to a rotating sphere at low and moderate Reynolds numbers. *Journal of Fluid Mechanics*, 101 :257–279.
- [Deutsch, 1992] Deutsch, E. (1992). *Dispersion de particules dans une turbulence homogène isotrope stationnaire calculée par simulation numérique directe des grandes échelles*. PhD thesis, Ecole Centrale de Lyon.
- [Dobrzynski and Frey, 2008] Dobrzynski, C. and Frey, P. (2008). Anisotropic delaunay mesh adaptation for unsteady simulations. In *Proceedings of the 17th International Meshing Roundtable*, page 177–194.
- [Dong et al., 2004] Dong, S., Liu, D., Maxey, M. R., and Karniadakis, G. E. (2004). Spectral distributed lagrange multiplier method : Algorithm and benchmark tests. *Journal of Computational Physics*, 195(2) :695–717.
- [Douglas-Hamilton et al., 2005] Douglas-Hamilton, D. H., Smith, N. G., Kuster, C. E., Vermeiden, J. P., and Althouse, G. C. (2005). Capillary-loaded particle fluid dynamics : effect on estimation of sperm concentration. *Journal of Andrology*, 26(1) :115.
- [Druzhinina and Elghobashi, 1999] Druzhinina, O. A. and Elghobashi, S. (1999). On the decay rate of isotropic turbulence laden with microparticles. *Physics of Fluids*, 11 :602–611.
- [Elghobashi, 1991] Elghobashi, S. (1991). Particle-laden turbulent flows : direct simulation and closure models. *Applied Scientific Research*, 48(3-4) :301–314.
- [Elghobashi, 1994] Elghobashi, S. (1994). On predicting particle-laden turbulent flows. *Applied Scientific Research*, 52(4) :309–329.
- [Elghobashi and Truesdell, 1993] Elghobashi, S. and Truesdell, G. (1993). On the two-way interaction between homogeneous turbulence and dispersed solid particles. i : Turbulence modification. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 5 :1790–1790.
- [Eswaran and Pope, 1988] Eswaran, V. and Pope, S. (1988). An examination of forcing in direct numerical simulations of turbulence. *Computers and Fluids*, 16(3) :257 – 278.
- [Fadlun et al., 2000] Fadlun, E. A., Verzicco, R., Orlandi, P., and Mohd-Yusof, J. (2000). Combined immersed-boundary finite-difference methods for three-dimensional complex flow simulations. *Journal of Computational Physics*, 161(1) :35–60.
- [Falkovich et al., 2002] Falkovich, G., Fouxon, A., and Stepanov, M. G. (2002). Acceleration of rain initiation by cloud turbulence. *Nature*, 419(6903) :151–154.
- [Fang et al., 2007] Fang, X., Tang, J., and Luo, H. (2007). Granular damping analysis using an improved discrete element approach. *Journal of Sound and Vibration*, 308(1-2) :112–131.
- [Fauci and McDonald, 1995] Fauci, L. J. and McDonald, A. (1995). Sperm motility in the presence of boundaries. *Bulletin of Mathematical Biology*, 57(5) :679–699.
- [Fede, 2004] Fede, P. (2004). *Modélisation et simulation de l’influence de la turbulence sur les collisions dans les écoulements mono- et bi-solides*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, Toulouse.
- [Fede, 2012] Fede, P. (2012). Communication privée.
- [Fede and Simonin, 2006] Fede, P. and Simonin, O. (2006). Numerical study of the subgrid fluid turbulence effects on the statistics of heavy colliding particles. *Physics of Fluids*, 18 :045103.
- [Feng and Michaelides, 2004] Feng, Z.-G. and Michaelides, E. E. (2004). The immersed boundary-lattice boltzmann method for solving fluid–particles interaction problems. *Journal of Computational Physics*, 195(2) :602–628.

