



HAL
open science

Modélisation numérique de l'abattage humide comme procédé d'assainissement de l'air

Gaël Cherrier

► **To cite this version:**

Gaël Cherrier. Modélisation numérique de l'abattage humide comme procédé d'assainissement de l'air. Génie des procédés. Université de Lorraine, 2017. Français. NNT : 2017LORR0306 . tel-01710078

HAL Id: tel-01710078

<https://theses.hal.science/tel-01710078v1>

Submitted on 15 Feb 2018

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>



**Institut National de Recherche et de
Sécurité pour la prévention des maladies
professionnelles et des accidents du travail**
1, rue du Morvan
54500 Vandoeuvre-lès-Nancy

**Laboratoire d'Energétique et de Mécanique
Théorique et Appliquée**
2, avenue de la Forêt de Haye
54500 Vandoeuvre-lès-Nancy

**Ecole Doctorale Energie, Mécanique et
MATériaux**
2, avenue de la Forêt de Haye
54500 Vandoeuvre-lès-Nancy

Université de Lorraine
34, cours Léopold
54000 Nancy

Thèse

présentée en vue d'obtenir le titre de
Docteur de l'Université de Lorraine

spécialité
Mécanique et Energétique

Modélisation numérique de l'abattage humide comme procédé d'assainissement de l'air

par
Gaël CHERRIER

Soutenue publiquement le 1^{er} décembre 2017 à Polytech Nancy devant un jury composé de :

Pr. Anne TANIÈRE, LEMTA, Directrice de thèse

Pr. Eric CLIMENT, IMFT, Président du jury

Pr. Evelyne GEHIN, Université Paris Est Créteil, CERTES, Rapporteur

Pr. Irina GRAUR MARTIN, IUSTI, Rapporteur

Dr. Emmanuel BELUT, INRS, Examineur (Co-encadrant de thèse)

Dr. Fabien GERARDIN, INRS, Examineur (Co-encadrant de thèse)

Dr. Emmanuel PORCHERON, IRSN, Examineur

Dr. Nicolas RIMBERT, LEMTA, Examineur (Co-encadrant de thèse)

Remerciements

Je tiens tout particulièrement à remercier l'ensemble des professeurs et docteurs qui ont accepté de faire partie de mon jury de thèse. Je remercie Evelyne GEHIN et Irina GRAUR MARTIN pour m'avoir fait l'honneur d'être les deux rapporteurs de ce manuscrit, Eric CLIMENT pour avoir présidé mon jury et Emmanuel PORCHERON pour avoir évalué mes travaux de recherche en tant qu'examineur.

J'exprime toute ma gratitude à Anne TANIÈRE pour avoir dirigé ma thèse. Elle a su me motiver et m'encourager pour que je donne le meilleur de moi-même dans cette aventure qui est celle du doctorat. Je te dis un grand merci d'avoir été mon professeur puis ma directrice de thèse durant toutes ces années. Je remercie Emmanuel BELUT pour son encadrement, sa disponibilité et son expertise scientifique sans limite. Tout ceci n'aurait pas été possible sans lui. Pour tout ce que tu m'as donné, je te serai toujours reconnaissant. Je souhaite témoigner toute ma reconnaissance à Fabien GERARDIN pour le riche accompagnement qu'il m'a apporté. Ton soutien, à la fois humain et technique, m'a grandement aidé à mener à terme ce projet de recherche. Je tiens à remercier Nicolas RIMBERT pour avoir partagé avec moi ses connaissances scientifiques de pointe. Pour la qualité de ton suivi et de ta contribution scientifique, je tiens à te dire un grand merci. Vous quatre, vous avez su m'apporter à la fois l'encadrement, les connaissances scientifiques mais aussi les compétences rédactionnelles qui m'ont permis de concrétiser ma première expérience de recherche. Pour tout ce temps passé ensemble, je vous suis extrêmement reconnaissant.

Je tiens aussi à remercier les membres du laboratoire d'aérodynamique de l'INRS qui m'ont accueilli dans leurs locaux avec qui j'ai pris grand plaisir à échanger: Laurence, Francis, Florent, Jean-Claude, Francis (bis), Romain, Sullivan, Jean-Raymond, François-Xavier, Roland, Robert et Jennifer, je vous remercie pour nos discussions à propos de la science mais aussi en relation avec nos passés, nos présents et nos futurs. Pour la joie de vivre qui régnait dans ce laboratoire, je vous dis merci. J'aimerais remercier Armelle et Jean-Pierre pour avoir dirigé et géré le département de recherche dans lequel j'exerçais. Je remercie Fabrice qui est, et restera, mon « Parrain INRS ». Je suis persuadé que notre amitié durera bien longtemps. Je souhaite également exprimer mes remerciements à Boris et Rafik qui m'ont permis de passer de bons moments studieux à l'ESSTIN et à Patrick avec qui j'ai eu beaucoup de discussions très intéressantes durant mon séjour au 32. J'envoie mes remerciements à Irène qui s'est occupée de mon intégration au LEMTA tout au long de cette thèse.

Je désire également remercier ma famille, mes amis et ma compagne pour m'avoir soutenu durant ces trois années de doctorat. Sans vous, tout ceci aurait été beaucoup plus difficile à réaliser.

Je m'excuse auprès des personnes que j'aurais pu oublier de remercier et qui ont joué un rôle dans la réalisation de ce projet.

Table des matières

Remerciements	3
Table des matières	5
Liste des figures.....	9
Liste des tableaux.....	12
Nomenclature.....	15
I. Introduction.....	19
II. Phénoménologie de l'abattage humide.....	21
II.1 Généralités sur l'abattage humide.....	21
II.1.1 Phénomène multiphasique	22
II.1.2 Epuration de l'air	31
II.1.3 Conclusion partielle.....	43
II.2 Etude bibliographique	44
II.2.1 Données de la littérature.....	44
II.2.2 Lacunes de la littérature.....	50
II.2.3 Démarche retenue.....	53
II.3 Points clefs de ce chapitre.....	55
III. Modélisation microphysique.....	57
III.1 Introduction.....	57
III.1.1 Champ d'application et hypothèses de modélisation.....	57
III.2 Modélisation des trois phases prenant place dans l'abattage humide	58
III.2.1 Modélisation de l'écoulement d'air autour de la goutte et d'eau dans la goutte	58
III.2.2 Réduction axisymétrique.....	59
III.2.3 Modélisation du déplacement des particules d'aérosol	61
III.2.4 Modélisation de la capture d'une particule d'aérosol par une goutte	63
III.2.5 Conclusion partielle.....	64
III.3 Implémentation du modèle fluide et particulaire.....	64
III.3.1 Modèle fluide	64
III.3.2 Modèle particulaire	66
III.3.3 Conclusion partielle.....	72
III.4 Vérification du modèle.....	72
III.4.1 Génération des nombres aléatoires.....	72
III.4.2 Disque d'injection.....	72

III.4.3	Complétude des trajectoires des particules d'aérosol.....	73
III.4.4	Représentativité des résultats d'efficacité de capture	73
III.4.5	Conclusion partielle.....	75
III.5	Validation des résultats microphysiques.....	75
III.5.1	Goutte.....	75
III.5.2	Mouvement brownien d'une particule d'aérosol	78
III.5.3	Efficacité de capture unitaire	79
III.5.4	Conclusion partielle.....	80
III.6	Résultats et discussion de l'approche microphysique	81
III.6.1	Zones de collecte préférentielle.....	81
III.6.2	Efficacité de collecte.....	83
III.6.3	Dérivation d'une corrélation pour le noyau de capture.....	85
III.7	Points clefs de ce chapitre.....	88
IV.	Simulation macrophysique.....	89
IV.1	Introduction.....	89
IV.2	Champ d'application et hypothèses de simulation.....	89
IV.3	Aperçu de la modélisation physique proposée.....	90
IV.3.1	Modélisations des phases et de leurs interactions	90
IV.3.2	Conclusion partielle.....	99
IV.4	Vérification de la simulation macroscopique d'abattage humide	102
IV.4.1	Cas test	102
IV.4.2	Résolution du cas test	104
IV.4.3	Résultats de la comparaison entre la simulation CFD 3D et la modélisation 1D Matlab® 106	
IV.4.4	Etude de sensibilité des paramètres	109
IV.5	Points clefs de ce chapitre.....	110
V.	Validation de la simulation macrophysique d'abattage humide	113
V.1	Expérience TOSQAN	113
V.1.1	Présentation	113
V.1.2	Simulation d'une expérience TOSQAN.....	116
V.2	Proposition et dimensionnement d'un banc d'essai de validation.....	127
V.2.1	Cahier des charges.....	127
V.2.2	Conception du banc d'essai.....	128
V.2.3	Réalisation du banc d'essai	139

V.3	Points clefs de ce chapitre.....	145
VI.	Conclusion générale et perspectives.....	147
	Bibliographie.....	151
	Table des annexes	157

Liste des figures

Figure II-1 : Exemples de dispositifs d'abattage humide. A : laveur humide (venturi) © Wikipedia, B : pince de chantier appareillée © INRS, C : canon à eau © towerlight.com.....	21
Figure II-2 : Histogramme de la granulométrie d'un aérosol dont la distribution normale est centrée sur 150 μm (écart type de 20 μm). La courbe représente le spectre granulométrique correspondant.	24
Figure II-3 : Illustration des diamètres équivalents pour une particule. © (Calec, 2013).....	26
Figure II-4 : Illustration de la forme de différentes gouttes d'eau de pluie. Les diamètres des gouttes présentées sont les suivants : 1 ^{er} rang, de gauche à droite : 8 mm; 7,36 mm et 5,8 mm, 2 ^{ème} rang, de gauche à droite : 5,3 mm; 3,5 mm et 2,7 mm, 3 ^{ème} rang, de gauche à droite : 786 μm ; 708 μm et 310 μm . © (Pruppacher and Klett, 2010).	28
Figure II-5 : Vitesse limite de chute et nombre de Reynolds associé en fonction du diamètre d'une goutte.	31
Figure II-6 : Efficacité de capture.....	32
Figure II-7 : Efficacité de capture inertielle.	32
Figure II-8 : Illustration de la diffusion brownienne d'une particule dans de l'air au repos.	34
Figure II-9 : La capture brownienne.	35
Figure II-10 : La capture par impaction.	36
Figure II-11 : La capture par interception.....	37
Figure II-12 : La diffusiophorèse. Dans cette Figure, X est la concentration en vapeur d'eau dans l'air.	38
Figure II-13 : La thermophorèse. Dans cette Figure, T est la température de l'air.	40
Figure II-14 : La capture électrostatique.	41
Figure II-15 : Mouvement dû à la force radiométrique.....	41
Figure II-16: La capture arrière.....	42
Figure II-17 : Comparaison qualitative de l'efficacité de collecte d'une particule par une goutte d'eau. © (Murata et al., 1997)	43
Figure II-18 : Schéma de la situation d'abattage humide modélisée en 0D.....	51
Figure II-19 : Impact du noyau de capture sur la prédiction de l'efficacité d'assainissement d'une pièce. Le noyau de capture somme correspond à la contribution du noyau de Wang (Wang <i>et al.</i> , 1978) et de Mohebbi (Mohebbi <i>et al.</i> , 2003).....	52
Figure II-20 : Approche microphysique du phénomène de capture.	54
Figure II-21 : Approche macrophysique du phénomène de capture.	54
Figure III-1 : Caractérisation du couplage particule d'aérosol-fluide en fonction de la fraction volumique en particules d'aérosol. © (Elghobashi, 1994).	58
Figure III-2 : Champ de vitesse en 2D axisymétrique et en 3D. Le nombre de Reynolds de la goutte est égal à 70.	59
Figure III-3 : Domaine des phases continues.....	61
Figure III-4 : Domaine de la phase dispersée.	62
Figure III-5 : Conditions aux limites pour la phase fluide et la phase dispersée.	65
Figure III-6 : Vecteurs vitesses externes et internes à une goutte d'eau. Le nombre de Reynolds de la goutte est de 10 pour l'image A, de 30 pour la B et de 100 pour la C. Les vecteurs relatifs à l'eau sont agrandis 20 fois.	65

Figure III-7: Représentation de la taille d'un disque d'injection en fonction du nombre de Stokes de la particule d'aérosol.....	68
Figure III-8 : Diagramme du calcul de déplacement 3D d'une particule d'aérosol à partir de données fluides 2D axisymétriques. L'exposant $3D$ (resp. $2D$) correspond aux coordonnées 3D (resp. 2D), l'indice $n + 1$ correspond au pas de temps suivant et af correspond au vecteur accélération du fluide.....	71
Figure III-9 : Efficacité de capture moyenne et temps de calcul relatifs en fonction de la taille du diamètre du disque d'injection. L'exposant d_{inj} signifie diamètre du disque d'injection et l'exposant max correspond à la valeur maximale de la variable. $d_g = 1\mu m$ et $Reg = 100$	73
Figure III-10 : Efficacité de capture relative en fonction du nombre de réalisations pour $d_p = 5\mu m$, $Reg = 100$. 100 particules d'aérosol sont injectées par réalisation. L'efficacité de capture relative est obtenue en divisant E_c par l'efficacité de capture liée à 1000 réalisations.....	74
Figure III-11 : Coordonnées angulaires de la surface de la goutte.....	76
Figure III-12 : Vorticité adimensionnée à la surface de la goutte.	77
Figure III-13 : Vitesse de la surface de la goutte adimensionnée.....	77
Figure III-14 : Pression adimensionnée à la surface de la goutte.....	78
Figure III-15: Rapport entre noyau de capture obtenu par modélisation et le noyau de capture de référence en fonction du nombre de Reynolds de goutte. $T_f = 298 K, P = 101325 Pa$	80
Figure III-16: Flux de particules d'aérosol collectées φ (pointillés) et flux angulaire moyen $\bar{\varphi}$ (tirets) en fonction du diamètre aérodynamique de la particule d'aérosol ($Reg = 4$ (A)) et en fonction du nombre de Reynolds de la goutte ($d_p = 1\mu m$ (B)). Les calculs ont été réalisés sur 50 segments sphériques et β correspond à la position angulaire.....	82
Figure III-17: Noyau de capture en fonction du diamètre aérodynamique de la particule d'aérosol. $Reg = 30$	84
Figure III-18: Noyau de capture en fonction du diamètre aérodynamique de la particule d'aérosol. $Reg = 4$	85
Figure III-19: Noyau de capture en fonction du diamètre aérodynamique de la particule d'aérosol. $Reg = 100$	85
Figure III-20: Noyau de capture en fonction du diamètre aérodynamique de la particule d'aérosol. $Reg = 30$ et $Hr \in 50; 100\%$	88
Figure IV-1: Schéma du modèle 1D d'évaporation avec variation de l'humidité relative, du diamètre des gouttes et de la température des gouttes et de l'air.....	102
Figure IV-2: Schéma de la géométrie et du maillage du cas Fluent®.	105
Figure IV-3: Comparaison du diamètre des gouttes en fonction de leur position (x).....	106
Figure IV-4: Comparaison de la température des gouttes en fonction de leur position (x).	107
Figure IV-5: Comparaison de la température de l'air en fonction de x.....	107
Figure IV-6: Comparaison de l'humidité relative en fonction de x.	108
Figure IV-7: Comparaison de la concentration en particules adimensionnée en fonction de x.	108
Figure V-1 : Banc d'essai TOSQAN. © (Marchand, 2008).....	113
Figure V-2 : Plan d'expérience de la campagne TOSQAN. s correspond à l'humidité relative. © (Marchand, 2008).....	116
Figure V-3 : Evolution des grandeurs relatives à l'expérience AG0 en fonction du temps. Les mesures sont réalisées en L1. © (Marchand, 2008).....	118
Figure V-4: Domaine simulé représentant TOSQAN.	119

Figure V-5 : Evolution du nombre normé de particules d'aérosol dans l'air en fonction du temps. Mesure pour l'essai S0. © (Marchand, 2008)	121
Figure V-6 : Evolution du nombre normé de particules d'aérosol dans l'air en fonction du temps et du diamètre aérodynamiques des particules d'aérosol. Simulation de l'essai S0.	121
Figure V-7 : Distribution des particules d'aérosol pour l'essai S0. © (Marchand, 2008)	122
Figure V-8 : Evolution de la concentration adimensionnée en particules d'aérosol dans l'air en fonction du temps. Les donnée correspondent à la population globale des particules d'aérosol. Simulation de l'essai S0.	123
Figure V-9 : Evolution de la concentration en particules d'aérosol adimensionnée en fonction du temps. Particules d'aérosol de 3 μm de diamètre. Simulation de l'essai AG0.....	124
Figure V-10 : Schéma d'une tour de lavage.....	128
Figure V-11 : Schéma du banc d'essai modélisé en 1D.	129
Figure V-12 : Evolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air en fonction de x . $dg = 300 \mu\text{m}$	130
Figure V-13 : Evolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air en fonction de x . $dg = 200 \mu\text{m}$	130
Figure V-14 : Dispositif de banc d'essai envisagé.....	132
Figure V-15 : Schéma du banc d'essai modélisé avec le logiciel de CFD.	132
Figure V-16 : Caractéristiques géométriques du banc d'essai.	134
Figure V-17: Trajectoire des gouttes d'eau et évolution de leur diamètre. Diamètre initial des gouttes égal à 200 μm (gauche) ou 300 μm (droite).....	136
Figure V-18 : Trajectoire des gouttes d'eau et évolution de leur nombre de Reynolds. Diamètre initial des gouttes égal à 200 μm (gauche) ou 300 μm (droite).	136
Figure V-19 : Trajectoire des gouttes d'eau et évolution de leur température. Diamètre initial des gouttes égal à 200 μm (gauche) ou 300 μm (droite).....	137
Figure V-20 : Evolution de la vitesse de l'air (lignes de courant, gauche), de l'humidité relative dans l'air (milieu) et de la température de l'air (droite). Diamètre initial des gouttes égal à 200 μm	138
Figure V-21 : Dessin technique du banc d'essai.	140
Figure V-22 : Schéma du banc d'essai avec les instruments de mesure et le matériel de contrôle de la température et de l'humidité. Le sigle Hr correspond à un capteur d'humidité, la lettre C correspond à un capteur de concentration en particules d'aérosol et la lettre T correspond à un capteur de température.	141
Figure VI-1: Schéma d'une situation d'abattage humide.	147
Figure VI-2: Modélisation microphysique de la capture de particules d'aérosol par une goutte d'eau.	148

Liste des tableaux

Tableau II-1 : Facteur de forme dynamique de quelques particules. ©(Renoux and Boulaud, 1998).	26
Tableau II-2: Les différents régimes d'écoulement d'air autour d'une goutte. © (Pruppacher and Klett, 2010).	30
Tableau II-3 : Coefficient de diffusion brownienne et déplacement quadratique moyen 3D d'une particule en fonction de son diamètre aérodynamique.	35
Tableau II-4 : Temps de réponse aérodynamique en fonction du diamètre aérodynamique d'une particule de densité égale à 1.	36
Tableau II-5 : Récapitulatif des données disponibles de capture de particules d'aérosol par des gouttes d'eau.	49
Tableau III-1: Intervalle de confiance de l'efficacité de capture moyenne pour une particule d'aérosol de diamètre égal à $5\mu\text{m}$ et un nombre de Reynolds de goutte de 100. L'efficacité de capture moyenne est obtenue en divisant E_c par l'efficacité de capture correspondant au nombre de réalisation.	74
Tableau III-2: Coefficients de traînée : comparaison entre simulation numérique et littérature. Les données de la littérature proviennent de (Rivkind and Ryskin, 1976) sauf celle avec l'exposant * qui provient de (Saboni <i>et al.</i> , 2004).	76
Tableau III-3 : Comparaison du déplacement quadratique moyen au temps long d'une particule d'aérosol dû à son mouvement brownien $T_f = 290\text{K}$, $P = 101325\text{ Pa}$). Le nombre de pas de temps utilisé pour la modélisation est constant (103) mais la durée de la modélisation ne l'est pas.	79
Tableau IV-1 : Etude de sensibilité des paramètres initiaux sur la simulation CFD et la modélisation 1D (1/2)	109
Tableau IV-2 : Etude de sensibilité des paramètres initiaux sur la simulation CFD et la modélisation 1D (2/2)	110
Tableau V-1: Conditions initiales de l'essai de référence sans aspersion de TOSQAN (S0).	117
Tableau V-2: Conditions initiales de l'essai de référence avec aspersion de TOSQAN (AG0).	117
Tableau V-3: Conditions initiales de l'essai de référence sans aspersion S0 et avec aspersion AG0 de TOSQAN.	120
Tableau V-4: Paramètres de simulations utilisés dans les différents essais.	123
Tableau V-5: Evolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air en fonction du diamètre aérodynamique des particules d'aérosol. $d_g = 200\ \mu\text{m}$. L'épuration de l'air est égale à 1 – $C_{pout}C_{pin}$	138
Tableau V-6 : Evolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air en fonction du diamètre aérodynamique des particules d'aérosol. $d_g = 300\ \mu\text{m}$. L'épuration de l'air est égale à 1 – $C_{pout}C_{pin}$	139
Tableau V-7 : Evolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air en fonction du diamètre aérodynamique des particules d'aérosol. $d_g = 300\ \mu\text{m}$. L'épuration de l'air est égale à 1 – $C_{pout}C_{pin}$	139
Tableau V-8 : Débit d'eau pulvérisé par une buse en fonction de son type et de la pression.	142
Tableau V-9 : Conditions expérimentales pour la caractérisation du dépôt des particules d'aérosol sur les surfaces du banc d'essai. La pression de l'air est constante et égale à la pression atmosphérique, la granulométrie et la nature de l'aérosol sont constantes et le débit d'air est constant.	144

Tableau V-10 : Plan d'expérience pour le banc d'essai. La pression de l'air est constante et égale à la pression atmosphérique, la granulométrie et la nature de l'aérosol sont constantes, le débit d'air est constant et le débit d'eau est fixé par le diamètre recherché pour les gouttes d'eau..... 145

Nomenclature

Symbole Grec	Signification	Unité
α	Fraction volumique	[\emptyset]
γ	Tension superficielle de la goutte d'eau	[$kg \cdot s^{-2}$]
Γ	Terme d'échange	Selon contexte
δ_{ij}	Symbole de Kronecker	[\emptyset]
Δ	Variation	Selon contexte
ε	Taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente	[$m^2 \cdot s^{-3}$]
λ	Libre parcours moyen des molécules du gaz porteur	[m]
λ_c	Conductivité thermique (sauf précisé autrement)	[$kg \cdot m \cdot s^{-3} \cdot K^{-1}$]
μ	Viscosité dynamique ou turbulente	[$kg \cdot m^2 \cdot s^{-1}$]
ν	Viscosité cinématique ou turbulente	[$m^2 \cdot s^{-1}$]
ξ	Variable aléatoire tirée d'une loi normale	[\emptyset]
ρ	Masse volumique ou densité	[$kg \cdot m^{-3}$] - [\emptyset]
τ	Constante de temps	[s]
φ	Flux	Selon contexte
χ	Facteur de forme dynamique	[\emptyset]

Symbole Latin	Signification	Unité
a	Accélération	$[m. s^{-2}]$
<i>Bo</i>	Nombre de Bond	$[\emptyset]$
<i>B</i>	Coefficient relatif aux propriétés diffusionnelles	$[m. s^{3/2}]$
<i>B_m</i>	Nombre de Spalding	$[\emptyset]$
<i>C_d</i>	Coefficient de traînée	$[\emptyset]$
<i>C_u</i>	Coefficient de correction de Cunningham	$[\emptyset]$
<i>C</i>	Concentration numérique	$[m^{-2}]-[m^{-3}]$
<i>Co</i>	Nombre de Courant	$[\emptyset]$
<i>Cs</i>	Chaleur spécifique (ou capacité thermique)	$[kg. m^2. s^{-2}. K^{-1}]$
<i>d</i>	Diamètre	$[m]$
<i>D_B</i>	Coefficient de diffusion brownienne (de la particule) ou diffusivité moléculaire	$[m^2. s^{-1}]$
<i>D_{vap}</i>	Diffusivité de la vapeur d'eau dans l'air	$[m^2. s^{-1}]$
<i>E_c</i>	Efficacité de capture	$[\emptyset]$
<i>E</i>	Energie interne	$[kg. m^2. s^{-2}]$
<i>Ex</i>	Excentricité de la goutte d'eau	$[\emptyset]$
F	Force	$[kg. m. s^{-2}]$
F_T	Force de traînée	$[kg. m. s^{-2}]$
<i>F_{df}</i>	Force de diffusiphorèse	$[kg. m. s^{-2}]$
<i>F_{el}</i>	Force électrostatique	$[kg. m. s^{-2}]$
<i>F_{th}</i>	Force thermophorétique	$[kg. m. s^{-2}]$
g	Accélération de pesanteur	$[m. s^{-2}]$
<i>H</i>	Fonction prenant en compte les forces diffusiphorétiques (<i>H_{df}</i>), thermophorétique (<i>H_{th}</i>) et électrostatiques (<i>H_e</i>)	$[kg. m^3. s^{-2}]$
<i>H_r</i>	Humidité relative	$[\emptyset]$
<i>Kn</i>	Nombre de Knudsen	$[\emptyset]$
<i>k_B</i> = 1,38 10 ⁻²³	Constante de Boltzmann	$[m^2. kg. s^{-2}. K^{-1}]$
<i>K</i>	Noyau de capture	$[m^{-3}. s^{-1}]$
<i>L_{vap}</i>	Chaleur latente de vaporisation	$[m^2. s^{-2}]$
<i>m</i>	Masse	$[kg]$
<i>M</i>	Masse molaire	$[kg. mol^{-1}]$
<i>n</i>	Débit numérique	$[s^{-1}]$
<i>Nu</i>	Nombre de Nusselt	$[\emptyset]$
<i>Oh</i>	Nombre d'Ohnesorge	$[\emptyset]$
Po	Poids	$[kg. m. s^{-2}]$
<i>P</i>	Pression	$[kg. m^{-1}. s^{-2}]$
<i>Q</i>	Débit volumique	$[m^3. s^{-1}]$
<i>Re</i>	Nombre de Reynolds	$[\emptyset]$
r	Vecteur normal	$[\emptyset]$
<i>R</i>	Constante universelle des gaz parfaits	$[kg. m^2. s^{-2}. mol^{-1}. K^{-1}]$
<i>S</i>	Surface	$[m^2]$
<i>Sh</i>	Nombre de Sherwood	$[\emptyset]$
<i>Sc</i>	Nombre de Schmidt	$[\emptyset]$
<i>St</i>	Nombre de Stokes	$[\emptyset]$
<i>t</i>	Temps	$[s]$
<i>T</i>	Température	$[K]$
<i>u</i>	Vitesse	$[m. s^{-1}]$
<i>Vo</i>	Volume	$[m^3]$

Symbole Latin	Signification	Unité
<i>V</i>	Vorticité	[s ⁻¹]
<i>We</i>	Nombre de Weber	[Ø]
<i>W</i>	Processus de Wiener	[Ø]
<i>X</i>	Fraction molaire	[Ø]
<i>X</i>	Vecteur position	[Ø]
<i>x</i>	Distance (modèle 1D)	[m]
<i>Y</i>	Fraction massique	[Ø]

Symbole en indice	Référence
0	Initial
<i>B</i>	Brownien
<i>diff</i>	Diffusionnel
<i>fro</i>	Frottement
<i>f</i>	Fluide porteur
<i>f@g</i>	Valeur du fluide à la position de la goutte
<i>f@p</i>	Valeur du fluide à la position de la particule
<i>g</i>	Goutte
<i>H2O</i>	Eau
<i>i</i>	Numéro de la réalisation ou composante du vecteur
<i>inj</i>	Injection
<i>int</i>	Interception
<i>imp</i>	Impaction
<i>I</i>	Inertiel
<i>in</i>	Entrée
<i>k</i>	Kolmogorov
<i>m</i>	Milieu considéré
<i>out</i>	Sortie
<i>p</i>	Particule d'aérosol
<i>ref</i>	Référence
<i>S</i>	Slinn (1977)
<i>s</i>	Simulation numérique
<i>sat</i>	Saturation
<i>surf</i>	Surface
<i>t</i>	Tangentiel
<i>T</i>	Turbulent
<i>vap</i>	Vapeur d'eau
<i>W</i>	Wang <i>et al.</i> (1978)
<i>Wc</i>	Wang <i>et al.</i> (1978) avec la corrélation proposée dans cette thèse

Symbole en exposant	Référence
$\bar{\quad}$	Moyenne
\cdot	Débit massique
'	Fluctuation
<i>airsec</i>	Air sans humidité
<i>chute</i>	En situation stable de chute
<i>def</i>	Déformé
<i>H2O</i>	Eau
<i>inst</i>	Instantanée
<i>in</i>	Entrée
<i>out</i>	Sortie

Abréviation	Signification
CFD	Computational Fluid Dynamics (Mécanique des fluides numérique)
RANS	Reynolds Average Navier-Stokes Equations (Equations de Navier-Stokes moyennées)

I. Introduction

Les travaux réalisés dans le cadre de ce doctorat ont pour origine une étude de l'INRS sur la prévention des maladies professionnelles dues à l'exposition de salariés à des particules d'aérosol nocives.

Les salariés peuvent être exposés à des particules d'aérosol nocives dans le cadre de leur activité professionnelle. Ainsi par exemple, des particules sont générées dans les carrières, des poussières sont produites lors de l'usinage de bois et de la découpe de ciment, des poudres sont émises dans les industries alimentaires, des déchets organiques sont aérosolisés dans les porcheries ou dans l'industrie du compostage,... Les salariés évoluant dans ces environnements sont exposés à des particules susceptibles d'être inhalées puis déposées dans l'appareil respiratoire. Ainsi, l'exposition aux particules peut engendrer de graves répercussions en termes de santé comme, par exemple, des allergies pour le contact avec de la farine de blé ou des cancers pour les poussières de bois qui se déposent au niveau des sinus faciaux. Cette constatation de l'impact de l'inhalation de particules d'aérosol sur la santé des personnes met en évidence le besoin d'intervenir pour éviter les situations à risques. Ainsi, trois axes de prévention peuvent être envisagés:

- La substitution qui consiste à remplacer une substance dangereuse par une autre moins nocive.
- La protection collective qui consiste à mettre en place un système protégeant l'ensemble des personnes se situant dans la zone à risque.
- L'équipement de protection individuelle qui protège uniquement la personne qui le porte.

Cette thèse est consacrée à l'étude des systèmes d'abattage humide en tant qu'outil de protection collective. La diminution de l'exposition des personnes à des particules d'aérosol peut être réalisée par épuration de l'air, c'est à dire en réduisant sa concentration en particules. Dans ce cas-là, plusieurs moyens d'assainissement sont envisageables tels que les média filtrants (filtres, mousses de filtration, grille filtrante,...) pour épurer l'air, l'installation d'un système de ventilation pour évacuer l'air vicié ou encore la mise en place d'un outil de dépollution basé sur la pulvérisation de gouttes de liquide pour diminuer la concentration en polluants dans l'air. En effet, l'interaction entre des gouttes de liquide et des particules d'aérosol peut mener à la capture de celles-ci et à leur rabattement vers le sol, ce qui a pour effet d'abaisser leur concentration dans l'air. Ce procédé d'assainissement, nommé « abattage humide », présente l'avantage d'être utilisable dans de nombreuses situations dans lesquelles le recours à la ventilation n'est pas aisé comme lors du curage de bâtiments, le creusement de tunnels, la destruction de bâtiments ou lors de travail en extérieur dans des carrières. Un système de spray peut aussi être envisagé pour remplacer le média filtrant d'un système de ventilation. Un autre avantage de l'abattage humide est que les gouttes pulvérisées peuvent capter des polluants gazeux grâce au phénomène d'absorption.

L'objectif de ce doctorat est de contribuer à éclaircir la physique du phénomène d'abattage humide, afin de prédire l'efficacité de dépollution d'un système complet d'épuration. Une telle capacité de prédiction donnerait ainsi la possibilité de dimensionner un dispositif d'abattage humide adapté à la situation à risque étudiée. Atteindre cet objectif passe par la mise en place d'une

modélisation numérique de l'abattage humide comme procédé d'assainissement de l'air. La modélisation mise en place doit permettre de relier les caractéristiques d'une situation, où un dispositif d'abattage humide est implanté, à un taux d'épuration de l'air. Pour répondre à la problématique de l'étude, plusieurs étapes ont été identifiées. La modélisation de l'épuration de l'air par un spray d'eau commence d'abord par une modélisation à l'échelle de la goutte de la capture de particules d'aérosol par une goutte isolée. Dans ce cas de modélisation microphysique simplifiée, seules les variables de l'environnement proche de la goutte influent sur le taux de capture. Ensuite, une simulation macrophysique, à l'échelle du procédé, est utilisée pour prédire le taux d'épuration global de l'air en fonction des variables macrophysiques de la situation. Les chapitres suivants détaillent la réponse aux étapes nécessaires à la mise en place d'une modélisation numérique de l'abattage humide comme procédé d'épuration de l'air.

II. Phénoménologie de l'abattage humide

II.1 Généralités sur l'abattage humide

L'abattage humide consiste à employer une pulvérisation de gouttelettes de liquide pour capturer des particules d'aérosol présentes dans l'air et ainsi l'épurer. Cette interaction entre les gouttes et les particules permet de modérer l'influence des sources de pollution particulaire sur la qualité de l'air (baisse de la visibilité, apparition d'un risque d'explosion,...) et sur la santé des personnes évoluant dans le milieu (Hall, 1981; Janès and Chaineaux, 2010; Jin and Yamada, 1985; Monteiller *et al.*, 2007; Pope III and Dockery, 2006).

Des dispositifs d'abattage humide peuvent être utilisés en tant qu'outil de protection collective dans les endroits où les procédés industriels sont générateurs de particules d'aérosol et dans des situations où la mise en place d'une ventilation n'est pas aisée. La panoplie des lieux concernés est donc vaste puisqu'il peut aussi bien s'agir de zones à ciel ouvert telles que des carrières, des chantiers de démolition de bâtiments,... ou d'espaces confinés tels que des tunnels, des mines, des chantiers de curage de bâtiment, des centres de traitement des déchets, ... ou encore de la plupart des lieux où un système de ventilation existe, comme par exemple des scieries où un système d'abattage humide sous la forme d'un laveur peut être substitué au média filtrant (mousse filtrante, grille de filtration,...) du système de ventilation (Ananthanarayanan et Viswanathan, 1998). Ainsi, l'offre d'appareils utilisés pour l'abattage humide est variée (Figure II-1) : elle comporte des outils dédiés spécifiquement à la dépollution de l'air tels que des brumisateurs couplés à des ventilateurs (canon à eau), des rampes de brumisation, des sprays installés sur des outils de chantier, des laveurs (cyclones, venturi),... mais aussi des outils déviés de leur utilité première comme des lances à incendie.

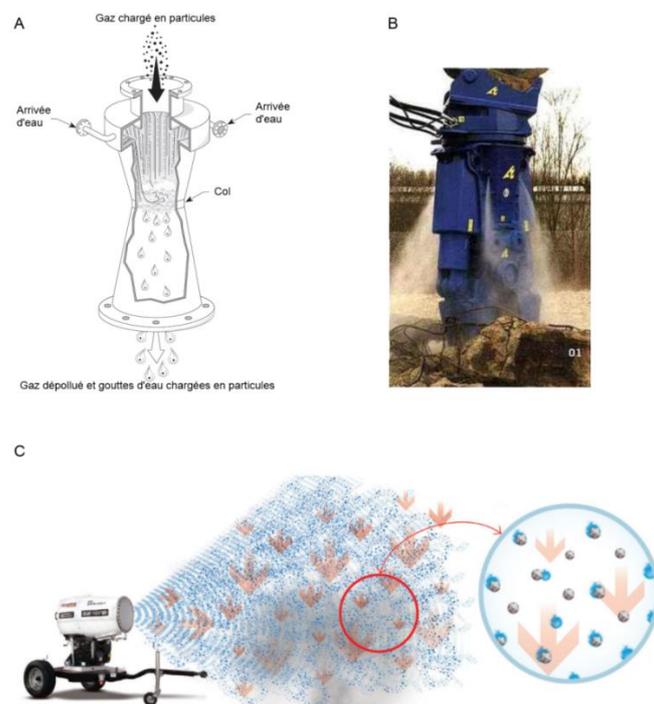


Figure II-1 : Exemples de dispositifs d'abattage humide. A : laveur humide (venturi) © Wikipedia, B : pince de chantier appareillée © INRS, C : canon à eau © towerlight.com.

Puisque l'abattage humide consiste à épurer l'air en abaissant sa concentration en particules grâce à des gouttes d'eau, son analyse fait partie de l'étude des écoulements multiphasiques où les trois phases sont l'air, les particules et les gouttes d'eau.

II.1.1 Phénomène multiphasique

L'écoulement étudié dans le cadre de l'abattage humide est un écoulement multiphasique à phases dispersées : le système est composé d'une phase gazeuse (air porteur), d'une phase solide (particules d'aérosol) et d'une phase liquide (gouttes d'eau).

II.1.1.a Air porteur

Une des phases continues dans les situations d'abattage humide est l'air. En effet, il sert de phase porteuse aux gouttes et aux particules.

L'air dans lequel évoluent les particules est constitué de molécules diverses (N_2 , O_2 ,...). Cependant, ce milieu peut être considéré par une particule soit comme un mélange hétérogène de molécules, soit comme un milieu continu. Cette distinction est donnée par le nombre de Knudsen Kn (Equation II-1) qui est le rapport entre le libre parcours moyen des molécules du gaz et la taille de la particule. Lorsque $Kn \ll 0,1$ le gaz porteur peut être considéré comme étant continu, lorsque $Kn \gg 10$ le gaz porteur est considéré comme étant en régime moléculaire et lorsque $0,1 \lesssim Kn \lesssim 10$ le régime intermédiaire ou de transition est considéré. Cette distinction est importante lors de l'étude de la phase particulaire (Equation II-3).

$$Kn = \frac{2\lambda}{d_p} . \quad (II-1)$$

Ce nombre adimensionnel dépend du diamètre de la particule d_p et du libre parcours moyen des molécules du gaz porteur λ qui est donné par l'Equation II-2 (Willeke, 1976).

$$\lambda = \lambda_0 \left(\frac{P_{atm}}{P} \right) \left(\frac{T}{T_{ref2}} \right) \frac{1,375}{\left(1 + \frac{T_{ref1}}{T} \right)} , \quad (II-2)$$

avec $T_{ref1} = 110 \text{ K}$ et $\lambda_0 = 66,5 \cdot 10^{-9} \text{ m}$ correspondant au libre parcours moyen à une température $T = T_{ref2} = 293,15 \text{ K}$ et une pression $P = P_{atm} = 101325 \text{ Pa}$.

Le nombre de Knudsen est principalement utilisé pour obtenir le coefficient de correction de Cunningham (Cu , Equation II-3) qui permet de prendre en compte la non-continuité de l'air porteur dans les calculs relatifs aux particules (temps de réponse aérodynamique de la particule, coefficient de traînée de la particule, mouvement brownien de la particule...).

$$Cu = 1 + Kn \left(1,257 + 0,4e^{-1,1/Kn} \right) . \quad (II-3)$$

Ainsi, dans notre étude, nous considérons l'air porteur comme continu lorsque les particules ont un diamètre aérodynamique supérieur à $1,32 \mu\text{m}$ ($Kn \ll 0,1$). Le nombre de Cunningham correspondant à la limite basse du régime intermédiaire ($Kn \gtrsim 10$) est environ égal à 1,12 tandis que la limite haute ($Kn \lesssim 0,1$) correspond à un nombre de Cunningham de 17.

La deuxième phase à être étudiée dans ce manuscrit est la phase composée des particules d'aérosol.

II.1.1.b Aérosol

Un aérosol est un ensemble de suspensions présentes dans un gaz porteur. Il peut avoir une origine naturelle (éruption volcanique, feu de forêt,...) ou humaine (gaz d'échappement, travail du bois,...). Les particules d'aérosol peuvent être caractérisées par leur taille, leur forme, leur nombre de charges électriques,... ainsi, un aérosol est potentiellement composé d'une multitude de particules semblables mais présentant de légères différences. Une de ces différences est liée à la granulométrie de l'aérosol.

II.1.1.b.i Granulométrie d'un aérosol

Il est possible de définir plusieurs catégories d'aérosols en fonction de leur taille (Avy, 1956):

- les fumées qui sont un ensemble de particules de diamètre compris entre 1 nm et $0,1 \mu\text{m}$.
- les nuages qui sont composés de particules de diamètre compris entre $0,1$ et $10 \mu\text{m}$.
- les poussières qui sont des particules de diamètre supérieur à $10 \mu\text{m}$.

Cependant, puisqu'un aérosol peut être composé de particules de tailles variées, il est caractérisé par sa granulométrie. La granulométrie d'un aérosol polydisperse est obtenue en répartissant les différentes tailles de particules en classes ou sections. Dans le cas d'une distribution log-normale des particules, l'espace des tailles est souvent divisé de manière logarithmique et non linéaire. D'autres distributions existent telles que les distributions normales ou Gaussiennes. Cette séparation des diamètres en classe va permettre de tracer un histogramme de la concentration (en nombre ou en masse) des particules en fonction de leur diamètre (Figure II-2).

Plus le nombre de classe est important, plus la granulométrie est précise. Ainsi, lorsque le nombre de classe tend vers l'infini, l'histogramme devient une courbe continue correspondant à la fonction densité de probabilité des diamètres des particules. Le spectre granulométrique ainsi obtenu permet de définir les principales caractéristiques de la granulométrie de l'aérosol telles que le mode, la médiane, la moyenne, l'étendue et l'écart-type de la distribution.

Dans cette étude, l'aérosol étudié est considéré comme étant monodisperse. Cependant, la simulation d'un aérosol polydisperse (cas réel de dépollution) peut être réalisée en modélisant plusieurs aérosols monodisperses. Toutefois, nous ne simulons pas ici les interactions entre les particules d'aérosol (agglomération,...).

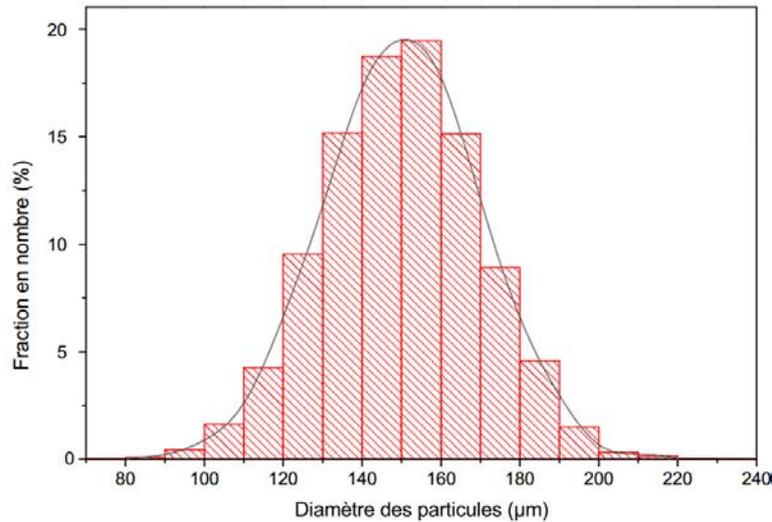


Figure II-2 : Histogramme de la granulométrie d'un aérosol dont la distribution normale est centrée sur 150 µm (écart type de 20 µm). La courbe représente le spectre granulométrique correspondant.

Un aérosol est caractérisé via sa granulométrie mais chaque particule présente un diamètre propre qui peut être défini de différentes manières.

II.1.1.b.ii Diamètre d'une particule

Définir le diamètre d'une sphère est aisé. Cependant, dès lors que la forme de la particule s'éloigne de la sphère, il est possible de définir plusieurs diamètres appelés « diamètres équivalents ». La plupart des lois et des règles existantes sont basées sur des sphères alors que la majorité des particules rencontrées ne sont pas sphériques, c'est pourquoi les diamètres équivalents sont utilisés : ils permettent de considérer une sphère ayant la même propriété que la particule considérée.

- Le diamètre équivalent en volume est égal au diamètre de la sphère ayant un volume identique à celui de la particule. Il est défini grâce au volume ou à la masse de la particule via l'équation suivante (Equation II-4):

$$d_{vol} = \sqrt[3]{\frac{6V_o_p}{\pi}} = \sqrt[3]{\frac{6m_p}{\pi\rho_p}}, \quad (II-4)$$

avec V_o_p le volume de la particule, m_p sa masse et ρ_p sa masse volumique.

- Le diamètre équivalent en surface correspond au diamètre d'une sphère de même surface que la particule. Il est obtenu grâce à la surface de la particule via l'équation suivante (Equation II-5):

$$d_{surf} = \sqrt{\frac{S_p}{\pi}}, \quad (II-5)$$

avec S_p la surface de la particule.

- Le diamètre aérodynamique est égal au diamètre d'une sphère de densité 1 ayant la même vitesse limite de chute (aussi appelée vitesse terminale de chute ou vitesse de sédimentation) que la particule (Equation II-25). Ce diamètre est donné par l'équation suivante (Equation II-6):

$$d_p = d_{vol} \sqrt{\frac{\rho_p Cu(d_{vol})}{1000 \chi Cu(d_{St})}} , \quad (II-6)$$

avec d_{St} le diamètre de Stokes (Equation II-7) et χ le facteur de forme dynamique qui est égal à la force de traînée agissant sur la particule divisée par celle correspondant à une particule de même volume et de même vitesse terminale de chute. Plus ce facteur est proche de 1, plus la particule est sphérique (Tableau II-1 (Renoux and Boulaud, 1998)).

- Le diamètre de Stokes correspond au diamètre d'une sphère de même masse volumique et de même vitesse limite de chute que la particule. Il est donné par l'Equation II-7:

$$d_{St} = d_{vol} \sqrt{\frac{Cu(d_{vol})}{Cu(d_{St})\chi}} , \quad (II-7)$$

tant que le nombre de Reynolds particulaire (Re_p , Equation II-8) est inférieur à 0,1.

$$Re_p = \frac{\rho_f \|\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p\| d_p}{\mu_f} , \quad (II-8)$$

avec ρ_f la masse volumique de l'air, $\|\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p\|$ la norme de la vitesse de glissement existante entre la particule et l'air (\mathbf{u}_f est la vitesse de l'air au voisinage de la particule et \mathbf{u}_p est la vitesse de la particule) et μ_f la viscosité dynamique de l'air.

- Le diamètre de mobilité électrique est égal au diamètre d'une sphère de même mobilité électrique Z (Equation II-10) et de même nombre de charges électriques que la particule. Ce diamètre est souvent utilisé en métrologie des aérosols puisque certains appareils de mesures utilisent la mobilité électrique des particules pour leurs mesures. Ce diamètre est donné par l'équation suivante (Equation II-9) :

$$d_{elec} = d_{vol} \chi \frac{Cu(d_{elec})}{Cu(d_{vol})} , \quad (II-9)$$

La mobilité électrique Z est donnée par :

$$Z = \frac{c e D_B}{k_B T} , \quad (II-10)$$

avec c le nombre de charges élémentaires portées par la particule, e la charge élémentaire ($e = 1,6 \cdot 10^{-19} C$), k_B la constante de Boltzmann ($k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} J.K^{-1}$) et D_B le coefficient de diffusion brownienne de la particule donnée par l'Equation II-11.

$$D_B = \frac{k_B T C u(d_p)}{3\pi \mu_f d_p}, \quad (II-11)$$

- Le diamètre géométrique correspond au diamètre de la sphère dans laquelle on peut inscrire la particule. Ainsi, le diamètre géométrique d'une particule est supérieur ou égal au diamètre équivalent en volume de cette même particule. Il est souvent utilisé pour les agrégats.

La Figure II-3 donne l'exemple de différents diamètres équivalents pour une particule non sphérique et de densité égale à 4 (Calec, 2013).

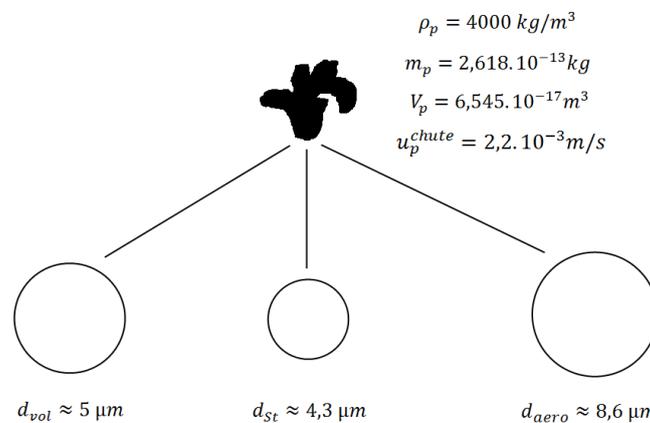


Figure II-3 : Illustration des diamètres équivalents pour une particule. © (Calec, 2013).

Tableau II-1 : Facteur de forme dynamique de quelques particules. ©(Renoux and Boulaud, 1998).

Forme géométrique	Facteur de forme dynamique
Sphère	1,00
Cube	1,08
Cylindre	1,32

Particule	Facteur de forme dynamique
Bitume	1,05-1,11
Quartz	1,36
Sable	1,57
Talc	2,04

Dans la suite de ce manuscrit, les particules considérées sont supposées sphériques et ont une densité égale à 1 ($\rho_p = 1$) donc le diamètre volumique est égal au diamètre surfacique qui est lui-même égal au diamètre géométrique qui est aussi égal au diamètre aérodynamique d_p . Le cas échéant, on reviendra aux particules réelles par l'intermédiaire de leurs diamètres équivalents définis précédemment. Les particules étudiées ont un diamètre compris entre 1 nm et 100 μm.

La dernière phase impliquée dans l'abattage humide est celle constituée par les gouttes d'eau.

II.1.1.c Gouttes d'eau

La caractérisation des gouttes d'eau doit comprendre leur diamètre d_g et leur vitesse \mathbf{u}_g .

II.1.1.c.i Diamètre d'une goutte

Le diamètre de chaque goutte est dépendant du spray utilisé pour l'injection et du parcours de la goutte depuis la zone dispersée du spray. En effet, les phénomènes d'évaporation ou de condensation modifient le diamètre des gouttes au fur et à mesure de leur trajectoire dans l'air porteur. Comme pour les particules, les gouttes peuvent avoir différents diamètres mais le diamètre de Stokes et le diamètre aérodynamique sont confondus. De plus, la sphéricité d'une goutte d'eau de composition chimique, température et diamètre constants, dépend uniquement de la vitesse de glissement de celle-ci par rapport à l'air porteur.

Le nombre de Weber de la goutte We_g (Equation II-12) est un nombre sans dimension permettant de caractériser l'influence des forces d'inertie exercées par l'écoulement d'air autour de la goutte par rapport aux forces de tension superficielle. En d'autres termes, le nombre de Weber permet de savoir si la goutte reste sphérique en fonction de sa vitesse dans l'air ou si elle se déforme, voire se fragmente.

$$We_g = \frac{\rho_f \|\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_g\|^2 d_g}{\gamma} , \quad (\text{II-12})$$

avec \mathbf{u}_f la vitesse de l'air au voisinage de la goutte et γ la tension de surface de la goutte.

D'après Oesterlé (Oesterlé, 2006), une goutte d'eau peut être supposée sphérique lorsque son nombre de Weber est inférieur à 0,06. Dans d'autres cas, la déformation de la goutte peut être approximée par l'Equation II-13 qui lie l'excentricité Ex de la goutte au nombre de Weber (Wellek *et al.*, 1966).

$$Ex = 1 + 0,093 We_g^{0,98} \left(\frac{\mu_f}{\mu_g} \right)^{0,07} \text{ pour } We_g \leq 12,6 , \quad (\text{II-13})$$

avec μ_g la viscosité dynamique de l'eau.

Une autre équation permet d'obtenir le diamètre correspondant à la section de capture d'une goutte d'eau déformée d_g^{def} en fonction de son diamètre équivalent en volume et de son nombre de Weber (Equation II-14, (Hsiang and Faeth, 1992; Pak and Chang, 2006)).

$$d_g^{def} = \left(1 + 0,19 \sqrt{We_g} \right) d_g \text{ pour } We_g \leq 3 . \quad (\text{II-14})$$

De son côté, le nombre d'Ohnesorge Oh caractérise l'influence relative de la viscosité de la goutte par rapport à la tension superficielle et aux forces d'inertie (Equation II-15).

$$Oh = \frac{\mu_g}{\sqrt{\rho_g \gamma} d_g} , \quad (II-15)$$

avec ρ_g la masse volumique de l'eau.

Le nombre d'Ohnesorge permet d'introduire un nombre de Weber critique We_{gc} à partir duquel la goutte va se fragmenter. La formule empirique donnée en Equation II-16 a été obtenue par Brodkey (Brodkey, 1969).

$$We_{gc} = 12 (1 + 1,077 Oh^{1,6}) . \quad (II-16)$$

En général, le nombre de Weber critique est de 12 puisque le nombre d'Ohnesorge est habituellement petit.

Un autre nombre adimensionnel permettant de caractériser la sphéricité d'une goutte d'eau est le nombre de Bond Bo (ou encore nombre d'Eötvös, Equation II-17). Il caractérise l'influence relative du poids de la goutte sur sa tension superficielle. Lorsque le nombre de Bond est inférieur à 0,2 la goutte reste quasi-sphérique jusqu'à un nombre de Reynolds de goutte $Re_g \lesssim 100 - 1000$ (Clift *et al.*, 1978). La Figure II-4 présente les valeurs du nombre de Bond dans différentes situations.

$$Bo = \frac{g |\rho_f - \rho_g| d_g^2}{\gamma} , \quad (II-17)$$

avec g l'accélération de la pesanteur.

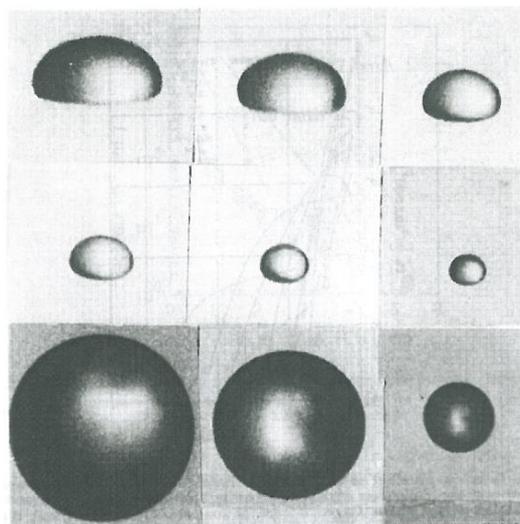


Figure II-4 : Illustration de la forme de différentes gouttes d'eau de pluie. Les diamètres des gouttes présentées sont les suivants : 1^{er} rang, de gauche à droite : 8 mm; 7,36 mm et 5,8 mm, 2^{ème} rang, de gauche à droite : 5,3 mm; 3,5 mm et 2,7 mm, 3^{ème} rang, de gauche à droite : 786 µm; 708 µm et 310 µm. © (Pruppacher and Klett, 2010).

Ces trois nombres adimensionnels permettent de qualifier et quantifier la sphéricité de la goutte d'eau et sa stabilité dans les situations couramment rencontrées lors de l'abattage humide.