-
- [Ferrante and Elghobashi, 2003] Ferrante, A. and Elghobashi, S. (2003). On the physical mechanisms of two-way coupling in particle-laden isotropic turbulence. *Physics of Fluids*, 15(2) :315.
- [Fessler et al., 1994] Fessler, J., Kulick, J., and Eaton, J. (1994). Preferential concentration of heavy particles in a turbulent channel flow. *Physics of Fluids*, 6 :3742.
- [Février, 2000] Février, P. (2000). *Etude numérique des effets de concentration préférentielle et de corrélation spatiale entre vitesses de particules solides en turbulence homogène isotrope stationnaire*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse.
- [Fogelson and Peskin, 1988] Fogelson, A. L. and Peskin, C. S. (1988). A fast numerical method for solving the three-dimensional stokes' equations in the presence of suspended particles. *Journal of Computational Physics*, 79(1) :50–69.
- [Fortes et al., 1987] Fortes, A., Joseph, D., and Lundgren, T. (1987). Nonlinear mechanics of fluidization of beds of spherical particles. *Journal of Fluid Mechanics*, 177 :467–83.
- [Fortin and Glowinski, 1982] Fortin, M. and Glowinski, R. (1982). *Méthodes de lagrangien augmenté. Application à la résolution numérique de problèmes aux limites*. Dunod, Paris.
- [Gao et al., 2011] Gao, H., Li, H., and Wang, L.-P. (2011). Lattice boltzmann simulation of turbulent flow laden with finite-size particles. *Computers & Mathematics with Applications*.
- [Gao and Wang, 2010] Gao, H. and Wang, L.-P. (2010). Lattice Boltzmann simulation of turbulent flow laden with finite-size particles. In *Proceedings of the 7th International Conference on Multiphase flows ICMF 2010*.
- [García-Villalba et al., 2012] García-Villalba, M., Kidanemariam, A. G., and Uhlmann, M. (2012). DNS of vertical plane channel flow with finite-size particles : Voronoi analysis, acceleration statistics and particle-conditioned averaging. *International Journal of Multiphase Flow*.
- [Glowinski et al., 1999] Glowinski, R., Pan, T.-W., Hesla, T., and Joseph, D. (1999). A distributed lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 25(5) :755–794.
- [Glowinski et al., 2001] Glowinski, R., Pan, T.-W., Hesla, T. I., Joseph, D., and Périaux, J. (2001). A fictitious domain approach to the direct numerical simulation of incompressible viscous flow past moving rigid bodies : application to particulate flow. *Journal of Computational Physics*, 169 :363–426.
- [Goldstein et al., 1993] Goldstein, D., Handler, R., and Sirovich, L. (1993). Modeling a no-slip flow boundary with an external force field. *Journal of Computational Physics*, 105(2) :354–366.
- [Gondret et al., 2002] Gondret, P., Lance, M., and Petit, L. (2002). Bouncing motion of spherical particles in fluids. *Physics of Fluids*, 14(2) :643–652.
- [Gore and Crowe, 1989] Gore, R. and Crowe, C. (1989). Effect of particle size on modulating turbulent intensity. *International Journal of Multiphase Flow*, 15(2) :279–285.
- [Gustafsson, 1978] Gustafsson, I. (1978). *On first- and second-order symmetric factorisation methods for the solution of elliptic difference equations*. Chalmers University of Technology.
- [Han et al., 1999] Han, M., Kim, C., Kim, M., and Lee, S. (1999). Particle migration in tube flow of suspensions. *Journal of Rheology*, 43 :1157.
- [Happel and Brenner, 1963] Happel, J. and Brenner, H. (1963). *Low Reynolds Number Hydrodynamics*. Kluwer Academic Publishers.

- [Hardalupas et al., 1989] Hardalupas, Y., Taylor, A. M. K. P., and Whitelaw, J. H. (1989). Velocity and particle-flux characteristics of turbulent particle-laden jets. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 426(1870) :31–78. Article-Type : research-article / Full publication date : Nov. 8, 1989 / Copyright © 1989 The Royal Society.
- [Hetsroni and Sokolov, 1971] Hetsroni, G. and Sokolov, M. (1971). Distribution of mass, velocity, and intensity of turbulence in a two-phase turbulent jet. *Journal of Applied Mechanics*, 38(2) :315.
- [Hinze, 1975] Hinze, J. O. (1975). *Turbulence*. McGraw-Hill.
- [Hirt et al., 1974] Hirt, C., Amsden, A., and Cook, J. (1974). An arbitrary Lagrangian-Eulerian computing method for all flow speeds. *Journal of Computational Physics*, 14 :227–253.
- [Höfler and Schwarzer, 2000] Höfler, K. and Schwarzer, S. (2000). Navier-Stokes simulation with constraint forces : Finite-difference method for particle-laden flows and complex geometries . *Physical Review E*, 61 :7146–7160.
- [Hogan and Cuzzi, 2001] Hogan, R. C. and Cuzzi, J. N. (2001). Stokes and reynolds number dependence of preferential particle concentration in simulated three-dimensional turbulence. *Physics of Fluids*, 13(10) :2938.
- [Hogan et al., 1999] Hogan, R. C., Cuzzi, J. N., and Dobrovolskis, A. R. (1999). Scaling properties of particle density fields formed in simulated turbulent flows. *Physical review. E, Statistical physics, plasmas, fluids, and related interdisciplinary topics*, 60(2 Pt B) :1674–1680. PMID : 11969949.
- [Holton et al., 1987] Holton, P., Tackett, D., and Willeke, K. (1987). Particle size-dependent leakage and losses of aerosols in respirators. *American Industrial Hygiene Association journal*, 48 :848–854.
- [Hölzer and Sommerfeld, 2008] Hölzer, A. and Sommerfeld, M. (2008). New simple correlation formula for the drag coefficient of non-spherical particles. *Powder Technology*, 184 :361–365.
- [Homann and Bec, 2010] Homann, H. and Bec, J. (2010). Finite-size effects in the dynamics of neutrally buoyant particles in turbulent flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 651(1) :81–91.
- [Hu, 1996] Hu, H. (1996). Direct simulation of flows of solid-liquid mixtures. *International Journal of Multiphase Flow*, 22(2) :335–352.
- [Hu et al., 1992a] Hu, H., Joseph, D., and Crochet, M. (1992a). Direct simulation of fluid particle motions. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 3(5) :285–306.
- [Hu et al., 1992b] Hu, H. H., Joseph, D. D., and Crochet, M. J. (1992b). Direct Simulation of Fluid Particle Motions. *Theoretical and Computational Fluid Mechanics*, 3 :285–306.
- [Hu et al., 2001] Hu, H. H., Patankar, N. A., and Zhu, M. Y. (2001). Direct Numerical Simulations of Fluid-Solid Systems Using the Arbitrary Lagrangian-Eulerian Technique. *Journal of Computational Physics*, 169 :427–462.
- [Inamuro et al., 2000] Inamuro, T., Maeba, K., and Ogino, F. (2000). Flow between parallel walls containing the lines of neutrally buoyant circular cylinders. *International Journal of Multiphase Flow*, 26(12) :1981–2004.
- [Johnson and Tezduyar, 1996] Johnson, A. and Tezduyar, T. (1996). Simulation of multiple spheres falling in a liquid-filled tube. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 134(3-4) :351–373.