II.1.1.c.ii Vitesse d'une goutte

La vitesse limite de chute d'une goutte est aussi un critère important dans la prédiction de l'efficacité de capture d'un couple particule/goutte. Une goutte a atteint sa vitesse limite de chute lorsque son accélération est nulle, c'est-à-dire, lorsque l'ensemble des forces s'exerçant sur elle sont à l'équilibre (Equation II-18).

$$\sum \mathbf{F} = m_g \mathbf{a} = \mathbf{0} \text{ lorsque } u_g = u_g^{chute} , \quad (\text{II-18})$$

avec \mathbf{a} le vecteur accélération du centre d'inertie de la goutte, \mathbf{F} le vecteur d'une force s'exerçant sur la goutte, m_g la masse de la goutte et u_g^{chute} est la vitesse limite de chute de la goutte.

Dans le cas d'une goutte soumise uniquement à son poids \mathbf{Po} et à la force de traînée \mathbf{F}_T ($\rho_g \gg \rho_f$), l'Equation II-18 devient (Equation II-19):

$$\mathbf{F}_T + \mathbf{Po} = \mathbf{0} , \quad (\text{II-19})$$

avec \mathbf{F}_T donnée par l'Equation II-21 dans le cas d'un écoulement de Stokes ($Re_g \ll 1$, défini par l'Equation II-20) et l'Equation II-22 lorsque le nombre de Reynolds est plus grand.

Le nombre de Reynolds d'une goutte est donné par :

$$Re_g = \frac{\rho_f \| \mathbf{u}_f - \mathbf{u}_g \| d_g}{\mu_f} . \quad (\text{II-20})$$

La force de traînée est définie par :

$$F_{Ti} = \frac{C_{dg} Re_g}{24 \tau_g} (u_{fi} - u_{gi}) , \quad (\text{II-21})$$

avec τ_g défini par l'Equation II-22 et $C_{dg} = 24/Re_g$ si $Re_g \ll 1$ (écoulement de Stokes). Dans les autres cas, le coefficient de traînée de la goutte C_{dg} peut être approximé par les Equations II-23 et II-24.

$$\tau_g = \frac{\rho_g d_p^2}{18 \mu_f} . \quad (\text{II-22})$$

Le temps de réponse aérodynamique d'une goutte, aussi nommé « temps de relaxation », correspond au temps caractéristique mis par la goutte pour atteindre la vitesse du fluide porteur. Plus

sa valeur est faible, plus la vitesse relative entre la goutte et l'air décroît rapidement et plus la goutte suit rapidement et fidèlement les lignes de courant.

Le coefficient de traînée de la goutte C_{dg} est obtenu avec l'Equation II-23 lorsque $Re_g < 2$ (Saboni *et al.*, 2004) et l'Equation II-24 (Rivkind and Ryskin, 1976) sinon.

$$C_{dg} = \frac{\left[k \left(\frac{24}{Re_g} + \frac{4}{Re_g^{0,36}} \right) + \frac{15}{Re_g^{0,82}} - \frac{0,02k Re_g^{0,5}}{(1+k)} \right] Re_g^2 + \frac{40(3k+2)}{Re_g} + 15k + 10}{(1+k)(5 + 0,95Re^2)}, \quad (II-23)$$

tant que $Re_g < 2$. Le coefficient k correspond au rapport de viscosité dynamique entre l'eau et l'air (= $\frac{\mu_g}{\mu_f}$).

$$C_{dg} = \frac{1}{k+1} \left[k \left(\frac{24}{Re_g} + 4Re_g^{-1/3} \right) + 14,9Re_g^{-0,78} \right], \quad (II-24)$$

lorsque $2 \leq Re_g \leq 500$.

Ainsi, en combinant les Equations II-19 et II-21, il est possible d'obtenir la vitesse limite de chute d'une goutte en régime de Stokes (Equation II-25) :

$$u_g^{chute} = \|\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_g\| = \frac{\rho_g d_g^2 g}{18 \mu_f}. \quad (II-25)$$

Lorsque la goutte n'est plus en régime de Stokes, sa vitesse terminale de chute est obtenue en substituant l'Equation II-22 à l'Equation II-21 (Equation II-26).

$$u_g^{chute} = \frac{4 \rho_g d_g^2 g}{3 \mu_f Re_g C_{dg}}. \quad (II-26)$$

Le régime de l'écoulement autour d'une goutte (Tableau II-2) est caractérisée grâce à son nombre de Reynolds (Equation II-20).

Tableau II-2: Les différents régimes d'écoulement d'air autour d'une goutte. © (Pruppacher and Klett, 2010).

Nombre de Reynolds	Régime de l'écoulement
$Re_g \ll 1$	Stokes
$1 \leq Re_g < 20$	Laminaire
$20 \leq Re_g < 300$	Transitoire
$300 \leq Re_g$	Turbulent

La Figure II-5 présente la vitesse terminale de chute d'une goutte et le nombre de Reynolds correspondant en fonction de son diamètre.

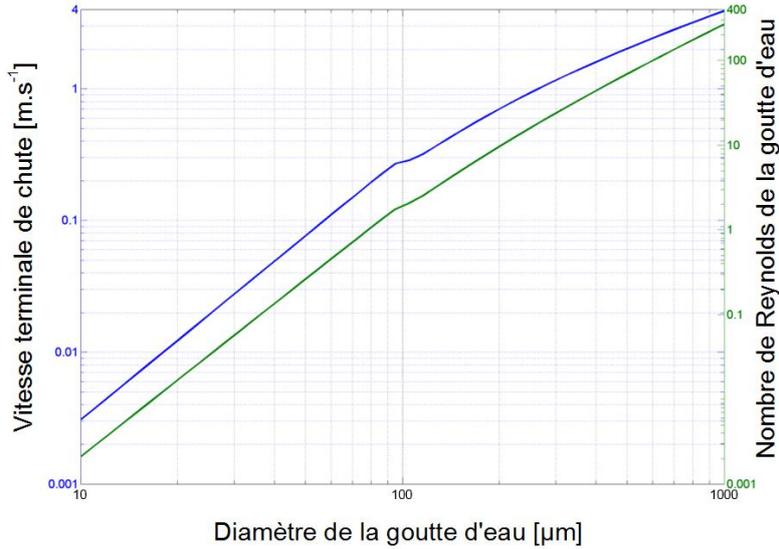


Figure II-5 : Vitesse limite de chute et nombre de Reynolds associé en fonction du diamètre d'une goutte.

La Figure II-5 montre que la vitesse terminale de chute et le nombre de Reynolds d'une goutte d'eau (basé sur sa vitesse limite de chute) évoluent de façon croissante avec le diamètre de la goutte ($d_g \in [10; 1000] \mu m$).

Dans le domaine de l'abattage humide, on utilise généralement des gouttes d'eau de diamètre d_g compris entre $80 \mu m$ et $600 \mu m$. Ces faibles diamètres permettent de pulvériser un nombre important de gouttes d'eau avec un débit d'eau restreint. Le nombre de Reynolds Re_g des gouttes d'eau (basé sur leur vitesse terminale de chute $u_g^{chute} \in [0,2; 2,4] m.s^{-1}$) est ainsi compris entre 1 et 100, leur nombre de Weber We_g varie entre $4,6 \cdot 10^{-5}$ et $5,8 \cdot 10^{-2}$ (ce qui correspond à une excentricité Ex inférieure à 1,004) et leur nombre de Bond Bo évolue entre $8,3 \cdot 10^{-4}$ et $4,9 \cdot 10^{-2}$. Par conséquent, ces gouttes d'eau peuvent être considérées comme étant sphériques et stables.

II.1.2 Epuración de l'air

L'épuration de l'air via l'abattage humide résulte de l'interaction entre les particules et les gouttes d'eau. La capture de particules d'aérosol par une goutte d'eau entraîne une baisse de la concentration numérique locale en particules de diamètre d_p dans l'air $C_p(d_p)$. Cette décroissance de la concentration en polluants peut être décrite en introduisant un noyau de capture $K(d_g, d_p)$ caractérisant le débit volumique de particules capturée par une goutte (Equation II-27).

$$\left. \frac{\partial C_p(d_p)}{\partial t} \right|_{\text{abattage humide}} = -C_p(d_p) \int_0^{\infty} K(d_g, d_p) C_g(d_g) dd_g, \quad (\text{II-27})$$

avec $C_g(d_g)dd_g$ la concentration numérique locale en gouttes de diamètre $[d_g, d_g + dd_g]$ dans l'air.

Le noyau de capture permet de mettre en place la notion d'efficacité de capture qui est égale au rapport entre le débit de particules capturées par une goutte et le débit maximal de particules capturables (particules dont la position était dans le volume balayé par la section de capture de la goutte, Figure II-6).

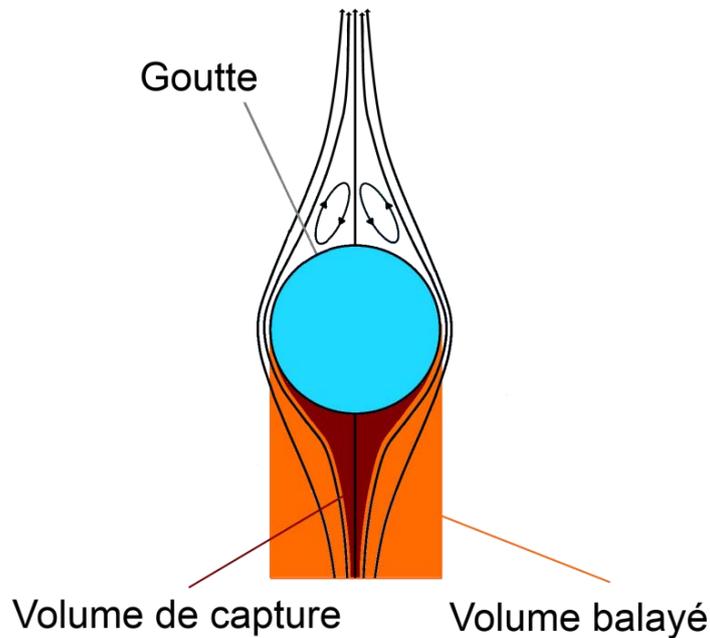


Figure II-6 : Efficacité de capture.

L'équation générale de l'efficacité de capture E_c est la suivante (Equation II-28) :

$$E_c = \frac{K(d_g, d_p)}{\pi \left(\frac{d_g + d_p}{2} \right)^2 \| \mathbf{u}_g - \mathbf{u}_p \|} \quad (II-28)$$

Lors d'une capture uniquement inertielle, l'Equation II-28 peut être simplifiée en (Equation II-29, (Beard and Grover, 1974)) :

$$E_c^{inertielle} = \frac{\pi (Y_c)^2}{\pi/4 (d_g + d_p)^2} \quad (II-29)$$

avec Y_c l'offset par rapport à l'axe de symétrie de trajectoire la goutte correspondant à la position de la particule ayant une trajectoire rasante la goutte (Figure II-7).

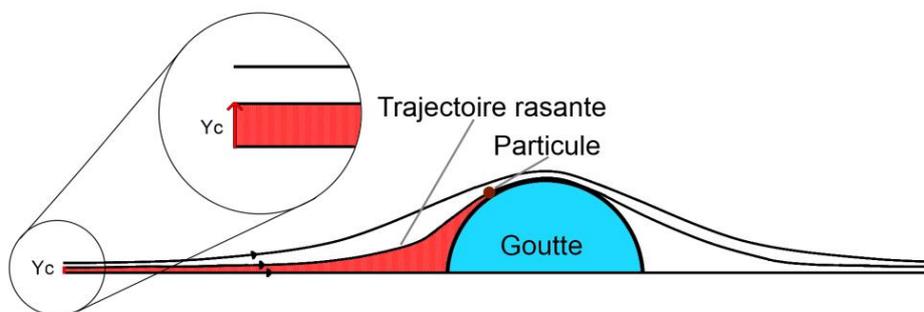


Figure II-7 : Efficacité de capture inertielle.

Le noyau de capture rend compte des différentes situations d'abattage humide pouvant être complexes : les caractéristiques de l'air (vitesse, température, humidité,...), des particules (densité, diamètre, électriquement neutre ou non,...) et des gouttes d'eau (vitesse, diamètre, température, charges électriques) sont autant de grandeurs influençant le phénomène de capture de particules par une goutte. Les mécanismes élémentaires de capture peuvent être regroupés en quatre catégories :

- les mécanismes diffusionnels browniens : si les particules d'aérosol sont petites par rapport au libre parcours moyen des molécules de gaz du fluide porteur, le fluide environnant n'est plus vu comme un milieu continu et les particules sont sujettes au mouvement brownien. Cette diffusion peut engendrer la capture brownienne.
- les mécanismes inertiels : si une particule ne suit pas les lignes de courant contournant la goutte (temps de réponse aérodynamique de la particule très important), celle-ci peut se faire capturer par impaction. Dans le cas où une particule suit les lignes de courant contournant la goutte mais possède un rayon supérieur à sa distance à la goutte, celle-ci peut également se faire capturer par interception.
- les mécanismes phorétiques : les gradients d'agitation moléculaire ou turbulente dans l'air porteur peuvent modifier le déplacement des particules et ainsi mener à leur capture. Les gradients de température entre la surface de la goutte et l'air porteur engendrent la thermophorèse, les gradients de diffusivité moléculaire donnent lieu à la diffusiophorèse et les gradients de turbulence dans l'environnement de la goutte entraînent la turbophorèse.
- les mécanismes électrostatiques : les gouttes et les particules d'aérosol peuvent porter des charges électriques qui peuvent induire une capture électrostatique.

Le contact entre une particule d'aérosol et une goutte d'eau ne donne pas toujours lieu à capture. En effet, il est nécessaire de prendre en compte le taux de rétention qui définit si le phénomène de contact engendre la capture. Cependant, il est supposé que le taux de rétention est égal à un dans cette étude. Ainsi, la rencontre entre une goutte et une particule d'aérosol entraîne sa capture.

II.1.2.a Capture brownienne

La continuité de l'air (cf II.1.1.a) influe sur le transport des particules d'aérosol. En effet, dans un régime continu, la distance moyenne parcourue par une molécule entre deux collisions successives avec une autre molécule est inférieure à la taille de la particule d'aérosol. Ainsi, la résistance du milieu au mouvement de la particule est décrite par des grandeurs macroscopiques telles que la viscosité du gaz porteur, sa densité,... Dans le cas d'un régime moléculaire, la distance moyenne parcourue par une molécule entre deux collisions successives avec une autre molécule est de l'ordre ou supérieure à la taille de la particule d'aérosol. Ainsi, le mouvement de la particule d'aérosol est influencé par sa collision avec les molécules environnantes : les molécules s'entrechoquent à cause de leur agitation thermique et lorsqu'elles rentrent en collision avec la particule d'aérosol, modifient son mouvement. Le mouvement induit s'appelle le mouvement brownien.

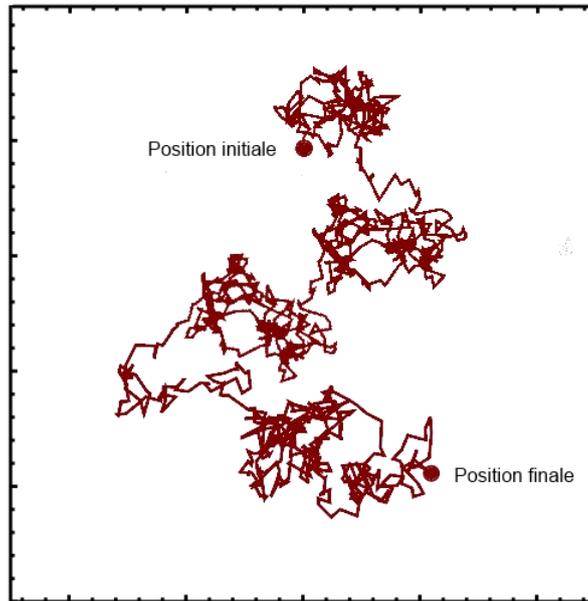


Figure II-8 : Illustration de la diffusion brownienne d'une particule dans de l'air au repos.

La trajectoire brownienne empruntée par une particule est chaotique: les chocs entre la particule et les molécules de gaz se produisent de manière aléatoire. Le mouvement ainsi induit est irrégulier (Figure II-8). Cependant, le déplacement quadratique moyen de la particule au temps long t peut être obtenu par l'intermédiaire de l'Equation II-30 (Einstein, 1956):

$$\sqrt{x^2} = \sqrt{2 \dim D_B t} \quad , \quad (\text{II-30})$$

avec \dim la dimension de l'espace où évolue la particule (1 pour un mouvement linéaire, 2 pour un mouvement plan et 3 pour un mouvement spatial).

L'Equation II-30 montre que le déplacement quadratique moyen est proportionnel au coefficient de diffusion brownienne D_B , or, celui-ci augmente de façon linéaire avec la température (Equation II-11). Ceci est dû au fait que plus la température augmente, plus l'agitation thermique des molécules est importante. De plus, D_B diminue lorsque le diamètre de la particule augmente : lorsque la particule est plus grande que le libre parcours moyen des molécules, elle ressent le milieu comme étant continu.

Le Tableau II-3 donne des valeurs du coefficient de diffusion brownienne et du déplacement quadratique moyen d'une particule en fonction de son diamètre. Ces valeurs concernent une particule évoluant dans un espace 3D à une température $T = 300 \text{ K}$ et une pression $P = 101325 \text{ Pa}$.

Le Tableau II-3 montre que le mouvement brownien ne peut être négligé pour les particules de petites tailles (le déplacement quadratique moyen sur une seconde pour une particule d'un nanomètre de diamètre équivaut à environ 5,5 millions de fois le diamètre de cette particule) alors que ce phénomène est minime dans le cas de grosses particules (le mouvement quadratique moyen sur une seconde descend à 0,01 fois le diamètre d'une particule de $100 \mu\text{m}$). Le fait que la capture brownienne puisse être négligée dans le cas de grosses particules est confirmé dans la Figure II-17. Le

mouvement brownien d'une particule dans l'air peut l'amener à rentrer en contact avec une goutte et ainsi engendrer une capture brownienne (Figure II-9).

Tableau II-3 : Coefficient de diffusion brownienne et déplacement quadratique moyen 3D d'une particule en fonction de son diamètre aérodynamique.

Diamètre aérodynamique de la particule [m]	Coefficient de diffusion brownienne [$m^2 \cdot s^{-1}$]	Déplacement quadratique moyen [m] pour 1 seconde
10^{-9}	$5,40 \cdot 10^{-6}$	$5,69 \cdot 10^{-3}$
10^{-8}	$5,53 \cdot 10^{-8}$	$5,76 \cdot 10^{-4}$
10^{-7}	$7,05 \cdot 10^{-10}$	$5,50 \cdot 10^{-5}$
10^{-6}	$2,78 \cdot 10^{-11}$	$1,29 \cdot 10^{-5}$
10^{-5}	$2,42 \cdot 10^{-12}$	$3,81 \cdot 10^{-6}$
10^{-4}	$2,38 \cdot 10^{-13}$	$1,19 \cdot 10^{-6}$

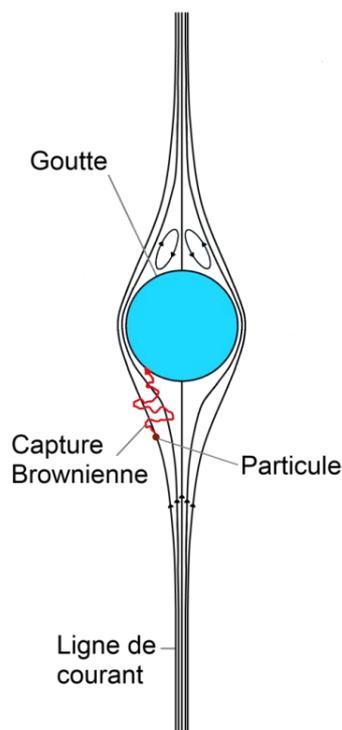


Figure II-9 : La capture brownienne.

II.1.2.b Captures inertielles

II.1.2.b.i Impaction

Les particules ayant une inertie non négligeable peuvent dévier des lignes de courant de l'écoulement lors des changements de direction de celui-ci (Figure II-10). Une particule non brownienne et présentant une faible inertie se comporte tel un traceur gazeux et ne dévie pas des lignes de courant. Ainsi, la particule contourne la goutte d'eau et n'est pas capturée via un processus inertiel. Par contre, lorsqu'une particule est inertielle, son temps de réponse aux changements de trajectoire de l'air est plus important. Cette capacité à suivre les variations de vitesse et de direction de l'écoulement est caractérisée par le nombre de Stokes. En effet, le nombre de Stokes St_p caractérise

la sensibilité de la particule aux fluctuations de la vitesse de l'air : c'est le ratio entre le temps de réponse de la particule et le temps de transit de la particule autour de la goutte (Equation II-31) :

$$St_p = \frac{\tau_p \|u_g\|}{d_g} , \quad (\text{II-31})$$

avec τ_p le temps de réponse aérodynamique de la particule qui basé sur l'Equation II-22. Le Tableau II-4 présente des valeurs de temps de réponse aérodynamique de plusieurs particules en fonction de leur diamètre (la densité de la particule est égale à 1, la température $T = 300 K$ et la pression $P = 101325 Pa$). Lorsque le temps de relaxation de la particule est important, la particule ne suit pas les lignes de courant contournant la goutte. Ainsi, celle-ci va l'impacter et donc être collectée. Ce phénomène est nommé « capture par impaction » ou « impaction » (Figure II-10).

Tableau II-4 : Temps de réponse aérodynamique en fonction du diamètre aérodynamique d'une particule de densité égale à 1.

Diamètre aérodynamique de la particule [m]	Temps de réponse aérodynamique [s]
10^{-9}	$6,83.10^{-10}$
10^{-8}	$6,99.10^{-9}$
10^{-7}	$8,92.10^{-8}$
10^{-6}	$3,51.10^{-6}$
10^{-5}	$3,05.10^{-4}$
10^{-4}	$3,01.10^{-2}$

Le Tableau II-4 montre que plus la masse de la particule augmente (de par l'augmentation de son diamètre ou de sa masse volumique), plus son temps de relaxation augmente. De même, cette capture devient négligeable lorsque des particules non inertielles sont étudiées (Figure II-17).

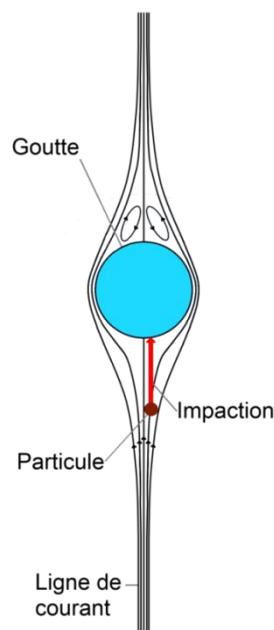


Figure II-10 : La capture par impaction.

II.1.2.b.ii Interception

Lorsqu'une particule suit les lignes de courant contournant une goutte, uniquement son centre de gravité est sur la trajectoire de la ligne de courant et son extrémité peut passer à une distance très faible de la surface de la goutte. Dès lors que la distance entre la ligne de courant et la surface de la goutte est inférieure au rayon de la particule, il y a contact. L'interception a lieu lorsque l'encombrement de la particule entraîne le contact entre celle-ci et la goutte (Figure II-11). Cette capture devient négligeable lorsque de petites particules sont étudiées (Figure II-17).

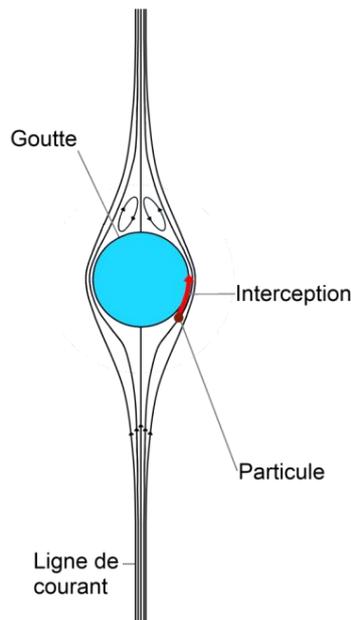


Figure II-11 : La capture par interception.

II.1.2.c Captures phorétiques

La capture phorétique est due aux forces phorétiques qui s'exercent sur les particules d'aérosol et qui induisent une migration des particules pouvant mener à leur capture. Les forces phorétiques apparaissent lorsqu'il existe un gradient de scalaire (concentration des espèces chimiques, température,...) dans l'air et leurs effets sont maxima dans le cas de particules présentes dans la couche limite de la goutte. Le mouvement induit par une force phorétique est dû à l'inhomogénéité des chocs des molécules de gaz sur la particule : certaines molécules ont plus d'énergie cinétique d'un côté de la particule que de l'autre. Cette différence d'énergie cinétique peut être due à une différence de température au niveau des molécules (température inhomogène au voisinage de la goutte), à une différence de diffusivité des molécules (composition chimique de l'air inhomogène autour de la goutte), à une différence de turbulence,...

Trois types de captures phorétiques sont détaillées ici : la capture diffusiophorétique, la capture thermophorétique et la capture turbophorétique.

II.1.2.c.i Capture diffusiophorétique

La capture diffusiophorétique est due aux forces de diffusiophorèse qui s'exercent sur les particules d'aérosol. La force de diffusiophorèse apparaît lorsque qu'il existe un gradient de diffusivité

moléculaire dans le fluide. Un tel gradient existe par exemple lorsque l'air n'est pas homogène en humidité. Ce gradient de concentration en vapeur d'eau dans l'air peut être dû à l'évaporation de la goutte d'eau. La vapeur d'eau ainsi relâchée par la goutte diffuse depuis la surface de la goutte en se dirigeant vers l'air plus sec situé plus loin dans la couche limite de la goutte. De manière concomitante, de l'air sec diffuse vers la surface de la goutte. Suivant la balance des forces dues aux impacts des différentes molécules sur les particules d'aérosol, celles-ci peuvent se rapprocher de la surface de la goutte et être capturées (Figure II-12). Cependant, cette capture devient négligeable devant les autres types de collecte lorsque de très petites ou très grosses particules sont étudiées (Figure II-17). Ces bornes dépendent de la taille de la goutte d'eau et des gradients de diffusivité moléculaire dans le fluide.

L'expression de la force de diffusiophorèse est détaillée dans l'Equation II-32 (Wang *et al.*, 1978).

$$F_{df} = -3\pi \mu_f d_p \frac{0,74 D_{vap} M_f \nabla \rho_{vap}}{Cu(d_p) M_{vap} \rho_f} , \quad (II-32)$$

avec D_{vap} la diffusivité de la vapeur d'eau dans l'air, M_f (resp. M_{vap}) la masse molaire de l'air (resp. de la vapeur d'eau), ρ_{vap} (resp. ρ_f) la densité de la vapeur d'eau dans l'air (resp. de l'air). Ici, l'air correspond au fluide porteur, les constantes peuvent donc changer en fonction de la composition de l'air (humidité relative,...).

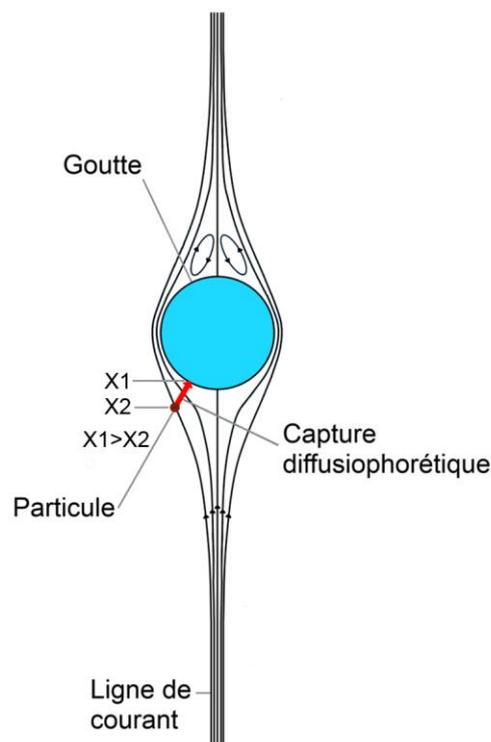


Figure II-12 : La diffusiophorèse. Dans cette Figure, X est la concentration en vapeur d'eau dans l'air.