-
- [Johnson and Tezduyar, 1997] Johnson, A. and Tezduyar, T. (1997). 3D simulation of fluid-particle interactions with the number of particles reaching 100. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 145(3-4) :301–321.
- [Johnson and Patel, 1999] Johnson, T. A. and Patel, V. C. (1999). Flow past a sphere up to a Reynolds number of 300. *Journal of Fluid Mechanics*, 378(1) :19–70.
- [Joseph et al., 1990] Joseph, D., Lundgren, T., Jackson, R., and Saville, D. (1990). Ensemble averaged and mixture theory equations for incompressible fluid—particle suspensions. *International Journal of Multiphase Flow*, 16(1) :35–42.
- [Joseph et al., 2001] Joseph, G. G., Zenit, R., Hunt, M. L., and Rosenwinkel, A. M. (2001). Particle-wall collisions in a viscous fluid. *Journal of Fluid Mechanics*, 433(-1) :329–346.
- [Kármán and Howarth, 1938] Kármán, T. d. and Howarth, L. (1938). On the statistical theory of isotropic turbulence. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 164(917) :192–215. ArticleType : research-article / Full publication date : Jan. 21, 1938 / Copyright © 1938 The Royal Society.
- [Karnis et al., 1966] Karnis, A., Goldsmith, H., and Mason, S. (1966). The flow of suspensions through tubes. V : Inertial effects. *Canada Journal of Chemical Engineering*, 44 :181–193.
- [Kataoka, 1986] Kataoka, I. (1986). Local instant formulation of two-phase flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 12 :745–758.
- [Kataoka et al., 1986] Kataoka, I., Ishii, M., and Serizawa, A. (1986). Local formulation and measurements of interfacial area concentration in two-phase flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 12 :505–529.
- [Kempe and Fröhlich, 2010] Kempe, T. and Fröhlich, J. (2010). On Euler-Lagrange coupling and collision modelling for spherical particles. In *8th International ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements, Marseille, France*.
- [Kempe et al., 2009] Kempe, T., Schwarz, S., and Fröhlich, J. (2009). Modelling of spheroidal particles in viscous flows. In *Proceedings of the Academy Colloquium Immersed Boundary Methods : Current Status and Future Research Directions (KNAW, Amsterdam, The Netherlands, 15–17 June 2009)*.
- [Khadra et al., 2000] Khadra, K., Angot, P., Parneix, S., and Caltagirone, J. (2000). Fictitious domain approach for numerical modelling of Navier-Stokes equations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 34 :651–684.
- [Kim et al., 2001] Kim, J., Kim, D., and Choi, H. (2001). An immersed-boundary finite-volume method for simulations of flow in complex geometries. *Journal of Computational Physics*, 171 :132–150.
- [Kolmogorov, 1941] Kolmogorov, A. (1941). Dissipation of energy in locally isotropic turbulence. *CR Acad. Sci. URSS*, 32 :16.
- [Kruis and Kusters, 1997] Kruis, F. E. and Kusters, K. A. (1997). The collision rate of particles in turbulent flow. *Chemical Engineering Communications*, 158(1) :201–230.
- [Lacaze et al., 2008] Lacaze, L., Phillips, J. C., and Kerswell, R. R. (2008). Planar collapse of a granular column : Experiments and discrete element simulations. *Physics of Fluids*, 20(6) :063302.
- [Ladd, 1994] Ladd, A. J. C. (1994). Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. part 2. numerical results. *Journal of Fluid Mechanics*, 271 :311–339.