Dans le schéma, le gradient de concentration en vapeur d'eau dans l'air est dû à l'évaporation de la goutte.

De façon complémentaire, l'évaporation d'une goutte d'eau peut donner naissance à un flux de Stefan. En effet, lors de son évaporation, de l'eau sous forme liquide se transforme en vapeur. Ensuite, cette vapeur s'éloigne de la surface de la goutte. Le flux de Stefan représente ce mouvement de vapeur d'eau. Contrairement à la force de diffusiophorèse qui peut mener à la capture des particules d'aérosol, le flux de Stefan a majoritairement tendance à éloigner les particules d'aérosol de la goutte d'eau. Il s'oppose ainsi à la capture.

II.1.2.c.ii Capture thermophorétique

La capture thermophorétique est due aux forces de thermophorèse qui s'exercent sur les particules d'aérosol. La force de thermophorèse apparaît lorsque qu'il existe un gradient de température dans l'air. Un tel gradient existe au voisinage de la goutte dès lors que celle-ci n'est pas à la même température que l'air environnant (aspersion à une température différente de l'air, évaporation,...). La force thermophorétique induite par le gradient de température de l'air peut contribuer à la capture de la particule lorsque le mouvement de la particule dû à cette force rapproche la particule de la goutte (Figure II-13). Ce mouvement est dû à la différence d'agitation moléculaire de l'air entre les zones chaudes et froides : la face de la particule qui est du côté chaud de l'air reçoit des chocs moléculaires plus énergétiques que la face côté froid. Ainsi, la particule se déplace de la zone chaude vers la zone froide de l'air. Cette capture devient négligeable devant les autres phénomènes de collecte lorsque de très petites ou très grosses particules sont étudiées (Figure II-17). Les diamètres de particules pour lesquels cette capture est négligeable dépendent de la taille de la goutte d'eau et des gradients de température existant autour d'elle.

L'Equation II-33 (Wang *et al.*, 1978) permet de définir la force de thermophorèse.

$$F_{th} = - \frac{6\pi \mu_f d_p (\lambda_{c_f} + 2,5\lambda_{c_p} Kn) \lambda_{c_f} \nabla T}{5(1 + 3Kn) (\lambda_{c_p} + 2\lambda_{c_f} + 5\lambda_{c_p} Kn) P} , \quad (II-33)$$

avec λ_{c_p} (resp. λ_{c_f}) la conductivité thermique de la particule (resp. de l'air). Ici, l'air correspond au fluide porteur, les constantes peuvent donc changer en fonction de la composition de l'air (humidité relative,...).

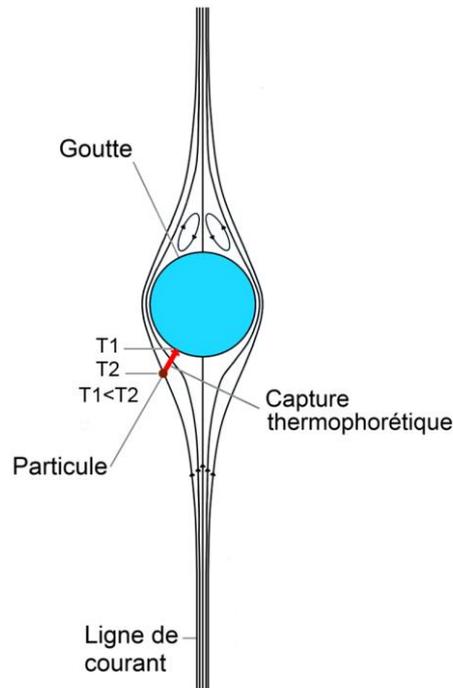


Figure II-13 : La thermophorèse. Dans cette Figure, T est la température de l'air.

Dans la Figure II.13, la goutte est plus froide que son environnement et la force thermophorétique s'exerçant sur la particule mène à sa capture.

L'évaporation d'une goutte donne souvent lieu à la fois à la diffusiophorèse et à la thermophorèse. L'action combinée de ces deux phénomènes peut augmenter significativement l'efficacité de dépollution due à l'abattage humide.

II.1.2.c.iii Capture turbophorétique

La capture turbophorétique est similaire à la capture thermophorétique et diffusiophorétique. Lorsque l'agitation de l'air est inhomogène, des gradients de turbulence apparaissent. Ceux-ci peuvent donner lieu à la capture turbophorétique. Ce phénomène est également appelé turbophorèse. En effet, dans un environnement avec des gradients de turbulence, les particules vont migrer des zones les plus agitées de l'air vers les zones les moins agitées.

II.1.2.d Capture électrostatique

La capture électrostatique a lieu lorsqu'une particule et une goutte portent des charges électriques opposées (Figure II-14). Les particules peuvent être naturellement électriquement chargées ou chargées volontairement. Les gouttes d'eau peuvent elles aussi être chargées grâce à des électrodes plongées dans le réservoir d'eau (Lemaitre *et al.*, 2017). Même lorsque la goutte ne porte pas de charges électriques, la capture électrostatique peut avoir lieu. En effet, quand une particule chargée est proche d'une goutte, elle peut engendrer une charge image de signe opposé dans la goutte grâce aux propriétés conductrices de l'eau (Tinsley *et al.*, 2006).

La force induisant le mouvement d'une particule vers une goutte grâce à leurs charges électriques est donnée par la loi de Coulomb (Equation II-34).

$$F_{el} = \frac{q_p q_g}{4 \pi \varepsilon_0 l^2} , \quad (II-34)$$

avec q_p (resp. q_d) la charge électrique portée par la particule (resp. goutte), $\varepsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12} \text{ F} \cdot \text{m}^{-1}$ la permittivité du vide et l la distance entre la particule et la goutte.

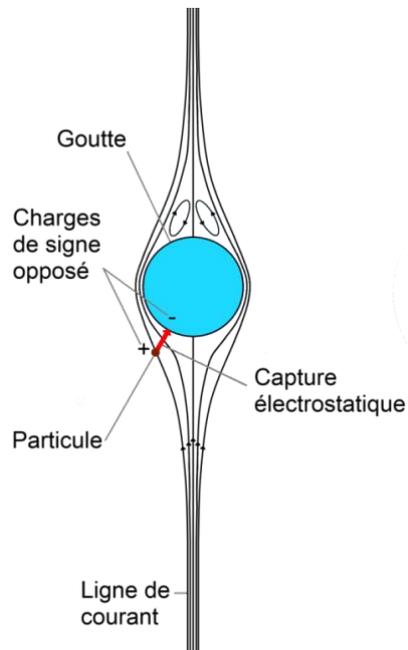


Figure II-14 : La capture électrostatique.

La force électrostatique améliore la probabilité de capture de la particule par la goutte lorsqu'elle est due aux charges images induites dans la goutte d'eau par la particule. Cependant, les forces électrostatiques peuvent éloigner la particule de la goutte d'eau (charges de même signe).

II.1.2.e Autres phénomènes

Il existe d'autres moyens de collecte, tels que la photophorèse et la capture arrière.

II.1.2.e.i Photophorèse

La photophorèse est engendrée par le fait que la lumière éclaire une face de la particule et pas l'autre. La particule ainsi éclairée va bouger dans le sens du rayon lumineux en s'éloignant de la source (Fuchs, 1964). Ce déplacement est dû à la force radiométrique (Figure II-15). Le mouvement ainsi créé peut approcher la particule de la goutte et donc faciliter sa capture.

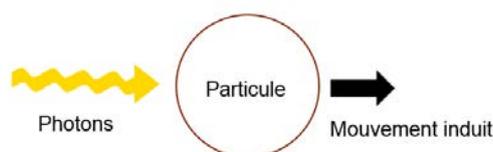


Figure II-15 : Mouvement dû à la force radiométrique.

II.1.2.e.ii Capture arrière

L'interaction entre l'hydrodynamique de l'écoulement autour de la goutte et les mécanismes de captures détaillés précédemment peut donner naissance à un autre mode de capture, la capture arrière. Lors de sa diffusion brownienne ou phorétique, une particule peut se retrouver piégée dans la recirculation arrière d'une goutte en mouvement qui apparaît pour $Re_g > 20$ (Wang *et al.*, 1978). Ainsi, celle-ci est capturée dans le sillage de la goutte. Cette situation peut être temporaire et engendrer soit la capture brownienne ou phorétique de la particule (Figure II-16), soit la libération de la particule dans l'air porteur à une autre position, le long de la trajectoire de la goutte.

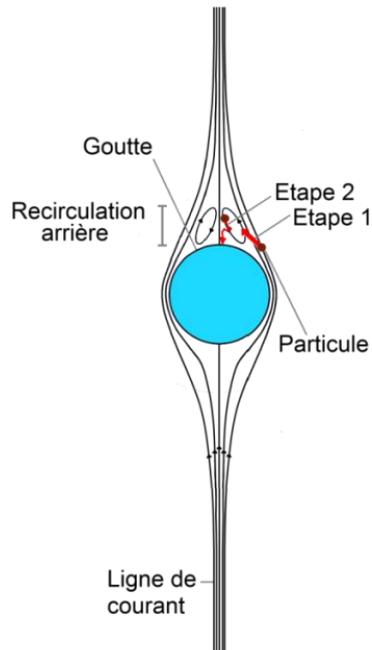


Figure II-16: La capture arrière.

II.1.2.f Synthèse de l'efficacité globale de capture

La Figure II-17 montre une comparaison qualitative de l'efficacité de collecte d'une particule par une goutte d'eau en fonction de son diamètre aérodynamique (Murata *et al.*, 1997). La courbe de l'efficacité de capture totale en fonction du diamètre aérodynamique de la particule est en forme de v : l'efficacité de capture présente un minimum pour une particule d'environ 100 nm de diamètre et deux maxima aux deux extrêmes qui correspondent aux particules browniennes et aux particules inertielles. La zone de diamètres où l'efficacité de capture est minimale est dénommée « minimum de Greenfield » d'après Greenfield qui le premier a décrit son existence (Greenfield, 1957). Les captures inertielles (l'impaction et l'interception) sont les captures prédominantes pour les particules dont le diamètre dépasse 0,5 μm . Tandis que la capture brownienne est prédominante pour les particules dont le diamètre est inférieur à 50 nm. Les captures phorétiques (thermophorèse et diffusiphorèse) présentent des efficacités de capture moindres mais peuvent jouer un rôle non négligeable dans la capture lorsque de forts gradients de température ou de diffusivité moléculaire existent au voisinage de la goutte. Il est important de noter que la Figure II-17 n'est utilisée que pour étudier la tendance de l'évolution de l'efficacité de capture en fonction du diamètre des particules d'aérosol.

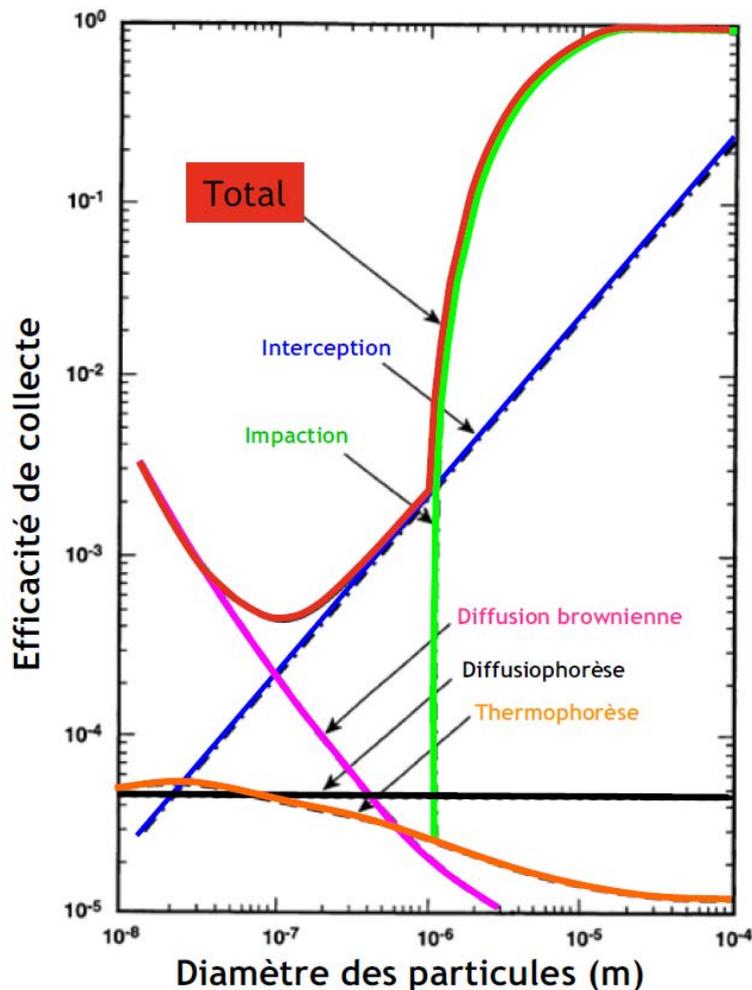


Figure II-17 : Comparaison qualitative de l'efficacité de collecte d'une particule par une goutte d'eau. © (Murata et al., 1997)

II.1.3 Conclusion partielle

Ce travail concerne l'étude de situations d'abattage humide où des particules de diamètre compris entre 1 nm et 100 μm sont capturées dans de l'air par des gouttes d'eau de diamètre compris entre 80 μm et 600 μm (nombre de Reynolds de goutte compris entre 1 et 100, lorsque les gouttes atteignent leur vitesse terminale de chute). Des gradients de température et d'humidité dans l'air peuvent exister (injection de l'eau à une température différente de celle de l'air, forte évaporation des gouttes,...). Ainsi, dans cette gamme d'étude, les différents phénomènes de capture peuvent jouer un rôle: la probabilité de capture globale dépend des phénomènes browniens, phorétiques, électrostatiques et inertiels qui contribuent à la capture de la particule. De plus, lorsqu'aucun mécanisme de capture n'est prédominant, comme c'est le cas pour les particules du minimum de Greenfield, il est nécessaire de modéliser les différentes captures car celles-ci peuvent s'influencer entre elles. Il est donc primordial d'avoir des données de référence pour chaque type de capture. L'étude bibliographique qui suit a été réalisée dans cette optique-là.

Parallèlement à la capture de particules d'aérosol, les gouttes peuvent également abaisser la concentration en gaz nocif dans l'air. Pour cela, les gouttes « capturent » ces gaz par absorption. Cet aspect de l'abattage humide n'est cependant pas détaillé dans ce manuscrit.

II.2 Etude bibliographique

Le phénomène d'abattage humide est présent dans de nombreux domaines tels que celui des sciences atmosphériques (Lemaitre *et al.*, 2017; Quérel, 2012), de la météorologie (Pruppacher and Klett, 2010), de la sûreté nucléaire (Marchand, 2008), de l'industrie (BTP, valorisation des déchets,...(Belut, 2014)), ou encore des applications en santé au travail (Gerardin and Midoux, 2016). Il en découle un intérêt important pour la compréhension et la prédiction de ce phénomène complexe. Ainsi, de nombreuses études concernant la capture de particules d'aérosol par des gouttes d'eau proposent des valeurs ou formules d'efficacités de captures E_c relatives aux différents phénomènes de capture possibles (brownienne, inertielle, phorétique,...) qui ont été obtenues soit par définition théorique, soit par calcul numérique, soit par expérience. La section qui suit synthétise les résultats de la littérature.

II.2.1 Données de la littérature

II.2.1.a Modèles théoriques

Wang et son équipe (Wang *et al.*, 1978) ont défini un modèle théorique prédisant la collecte, à un nombre de Reynolds modéré, de particules de faible inertie subissant la capture brownienne, la diffusiophorèse, la thermophorèse et la capture électrostatique mais pas la capture inertielle. L'efficacité de capture prédite par ce modèle a été obtenue grâce à une approche eulérienne consistant à calculer le flux de particules d'aérosol touchant la surface d'une goutte d'eau isolée tombant à sa vitesse terminale de chute dans de l'air. Ce flux de particules a été calculé en résolvant l'équation de conservation de la masse en particules d'aérosol qui sont soumises à la diffusion brownienne, aux forces électriques, à la thermophorèse et à la diffusiophorèse, toutes deux induites par l'évaporation de la goutte. Ce modèle est basé sur les hypothèses suivantes : l'inertie des particules est supposée négligeable, la goutte est supposée sphérique et les champs de température, de concentration en vapeur d'eau et de concentration en particules d'aérosol sont supposés présenter une symétrie sphérique autour de la goutte (faible vitesse relative de la goutte par rapport à l'air). Ainsi, les forces phorétiques modélisées sont distribuées spatialement en suivant une loi en carré inverse de la distance et en partant de la surface de la goutte. Les forces électriques ont été simplifiées de la même manière. L'équation de conservation de la masse d'aérosol a donc pu être résolue de façon analytique afin d'obtenir une expression du noyau de capture K_w (Equation II-38). Lorsque le nombre de Reynolds n'est plus négligeable ($Re_g \gg 1$), les hypothèses de symétrie sphérique autour de la goutte ne sont plus valables. Cependant, Wang a mis en place une correction du premier ordre pour son noyau de capture afin d'étendre son domaine de validité. Cette correction repose sur l'utilisation d'un coefficient de correction basé sur des corrélations définies pour des flux de chaleur ou de vapeur d'eau. Ce coefficient est le nombre de Sherwood Sh (Equation II-35) qui correspond au ratio de transfert de masse par convection par rapport au transfert de masse par diffusion (Beard and Pruppacher, 1971). Il permet ainsi de prendre en compte l'impact de l'augmentation du nombre de Reynolds sur le flux de chaleur, de vapeur d'eau et d'aérosols se dirigeant vers la goutte.

$$\begin{cases} Sh = 1,56 + 0,616 Re_g^{1/2} Sc^{1/3} & \text{quand } Re_g^{1/2} Sc^{1/3} > 1,4 \text{ ,} \\ Sh = 2 + 0,216 Re_g Sc^{2/3} & \text{quand } Re_g^{1/2} Sc^{1/3} \leq 1,4 \text{ ,} \end{cases} \quad (\text{II-35})$$

avec Sc le nombre de Schmidt (Equation II-36).

$$Sc = \frac{\mu_f}{\rho_f D_{vap}} \quad . \quad (II-36)$$

Malgré tout, le modèle de Wang est limité à la prédiction de l'abattage humide dans des cas avec un faible nombre de Reynolds de goutte et des particules présentant une inertie négligeable. Le noyau de capture de Wang est donné par l'équation suivante (Equation II-37) :

$$K_w = \frac{C_w}{\frac{C_w}{e^{\pi Sh D_B d_g} - 1}} \quad , \quad (II-37)$$

avec D_B la diffusivité brownienne des particules d'aérosol et où C_w est donné par l'Equation II-38 :

$$C_w = \frac{4HCu}{3d_p\mu_f} \quad . \quad (II-38)$$

H est une fonction modélisant la contribution des forces diffusiophorétiques (H_{df} , Equation II-39), thermophorétiques (H_{th} , Equation II-40) et électrostatiques (H_e , Equation II-41) de telle sorte que $H = H_{df} + H_{th} + H_e$. Soit :

$$H_{df} = -0,55\pi \mu_f D_{vap} Sh d_g d_p \frac{(X_{H_2O} - X_{H_2O_{surf}})}{(1 - X_{H_2O}) Cu} \quad , \quad (II-39)$$

avec X_{H_2O} (resp. $X_{H_2O_{surf}}$) la fraction molaire de vapeur d'eau dans l'air loin (resp. à la surface) de la goutte. Pour H_{th} , il vient :

$$H_{th} = -0,3\pi \mu_f Sh d_g d_p \frac{\lambda_f \left(\frac{k_f}{k_p} + 2,5Kn \right) (T_f - T_{f_{surf}})}{(1 + 3Kn) \left(1 + 2 \frac{k_f}{k_p} + 5Kn \right) P} \quad . \quad (II-40)$$

La fonction H_e est donnée par :

$$H_e = \frac{q_g q_p}{4\pi\epsilon_0} \quad . \quad (II-41)$$

En complément de ces études théoriques, d'autres chercheurs se sont attelés à réaliser des simulations numériques afin d'obtenir des efficacités de capture de particules par une goutte.

II.2.1.b Résultats de simulations numériques

De leur côté, l'équipe de Grover (Beard, 1974; Grover *et al.*, 1977) a réalisé des simulations numériques de la capture de particules inertielles $d_p \in [1,4; 28] \mu\text{m}$ à un nombre de Reynolds modéré $Re_g \in [1; 210]$ ($St_p \in [0,016; 9,98]$). La capture par impaction, la thermophorèse, la diffusiophorèse et la capture électrostatique sont prises en compte alors que la capture brownienne ne l'est pas. Par la suite, Wang *et al.* (Wang *et al.*, 2015) ont conduit des simulations numériques directes DNS (Direct Numerical Simulation) d'une goutte de diamètre égal à 2 mm capturant par impaction des particules ayant un nombre de Stokes compris entre 0,23 et 1 ($Re_g \in [50; 950]$). Pour réaliser ces DNS, Wang et son équipe résolvent, dans un domaine 3D, l'écoulement d'air chargé en particules d'aérosol autour d'une goutte immobile. Les particules d'aérosol sont suivies avec un point de vue lagrangien prenant uniquement en compte la force de traînée s'exerçant sur elles. Les simulations sont stationnaires lorsque $Re_g < 270$ et instationnaire sinon. Dans ces travaux, la goutte est supposée sphérique alors que le nombre de Weber de la goutte atteint 1,73. Un tel nombre de Weber engendre une excentricité de la goutte de 20% (Equation II-13), ce qui remet en cause l'hypothèse selon laquelle la goutte reste sphérique. De plus, les effets de la recirculation de l'eau à l'intérieur de la goutte sur le flux d'air est négligé. Tinsley *et al.* (Tinsley and Zhou, 2015) ont réalisé des simulations de la capture inertielle, phorétique et électrostatique de particules présentant un nombre de Stokes faible à modéré ($St_p < 0,0466$) par des gouttes d'eau ayant un très faible nombre de Reynolds ($Re_g < 0,06$). Dans cette optique, l'écoulement d'air autour de la goutte d'eau est simulé dans un domaine 2D axisymétrique (passant par le centre de la goutte) et un modèle trajectorien, couplé à un modèle analytique de diffusion, permettent de connaître le flux de particules d'aérosol capturé par la goutte d'eau. Les résultats de ces différentes simulations numériques ne couvrent pas la gamme d'étude liée à ce travail qui s'étend de $Re_g = 1$ à $Re_g = 100$ pour des particules présentant un nombre de Stokes compris entre $7 \cdot 10^{-9}$ et 127. Parallèlement à ces études numériques, plusieurs équipes de recherches ont réalisé des expériences de capture de particules par des gouttes.

II.2.1.c Résultats expérimentaux

Walton et Woolcock (Walton and Woolcock, 1960) ont été dans les premiers à mesurer expérimentalement des efficacités individuelles de capture. Les auteurs Wang *et al.* (Wang *et al.*, 2015) rapportent que les expériences menées par Walton et Woolcock (Walton and Woolcock, 1960) concernent la capture de particules de nombre de Stokes compris entre 0,06 et 2,81 par des gouttes d'eau présentant un nombre de Reynolds variant entre 65,5 et 900. Cependant, la validité des mesures est entachée par le fait que la goutte d'eau était maintenue au bout d'un capillaire : l'écoulement et la forme de la goutte d'eau ne correspondent pas à une situation de chute d'une goutte dans l'air. A partir de ces résultats, plusieurs corrélations de noyaux de captures ont été dérivées, dont celles de Calvert (Equation II-42) ou celle de Mohebbi (Equation II-43).

La corrélation définie par Calvert *et al.* (Calvert *et al.*, 1972) pour le noyau de capture est (Equation II-42):

$$K_I = \frac{\pi}{4} (d_g + d_p)^2 u_g \left(\frac{St_p}{St_p + 0.7} \right)^2 \quad . \quad (\text{II-42})$$

La corrélation du noyau de capture de Mohebbi (Mohebbi *et al.*, 2003) est définie par (Equation II-43):

$$K_I = \frac{\pi}{4} (d_g + d_p)^2 u_g \left(\frac{St_p}{1 + St_p} \right)^{0,759St_p^{-0,245}} \quad (II-43)$$

En 1965, Engelmann (Engelmann, 1965) a réalisé plusieurs expériences en plein air d'abattage humide. Il a généré un nuage de poussières se déplaçant jusqu'à une zone où de la pluie artificielle capturerait les particules d'aérosols. Les incertitudes de mesures sont malheureusement élevées car les paramètres de l'expérience étaient difficilement maîtrisables. Les efficacités globales de capture obtenues concernent des particules de nombre de Stokes compris entre 0,035 et 4,12 et des gouttes présentant un nombre de Reynolds $Re_g \in [2; 986]$. Starr et Mason (Starr and Mason, 1966) ont publié des efficacités individuelles de captures pour une grande gamme de nombre de Reynolds $Re_g \in [10; 1085]$ concernant des particules inertielles (grain de pollen non sphérique, $d_p \in [4; 13] \mu m$) collectées par des gouttes s'évaporant ($St_p \in [0,155; 2,29]$). Les incertitudes expérimentales liées à ces captures sont importantes et les résultats publiés présentent une grande dispersion.

Peu après, Berg *et al.* (Berg *et al.*, 1970) ont présenté des résultats d'efficacité individuelle de capture concernant la capture inertielle et électrostatique de particules à nombre de Stokes élevé ($St_p \in [5,67; 11,8]$) par des gouttes d'eau millimétriques ($Re_g \in [1380; 1575]$). Dans leurs expériences, la goutte d'eau est chargée électriquement avant de tomber dans un volume où se trouve une particule. En 1974, Beard (Beard, 1974) a publié des résultats d'efficacité individuelle de capture inertielle et électrostatique de particules présentant un nombre de Stokes compris entre 0,005 et 0,5 capturées par des gouttes d'eau maintenue dans l'air grâce à un flux d'air vertical compensant la force de gravité s'exerçant sur la goutte d'eau ($Re_g \in [20; 400]$). Cette même année, Kerker *et al.* (Kerker and Hampl, 1974) ont extrapolé des efficacités individuelles de captures à partir de la capture inertielle et brownienne de particules par des gouttes d'eau tombant à une vitesse inférieure à leur vitesse limite de chute ($Re_g \in [880; 5415]$ et $St_p \in [0,005; 0,023]$). Des données expérimentales à propos de particules de 0,57 μm de diamètre ($St_p \in [0,168; 2,15]$) capturées par des gouttes à $Re_g \in [24; 5260]$ peuvent être trouvées dans (Wang and Pruppacher, 1977). Ensuite, Lai *et al.* (Lai *et al.*, 1978) ont réalisé des expériences de capture de particules d'aérosol ($d_p \in [0,7; 2,3] \mu m$) par des gouttes d'eau à $Re_g \in [405; 950]$ ($St_p \in [0,005; 0,063]$). Certaines de leurs expériences mettent en évidence des captures. Cependant, les efficacités individuelles de capture publiées sont le résultat d'une extrapolation des mesures réalisées car les gouttes n'atteignaient pas leur vitesse limite de chute dans chaque configuration (la vitesse correspondait au minimum à 90% de la vitesse terminale de chute de la goutte). D'après les auteurs, l'écart quadratique moyen des résultats est compris entre 8 et 24%.