- [Laín et al., 2002] Laín, S., Sommerfeld, M., and Kussin, J. (2002). Experimental studies and modelling of four-way coupling in particle-laden horizontal channel flow. *International of Heat and Fluid Flow*, 23 :647–656.
- [Lallemand and Luo, 2003] Lallemand, P. and Luo, L. S. (2003). Lattice Boltzmann method for moving boundaries. *Journal of Computational Physics*, 184(2) :406–421.
- [Lamb, 1932] Lamb, H. (1932). *Hydrodynamics*. Cambridge University Press.
- [Lavieville, 1997] Lavieville, J. (1997). *Simulations numériques et modélisation des interactions entre l’entraînement par la turbulence et les collisions interparticulaires en écoulements gazeux*. PhD thesis, Université de Rouen, Rouen.
- [Lefebvre, 2007] Lefebvre, A. (2007). *Numerical modeling of fluid/particle flows. Accounting of lubrication effects*. PhD thesis, Paris-Sud. Faculté des Sciences d’Orsay.
- [Legendre et al., 2005] Legendre, D., Daniel, C., and Guiraud, P. (2005). Experimental study of a drop bouncing on a wall in a liquid. *Physics of Fluids*, 17(9) :097105–13.
- [Linassier, 2012] Linassier, G. (2012). *Etude expérimentale et numérique de l’allumage des turboréacteurs en conditions de haute altitude*. PhD thesis, Université de Toulouse.
- [Lucci et al., 2010] Lucci, F., Ferrante, A., and Elghobashi, S. (2010). Modulation of isotropic turbulence by particles of taylor length-scale size. *Journal of Fluid Mechanics*, 650 :5–55.
- [Lucci et al., 2011] Lucci, F., Ferrante, A., and Elghobashi, S. (2011). Is stokes number an appropriate indicator for turbulence modulation by particles of taylor-length-scale size? *Physics of Fluids*, 23(2) :025101.
- [Luret, 2010] Luret, G. (2010). *Étude numérique des phénomènes de collision/coalescence en milieu dense*. PhD thesis, Université de Rouen.
- [Magnaudet et al., 1995] Magnaudet, J., Rivero, M., and Fabre, J. (1995). Accelerated flows past a rigid sphere or a spherical bubble. Part 1. steady straining flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 284 :97–136.
- [Mansour and Wray, 1994] Mansour, N. N. and Wray, A. A. (1994). Decay of isotropic turbulence at low reynolds number. *Physics of Fluids*, 6 :808.
- [Marella et al., 2005] Marella, S., Krishnan, S., Liu, H., and Udaykumar, H. (2005). Sharp interface cartesian grid method i : An easily implemented technique for 3D moving boundary computations. *Journal of Computational Physics*, 210(1) :1–31.
- [Mashayek, 1998] Mashayek, F. (1998). Droplet-turbulence interactions in low-mach-number homogeneous shear two-phase flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 367 :163–203.
- [Matas et al., 2004] Matas, J., Morris, J. F., and Guazzelli, E. (2004). Inertial migration of rigid spherical particles in poiseuille flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 515(-1) :171–195.
- [Maury, 1997] Maury, B. (1997). A many-body lubrication model. *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences - Series I - Mathematics*, 325 :1053–1058.
- [Maury, 1999] Maury, B. (1999). Direct simulations of 2D fluid-particle flows in biperiodic domains. *Journal of Computational Physics*, 156(2) :325–351.
- [Maxey, 1987] Maxey, M. R. (1987). The gravitational settling of aerosol particles in homogeneous turbulence and random flow fields. *Journal of Fluid Mechanics*, 174 :441–465.
- [Maxey and Riley, 1983] Maxey, M. R. and Riley, J. J. (1983). Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow. *Physics of Fluids*, 26 :883.

-
- [Mecke et al., 1994] Mecke, K., Buchert, T., and Wagner, H. (1994). Robust morphological measures for large-scale structure in the universe. *Astronomy and Astrophysics*, 288 :697–704.
- [Merle et al., 2005] Merle, A., Legendre, D., and Magnaudet, J. (2005). Forces on a high-reynolds-number spherical bubble in a turbulent flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 532 :53–62.
- [Minutolo et al., 2009] Minutolo, P., Prati, M., Sirignano, M., and D’Anna, A. (2009). Emission of particles from practical combustion devices burning methane/natural gas. *European Aerosol Conference 2009, Karlsruhe*.
- [Monchaux et al., 2012] Monchaux, R., Bourgoïn, M., and Cartellier, A. (2012). Analyzing preferential concentration and clustering of inertial particles in turbulence. *International Journal of Multiphase Flow*, 40(0) :1–18.
- [Moore, 1962] Moore, D. W. (1962). The boundary layer on a spherical gas bubble. *Journal of Fluid Mechanics*, 16 :161–176.
- [Moreau et al., 2009] Moreau, M., Simonin, O., and Bédard, B. (2009). Development of Gas-Particle Euler-Euler LES Approach : A Priori Analysis of Particle Sub-Grid Models in Homogeneous Isotropic Turbulence. *Flow, Turbulence, Combustion*, 84 :295–324.
- [Özel et al., 2013] Özel, A., Vincent, S., Masbernat, O., Estivalezes, J.-L., Abbas, M., Brändle de Motta, J. C., and Simonin, O. (2013). Fully resolved dns of a liquid fluidized bed. In *International Conference in Multiphase Flow, Paper Number ICMF2013-1023*, Jeju (Korea).
- [Pan and Glowinski, 2002] Pan, T.-W. and Glowinski, R. (2002). Direct simulation of the motion of neutrally buoyant circular cylinders in plane poiseuille flow. *Journal of Computational Physics*, 181(1) :260–279.
- [Pan et al., 2002] Pan, T.-W., Joseph, D., Bai, R., Glowinski, R., and Sarin, V. (2002). Fluidization of 1204 spheres : simulation and experiment. *Journal of Fluid Mechanics*, 451 :169–191.
- [Patankar et al., 2000] Patankar, N., Singh, P., Joseph, D., Glowinski, R., and Pan, T.-W. (2000). A new formulation of the distributed lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 26(9) :1509–1524.
- [Patankar, 2001] Patankar, N. A. (2001). A formulation for fast computations of rigid particulate flows. In *Center for Turbulence Research*, pages 185–196. Stanford University.
- [Peskin, 1972a] Peskin, C. (1972a). *Flow patterns around heart valves : a digital computer method for solving the equations of motion*. PhD thesis, Sue Golding Graduate Division of Medical Sciences, Albert Einstein College of Medicine, Yeshiva University.
- [Peskin, 1972b] Peskin, C. (1972b). Flow patterns around heart valves : a numerical method. *Journal of Computational Physics*, 10(2) :252–271.
- [Peskin, 2002] Peskin, C. S. (2002). The immersed boundary method. *Acta Numerica*, 11 :479–517.
- [Pianet et al., 2007] Pianet, G., Cate, A. T., Derksen, J., and Arquis, E. (2007). Assessment of the 1-fluid method for DNS of particulate flows : sedimentation of a single sphere at moderate to high Reynolds numbers. *Computers and Fluids*, 36 :359–375.
- [Poelma et al., 2007] Poelma, C., Westerweel, J., and Ooms, G. (2007). Particle-fluid interactions in grid-generated turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 589(-1) :315–351.
- [Pope, 2000] Pope, S. B. (2000). *Turbulent flows*. Cambridge Univ Press.
- [Poux et al., 2011] Poux, A., Glockner, S., and Azaïez, M. (2011). Improvements on open and traction boundary conditions for Navier-Stokes time-splitting methods. *Journal of Computational Physics*, 230 :4011–4027.

- [Prosperetti and Oğuz, 2001] Prosperetti, A. and Oğuz, H. (2001). Physalis : A new $o(N)$ method for the numerical simulation of disperse systems : Potential flow of spheres. *Journal of Computational Physics*, 167(1) :196–216.
- [Qureshi, 2009] Qureshi, N. M. (2009). *Experimental Investigation of Finite-Sized Inertial Particles Dynamics in Wind Tunnel Grid Generated Turbulence*. PhD thesis, Université Joseph Fourier.
- [Qureshi et al., 2008] Qureshi, N. M., Arrieta, U., Baudet, C., Cartellier, A., Gagne, Y., and Bourgoïn, M. (2008). Acceleration statistics of inertial particles in turbulent flow. *The European Physical Journal B*, 66(4) :531–536.
- [Randrianarivelo, 2005] Randrianarivelo, T. (2005). *Étude numérique des interactions hydrodynamiques fluides/solides : application aux lits fluidisés*. PhD thesis, Université Bordeaux 1.
- [Randrianarivelo et al., 2005a] Randrianarivelo, T., Pianet, G., Vincent, S., and Caltagirone, J.-P. (2005a). Numerical modelling of the solid particle motion using a new penalty method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 47 :1245–1251.
- [Randrianarivelo et al., 2005b] Randrianarivelo, T. N., Pianet, G., Vincent, S., and Caltagirone, J. P. (2005b). Numerical modelling of solid particle motion using a new penalty method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 47(10-11) :1245–1251.
- [Randrianarivelo et al., 2007] Randrianarivelo, T. N., Vincent, S., Simonin, O., and Caltagirone, J.-P. (2007). A DNS approach dedicated to the analysis of fluidized beds. *Fluid Mechanics Applications*, 81 :207–214.
- [Reade and Collins, 2000] Reade, W. C. and Collins, L. R. (2000). Effect of preferential concentration on turbulent collision rates. *Physics of Fluids*, 12(10) :2530–2540.
- [Reynolds, 1883] Reynolds, O. (1883). An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and of the law of resistance in parallel channels. *Proceedings of the Royal Society of London*, 35(224-226) :84–99.
- [Richardson and Zaki, 1954] Richardson, J. and Zaki, W. (1954). Sedimentation and fluidization. Part 1. *Transactions of the Institution of Chemical Engineering*, 32 :35–53.
- [Richardson, 1922] Richardson, L. F. (1922). *Weather prediction by numerical process*. Cambridge, The University press, University of California Libraries.
- [Ritz and Caltagirone, 1999a] Ritz, J.-B. and Caltagirone, J. (1999a). A numerical continuous model for the hydrodynamics of fluid particle systems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 30 :1067–1090.
- [Ritz and Caltagirone, 1999b] Ritz, J. B. and Caltagirone, J. P. (1999b). A numerical continuous model for the hydrodynamics of fluid particle systems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 30(8) :1067–1090.
- [Rosa et al., 2011] Rosa, B., Wang, L.-P., Maxey, M., and Grabowski, W. (2011). An accurate and efficient method for treating aerodynamic interactions of cloud droplets. *Journal of Computational Physics*, 230(22) :8109–8133.
- [Rosales and Meneveau, 2005] Rosales, C. and Meneveau, C. (2005). Linear forcing in numerical simulations of isotropic turbulence : Physical space implementations and convergence properties. *Physics of Fluids*, 17 :095106.
- [Ryhming, 1985] Ryhming, I. (1985). *Dynamique des Fluides*. Presses Polytechniques Romanes.
- [Saffman and Turner, 1956] Saffman, P. G. and Turner, J. S. (1956). On the collision of drops in turbulent clouds. *Journal of Fluid Mechanics*, 1(01) :16–30.