Leong et ses collègues (Leong *et al.*, 1982) ont mené des expériences sur la capture individuelle inertielle et phorétique de particules inertielles $d_p \in [1,4; 8,5] \mu m$ ($St_p \in [0,017; 0,78]$) à des faibles nombres de Reynolds $Re_g \in [2; 8]$. Les diamètres aérodynamiques donnés ici ont été calculés en se basant sur une densité de particule de 2 mais les auteurs ne publient pas cette information (il est noté que les particules sont constituées d'hypophosphite de manganèse). La capture électrostatique et

phorétique de particules $\overline{St_p} = 0,003$ par une goutte d'eau ($Re_g \in [80; 380]$) a été étudiée par (Barlow and Latham, 1983).

Une étude de l'abattage humide dû à des épisodes pluvieux en Suisse a été réalisée pendant 7 ans par Volken et Schumann (Volken and Schumann, 1993). Cette longue étude de terrain a permis d'obtenir des efficacités globales de capture concernant des particules de nombre de Stokes compris entre $7 \cdot 10^{-4}$ et 1,45 et une gamme étendue de gouttes $Re_g \in [24; 6252]$. Cependant, ce type d'étude hors laboratoire ne permet pas de contrôler les variables expérimentales donc des incertitudes de mesures apparaissent. La même année, Byrne et Jennings (Byrne and Jennings, 1993) ont publié des résultats de capture individuelle de particules par des gouttes chargées électriquement et s'évaporant ($St_p \in [0,01; 0,055]$, $Re_g \in [177; 270]$). Les gouttes d'eau ont atteint 75% de leur vitesse limite de chute au moment de la capture et les mesures présentent une incertitude d'environ $\pm 75\%$ de la valeur de l'efficacité de capture. Pranesha et son collègue (Pranesha and Kamra, 1997, 1996) ont obtenu des efficacités individuelles de capture relatives à des particules ($St_p \in [0,075; 0,895]$) capturées par une goutte d'eau tombant à sa vitesse limite de chute ($Re_g \in [2895; 4885]$). L'eau était non chargée électriquement dans le premier article mais le deuxième prend en compte la capture électrostatique. Les incertitudes de mesures sont dues à la mesure de la concentration en polluants dans les gouttes d'eau, à la charge des gouttes et au phénomène d'évaporation des gouttes pendant leur chute. Des efficacités individuelles de capture obtenues pour des gouttes d'eau en chute libre ($Re_g \in [2895; 4885]$) et des particules présentant un nombre de Stokes ($St_p \in [0,075; 1,10]$) sont disponibles dans Chate and Kamra (1997). De leur côté, Ebert et son équipe (Ebert *et al.*, 1998) ont étudié l'abattage humide dû à la pluie à l'aide d'une expérience de terrain. Les gouttes de pluie rencontrées dans cette campagne expérimentale ont un nombre de Reynolds compris entre 16 et 380 et les particules présentent un nombre de Stokes compris entre 0,002 et 0,165.

Dans l'expérience de laboratoire de Vohl (Vohl *et al.*, 2001), la goutte d'eau collecte des particules d'aérosol ($St_p \in [0,001; 0,004]$) tandis qu'elle est suspendue dans l'air grâce à un flux d'air ascendant correspondant à sa vitesse limite de chute. Cette situation se rapproche d'une goutte d'eau tombant à sa vitesse limite de chute dans l'air. Les nombres de Reynolds investigués s'étendent de 135 à 6800. En 2003, Laakso et ses confrères (Laakso *et al.*, 2003) ont publié une étude de 6 ans sur les effets de la pluie sur la dépollution de l'air. Malheureusement, les résultats disponibles sont fonction de l'intensité de la pluie et non du diamètre ou du nombre de Reynolds des gouttes d'eau. Balachandran et son équipe (Balachandran *et al.*, 2003) ont réalisé une expérience de dépollution de l'air contenant des fumées $\overline{St_p} = 0,01$ par un spray d'eau chargée électriquement $\overline{Re_g} = 3,44$. Les résultats publiés concernent la décroissance de la concentration massique en fumée dans l'air.

Des efficacités de capture individuelle concernant des gouttes d'eau s'évaporant et tombant en chute libre sont disponibles dans (Ladino *et al.*, 2011). La gamme concernée comprend $St_p \in [5 \cdot 10^{-5}; 0,003]$ et $Re_g \in [0,001; 0,09]$. D'après les auteurs, la source d'incertitude principale est la mesure de la masse des particules d'aérosol. De plus, les charges électriques portées par les particules et les gouttes n'ont pu être mesurées. Plus récemment, Prodi *et al.* (Prodi *et al.*, 2014) ont mené des expériences de capture individuelle de particules par une goutte d'eau en microgravité. Les captures phorétiques ont été observées pour la gamme $St_p \in [0,002; 0,048]$, $Re_g \in [65; 1130]$. La même année des expériences sur la capture individuelle, à grand nombre de Reynolds $Re_g \in [987; 1597]$,

de particules de diamètre $d_p \in [0,38; 4,4] \mu m$ ($St_p \in [0,002; 0,217]$) ont été réalisées (Quérel *et al.*, 2014). Par la suite, la même gamme d'aérosol et de goutte a été utilisée pour mesurer l'efficacité de capture individuelle pour des particules et des gouttes d'eau chargées électriquement (Sow and Lemaitre, 2015). D'autres expériences d'abattage humide ont été réalisées (Ardon-Dryer *et al.*, 2015) à partir de goutte composées de sulfate d'ammonium tombant dans un milieu non saturé en humidité ($\overline{Re}_g = 0,05$) et des particules présentant un nombre de Stokes très faible ($St_p \in [7 \cdot 10^{-6}; 0,003]$). Cette année, Lemaitre et son équipe (Lemaitre *et al.*, 2017) ont publié des résultats d'efficacité individuelle de capture en rapport avec des gouttes d'eau s'évaporant pendant leur chute ($\overline{Re}_g = 410$) dans un nuage de particules ($St_p \in [7 \cdot 10^{-4}; 0,077]$).

II.2.1.d Récapitulatif des données disponibles de capture de particules d'aérosol par des gouttes d'eau

Les données numériques et expérimentales d'abattage humide disponibles sont regroupées dans le tableau suivant (Tableau II-5) :

Tableau II-5 : Récapitulatif des données disponibles de capture de particules d'aérosol par des gouttes d'eau.

Nature des résultats	Source	Type de capture	Nombre de Reynolds Re_g	Nombre de Stokes St_p
Expérimentale	(Walton and Woolcock, 1960)	Unitaire	65,5-900	0,06-2,81
Expérimentale	(Engelmann, 1965)	Globale	2-986	0,035-4,12
Expérimentale	(Starr and Mason, 1966)	Unitaire	10-1085	0,155-2,29
Expérimentale	(Berg <i>et al.</i> , 1970)	Unitaire	1380-1575	5,67-11,8
Expérimentale	(Beard, 1974)	Unitaire	20-400	0,005-0,5
Expérimentale	(Kerker and Hampl, 1974)	Unitaire	880-5415	0,005-0,023
Expérimentale	(Wang and Pruppacher, 1977)	Unitaire	24-5260	0,168-2,15
Expérimentale	(Lai <i>et al.</i> , 1978)	Unitaire	405-950	0,005-0,063
Expérimentale	(Leong <i>et al.</i> , 1982)	Unitaire	2-8	0,017-0,78
Expérimentale	(Barlow and Latham, 1983)	Unitaire	80-380	0,003
Expérimentale	(Volken and Schumann, 1993)	Globale	24-6252	$7 \cdot 10^{-4}$ -1,45
Expérimentale	(Byrne and Jennings, 1993)	Unitaire	177-270	0,01-0,055
Expérimentale	(Pranisha and Kamra, 1996, 1997)	Unitaire	2895-4885	0,075-0,895
Expérimentale	(Chate and Kamra (1997))	Unitaire	2895-4885	0,075-1,10
Expérimentale	(Ebert <i>et al.</i> , 1998)	Globale	16-380	0,002-0,165
Expérimentale	(Vohl <i>et al.</i> , 2001)	Unitaire	135-6800	0,001-0,004

Nature des résultats	Source	Type de capture	Nombre de Reynolds Re_g	Nombre de Stokes St_p
Expérimentale	(Balachandran <i>et al.</i> , 2003)	Globale	3,44	0,01
Expérimentale	(Ladino <i>et al.</i> , 2011)	Unitaire	0,001-0,009	$5 \cdot 10^{-5}$ -0,003
Expérimentale	(Prodi <i>et al.</i> , 2014)	Unitaire	65-1130	0,002-0,048
Expérimentale	(Quérel <i>et al.</i> , 2014) (Sow and Lemaitre, 2015)	Unitaire	987-1597	0,002-0,217
Expérimentale	(Lemaitre <i>et al.</i> , 2017)	Unitaire	410	$7 \cdot 10^{-4}$ -0,077
Numérique	(Beard, 1974; Grover <i>et al.</i> , 1977)	Unitaire	1-210	0,016-9,98
Numérique	(Wang <i>et al.</i> , 2015)	Unitaire	50-950	0,23-1
Numérique	(Tinsley and Zhou, 2015)	Unitaire	<0,06	<0,0466

II.2.2 Lacunes de la littérature

L'étude bibliographique menée dans ce travail met en évidence le fait que, quelle que soit la méthode envisagée pour obtenir des efficacités individuelles de capture, il y a un manque de données de référence pour les particules d'inertie intermédiaire, c'est-à-dire celles qui sont sujettes à la fois à la capture brownienne et inertielle (particules de diamètre aérodynamique compris entre 50 nm et 2 μ m environ). Ces particules correspondent à la gamme du Greenfield gap (Greenfield, 1957) où les efficacités de capture sont les plus faibles car les particules sont proches d'être des traceurs gazeux et donc dévient peu des lignes de courant contournant la goutte. Cette faible efficacité de capture explique la difficulté pour obtenir des résultats expérimentaux. De plus, les résultats obtenus sont à nuancer avec les incertitudes de mesures qui sont de moins en moins négligeables au fur et à mesure de la décroissance des efficacités de capture.

Le manque de précision dans l'efficacité de capture concernant le Greenfield gap est un inconvénient majeur pour la compréhension de la capture de particules par une goutte d'eau et la prédiction de ce phénomène. En effet, le manque de données de référence et les incertitudes liées aux mesures expérimentales impactent la précision des noyaux de capture qui peuvent être définis à partir de ces résultats expérimentaux. Ainsi, une prédiction précise de la dépollution de l'air via l'abattage humide en se basant sur les efficacités de capture de référence n'est pas possible. Cette imprécision sur l'efficacité de capture, même si elle est faible, peut mener à une erreur importante sur la prédiction de l'épuration de l'air d'un espace de travail et cette erreur est d'autant plus importante que la goutte d'eau reste longtemps dans l'air.

Pour illustrer cette problématique, nous proposons de considérer un modèle OD pour mieux appréhender l'impact d'une erreur sur le noyau de capture au niveau de la dépollution de l'air d'une pièce. Une modélisation OD correspond à la modélisation d'une situation en négligeant la notion

d'espace. Ainsi, le volume modélisé est ramené à un réacteur parfaitement mélangé où chaque variable présente une valeur identique en tous points de l'espace. Ainsi, la définition d'un modèle OD permet d'obtenir des résultats approximatifs de l'impact de l'abattage humide sur la dépollution de l'air d'un volume type. La modélisation OD mise en place (Figure II-18) représente une enceinte cubique de 27 m^3 qui possède une entrée d'air (chargé en particules de diamètre d_p , à la concentration numérique C_{in_p}) de débit volumique Q et une sortie de même débit. Ainsi, à l'intérieur de cette pièce règne une concentration numérique en particules C_p également correspondante à la concentration en particules dans l'air à la sortie de la pièce C_{out_p} . Le débit massique d'eau pulvérisé dans l'enceinte est noté Q_{H2O} . Les gouttes sont injectées dans l'enceinte à leurs vitesses terminales de chute u_g^{chute} et leur concentration dans le volume modélisé est noté C_g . De cette manière, l'abattage humide est paramétré par le débit volumique d'eau pulvérisé dans l'enceinte Q_{H2O} et le diamètre des gouttes d_g .

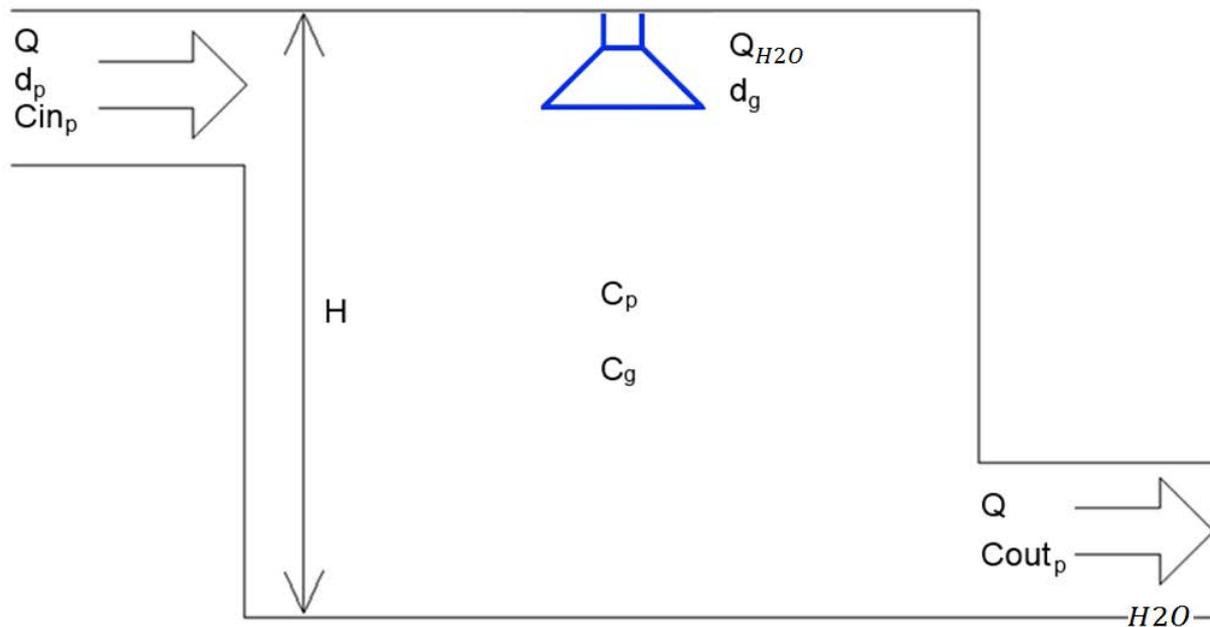


Figure II-18 : Schéma de la situation d'abattage humide modélisée en OD.

La variation de la concentration en polluants C_p peut être estimée par le bilan (Equation II-44) :

$$\frac{dC_p}{dt} = \frac{Q}{V_0} (C_{in_p} - C_p) - K(d_g, d_p) * C_p * C_g \quad , \quad (II-44)$$

avec V_0 le volume de la pièce.

Ainsi, l'efficacité d'assainissement, exprimée par η et correspondant à la diminution relative de la concentration en aérosol due à l'abattage humide est obtenue via l'Equation II-45 :

$$\eta = \frac{C_{out_p}}{C_{in_p}} = \frac{1}{1 + \frac{K(d_g, d_p) n_g H}{Q u_g^{chute}}} \quad , \quad (II-45)$$

avec n_g le débit numérique de goutte d'eau et H la hauteur de chute des gouttes.

La Figure II-19 présente l'efficacité d'assainissement de l'air d'une pièce de 27 m^3 en présence d'un dispositif d'abattage humide dont les caractéristiques sont les suivantes : le débit massique d'eau par unité de volume Q_{H_2O} est égal à $1,56 \cdot 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$ et correspond à 10^6 gouttes de $144 \mu\text{m}$ pulvérisées par seconde ($Re_g = 4$). Le renouvellement d'air de la pièce Q par unité de volume est égal à 1 volume par heure ($=7,5 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$) et l'humidité relative globale est de 50%. La Figure II-19 présente deux résultats d'efficacité d'assainissement différents obtenus à partir des données bibliographiques disponibles sur le noyau de collecte. Le premier résultat est obtenu en utilisant un noyau analytique correspondant à la somme du noyau de Wang *et al.* (Wang *et al.*, 1978) (traduisant la capture brownienne et phorétique pour des particules d'aérosol de faible inertie ($d_p \lesssim 100 \mu\text{m}$)) et celui de Mohebbi (Mohebbi *et al.*, 2003) qui décrit la capture de particules d'aérosol inertielles ($d_p \gtrsim 1 \mu\text{m}$). Le deuxième résultat est obtenu en utilisant les données de simulations numériques de Grover *et al.* (Grover *et al.*, 1977) pour les particules de diamètre aérodynamique supérieur au micromètre et les résultats du noyau de collecte de Wang *et al.* (Wang *et al.*, 1978) pour les particules plus petites.

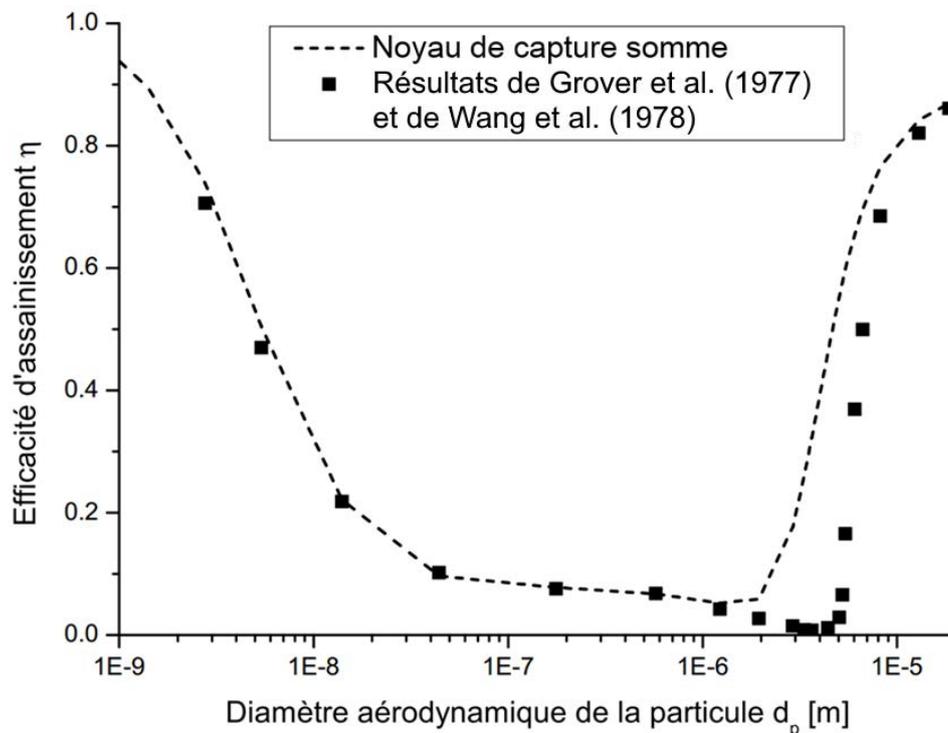


Figure II-19 : Impact du noyau de capture sur la prédiction de l'efficacité d'assainissement d'une pièce. Le noyau de capture somme correspond à la contribution du noyau de Wang (Wang *et al.*, 1978) et de Mohebbi (Mohebbi *et al.*, 2003).

La Figure II-19 montre que, suivant les sources bibliographiques utilisées pour le noyau de capture, les efficacités d'assainissement prédites peuvent varier de manière drastique pour les particules les plus inertielles ($d_p > 1 \mu\text{m}$). En effet, l'efficacité d'assainissement de l'air prédite par le noyau de capture de la littérature est, dans certains cas, très supérieure à celle correspondante aux données obtenues par simulation (Figure II-19, partie droite). Afin d'assurer une démarche de prévention efficace, il est donc primordial, dans un premier temps, d'obtenir une expression plus fiable que celles existantes sur le noyau de collecte.

II.2.3 Démarche retenue

L'objectif de l'étude présentée dans ce manuscrit est de mettre en place un modèle d'abattage humide capable de prédire l'efficacité d'assainissement de l'air dû à la capture de particules d'aérosol par des gouttes d'eau. Répondre à cet objectif permettrait d'évaluer a priori un dispositif d'abattage humide et d'en optimiser le dimensionnement afin de protéger les personnes évoluant dans ces espaces pollués et ainsi définir des méthodes de prévention adaptées à chaque situation d'hygiène industrielle rencontrée.

La prédiction de l'assainissement de l'air d'une situation par l'utilisation d'un spray d'eau nécessite de prédire précisément la dépollution de l'air au voisinage d'une goutte. Cette prédiction de l'épuration à petite échelle est liée au calcul de l'efficacité de capture de particules d'aérosol par une goutte et cette efficacité de capture unitaire est obtenue soit grâce à un noyau de capture, soit via une table regroupant des efficacités de captures de référence. Or, l'étude bibliographique a montré que les données disponibles dans la littérature ne permettent pas de prédire précisément l'efficacité de capture unitaire de particules par une goutte d'eau.

La première étape pour pouvoir prédire l'efficacité d'épuration de l'air via abattage humide est d'obtenir des données de référence d'efficacité de capture unitaire fiables et précises. Une démarche proposée consiste à réaliser des modélisations microphysiques de la capture de particules par une goutte d'eau pour combler le manque de données de référence et améliorer la précision des résultats de la littérature. Les nouvelles efficacités de captures obtenues pourront être utilisées pour mettre en place un noyau de capture capable de prédire la capture unitaire de particules par une goutte d'eau. Une fois ces travaux réalisés, implémenter le nouveau noyau de capture dans une simulation macrophysique d'abattage humide permettra de prédire l'efficacité de dépollution de l'air au voisinage de la goutte et ainsi l'épuration de l'air grâce à l'utilisation d'un spray d'eau.

II.2.3.a Approche microphysique

Pour obtenir les nouvelles efficacités de capture unitaires nécessaires à la définition d'un noyau de capture plus précis, nous nous proposons de réaliser des modélisations microphysiques. Ces modélisations microphysiques consistent à modéliser la capture de particules par une goutte d'eau isolée. Afin de se concentrer sur la problématique du couplage entre la capture brownienne et inertielle, mal décrite actuellement par les noyaux de la littérature (Figure II-19), nous considérons le cas où l'air est saturé en humidité, c'est-à-dire sans évaporation, sans diffusiophorèse et sans thermophorèse. Dans ces modélisations, le nombre de Reynolds est modéré ($Re_g < 100$) et la capture concerne des particules de diamètre aérodynamique compris entre 1nm et 100 μm et des gouttes d'eau en vitesse limite de chute, dont le diamètre correspond au nombre de Reynolds choisi. De plus, la goutte et les particules ne portent pas de charges électriques. Ceci permet de modéliser la capture brownienne et inertielle des particules d'aérosol par une goutte d'eau et ainsi obtenir de nouvelles efficacités de capture unitaires (Figure II-20).

Une fois les nouvelles efficacités de captures obtenues, elles pourront être utilisées (après avoir été complétées avec les données de la littérature concernant les captures phorétiques et électrostatiques) pour mettre en place une corrélation pour un noyau de capture. Ainsi, ce noyau prendra en compte le couplage entre les captures browniennes, phorétiques, électrostatiques et inertielle pour des particules de diamètre aérodynamique inférieur à 100 μm et des nombres de

Reynolds inférieur à 100. Le fait de définir un noyau de capture prenant en compte ces différents phénomènes devrait permettre de prédire de manière plus réaliste la capture de particules d'aérosol par une goutte isolée. Rappelons que l'objectif de l'étude est de prédire l'épuration de l'air dans un espace de travail, il est alors nécessaire, à la suite de cette étape microphysique, d'implémenter ce noyau dans une simulation macrophysique d'abattage humide.

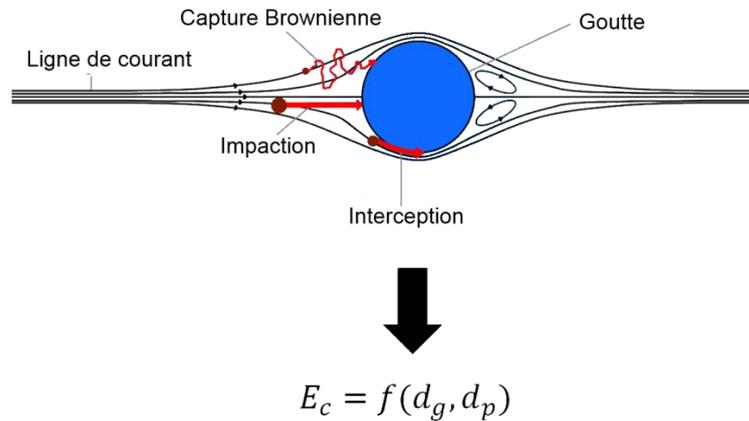


Figure II-20 : Approche microphysique du phénomène de capture.

II.2.3.b Approche macrophysique

L'objectif de l'approche macrophysique est de prédire l'efficacité d'assainissement de l'air par l'intermédiaire de l'abattage humide en prenant en compte les différentes grandeurs macroscopiques de la situation. En d'autres termes, elle consiste à simuler une situation globale d'abattage humide afin d'évaluer a priori l'efficacité d'un système d'abattage humide et donc optimiser la dépollution de l'air pour protéger au mieux les personnes évoluant dans l'environnement proche de la source de pollution. Les phénomènes pris en compte dans cette simulation macroscopique sont l'écoulement d'air, la dynamique des particules d'aérosol (mouvement, dépôt, capture,...) et la dynamique des gouttes d'eau (génération, déplacement, évaporation,...) (Figure II-21).

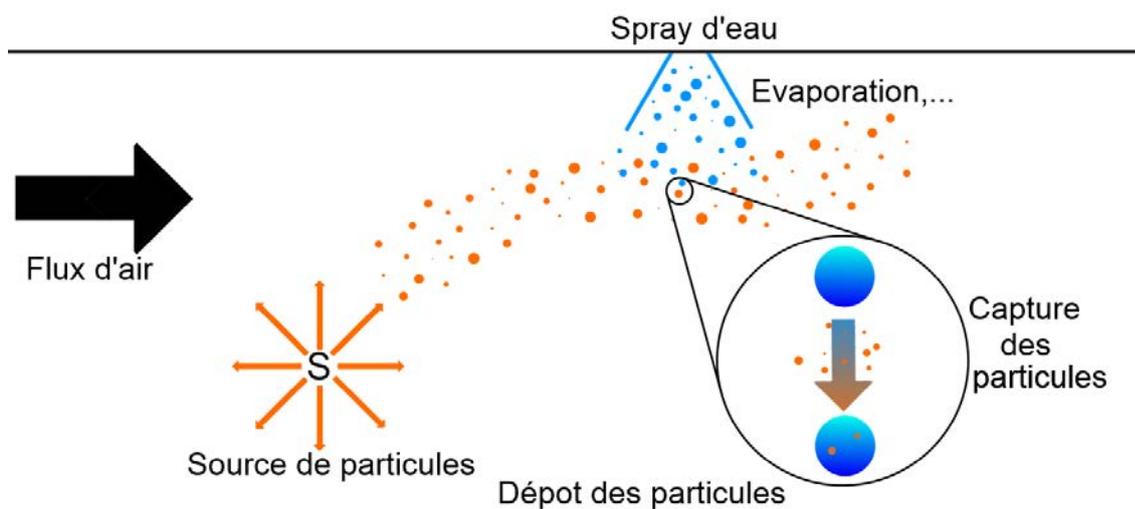


Figure II-21 : Approche macrophysique du phénomène de capture.