-
- [Sagaut, 1998] Sagaut, P. (1998). *Large Eddy Simulation for incompressible flows - An introduction*. Springer Verlag.
- [Salazar et al., 2008] Salazar, J. P. L. C., De Jong, J., Cao, L., Woodward, S. H., Meng, H., and Collins, L. R. (2008). Experimental and numerical investigation of inertial particle clustering in isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 600 :245–256.
- [Sawatzki, 1970] Sawatzki, O. (1970). Das Strömungsfeld um eine rotierende Kugel. *Acta Mechanica*, 9 :159–214.
- [Sawford, 1991] Sawford, B. L. (1991). Reynolds number effects in Lagrangian stochastic models of turbulent dispersion. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 3(6) :1577–1586.
- [Scardovelli and Zaleski, 1999] Scardovelli, R. and Zaleski, S. (1999). Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annual Revue of Fluid Mechanics*, 31 :567–603.
- [Schenk and Gärtner, 2004] Schenk, O. and Gärtner, K. (2004). Solving Unsymmetric Sparse Systems of Linear Equations with PARDISO. *Journal of Future Generation Computer Systems*, 20 :475–487.
- [Schiller and Naumann, 1935] Schiller, L. and Naumann, A. (1935). A drag coefficient correlation. *Vdi Zeitung*, 77 :318–320.
- [Schmitt and Seuront, 2008] Schmitt, F. G. and Seuront, L. (2008). Intermittent turbulence and copepod dynamics : Increase in encounter rates through preferential concentration. *Journal of Marine Systems*, 70(3-4) :263–272.
- [Sefidvash, 1996] Sefidvash, F. (1996). Status of the Small Modular Fluidized Bed LightWater Nuclear Reactor Concept. *Nuclear Engineering Design*, 167 :203.
- [Segré and Silberberg, 1961] Segré, G. and Silberberg, A. (1961). Radial particle displacements in poiseuille flow of suspensions. *Nature*, 189(4760) :209–210.
- [Segré and Silberberg, 1962a] Segré, G. and Silberberg, A. (1962a). Behaviour of macroscopic rigid spheres in poiseuille flow. part 1. determination of local concentration by statistical analysis of particle passages through crossed light beams. *Journal of Fluid Mechanics*, 14(01) :115–135.
- [Segré and Silberberg, 1962b] Segré, G. and Silberberg, A. (1962b). Behaviour of macroscopic rigid spheres in poiseuille flow. part 2. experimental results and interpretation. *Journal of Fluid Mechanics*, 14(01) :136–157.
- [Sharma and Patankar, 2005] Sharma, N. and Patankar, N. A. (2005). A fast computation technique for the direct numerical simulation of rigid particulate flows. *Journal of Computational Physics*, 205(2) :439–457.
- [Shyuer-Ming and Komar, 1994] Shyuer-Ming, S. and Komar, P. (1994). Sediments, beach morphology and sea cliff erosion within an Oregon coastal littoral cell. *Journal of coastal Research*, 10 :144–157.
- [Simeonov and Calantoni, 2011] Simeonov, J. A. and Calantoni, J. (2011). A pressure boundary integral method for direct fluid-particle simulations on Cartesian grids. *Journal of Computational Physics*, 230 :1749–1765.
- [Soo et al., 1960] Soo, S. L., Ihrig, H. K. J., and El Kouh, A. F. (1960). Experimental determination of statistical properties of two-phase turbulent motion. *Journal of Basic Engineering*, 82(3) :609–621.
- [Squires and Eaton, 1990] Squires, K. D. and Eaton, J. K. (1990). Particle response and turbulence modification in isotropic turbulence. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 2(7) :1191.