Les résultats de l'approche microphysique, compressés sous la forme d'un noyau de capture, sont implémentés dans cette simulation globale afin de prédire la capture de particules par des gouttes

d'eau : le noyau de capture sert à définir un terme source dans une équation de conservation de la concentration en particule. Ainsi, l'épuration globale de l'air est calculée en prenant en compte le dépôt des particules et toutes les captures unitaires se produisant dans le volume simulé. Ceci permet de quantifier l'apport de l'abattage humide en tant que système d'épuration de l'air sur la qualité de celui-ci mais aussi de considérer les autres mécanismes intervenant dans l'épuration de l'ambiance (dépôt,...).

II.3 Points clefs de ce chapitre

L'objectif de cette étude est de modéliser l'efficacité de dépollution de l'air d'un système d'abattage humide. Puisque cette épuration provient de la capture unitaire de particules par des gouttes d'eau, il est commode de pouvoir modéliser cette interaction via un noyau de capture K , plutôt que de simuler individuellement la trajectoire de chaque particule d'aérosol.

La littérature met à disposition des efficacités de capture E_c qui ne couvrent pas toute la gamme d'intérêt de cette étude (particule de diamètre d_p compris entre 1 nm et 100 μm , gouttes d'eau de diamètre d_g compris entre 80 μm et 600 μm) et certaines de ces données manquent de précision. L'étude bibliographique montre donc le besoin d'obtenir de nouvelles données de référence pour l'efficacité de capture de particules par une goutte d'eau. Ceci est réalisé grâce aux diverses modélisations microphysiques menées lors de cette étude.

La modélisation microphysique de la capture unitaire de particules par une goutte permet d'obtenir de nouvelles efficacités de captures unitaires E_c relatives à un couple particule/goutte (avec $d_p \in [1 \text{ nm}; 100 \mu m]$, $d_g \in [80; 600] \mu m$ ($Re_g \in [1; 100]$)). Ces modélisations prennent en compte la force brownienne et la force de traînée qui s'exercent sur la particule. Les nouvelles efficacités de captures sont ensuite utilisées pour mettre en place une corrélation pour un noyau de capture K_{wc} modélisant la capture brownienne, phorétique, électrostatique et inertielle. Ce noyau de capture permet de mettre en place une simulation de l'abattage humide à l'échelle d'un système complet.

La simulation macrophysique de l'abattage humide comme procédé d'assainissement de l'air utilise le noyau de capture précédemment défini pour prédire la capture des particules par les gouttes d'eau. Pour ce faire, le noyau de capture K_{wc} est implanté en tant que terme puits dans une équation de conservation de concentration en particules. Ainsi, cette méthode de simulation permet de qualifier l'assainissement de l'air dû à l'utilisation de sprays d'eau.

Le prochain chapitre est consacré à la mise en place de la modélisation microphysique de la capture de particules par une goutte d'eau.

III. Modélisation microphysique

III.1 Introduction

Ce chapitre a pour objectif de présenter la technique de modélisation de la capture unitaire de particules d'aérosol par une goutte d'eau. Cette modélisation, à l'échelle d'une goutte, permettra d'obtenir des efficacités de capture pour chaque couple particule d'aérosol/goutte de la gamme investiguée dans cette étude qui seront plus précises et complètes que les données de la littérature et ainsi combler le manque de données concernant la capture des particules d'aérosol du minimum de Greenfield (Greenfield, 1957) qui sont sujettes à la fois à la capture brownienne, phorétique, électrostatique et inertielle. Une fois validées, ces efficacités de capture obtenues par modélisation microphysiques servent de base pour la définition d'une corrélation pour un noyau de capture plus général. Celui-ci pourra être utilisé pour prédire la capture d'une particule d'aérosol par une goutte d'eau en considérant aussi bien les différents phénomènes physiques qui participent au processus de collecte.

III.1.1 Champ d'application et hypothèses de modélisation

Cette étape de modélisation est consacrée à la capture unitaire de particules d'aérosol par une goutte d'eau isolée. Les gouttes utilisées ont un diamètre compris entre $80 \mu\text{m}$ et $600 \mu\text{m}$, l'aérosol est supposé monodisperse et le diamètre aérodynamique des particules d'aérosol est compris entre 1 nm à $100 \mu\text{m}$. Cette modélisation microphysique est une modélisation stationnaire où la température est supposée constante dans le domaine de modélisation, l'air est saturé en humidité. Ainsi, les phénomènes d'évaporation/condensation de l'eau sont inexistants, le diamètre de la goutte est fixe et celle-ci est supposée de forme sphérique. De plus, la vitesse de la goutte d'eau est constante et supposée égale à la vitesse limite de chute de celle-ci ($Re_g \in [1; 100]$). L'écoulement de l'air autour de la goutte est donc laminaire. De plus, la goutte d'eau ne se déforme pas (l'excentricité de la goutte est négligeable (cf. II.1.1.c.i)) puisque le nombre de Weber de la goutte d'eau est inférieur à 10^{-3} . Dans cette étude, le contact entre une goutte et une particule d'aérosol est supposé entraîner la capture de celle-ci. L'efficacité de rétention de la particule d'aérosol par la goutte d'eau est supposée égale à 1, ce qui signifie que le contact mène obligatoirement au phénomène de capture. Le phénomène de rebond de la particule d'aérosol ou de remise en suspension de celle-ci est négligé. Le caractère hydrophobe de la particule d'aérosol n'empêche pas sa capture ; cette hypothèse est validée par Weber qui décrit (Weber, 1969) qu'une particule d'aérosol de poussière colle sur la surface d'une goutte à partir du moment où elles rentrent en contact, que la particule d'aérosol soit hydrophobe ou non. La tension de surface de la goutte n'a aucune influence sur la pénétration de la particule d'aérosol dans celle-ci. De plus, les caractéristiques de la goutte (forme, diamètre, masse, densité, viscosité,...) ne sont en rien influencées par sa pollution due à la capture des particules d'aérosol. Les collisions entre les particules d'aérosol et la goutte d'eau sont dues au mouvement brownien de la particule d'aérosol et à l'inertie de celle-ci. En effet, puisque certaines particules d'aérosol considérées dans cette étude sont plus petites que le libre parcours moyen des molécules dans l'air ($\lambda \approx 68 \text{ nm}$ dans de l'air saturé en humidité, à une température de $T_f = 298 \text{ K}$ et une pression absolue de $P = 101325 \text{ Pa}$ (Jennings, 1988)), leur déplacement, et donc leur capture, sont affectés par l'agitation brownienne. De plus, les particules d'aérosol et la goutte ne portent pas de charges électriques. La faible fraction

volumique des particules d'aérosol dans l'air ($\alpha_p < 10^{-6}$) permet de réaliser une modélisation avec un couplage « one way », c'est-à-dire que les effets de la présence de la phase dispersée sur la dynamique de la phase continue peuvent être négligés, ainsi que l'illustre la classification des écoulements à phase dispersée proposée par Elghobashi ((Elghobashi, 1994), Figure III-1). En d'autres termes, aucun couplage entre la phase fluide et la phase solide n'est pris en compte. La modélisation de la phase continue peut donc être réalisée séparément de la modélisation de la phase discrète (Figure III-1). La Figure III-1 présente les couplages possibles en fonction du rapport entre le temps de réponse aérodynamique de la particule d'aérosol et l'échelle de temps de Kolmogorov τ_p/τ_k (avec $\tau_k = \nu_f^{1/2} \varepsilon^{-1/2}$ où ν_f est la viscosité cinématique de l'air et ε est le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente). La faible fraction volumique en particules d'aérosol permet aussi de négliger les collisions inter-particulaires.

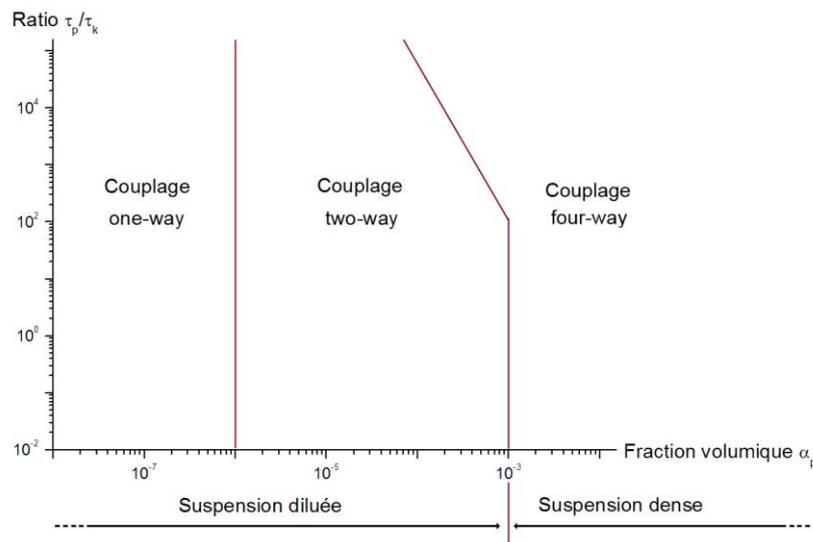


Figure III-1 : Caractérisation du couplage particule d'aérosol-fluide en fonction de la fraction volumique en particules d'aérosol. © (Elghobashi, 1994).

III.2 Modélisation des trois phases prenant place dans l'abattage humide

La modélisation de la capture de particules d'aérosol par une goutte d'eau nécessite la mise en place d'un modèle pour coupler la résolution de l'écoulement de l'air autour d'une goutte et l'eau à l'intérieur de celle-ci, un modèle pour résoudre la dynamique des particules d'aérosol et d'un modèle pour simuler le phénomène de capture.

III.2.1 Modélisation de l'écoulement d'air autour de la goutte et d'eau dans la goutte

On considère une goutte d'eau isolée en mouvement de translation uniforme dans de l'air chargé en polluants (Figure III-3). On se place dans un repère lié à la goutte. Les écoulements d'air et d'eau impliqués étant laminaire, les équations de Navier-Stokes permettent de les décrire avec notamment la conservation de la quantité de mouvement (Equation III-1).

$$\rho_m \nabla \mathbf{u}_m \cdot \mathbf{u}_m = -\nabla P_m + \mu_m \Delta \mathbf{u}_m, \quad (\text{III-1})$$

où l'indice m se rapporte indifféremment à l'air (indice f) ou à l'eau (indice g) suivant le milieu considéré, ρ_m est la masse volumique du milieu, u_m est la vitesse du milieu, P_m est la pression dans le milieu et μ_m est la viscosité dynamique du milieu.

Comme la modélisation globale doit être représentative du mouvement d'une goutte d'eau isolée dans un flux d'air chargé en particules d'aérosol, la première étape consiste à modéliser l'écoulement d'air s'établissant autour d'une goutte d'eau tombant à sa vitesse limite de chute (afin de coupler d_g et Re_g). Pour ce faire, la vitesse limite de chute de la goutte doit être connue (cf II.1.1.c.ii). Dans la gamme d'étude retenue ($d_g \in [80; 600] \mu m$), la vitesse terminale de chute est comprise entre 0,2 et 2,4 m/s. Ce couple diamètre de goutte et vitesse limite de chute correspond à un nombre de Reynolds de goutte compris entre 1 et 100.

III.2.2 Réduction axisymétrique

Le fait que l'écoulement soit laminaire et que la goutte reste sphérique permet d'utiliser un domaine 2D axisymétrique pour modéliser le déplacement de la goutte d'eau. Ceci peut être confirmé via la Figure III-2. L'écoulement reste en effet axisymétrique pour $Re_g < 200$ (Juncu, 1999; Oliver and Chung, 1985; Wham *et al.*, 1997).

La Figure III-2 compare les lignes de courant de l'écoulement d'air autour d'une goutte d'eau et de l'écoulement d'eau à l'intérieur de celle-ci qui ont été obtenues via une simulation 2D axisymétrique (à gauche) et une simulation 3D (à droite) réalisées avec le logiciel de CFD Fluent®. Cette Figure montre que les caractéristiques de l'écoulement en 3D (tourbillons, champ de vitesse,...) forment un tore axisymétrique. Ainsi, le fait de réaliser des simulations 2D axisymétrique est suffisant.

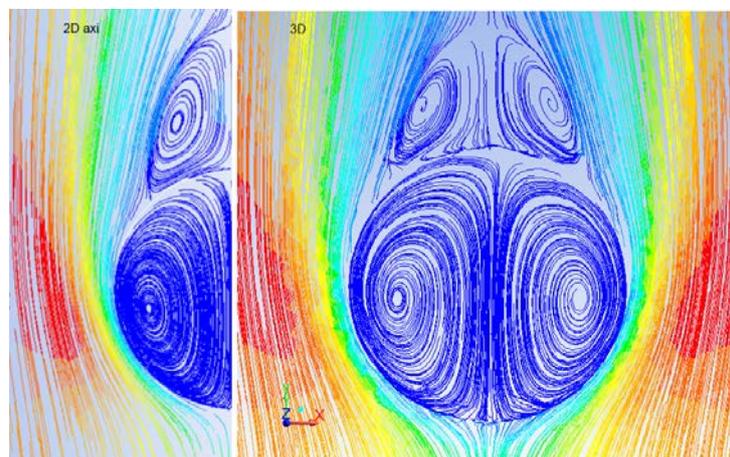


Figure III-2 : Champ de vitesse en 2D axisymétrique et en 3D. Le nombre de Reynolds de la goutte est égal à 70.

III.2.2.a Adimensionnement des variables

Afin de simplifier et de réduire le temps de calcul relatifs à la modélisation, les variables sont adimensionnées. Afin de procéder à l'adimensionnement des variables de simulation, l'équation de Navier-Stokes (Equation III-1) est adimensionnée (Equation III-5, les calculs sont réalisés pour le domaine air mais la démarche et les résultats sont identiques pour le domaine eau).

Les dimensions de référence des cas modélisés sont la vitesse de la goutte \mathbf{u}_g , le diamètre de la goutte d_g et la pression dynamique $\frac{1}{2} \rho_f u_g^2$. Ainsi, les variables adimensionnées, notées avec l'exposant *, sont définies par (Equation III-2, III-3 et III-4):

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{u}_m^* = \frac{\mathbf{u}_m}{u_g^{chute}} \\ P_m^* = \frac{P_m}{\frac{1}{2} \rho_f u_g^{chute^2}} \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{(III-2)} \\ \text{(III-3)} \end{array}$$

Pour ce qui est des dimensions spatiales, on adimensionne x_i par la longueur caractéristique d_g . Ainsi, x_i est adimensionnée par :

$$x_i^* = \frac{x_i}{d_g} \quad \text{(III-4)}$$

Après adimensionnement, l'Equation III-1 devient :

$$\nabla \mathbf{u}_m^* \cdot \mathbf{u}_m^* = -\nabla P_m^* + \frac{\mu_m}{d_g \rho_m u_g^{chute}} \Delta \mathbf{u}_m^* = -\nabla P_m^* + \frac{1}{Re_m} \Delta \mathbf{u}_m^* \quad \text{(III-5)}$$

En se basant sur la forme de l'Equation III-1, il est possible d'identifier les termes adimensionnés utilisés dans l'Equation III-5 (Equations III-6 et III-7):

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_m^* = 1 \\ \mu_m^* = \frac{\mu_m}{d_g \rho_m u_g^{chute}} = \frac{1}{Re_m} \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{(III-6)} \\ \text{(III-7)} \end{array}$$

Ceci permet de changer, dans le logiciel de CFD (Computational Fluid Dynamic), le cas étudié (Re_g, d_g) en ne changeant que la valeur de la viscosité dynamique adimensionnée μ_m^* de chaque fluide (eau et air) grâce à l'Equation III-7. Cette viscosité dynamique adimensionnée correspond à l'inverse du nombre de Reynolds aérodynamique ou hydrodynamique de la goutte.

III.2.2.b Domaine de calcul

Pour que la modélisation de la dynamique de la phase fluide soit représentative, il est nécessaire de résoudre l'écoulement dans un domaine suffisamment grand afin qu'il n'influence pas le résultat de la modélisation. En effet, lorsque le domaine de simulation est trop petit, des effets de bords apparaissent et ont un impact sur les résultats de l'écoulement (l'écoulement ne peut pas se développer correctement autour de la goutte d'eau). Puisque la modélisation utilise des variables adimensionnées, la taille du domaine est exprimée en diamètre de goutte et va par conséquent s'adapter automatiquement au cas à résoudre. La Figure III-3 montre la taille du domaine utile à la résolution de la phase fluide. Un domaine 2D-axisymétrique de 6 diamètres de goutte de hauteur et

40 diamètres de goutte de longueur (9 en amont et 30 en aval de la goutte) suffit à cette modélisation de la phase fluide.

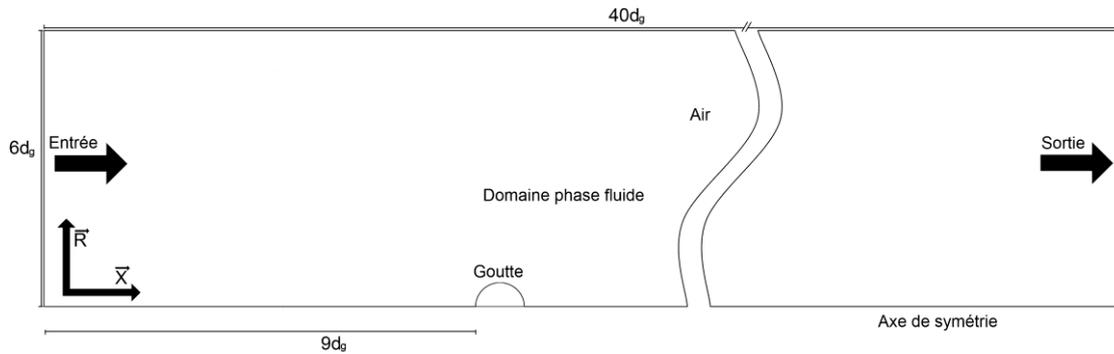


Figure III-3 : Domaine des phases continues.

III.2.2.c Continuité de la contrainte à l'interface air-goutte

Même si la goutte d'eau liquide est supposée sphérique et indéformable, il est important de ne pas la considérer comme une sphère solide. En effet, son interface avec l'air bouge à cause de l'écoulement de l'air autour de celle-ci. La prise en compte de la continuité de la contrainte de cisaillement τ_w à la surface de la goutte (Equation III-8) permet de coupler l'écoulement de l'air autour de la goutte et celui de l'eau à l'intérieur de celle-ci (Feng and Michaelides, 2001; Hadamard, 1911; Oliver and Chung, 1985; Rivkind *et al.*, 1976; Saboni *et al.*, 2004). Ainsi, le mouvement de l'air autour de la goutte et le mouvement de l'eau à l'intérieur de celle-ci interagissent.

$$\mu_f \frac{\partial \mathbf{u}_{tf}}{\partial \mathbf{r}_f} = \mu_g \frac{\partial \mathbf{u}_{tg}}{\partial \mathbf{r}_g}, \quad (\text{III-8})$$

avec \mathbf{u}_{tf} (resp. \mathbf{u}_{tg}) la vitesse tangentielle à la surface de la goutte côté fluide porteur (resp. côté eau dans la goutte) et \mathbf{r}_f (resp. \mathbf{r}_g) le vecteur normal à la surface de la goutte côté fluide porteur (resp. eau). Une fois adimensionnée, cette équation devient (Equation III-9):

$$\mu_f^* \rho_f \frac{\partial \mathbf{u}_{tf}^*}{\partial \mathbf{r}_f^*} = \mu_g^* \rho_g \frac{\partial \mathbf{u}_{tg}^*}{\partial \mathbf{r}_g^*}. \quad (\text{III-9})$$

Cette équation est implémentée dans le logiciel Fluent® par l'intermédiaire d'une UDF (User Define Function) que nous avons développée. Notons qu'il y a raccordement de la vitesse tangentielle à la surface de la goutte.

III.2.3 Modélisation du déplacement des particules d'aérosol

Contrairement à la modélisation de la phase fluide qui est basée sur une description eulérienne, la résolution de la phase dispersée se fait via une approche lagrangienne. C'est-à-dire que l'on suit un grand nombre de particules dans leur mouvement. L'approche lagrangienne permet de calculer le déplacement d'une particule à partir du principe fondamental de la dynamique (Equation III-10).

$$\frac{d \mathbf{u}_p(\mathbf{t})}{dt} = \frac{\sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i(\mathbf{t})}{m_g}, \quad (\text{III-10})$$

avec N le nombre de trajectoires suivies. Cette équation est complétée par l'Equation III-11 afin d'obtenir le système d'équations décrivant le mouvement d'une particule d'aérosol en fonction des forces qui lui sont appliquées. Soit :

$$\frac{d \mathbf{X}_p(\mathbf{t})}{dt} = \mathbf{u}_p(\mathbf{t}) . \quad (\text{III-11})$$

Ce système d'équations permet de calculer le déplacement d'une particule d'aérosol grâce aux forces auxquelles elle est soumise et à sa masse. Dans l'approche lagrangienne, il n'est pas nécessaire de suivre autant de trajectoires qu'il y a de particules d'aérosol réelles dans le domaine. En effet, il suffit de résoudre suffisamment de trajectoires pour obtenir des statistiques fiables pour la population. Les particules d'aérosol suivies représentent alors la totalité des particules d'aérosol du groupe. Ceci permet un gain de temps de calcul appréciable.

Puisque les particules d'aérosol sont soumises à la fois à la force de traînée et à la force brownienne, il est nécessaire d'utiliser un domaine 3D de calcul. En effet, le mouvement brownien est intrinsèquement 3D. Comme la modélisation de la capture des particules d'aérosol par une goutte se fait en couplage « one-way » (aucun couplage entre la phase fluide et la phase dispersée n'est pris en compte), la résolution de la phase fluide a été réalisée précédemment. Ainsi, le champ de vitesse et d'accélération de l'air calculé sur un domaine 2D axisymétrique est utilisé pour obtenir le mouvement de l'air dans le domaine 3D nécessaire à la modélisation de la phase dispersée.

Pour que la modélisation du mouvement des particules d'aérosol soit représentative du cas simulé, il est nécessaire de calculer suffisamment de trajectoires de particules d'aérosol. Ceci a pour objectif d'obtenir des résultats lagrangiens qui soient représentatifs de la population de particules d'aérosol. De plus, il est primordial de suivre ces trajectoires dans un domaine 3D pour prendre en compte le mouvement brownien de l'aérosol. Puisque la modélisation utilise des variables adimensionnées, la taille du domaine va automatiquement s'adapter au cas à résoudre. La Figure III-4 montre la taille du domaine utile à la résolution de la phase dispersée. Un domaine 3D cylindrique de 2 diamètres de goutte de rayon et 8 diamètres de goutte de longueur (4 en amont et 3 en aval de la goutte) suffit à la modélisation lagrangienne. Les détails de la modélisation numérique sont donnés par la suite.

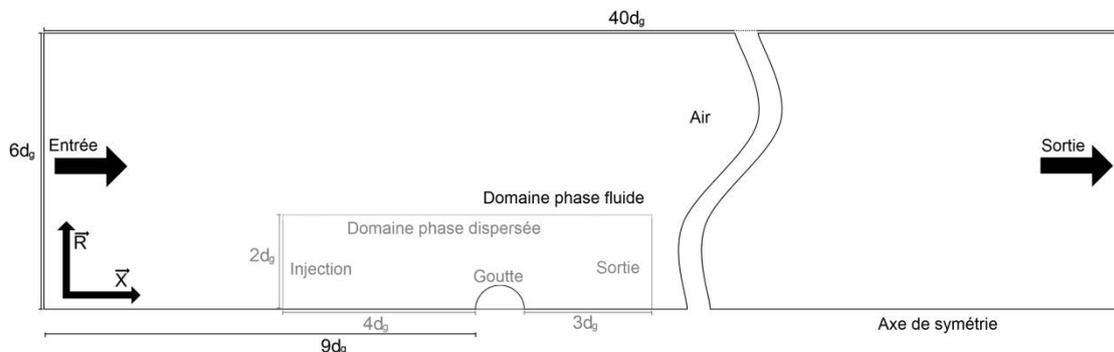


Figure III-4 : Domaine de la phase dispersée.

III.2.4 Modélisation de la capture d'une particule d'aérosol par une goutte

La capture d'une particule d'aérosol par une goutte se produit lorsque la distance entre le centre de la particule d'aérosol et celui de la goutte est plus petite que la somme de leur rayon. Mais, lorsqu'une particule d'aérosol est modélisée avec une approche lagrangienne, elle est considérée comme une particule ponctuelle. Son encombrement géométrique doit donc être ajouté au modèle lagrangien. Ainsi, le contact avec une goutte peut être constaté grâce aux Equations III-12 et III-13 correspondantes à deux types de captures distinctes (Henry *et al.*, 2014; Mohaupt, 2011; Mohaupt *et al.*, 2011) :

- les captures se produisant à la fin d'un pas de temps (Equation III-12).
- les captures se produisant pendant un pas de temps (Equation III-13).

$$\sum_{i=1}^2 (X_p^i - X_g^i)^2 \leq \frac{1}{4} (d_g + d_p)^2 \quad , \quad (\text{III-12})$$

avec X_p^i (resp. X_g^i) la position du centre de la particule d'aérosol (resp. de la goutte) sur l'axe i .

Quand la capture se produit durant le pas de temps, elle se produit entre deux positions calculées successivement pour la particule d'aérosol. Dans ce cas-là, la capture est principalement due au mouvement brownien de la particule d'aérosol et se produit si la condition suivante (Equation III-13) est satisfaite. Cette équation est basée sur la théorie des ponts browniens:

$$\frac{e^{\left(\frac{(d_d + d_p)(a + b - 0.5(d_d + d_p))}{B^2 \tau_p^2 \Delta t} \right)}}{e^{\left(\frac{2ab}{B^2 \tau_p^2 \Delta t} \right)} - 1} \geq \Lambda \quad , \quad (\text{III-13})$$

où a (resp. b) est la distance entre les centres de la goutte et de la particule d'aérosol au début (resp. à la fin) du pas de temps et Λ est une variable aléatoire obtenue grâce à une loi de probabilité de distribution uniforme (Press *et al.*, 1992).

La capture d'une particule d'aérosol par une goutte d'eau peut être vu, d'un point de vue mathématique, comme le temps d'arrêt d'un processus stochastique. Ainsi, l'efficacité de capture E_c pour une situation donnée (Equation III-14) est calculée à partir des efficacités de capture E_{c_i} obtenues à chaque réalisation. Cette méthode est une méthode de Monte Carlo et consiste à obtenir une efficacité de capture en moyennant les efficacités obtenues lors de réalisations successives. Ainsi, il vient (Equation III-14) :

$$E_c = \frac{1}{j} \sum_{i=1}^{j_m} E_{c_i}(d_g, d_p) \quad , \quad (\text{III-14})$$

avec j_m le nombre de réalisations employées pour obtenir l'efficacité de capture E_c et E_{c_i} l'efficacité de capture obtenue via la $i^{\text{ème}}$ réalisation (Equation III-15).

$$E_{c_i} = \frac{j_{p_c}}{\frac{\pi}{4} (d_g + d_p)^2 C_{surf_p}} , \quad (\text{III-15})$$

où j_{p_c} est le nombre de particules d'aérosol capturées et C_{surf_p} est la concentration numérique surfacique en particules d'aérosol au niveau de la surface d'injection.

III.2.5 Conclusion partielle

Les modèles présentés permettent de simuler l'écoulement de l'air autour d'une goutte d'eau et de l'eau la composant, le déplacement des particules d'aérosol dans l'air porteur et l'interaction entre les particules d'aérosol et la goutte (capture). Ainsi, ils ont été implémentés, soit dans le logiciel de CFD (Fluent®, résolution de la phase fluide), soit dans le logiciel de calcul numérique (Matlab®, résolution de la phase dispersée). Cette étape est présentée par la suite.

III.3 Implémentation du modèle fluide et particulaire

III.3.1 Modèle fluide

La résolution de la phase fluide est réalisée sur un maillage 2D correspondant au domaine 2D axisymétrique décrit dans la Figure III-5. Le maillage correspondant est uniquement composé de cellules quadrilatères dont la taille est donnée par l'Equation III-16.

$$0,1 \leq \frac{\Delta x}{v_f} \sqrt{\frac{Cis}{\rho_f}} \leq 3,75 , \quad (\text{III-16})$$

où Δx est la taille de la cellule et Cis est la contrainte de cisaillement moyenne sur la surface de la goutte. L'Equation III-16 montre que la taille des cellules n'est pas constante. En effet, la valeur minimale obtenue via l'Equation III-16 est rencontrée à la surface de la goutte et correspond à une taille de cellule de $1,97 \cdot 10^{-2} d_g$ et la valeur maximale n'est atteinte que loin de la goutte (taille de cellule égale à $3,83 \cdot 10^{-1} d_g$).

Les conditions aux limites relatives à la phase fluide sont les suivantes :

- Une condition de continuité de la contrainte de cisaillement est appliquée à la surface de la goutte. Cette contrainte induit des mouvements d'eau à l'intérieur de la goutte qui impactent l'écoulement d'air autour de celle-ci. Ces deux écoulements sont représentés dans la Figure III-6 qui a été réalisée à partir des résultats de CFD (vecteurs vitesses).
- Une condition de type Dirichlet correspondant à la vitesse limite de chute de la goutte est appliquée à l'entrée et à la sortie du domaine.
- Une condition de type axisymétrie est fixée au niveau de l'axe de symétrie.
- Une condition de symétrie est fixée à la dernière frontière.

Ces différentes conditions aux limites sont présentées dans la Figure III-5 qui regroupe aussi bien la phase solide que la phase fluide.

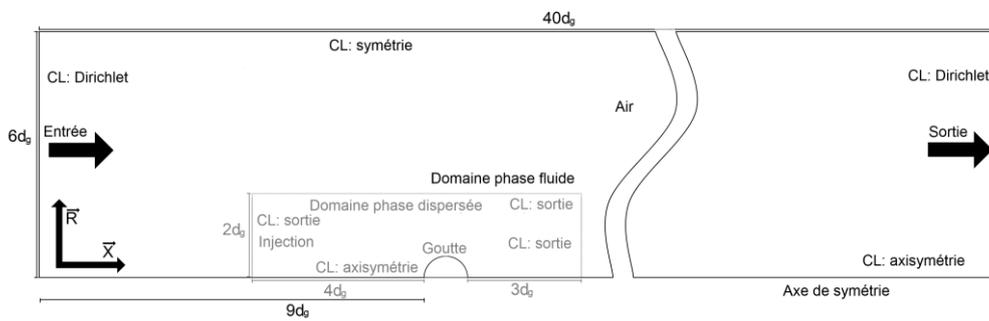


Figure III-5 : Conditions aux limites pour la phase fluide et la phase dispersée.

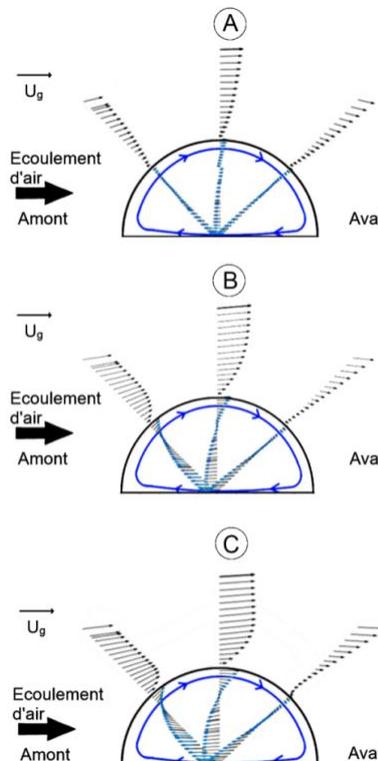


Figure III-6 : Vecteurs vitesses externes et internes à une goutte d'eau. Le nombre de Reynolds de la goutte est de 10 pour l'image A, de 30 pour la B et de 100 pour la C. Les vecteurs relatifs à l'eau sont agrandis 20 fois.

III.3.2 Modèle particulaire

Le domaine utilisé pour la résolution de la phase dispersée est un domaine 3D. Un domaine 2D axisymétrique ne peut pas être employé ici puisque le déplacement des particules d'aérosol dépend d'un mouvement brownien. Celui-ci est obtenu grâce à une rotation du domaine fluide (2D axisymétrique) autour de son axe de symétrie. Cependant, le maillage utilisé pour calculer le déplacement et la capture des particules d'aérosol est un maillage 2D axisymétrique. En effet, au lieu d'interpoler les résultats du calcul fluide 2D sur un maillage 3D et y résoudre la phase dispersée, il a été choisi de garder un maillage 2D axisymétrique et d'obtenir la vitesse du fluide à la position 3D des particules d'aérosol en projetant leur position sur ce maillage à chaque pas de temps. Ainsi, un gain de temps et de place est réalisé et le mouvement de la particule d'aérosol se produit en 3D. Il en résulte que le calcul de la composante brownienne de son déplacement n'est pas faussé. L'utilisation d'un maillage 2D axisymétrique pour la résolution de la phase dispersée qui a un mouvement intrinsèquement 3D demande de recourir à plusieurs interpolations pour obtenir les caractéristiques du fluide à la position de la particule d'aérosol. Dans un premier temps, les variables fluides 2D axisymétriques calculées précédemment (lors de la résolution de la phase fluide) sont interpolées, via une interpolation cubique (nommée Triangle Based Cubic Interpolation), sur un maillage 2D plus fin couvrant le domaine utilisé pour la phase particulaire. Dans un deuxième temps, et tout au long du calcul de la trajectoire d'une particule d'aérosol, les coordonnées 3D de la particule d'aérosol sont projetées sur le repère cylindrique du maillage 2D axisymétrique afin de pouvoir localiser la particule d'aérosol dans ce maillage. Le fait d'utiliser un maillage dont les cellules ne sont que des quadrilatères de taille constante simplifie grandement cette étape. En effet, la cellule dans laquelle se situe la particule d'aérosol recherchée peut être facilement identifiée en traduisant les coordonnées de la particule d'aérosol en nombre de cellules à parcourir à partir de l'origine du maillage. Ensuite une interpolation linéaire de la vitesse et de l'accélération du fluide (stockés sur le maillage fin 2D axisymétrique) au niveau de la position de la particule d'aérosol est réalisée. Cette méthode de résolution de la phase particulaire est présentée dans la Figure III-8 et dans l'annexe 4 (partie 3.3.1, de la ligne 309 à la ligne 321).

Les cellules du maillage de la phase particulaire sont plus petites que celles de la phase fluide afin de résoudre de façon plus fine la couche limite de concentration autour de la goutte. La taille de la cellule du maillage particulaire est de $8 \cdot 10^{-4} d_g$. Ceci est nécessaire pour obtenir une précision suffisamment fine au niveau de la couche limite de la goutte. En effet, la couche limite utilisée pour le calcul de la concentration en particules d'aérosol est plus fine que celle pour la résolution de la phase fluide. En effet, la taille de la couche limite de concentration en particules d'aérosol évolue en $Sc_p^{-1/3}$ par rapport à l'épaisseur de la couche limite aérodynamique, avec Sc_p le nombre de Schmidt défini par $Sc_p = \frac{\mu_f}{\rho_f D_B}$ (D_B est le coefficient de diffusion brownienne). Les cellules du maillage sont jugées suffisamment fines lorsque la diminution de leur taille n'a plus d'impact sur la valeur des efficacités de captures obtenues (test de convergence en maillage).

Le domaine de la phase dispersée comporte les conditions aux limites suivantes :

- Une condition de capture est fixée au niveau de la surface de la goutte.
- Une condition d'axisymétrie est appliquée au niveau de l'axe de symétrie.
- Une condition de sortie est fixée à toutes les autres frontières du domaine.

La Figure III-5 présente ces conditions aux limites.

Les particules d'aérosol sont injectées dans le domaine de calcul à la face d'injection (cf Figure III-5) située à l'amont de la goutte. Cette surface d'injection est un disque centré sur l'axe de symétrie où la position de chaque particule d'aérosol est initialisée aléatoirement grâce à l'utilisation d'une loi de probabilité de distribution uniforme. Le processus d'initialisation est optimisé en ajustant la taille du disque d'injection aux particules d'aérosol employées dans le cas modélisé. Trois groupes de particules d'aérosol, et donc de taille de disque d'injections, peuvent être distingués, soit :

- les particules d'aérosol à faible nombre de Knudsen ($Kn = 2\lambda/d_p$ avec λ le libre parcours moyen des molécules du gaz porteur) qui sont sensibles au mouvement brownien.
- les particules d'aérosol à grand nombre de Stokes qui sont inertielles.
- les particules d'aérosol de nombre de Stokes intermédiaire qui ont un comportement proche d'un traceur gazeux, ce que l'on appelle le régime de Stokes.

La Figure III-7 présente les disques d'injection correspondants à ces trois groupes de particules d'aérosol. Dans cette Figure, d_B correspond au disque d'injection utilisé pour les particules d'aérosol de faible nombre de Knudsen, d_I correspond au disque d'injection relatif aux particules d'aérosol inertielles et d_n est le diamètre du disque d'injection employé pour les particules de nombre de Stokes intermédiaire.

Le diamètre du disque d'injection pour les particules d'aérosol à faible nombre de Knudsen (noté d_B dans la Figure III-7) est obtenu grâce à l'Equation III-17 (Einstein, 1956). Celle-ci donne le déplacement quadratique moyen au temps long, dû à l'agitation brownienne, d'une particule d'aérosol dans un fluide au repos.

$$\sqrt{\overline{X_p^2}} = \sqrt{dim B^2 \tau_p^2 t_{total}} \quad , \quad (III-17)$$

avec dim la dimension du problème (1 pour un déplacement linéaire, 2 pour un déplacement plan et 3 pour un déplacement volumique) et t_{total} le temps mis par la particule d'aérosol pour aller du point d'injection à la goutte.

Le diamètre du disque d'injection pour les particules d'aérosol de nombre de Stokes intermédiaire (noté d_n dans la Figure III-7) est obtenu grâce à la position, au niveau de la face d'injection, de la ligne de courant rasant la goutte.

Le diamètre du disque d'injection pour les particules d'aérosol inertielles (noté d_I dans la Figure III-7) est égal à la somme des diamètres de la goutte et de la particule d'aérosol.

Ces trois diamètres sont présentés dans la Figure III-7.

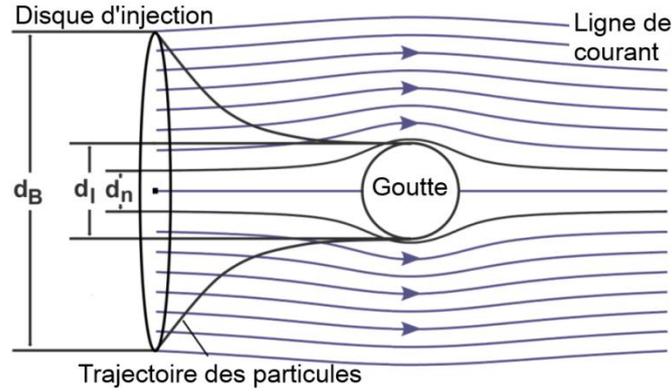


Figure III-7: Représentation de la taille d'un disque d'injection en fonction du nombre de Stokes de la particule d'aérosol.

Une fois la particule d'aérosol injectée dans le domaine de calcul, sa trajectoire est obtenue pas à pas grâce à un schéma explicite mettant à jour sa position et sa vitesse à chaque pas de temps. La trajectoire de chaque particule d'aérosol est calculée en suivant l'approche de (Henry *et al.*, 2014; Minier and Peirano, 2001; Mohaupt *et al.*, 2011) qui est une approche lagrangienne stochastique où la vitesse et la position de la particule d'aérosol est donnée par l'Equation III-18 (appelée équation de Langevin) :

$$\begin{cases} d\mathbf{X}_p(t) = \mathbf{u}_p(t) dt , \\ d\mathbf{u}_p(t) = \frac{\mathbf{u}_{f@p}(t) - \mathbf{u}_p(t)}{\tau_p} dt + B d\mathbf{W}_t , \end{cases} \quad (\text{III-18})$$

où $\mathbf{X}_p(t)$ (resp. $\mathbf{u}_p(t)$) est le vecteur position (resp. vitesse) de la particule d'aérosol au temps t , $\mathbf{u}_{f@p}(t)$ est la vitesse du fluide à la position de la particule d'aérosol $\mathbf{X}_p(t)$, B est un coefficient relatif aux propriétés diffusionnelles de la particule d'aérosol dues au mouvement brownien $B = \sqrt{\frac{12k_B\theta_f}{\pi d_p^3 \rho_p \tau_p}}$.

Le processus de Wiener \mathbf{W}_t est utilisé pour le processus aléatoire du modèle et $d\mathbf{W}_t$ est son incrément. Le processus de Wiener est un processus stochastique décrivant des trajectoires qui sont continues mais qui ne sont nulle part dérivables.

Les Equations III-18 utilisées pour modéliser le mouvement des particules d'aérosol prennent à la fois en compte la traînée des particules d'aérosol grâce au terme $\frac{\mathbf{u}_{f@p}(t) - \mathbf{u}_p(t)}{\tau_p} dt$ et leur mouvements browniens aléatoires via l'implémentation du terme $B d\mathbf{W}_t$. A la suite de la discrétisation de ces Equations de Langevin via une méthode d'intégration Stochastique d'Itô (Itô and McKean, 1965), la solution de l'Equation III-18 est obtenue (Equation III-19, (Henry *et al.*, 2014; Minier and Peirano, 2001; Mohaupt *et al.*, 2011)).

Il en découle :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{X}_p(t + \Delta t) = \mathbf{X}_p(t) + \mathbf{u}_p(t)\tau_p \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}}\right) + \mathbf{u}_{f@p}(t) \left[\Delta t - \tau_p \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}}\right) \right] + \\ + B \tau_p \sqrt{\frac{2\tau_p \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}}\right)}{\left(1 + e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}}\right)}} \xi_x + B \frac{\tau_p^2 \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}}\right)^2}{\sqrt{2\tau_p \left(1 - e^{-\frac{2\Delta t}{\tau_p}}\right)}} \xi_v , \\ \mathbf{u}_p(t + \Delta t) = \mathbf{u}_p(t) e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}} + \mathbf{u}_{f@p}(t) \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}}\right) + B \sqrt{\frac{\tau_p}{2} \left(1 - e^{-\frac{2\Delta t}{\tau_p}}\right)} \xi_v , \end{array} \right. \quad (III-19)$$

avec (ξ_x, ξ_v) deux variables aléatoires suivant une loi normale $\mathcal{N}(0,1)$. Elles sont générées grâce à une méthode Box-Muller (Box and Muller, 1958). Ces équations comportent trois parties :

- la première partie de ces équations correspond à l'inertie de la particule d'aérosol :

$$\mathbf{u}_p(t)\tau_p \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}}\right) \text{ et } \mathbf{u}_p(t) e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}} ,$$

- la deuxième partie permet de modéliser la force de traînée agissant sur celle-ci :

$$\mathbf{u}_{f@p}(t) \left[\Delta t - \tau_p \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}}\right) \right] \text{ et } \mathbf{u}_{f@p}(t) \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}}\right) ,$$

- la troisième partie rend compte du mouvement brownien :

$$B \tau_p \sqrt{\frac{2\tau_p \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}}\right)}{\left(1 + e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}}\right)}} \xi_x + B \frac{\tau_p^2 \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}}\right)^2}{\sqrt{2\tau_p \left(1 - e^{-\frac{2\Delta t}{\tau_p}}\right)}} \xi_v \text{ et } B \sqrt{\frac{\tau_p}{2} \left(1 - e^{-\frac{2\Delta t}{\tau_p}}\right)} \xi_v .$$

Grâce à cela, ces équations sont utilisables dans une approche lagrangienne pour prendre en compte la force brownienne et la force de traînée qui s'exercent sur une particule d'aérosol (Henry *et al.*, 2014; Mohaupt *et al.*, 2011; Taniere, 2010).

Le schéma donné par l'Equation III-20 est basé sur les travaux de (Henry *et al.*, 2014; Mohaupt *et al.*, 2011) et permet d'utiliser de grands pas de temps dans le suivi lagrangien d'une particule d'aérosol. Ainsi, il n'est pas nécessaire d'utiliser des pas de temps inférieurs au temps de réponse aérodynamique de la particule d'aérosol τ_p mais seulement de valider la condition $\Delta t < 10^3 \tau_p$. En effet, ce schéma est capable de prédire le mouvement de la particule d'aérosol aussi bien dans un régime balistique (temps court, particule inertielle) que dans un régime diffusif (temps long, particule brownienne). La taille du pas de temps ne dépend pas que de la constante de temps aérodynamique de la particule d'aérosol τ_p mais aussi de la taille des cellules du maillage sur lequel sont suivies les particules d'aérosol car il est nécessaire de garder un nombre de Courant $Co = u_p \Delta t / \Delta x$ inférieur à 1. Ainsi, avec le diamètre de la particule d'aérosol variant entre 1 nm et 100 μm , Δt varie entre $10^3 \tau_p$ et $10^{-3} \tau_p$. Cette gamme de pas de temps n'est pas en contradiction avec les pas de temps proposés

par Mohaupt pour son schéma explicite (Mohaupt *et al.* (2011)). Le processus utilisé pour simuler le déplacement et la capture des particules d'aérosol est résumé dans la Figure III-8.

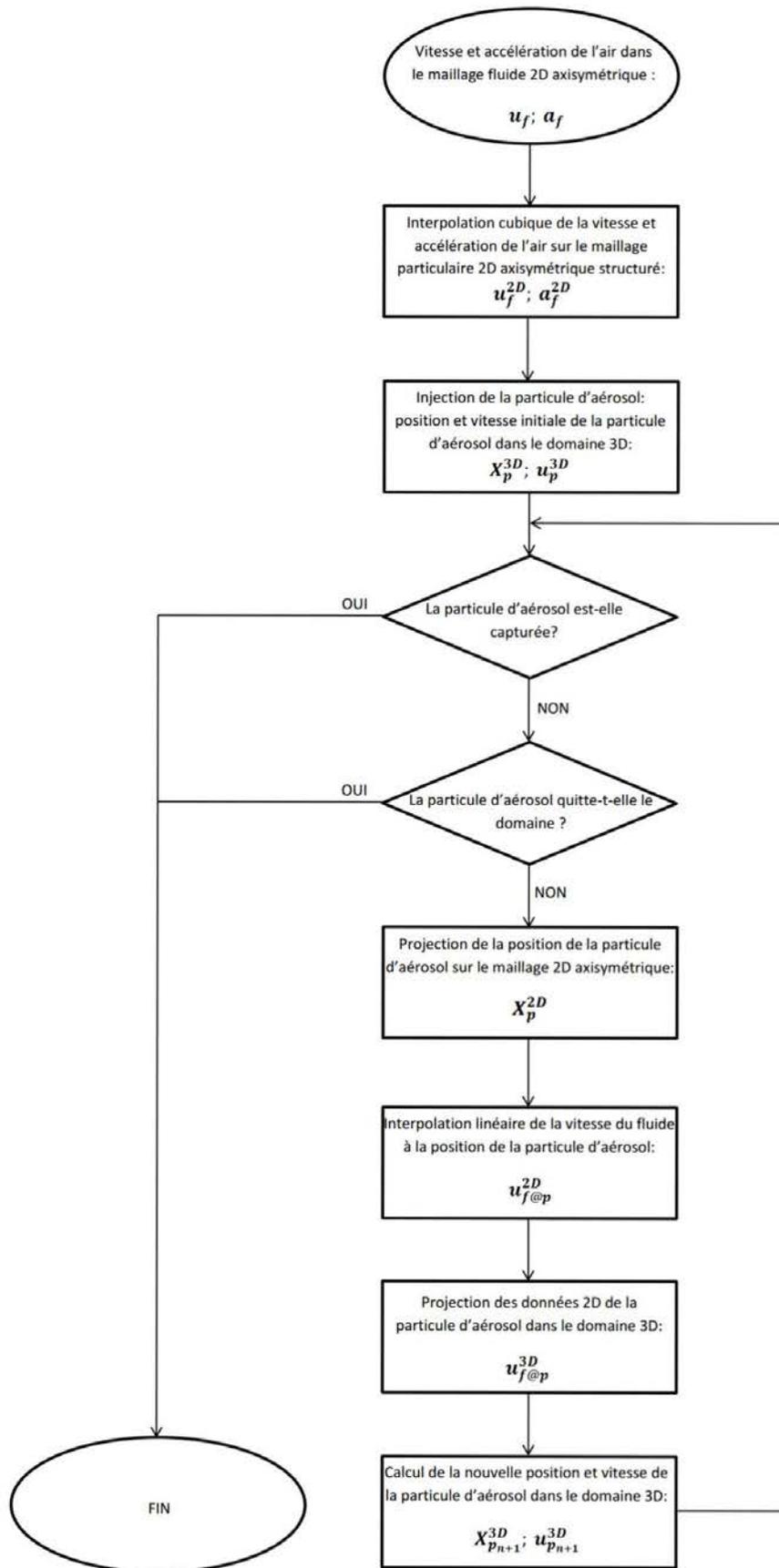


Figure III-8 : Diagramme du calcul de déplacement 3D d'une particule d'aérosol à partir de données fluides 2D axisymétriques. L'exposant 3D (resp. 2D) correspond aux coordonnées 3D (resp. 2D), l'indice $n + 1$ correspond au pas de temps suivant et a_f correspond au vecteur accélération du fluide.

III.3.3 Conclusion partielle

Les paragraphes précédents ont décrit comment le modèle couplant l'écoulement d'air autour d'une goutte avec l'écoulement d'eau à l'intérieur de celle-ci a été implémenté dans le logiciel de CFD et comment les deux modèles relatifs aux particules d'aérosol (déplacement et capture) ont été implémentés dans le logiciel de résolution d'équations mathématique. Une fois ces trois modèles implémentés, il est nécessaire de les vérifier.

III.4 Vérification du modèle

Plusieurs vérifications sont nécessaires à la validation de l'implantation du modèle microphysique. En effet, la véracité des résultats obtenus via la modélisation microphysique dépend de la génération des nombres aléatoires utilisés dans le schéma de Mohaupt *et al.* (Mohaupt *et al.*, 2011) qui se doit d'être optimale car la modélisation stochastique du mouvement brownien des particules d'aérosol est basée sur ces nombres aléatoires. Il est aussi nécessaire de vérifier que la taille des disques d'injections utilisés pour injecter les particules d'aérosol dans le domaine de calcul n'impactent pas les résultats. Une autre vérification consiste à contrôler la position finale des particules d'aérosol suivies afin de s'assurer de la complétude des trajectoires suivies. Pour finir, il est indispensable de vérifier que les résultats d'efficacité de capture provenant des calculs sont représentatifs du cas modélisé.

III.4.1 Génération des nombres aléatoires

Les deux nombres aléatoires utilisés dans le schéma de Mohaupt suivent une loi normale d'espérance nulle et d'écart-type égal à 1 : $(\xi_x, \xi_y) \sim \mathcal{N}(0,1)$. Ils sont générés à chaque pas de temps par une méthode Box-Muller (Box and Muller, 1958). Dans l'optique de valider le générateur de nombre aléatoire, un test de Shapiro-Wilk est réalisé pour savoir si l'échantillon de nombres aléatoires est issu d'une population normalement distribuée. Avec un seuil de signification choisi de 0,05 et une taille d'échantillon de 100, l'hypothèse selon laquelle les nombres sont issus d'une population normalement distribuée ne peut pas être rejetée. Le test de Shapiro-Wilk permet de valider la génération de nombre aléatoire employée ici.

III.4.2 Disque d'injection

Les particules d'aérosol sont injectées dans le domaine de calcul à partir du disque d'injection défini précédemment (cf III.3.2). La diminution du diamètre de ce disque d'injection permet un gain de temps de calcul mais peut mener à des résultats d'efficacité de capture erronés. En effet, lorsque le diamètre du disque d'injection tend vers 0, l'efficacité de capture tend irrémédiablement vers 1. Il est donc important de valider la taille du disque d'injection pour optimiser le temps de calcul tout en obtenant des résultats d'efficacité de capture de qualité. L'influence de la taille du disque d'injection sur l'erreur de prédiction de l'efficacité de capture (axe des ordonnées à gauche) et sur le temps de calcul (axe des ordonnées à droite) est présentée dans la Figure III-9. La Figure III-9 montre que, dans le cas d'une particule d'aérosol de diamètre aérodynamique égal à $1 \mu\text{m}$ et un nombre de Reynolds de goutte de 100, le diamètre du disque d'injection peut être diminué jusqu'à atteindre une taille de $0,4 d_g$. Ainsi, le temps de calcul est divisé par 3 par rapport au cas de non-optimisation du disque

d'injection. La Figure III-9 montre qu'il est possible d'utiliser un disque d'injection de diamètre inférieur à d_g . Il est cependant nécessaire de garder le disque d'injection suffisamment grand pour que sa taille n'influence pas les résultats de capture.

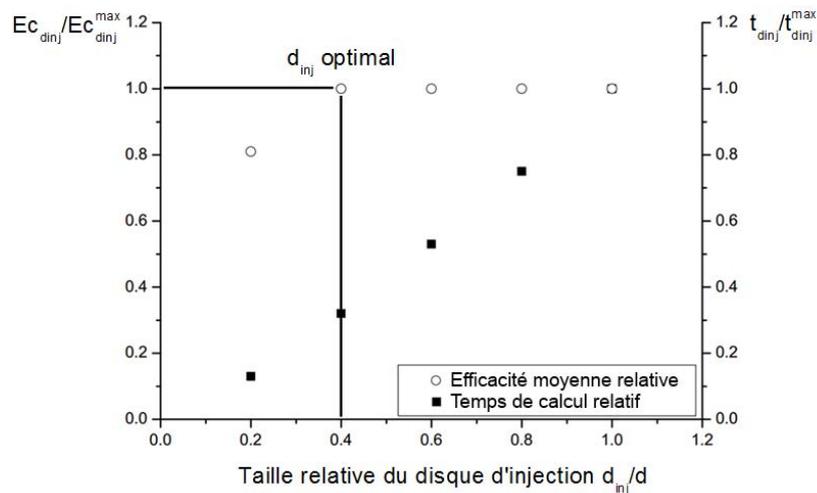


Figure III-9 : Efficacité de capture moyenne et temps de calcul relatifs en fonction de la taille du diamètre du disque d'injection. L'exposant d_{inj} signifie diamètre du disque d'injection et l'exposant max correspond à la valeur maximale de la variable. $d_g = 1\mu m$ et $Re_g = 100$.

Après s'être assuré que l'injection des particules d'aérosol n'a pas d'influence sur les résultats obtenus, la phase de validation peut être envisagée. La validité de la modélisation de la dynamique de la phase particulaire dépend du mouvement brownien des particules d'aérosol.

III.4.3 Complétude des trajectoires des particules d'aérosol

La bonne complétude des trajectoires des particules d'aérosol suivies est une nécessité pour la validité des résultats obtenus par la modélisation. Cette vérification est réalisée en suivant le nombre de particules d'aérosol modélisées. Ainsi, la somme des particules d'aérosol sortantes du domaine et des particules d'aérosol capturées est comparée avec le nombre de particules d'aérosol injectées à l'entrée du domaine. L'égalité entre ces deux nombres permet de vérifier que la trajectoire de chaque particule d'aérosol a été suivie pendant suffisamment longtemps pour être représentative de l'évolution réelle de la concentration en particules d'aérosol au voisinage de la goutte d'eau.