- [Squires and Eaton, 1991] Squires, K. D. and Eaton, J. K. (1991). Preferential concentration of particles by turbulence. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 3 :1169.
- [Squires and Yamazaki, 1995] Squires, K. D. and Yamazaki, H. (1995). Preferential concentration of marine particles in isotropic turbulence. *Deep Sea Research Part I : Oceanographic Research Papers*, 42(11–12) :1989–2004.
- [Stokes, 1845] Stokes, G. G. (1845). On the theories of the internal friction of fluids in motion, and of the equilibrium and motion of elastic solids. *Transactions of the Cambridge Philosophical Society*, 8 :287 – 305.
- [Sundaram and Collins, 1997] Sundaram, S. and Collins, L. (1997). Collision statistics in an isotropic particle-laden turbulent suspension. Part 1. direct numerical simulations. *Journal of Fluid Mechanics*, 335(75) :109.
- [Sundararajakumar and Koch, 1996] Sundararajakumar, R. R. and Koch, D. L. (1996). Non-continuum lubrication flows between particles colliding in a gas. *Journal of Fluid Mechanics*, 313 :283–308.
- [Tachibana, 1973] Tachibana, M. (1973). On the behaviour of a sphere in the laminar tube flows. *Rheologica Acta*, 12 :58–69.
- [Tagawa et al., 2012] Tagawa, Y., Mercado, J. M., Prakash, V. N., Calzavarini, E., Sun, C., and Lohse, D. (2012). Three-dimensional lagrangian voronoï analysis for clustering of particles and bubbles in turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 693 :201–215.
- [Takagi et al., 2003] Takagi, S., Oğuz, H., Zhang, Z., and Prosperetti, A. (2003). PHYSALIS : a new method for particle simulation : Part II : two-dimensional Navier–Stokes flow around cylinders. *Journal of Computational Physics*, 187(2) :371–390.
- [Tanaka and Eaton, 2008] Tanaka, T. and Eaton, J. K. (2008). Classification of turbulence modification by dispersed spheres using a novel dimensionless number. *Physical Review Letters*, 101(11) :114502.
- [Tanaka and Eaton, 2010] Tanaka, T. and Eaton, J. K. (2010). Sub-kolmogorov resolution particle image velocimetry measurements of particle-laden forced turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 643 :177.
- [Taylor, 1921] Taylor, G. I. (1921). Diffusion by continuous movements. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A.*, 88 :196–211.
- [Tchen, 1947] Tchen, C. (1947). *Mean value and correlation problems connected with the motion of small particles suspended in a turbulent fluid*. PhD thesis, University of Delft, The Hague.
- [Trontin, 2009] Trontin, P. (2009). *Développement d’une approche de type LES pour la simulation d’écoulements diphasiques avec interface. Application à l’atomisation primaire*. PhD thesis, Université de Toulouse, Toulouse.
- [Truesdell and Elghobashi, 1994] Truesdell, G. C. and Elghobashi, S. (1994). On the two-way interaction between homogeneous turbulence and dispersed solid particles. II. particle dispersion. *Physics of Fluids*, 6(3) :1405–1407.
- [Uhlmann, 2005] Uhlmann, M. (2005). An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows. *Journal of Computational Physics*, 209(2) :448–476.
- [Uhlmann, 2008] Uhlmann, M. (2008). Interface-resolved direct numerical simulation of vertical particulate channel flow in the turbulent regime. *Physics of Fluids*, 20(5) :053305–27.
- [Uhlmann, 2010] Uhlmann, M. (2010). Communication privée.

-
- [Verlet, 1967] Verlet, L. (1967). Computer "Experiments" on classical fluids. i. thermodynamical properties of lennard-jones molecules. *Phys. Rev.*, 159(1) :98.
- [Vermorel, 2003] Vermorel, O. (2003). *Etude numérique et modélisation de la modulation de la turbulence dans un écoulement de nappe chargée en particules*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse.
- [Vincent et al., 2013] Vincent, S., Brändle de Motta, J. C., Sarthou, A., Estivalezes, J.-C., Simonin, O., and Climent, E. (2013). A Lagrangian vof tensorial penalty method for the dns of resolved particle. *Journal of Computational Physics (En cours de publication)*.
- [Vincent et al., 2004] Vincent, S., Caltagirone, J.-P., Lubin, P., and Randrianarivelo, N. (2004). An adaptative augmented Lagrangian method for three-dimensional multi-material flows. *Computers and Fluids*, 33 :1273–1289.
- [Vincent et al., 2008] Vincent, S., Lacanette, D., Larocque, J., Toutant, A., Lubin, P., and Sagaut, P. (2008). Direct numerical simulation of phase separation and *a priori* two-phase LES filtering. *Computers and Fluids*, 37 :898–906.
- [Vincent et al., 2007] Vincent, S., Randrianarivelo, T., Pianet, G., and Caltagirone, J. (2007). Local penalty methods for flows interacting with moving solids at high Reynolds numbers. *Computers and Fluids*, 36 :902–913.
- [Vincent et al., 2011] Vincent, S., Sarthou, A., Caltagirone, J.-P., Sonilhac, F., Février, P., Mignot, C., and Pianet, G. (2011). Augmented Lagrangian and penalty methods for the simulation of two-phase flows interacting with moving solids. Application to hydroplaning flows interacting with real tire tread patterns. *Journal of Computational Physics*, 230 :956–983.
- [Volk et al., 2008] Volk, R., Calzavarini, E., Verhille, G., Lohse, D., Mordant, N., Pinton, J., and Toschi, F. (2008). Acceleration of heavy and light particles in turbulence : comparison between experiments and direct numerical simulations. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 237(14-17) :2084–2089.
- [Vorst, 1992] Vorst, R. A. V. D. (1992). BiCGSTAB : a fast and smoothly converging varian of BiCG for the solution of non-symmetric linear systems. *SIAM Journal on Scientific Statistic Computing*, 13 :631–644.
- [Voth et al., 2002] Voth, G. A., La Porta, A., Crawford, A. M., Alexander, J., and Bodenschatz, E. (2002). Measurement of particle accelerations in fully developed turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 469.
- [Wang and Maxey, 1993] Wang, L. P. and Maxey, M. R. (1993). Settling velocity and concentration distribution of heavy particles in homogeneous isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 256 :27–27.
- [Wang et al., 2000] Wang, L. P., Wexler, A. S., and Zhou, Y. (2000). Statistical mechanical description and modelling of turbulent collision of inertial particles. *Journal of Fluid Mechanics*, 415 :117–153.
- [Williams and Crane, 1983] Williams, J. and Crane, R. (1983). Particle collision rate in turbulent flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 9(4) :421 – 435.
- [Wood et al., 2005] Wood, A. M., Hwang, W., and Eaton, J. K. (2005). Preferential concentration of particles in homogeneous and isotropic turbulence. *International Journal of Multiphase Flow*, 31(10-11) :1220–1230.
- [Xu and Bodenschatz, 2008] Xu, H. and Bodenschatz, E. (2008). Motion of inertial particles with size larger than kolmogorov scale in turbulent flows. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 237(14-17) :2095–2100.

- [Yang and Hunt, 2006] Yang, F.-L. and Hunt, M. L. (2006). Dynamics of particle-particle collisions in a viscous liquid. *Physics of Fluids*, 18(12) :121506–11.
- [Yeung and Pope, 1988] Yeung, P. and Pope, S. (1988). An algorithm for tracking fluid particles in numerical simulations of homogeneous turbulence. *Journal of Computational Physics*, 79(2) :373 – 416.
- [Yeung and Pope, 1989] Yeung, P. and Pope, S. (1989). Lagrangian statistics from direct numerical simulations of isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 207(531) :352.
- [Youngs, 1982] Youngs, D. (1982). *Time-dependent multimaterial flow with large fluid distortion*. K.W. Morton and M.J. Baines, Numerical Methods for Fluid Dynamics, Academic, New-York.
- [Zhang and Prosperetti, 2003] Zhang, Z. and Prosperetti, A. (2003). A method for particle simulation. *Journal of Applied Mechanics*, 70(1) :64.
- [Zhang and Prosperetti, 2005] Zhang, Z. and Prosperetti, A. (2005). A second-order method for three-dimensional particle simulation. *Journal of Computational Physics*, 210(1) :292–324.
- [Zhou et al., 2001] Zhou, Y., Wexler, A. S., and Wang, L. P. (2001). Modelling turbulent collision of bidisperse inertial particles. *Journal of Fluid Mechanics*, 433 :77–104.

Simulation des écoulements turbulents avec des particules de taille finie en régime dense

Un grand nombre d'écoulements naturels et industriels mettent en jeu des particules (sédimentation, lit fluidisé, sprays...). Les écoulements chargés en particules sont bien décrits numériquement sous l'hypothèse des particules plus petites que toutes les échelles de l'écoulement. Cette thèse consiste à simuler numériquement une turbulence homogène et isotrope soutenue chargée en particules dont la taille est supérieure à l'échelle de Kolmogorov. Pour se faire une méthode de simulation a été développée au sein du code Thétis puis validée. L'originalité de cette méthode consiste en l'utilisation d'une approche de pénalisation associée à la viscosité dans la zone solide. Les particules sont transportées de façon lagrangienne. Les principaux résultats concernent trois simulations faisant varier le rapport de densité entre le fluide et le solide. Chaque simulation simule le mouvement de 512 particules avec un diamètre 22 fois plus grand que l'échelle spatiale de Kolmogorov remplissant ainsi 3% du volume total. La dispersion des particules est étudiée et montre des comportements comparables à ceux observés pour des particules ponctuelles. Un intérêt particulier est porté sur le régime collisionnel. On observe que la corrélation des vitesses avec le fluide environnant réduit le nombre de chocs frontaux par rapport au cas théorique de particules d'un gaz dense. L'effet de la prise en compte du fluide visqueux entre les particules (couche de lubrification) lors de la collision a été étudiée. L'écoulement moyen à l'échelle des particules est aussi analysé, mettant en évidence l'existence d'une couche de dissipation autour des particules.

Mots clés: Écoulement particulaire, Turbulence, Particules de taille finie, DNS

Numerical simulation of particle laden turbulent flows with finite-sized particles in dense regime

Many applications and natural environment flows make use of particles (sedimentation, fluidized bed, sprays...). Particle laden flows are described correctly by numerical methods when the particles are smaller than all other spatial scales of the flow. This thesis involves the numerical simulation of a particle laden sustained homogeneous isotropic turbulence whose particle's size is larger than the Kolmogorov spatial scale. A numerical method has been developed and validated in the numerical code Thetis. The novelty of this method is the viscosity penalization approach. The particles are tracked by a Lagrangian way. The main results obtained are related to three simulations where the density ratio between the solid and the fluid varies. Each simulation reproduces the movement of 512 particles whose diameter is 22 times the Kolmogorov spatial scale (3% volumetric solid fraction). The dispersion of particles is studied and has similar behavior than those observed with point particles simulations. The collision regime is also investigated. It is shown that the number of frontal collision is lower than its estimate for kinetic theory of gases because there is a correlation between the particles velocity and the surrounding fluid. The modification of the collision regime when the lubrication film between particles at collision is taken into account is studied. Finally, the averaged flow around particles is analyzed and shows that there is a dissipation layer around particles.

Keywords: Particle-laden flow, Turbulence, Finite-sized particles, DNS