III.4.4 Représentativité des résultats d'efficacité de capture

Le contrôle de la convergence statistique des efficacités de capture obtenues par modélisation permet de valider les résultats obtenus. L'efficacité de capture obtenue par modélisation E_c est fondée sur les nombreuses efficacités de captures E_{c_i} correspondantes aux différentes réalisations de particules d'aérosol pour une situation donnée. Un test de Shapiro-Wilk (Shapiro and Wilk, 1965) est réalisé pour vérifier que la distribution des résultats des différentes réalisations correspond à une population normalement distribuée. Avec un seuil de signification choisi de 0,05 et une taille d'échantillon de 100, l'hypothèse selon laquelle les nombres sont issus d'une population normalement distribuée ne peut pas être rejetée. Ainsi, l'intervalle de confiance sur E_c peut être estimée grâce à un

test de distribution basé sur la loi de Student-t dont les résultats sont affichés dans le Tableau III-1 et la Figure III-10.

Tableau III-1: Intervalle de confiance de l'efficacité de capture moyenne pour une particule d'aérosol de diamètre égal à 5µm et un nombre de Reynolds de goutte de 100. L'efficacité de capture moyenne est obtenue en divisant E_c par l'efficacité de capture correspondant au nombre de réalisation.

Nombre de particules d'aérosol	Nombre de réalisation	Efficacité moyenne relative	Intervalle de confiance [%]
100	10	0,998	10,72
	100	0,999	2,70
	1000	1	0,59
1000	10	0,987	4,11
	100	0,999	0,77
	1000	1	0,24

La Figure III-10 présente l'évolution de l'efficacité de capture moyenne en fonction du nombre de réalisations.

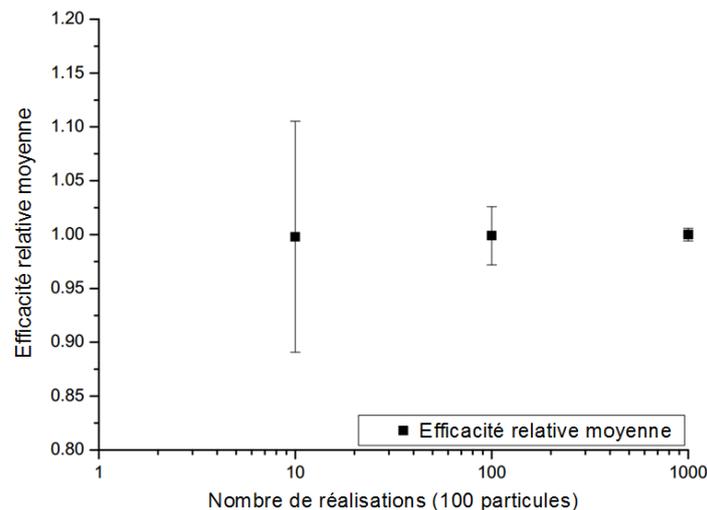


Figure III-10 : Efficacité de capture relative en fonction du nombre de réalisations pour $d_p = 5 \mu\text{m}$, $Re_g = 100$. 100 particules d'aérosol sont injectées par réalisation. L'efficacité de capture relative est obtenue en divisant E_c par l'efficacité de capture liée à 1000 réalisations.

Le Tableau III-1 et la Figure III-10 montrent que lorsque les particules d'aérosol ne sont pas sensibles à l'agitation brownienne, 1000 réalisations¹ successives de 100 particules d'aérosol permettent d'obtenir une efficacité de capture E_c présentant un intervalle de confiance inférieur à 1%. Néanmoins, lorsque la particule d'aérosol est très sensible à la diffusion brownienne, il est nécessaire d'injecter plus de particules d'aérosol à chaque réalisation. Par exemple, lorsque le diamètre aérodynamique de la particule d'aérosol est de 2 nm ($Re_g = 100$), 100 réalisations successives de 10 000 particule d'aérosol sont obligatoires.

¹ Une réalisation correspond au tirage aléatoire de la position initiale de plusieurs particules et à la modélisation de leur déplacement dans le domaine de simulation. L'efficacité de capture E_c est obtenue via les efficacités de captures E_{c_i} calculées pour chaque réalisation.

Ces vérifications permettent de s'assurer que l'efficacité de capture E_c est représentative des différentes efficacités E_{c_i} . La validation de quelques résultats avec des données de référence offre une confirmation supplémentaire pour la validité de la technique microphysique employée.

III.4.5 Conclusion partielle

Les vérifications effectuées permettent de valider la technique mise en place pour modéliser le déplacement et la capture des particules d'aérosol. En effet, la modélisation du mouvement des particules d'aérosol a été vérifiée suivant trois points : l'étude du générateur des nombres aléatoires employés dans le schéma explicite de Mohaupt *et al.* (Mohaupt *et al.*, 2011)(cf III.3.2), l'analyse de la taille du disque d'injection et le contrôle de la complétude des trajectoires d'aérosols. Ensuite, la représentativité des résultats d'efficacité de capture a été attestée. Cependant, il est important de valider les résultats microphysiques obtenus par le modèle avant de l'utiliser pour obtenir des données d'efficacité de capture de référence. Les validations essentielles concernent à la fois la goutte d'eau, le mouvement brownien des particules d'aérosol et les résultats d'efficacité de capture unitaires.

III.5 Validation des résultats microphysiques

Dans un premier temps, la validation concerne les grandeurs relatives à la goutte d'eau telles que sa traînée, sa vorticité, sa vitesse et la pression existante à sa surface. En effet, puisque les résultats de l'écoulement fluide autour de la goutte sont primordiaux pour la résolution de la phase dispersée, il est important de valider cette partie de la simulation. Ensuite, la validation du mouvement des particules d'aérosol est réalisée. Pour finir, Les résultats d'efficacité de captures sont confrontés à des résultats de la littérature.

III.5.1 Goutte

III.5.1.a Traînée

La première grandeur relative à la goutte à être comparée à la théorie est la traînée de celle-ci. Pour ce faire, la traînée obtenue par simulation de l'écoulement d'air autour d'une goutte est confrontée aux résultats obtenus grâce à l'équation de Saboni lorsque $Re_g < 2$ (Equation II.23, (Saboni *et al.*, 2004)) ou à l'équation de Rivkind lorsque $2 \leq Re_g \leq 500$ (Equation II.24, (Rivkind and Ryskin, 1976)). Les résultats de comparaison sont donnés dans le Tableau III-2.

Le Tableau III-2 montre que l'écart relatif entre le coefficient de traînée de la goutte obtenu grâce à la simulation et sa valeur calculée avec les deux équations présentées précédemment est inférieur à 3% sauf pour la comparaison avec l'équation de Saboni où l'écart relatif augmente presque à 5%. Cependant, les auteurs donnent une erreur de prédiction de l'ordre de 7%. Ainsi, les écarts obtenus ici sont inférieurs aux erreurs de prédictions des corrélations utilisées et peuvent donc être considérés comme acceptables.

Tableau III-2: Coefficients de trainée : comparaison entre simulation numérique et littérature. Les données de la littérature proviennent de (Rivkind and Ryskin, 1976) sauf celle avec l'exposant * qui provient de (Saboni et al., 2004).

Re_g	C_d		
	Simulation	Littérature	Ecart relatif (%)
1	28,1421	26,9779*	4,3*
4	8,5413	8,6138	0,8
10	4,2902	4,2852	0,1
30	2,09	2,0859	0,2
50	1,5515	1,5616	0,6
70	1,2902	1,3093	1,4
100	1,0692	1,0970	2,5

Pour l'intégralité de ce manuscrit, l'écart relatif est défini comme (Equation III-20) :

$$Ecart\ relatif = \frac{|V_s - V_{ref}|}{V_{ref}}, \quad (III-20)$$

avec V_s la valeur obtenue par simulation et V_{ref} la valeur de référence.

III.5.1.b Vorticité, vitesse et pression

La deuxième grandeur relative à la goutte à être validée est la vorticité de celle-ci. La vorticité \mathbf{V}_f est définie, à partir de la vitesse de l'air, comme $\mathbf{V}_f = \nabla \times \mathbf{u}_f$. La Figure III-12 présente la norme de la vorticité à l'interface de la goutte obtenue par simulation et celle de référence donnée par LeClair (LeClair et al., 1972) en fonction des coordonnées angulaires β autour de la surface de la goutte dont la valeur nulle correspond à l'amont de la goutte (Figure III-11). Dans la Figure III-12, le nombre de Reynolds de la goutte vaut soit 30, soit 100. La vorticité est adimensionnée par $2 u_g^{chute} / d_g$.

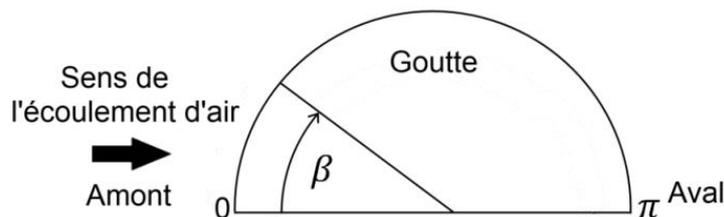


Figure III-11 : Coordonnées angulaires de la surface de la goutte.

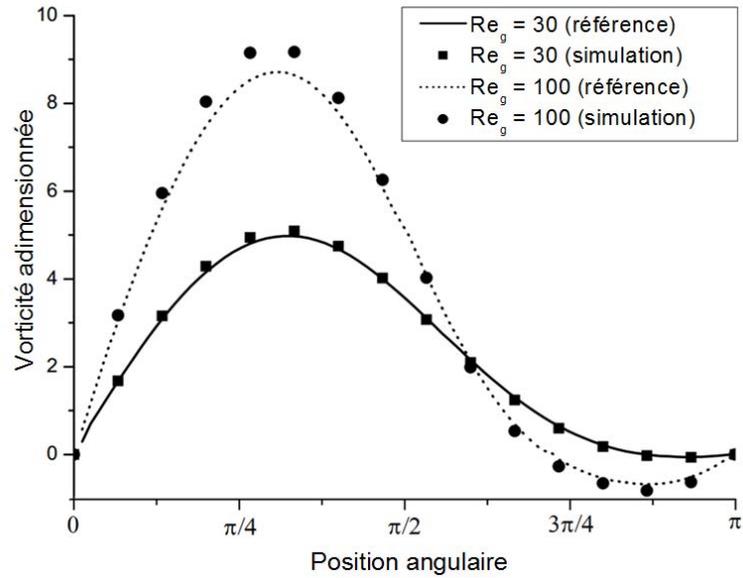


Figure III-12 : Vorticité adimensionnée à la surface de la goutte.

L'écart relatif (Equation III-20) entre les résultats de simulation et les résultats de la littérature est inférieur à 4%.

De façon similaire, les comparaisons au niveau de la vitesse de la surface de la goutte et de la pression à son interface sont données par les Figures III-13 et III-14. La vitesse est adimensionnée par u_g^{chute} et la pression est adimensionnée par $\frac{1}{2}\rho_f u_g^{chute^2}$. Les écarts relatifs entre la simulation et la littérature sont similaires à ceux concernant la vorticité. En effet, l'écart relatif (Equation III-20) concernant la vitesse de la surface de la goutte est inférieur à 2% tandis que celui relatif à la pression est inférieur à 5%.

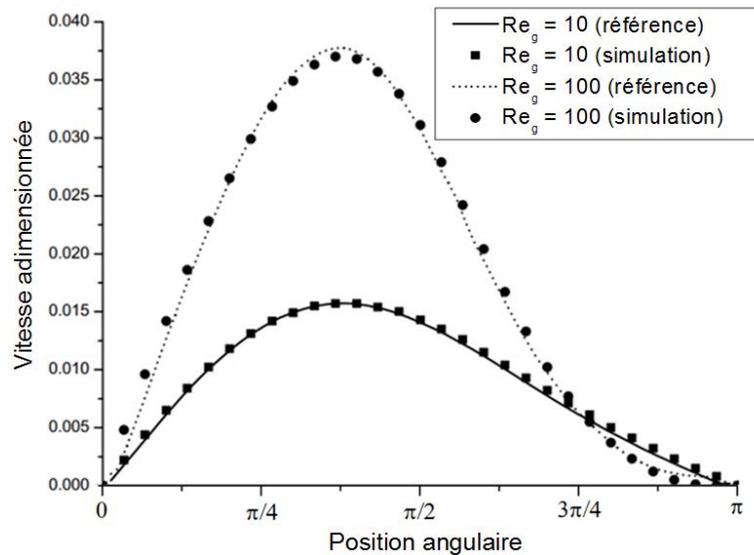


Figure III-13 : Vitesse de la surface de la goutte adimensionnée.

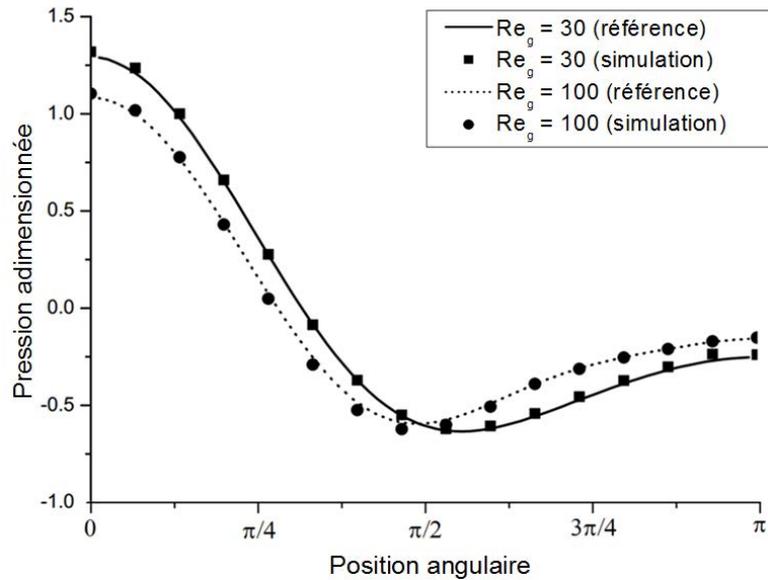


Figure III-14 : Pression adimensionnée à la surface de la goutte.

La validation de la vitesse de la surface de la goutte, de sa traînée, de la pression à sa surface et de sa vorticit  permet d'utiliser les r sultats de la phase fluide comme donn es d'entr e pour la r solution de la phase dispers e. La prochaine  tape de v rification et de validation concerne la mod lisation du mouvement des particules d'a rosol.

III.5.2 Mouvement brownien d'une particule d'a rosol

Le d placement des particules d'a rosol est obtenu gr ce au sch ma explicite de Mohaupt *et al.* (Mohaupt *et al.*, 2011)(cf II.6). La validit  du mouvement brownien est v rifi e via son d placement quadratique moyen au temps long (cf Equation III-17). Pour ce faire, des particules d'a rosol sont inject es   vitesse nulle dans un fluide au repos. En absence de vitesse initiale et de force induite par le fluide environnant, le mouvement de la particule d'a rosol n'est d  qu'  son agitation brownienne. Ainsi, en comparant le d placement quadratique moyen de la particule d'a rosol   son d placement quadratique moyen brownien th orique, il est possible de v rifier la mod lisation de la diffusion brownienne des particules d'a rosol. Le Tableau suivant (Tableau III-3) compare les r sultats de mod lisation au d placement quadratique moyen obtenu via l'Equation III-17.

Le Tableau III-3 montre que l' cart relatif (Equation III-20) entre les deux valeurs du d placement quadratique moyen au temps long des particules d'a rosol est inf rieur   1,1%. Ainsi, la composante brownienne du d placement des particules d'a rosol est valid e.

Apr s s' tre assur  que le mouvement des particules d'a rosol est correctement mod lis , des efficacit s de capture peuvent  tre obtenues. Toutefois, la v rification de la m thode de mod lisation du m canisme de capture et la validation des mod lisations doivent  tre r alis es avant de consid rer les r sultats d'efficacit  de capture calcul s comme  tant corrects.

Tableau III-3 : Comparaison du déplacement quadratique moyen au temps long d'une particule d'aérosol dû à son mouvement brownien ($T_f = 290K$, $P = 101325 Pa$). Le nombre de pas de temps utilisé pour la modélisation est constant (10^3) mais la durée de la modélisation ne l'est pas.

d_p [μm]	$\frac{\Delta t}{\tau_p}$	Durée modélisée [s]	$\sqrt{X_p^2}$ [μm]		Ecart [%]
			Modèle	Théorie	
10^{-3}	1	$7,55 \cdot 10^{-7}$	5,08	5,11	0,6
	10^3	$7,55 \cdot 10^{-4}$	$1,62 \cdot 10^2$	$1,62 \cdot 10^2$	0,4
10^{-2}	1	$7,71 \cdot 10^{-6}$	1,64	1,65	0,8
	10^3	$7,71 \cdot 10^{-3}$	$5,23 \cdot 10^1$	$5,22 \cdot 10^1$	0,1
10^{-1}	1	$9,70 \cdot 10^{-5}$	$6,51 \cdot 10^{-1}$	$6,57 \cdot 10^{-1}$	0,1
	10^3	$9,70 \cdot 10^{-2}$	$2,09 \cdot 10^1$	$2,08 \cdot 10^1$	0,7
1	1	$3,71 \cdot 10^{-3}$	$8,00 \cdot 10^{-1}$	$7,95 \cdot 10^{-1}$	0,7
	10^3	3,71	$2,52 \cdot 10^1$	$2,51 \cdot 10^1$	0,4
10^1	1	$3,20 \cdot 10^{-1}$	2,18	2,16	0,8
	10^3	$3,20 \cdot 10^2$	$6,83 \cdot 10^1$	$6,84 \cdot 10^1$	0,2

III.5.3 Efficacité de capture unitaire

La comparaison des efficacités de capture obtenues par modélisation pour les deux cas limites de particules d'aérosol (particules d'aérosol browniennes et particules d'aérosol inertielles) avec des résultats de référence apporte une validation supplémentaire de la méthode de modélisation. Les comparaisons sont réalisées à partir des valeurs des noyaux de capture.

Pour les particules d'aérosol ne subissant que la capture brownienne, les résultats de modélisation sont comparés au noyau théorique donné par Wang (Equation III-21, (Wang *et al.*, 1978)).

$$K_B = \pi d_g Sh D_B \quad . \quad (III-21)$$

Pour les particules d'aérosol uniquement capturées par les phénomènes inertiels, les résultats sont comparés à la corrélation mise en place par Mohebbi *et al.* à partir de données expérimentales (Equation III-22, (Mohebbi *et al.*, 2003)).

$$K_I = \frac{\pi}{4} (d_g + d_p)^2 u_g \left(\frac{St_p}{1 + St_p} \right)^{0,759 St_p^{-0,245}} \quad . \quad (III-22)$$

La Figure III-15 présente la comparaison entre les données du noyau de capture obtenues par modélisation et les données de référence pour une particule d'aérosol ayant un diamètre aérodynamique de 2nm ou de 20 μm et un nombre de Reynolds de goutte compris entre 1 et 100. Pour réaliser cette comparaison, le noyau de capture obtenu grâce aux particules d'aérosol de 2nm de diamètre est divisé par le noyau de capture brownienne afin de définir le rapport K_{mod}/K_B . Le même calcul est réalisé au sujet des particules d'aérosol de 20 μm de diamètre et du noyau de capture inertielle de Mohebbi *et al.* (Mohebbi *et al.*, 2003) afin de définir K_{mod}/K_I .

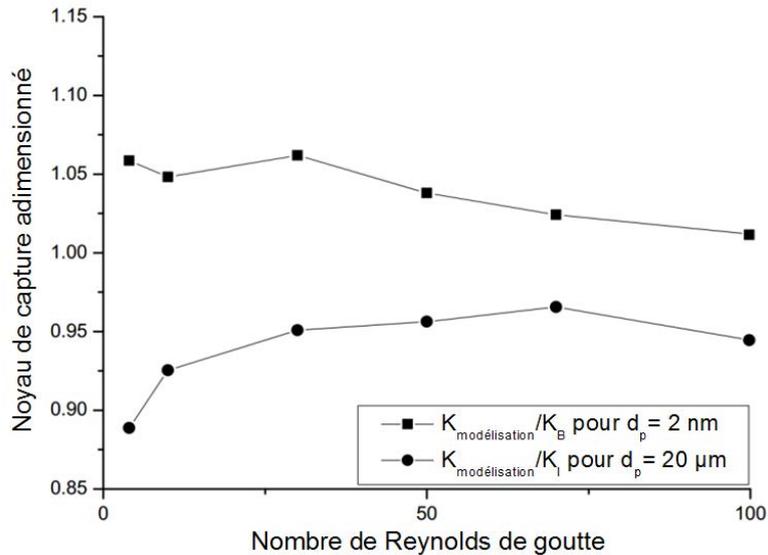


Figure III-15: Rapport entre noyau de capture obtenu par modélisation et le noyau de capture de référence en fonction du nombre de Reynolds de goutte. $T_f = 298 \text{ K}$, $P = 101325 \text{ Pa}$.

La Figure III-15 montre que l'écart entre les noyaux de capture dans le cas relatif à la capture brownienne est inférieur à 5%. Cet écart atteint 13% lorsque la comparaison est réalisée pour la capture inertielle. En considérant la précision des corrélations et des données sur lesquelles elles sont basées, les différences obtenues au niveau des noyaux de capture sont acceptables. On constate une apparente décroissance de l'écart avec l'augmentation du nombre de Reynolds de la goutte. Cependant, la précision des données de référence empêche de conclure quant à l'évolution de l'écart en fonction du nombre de Reynolds de goutte. En effet, la précision du noyau brownien K_B est limitée par la corrélation du nombre de Sherwood proposée par Wang (Wang *et al.*, 1978). Cette corrélation a été établie à partir des travaux expérimentaux de Beard *et al.* (Beard and Pruppacher, 1971) relatifs à de la vapeur d'eau présentant un petit nombre de Schmidt ($S_c = 0,71$) et pour un nombre de Reynolds de la goutte supérieur à 2,5. Dans les cas d'applications présentés dans ce manuscrit, le nombre de Schmidt des particules d'aérosol est supérieur à 10. De plus, les auteurs indiquent que l'incertitude de leur corrélation atteint 4% pour les plus petits nombres de Reynolds de goutte testés. De façon analogue, la corrélation de K_I est basée sur des données expérimentales (Walton and Woolcock, 1960) obtenues pour $Re_g > 65$ et présentant des écarts de près de 20% par rapport à la corrélation.

III.5.4 Conclusion partielle

La validation des différents modèles (écoulement d'air et d'eau, dynamique des particules d'aérosol et capture de celles-ci) a été réalisée en trois phases. La première phase a concerné la goutte d'eau : des résultats de traînée, de vorticit , de vitesse et de pression   sa surface ont  t  compar s   des donn es de la litt rature. Ensuite, la validation de la mod lisation de la dynamique des particules d'aérosol a  t  effectu e par l'interm diaire de l' tude du mouvement brownien de celles-ci. Pour finir, des r sultats d'efficacit  de capture unitaire ont  t  confront s   des r sultats de r f rence provenant de la litt rature.

Une fois ces validations du mod le r alis es, il est possible de l'utiliser pour calculer le d placement de particules d'aérosol autour d'une goutte.

III.6 Résultats et discussion de l'approche microphysique

La vérification de l'implantation du modèle microphysique de capture et la validation des calculs permet d'utiliser la technique de modélisation présentée précédemment pour obtenir de nouvelles données relatives au couple particule d'aérosol-goutte dont les variables sont d_p ; (d_g, Re_g) . Ainsi, des informations sur le lieu de capture des particules d'aérosol au niveau de la surface de la goutte permettent de tracer une cartographie des zones de capture préférentielles. Des valeurs d'efficacité de captures unitaires sont disponibles grâce aux modélisations microphysiques et peuvent donc servir de données de référence pour la mise en place d'une corrélation rendant possible la définition d'un noyau de collecte général.

III.6.1 Zones de collecte préférentielle

Les différentes modélisations ont mis en avant les zones de collectes préférentielles en fonction de chaque situation. Ces zones de capture préférentielles sont obtenues grâce aux positions finales des particules d'aérosol capturées par la goutte. La Figure III-16 présente les zones de capture préférentielles en traçant le flux de particules d'aérosol capturées φ en fonction de la position angulaire β autour de la goutte. Ce flux représente le nombre de particules d'aérosol qui a été collecté, par unité de temps et de surface, sur un segment sphérique de la surface de la goutte. Chaque segment sphérique utilisé dans la Figure ci-dessous est positionné sur la surface de la goutte par sa position angulaire par rapport au point d'arrêt à l'amont de la goutte et au centre de celle-ci. Les segments sont obtenus en découpant la surface de la goutte en parts présentant des angles de même amplitude. Sur la Figure III-16, le flux φ est normalisé par $\bar{\varphi}$ qui est le flux moyen de particules d'aérosol déposées. Ce flux moyen correspond au flux de particules d'aérosol qui seraient collectées au niveau de chaque segment sphérique si la répartition des particules d'aérosol était homogène au niveau de la surface de la goutte. Pour obtenir le flux φ , il suffit de répartir les particules d'aérosol collectées sur les différents segments en fonction de leur position finale sur la surface de la goutte. Dans les cas présentés, la concentration en particules d'aérosol à l'entrée du domaine de modélisation est fixée à 1.

Dans la Figure III-16, les zones de capture préférentielles sont présentées en fonction du diamètre aérodynamique des particules d'aérosol (Figure III-16 A) et du nombre de Reynolds de la goutte (Figure III-16 B). Il peut ainsi être remarqué que, lorsque le diamètre des particules d'aérosol augmente, la zone de capture préférentielle migre vers la face amont de la goutte. Ceci est dû à la capture inertielle prédominant de plus en plus la capture brownienne. Même dans le cas où la capture inertielle est prédominante, peu de particules d'aérosol sont capturées sur la zone proche du point d'arrêt amont de la goutte. Ceci s'explique par la présence d'une vitesse axiale du fluide nulle au niveau du point d'arrêt et d'une vitesse radiale, dans le système de coordonnées cylindrique de la Figure III-4, qui est importante dès lors que l'on n'est plus sur la ligne de courant qui mène au point d'arrêt. Cette vitesse radiale dévie facilement les particules d'aérosol de leur trajectoire. Pour les petits nombres de Reynolds de la goutte ($Re_g < 50$) et à diamètre de particules d'aérosol constant ($d_p = 1\mu m$), plus le nombre de Reynolds de la goutte augmente, plus le nombre de Stokes augmente. Par conséquent, les particules d'aérosol ne suivent pas les lignes de courant et sont capturées près du point d'arrêt par interception ou impaction. Dès lors que le nombre de Reynolds dépasse 20, une zone de recirculation se forme à l'aval de la goutte (Wang *et al.* remarquent aussi ce phénomène dans leur article (Wang *et al.*, 1978)). Par conséquent, les lignes de courant amont n'atteignent pas la surface aval de la goutte et les particules d'aérosol ne sont pas significativement capturées dans cette zone.

Ainsi, la zone préférentielle de capture se déplace vers l'amont de la goutte. Des particules d'aérosol peuvent aussi être capturées sur la partie aval de la goutte par l'intermédiaire de la capture arrière (cf, II.1.2.e.ii). Cependant, les cartographies de captures (Figure III-16) ne présentent pas ce mécanisme de capture. En effet, la capture arrière n'est plus un phénomène négligeable lorsque le nombre de Reynolds de la goutte d'eau est supérieur à environ 300, donc au-delà de la gamme de nombre de Reynolds étudiée ici.

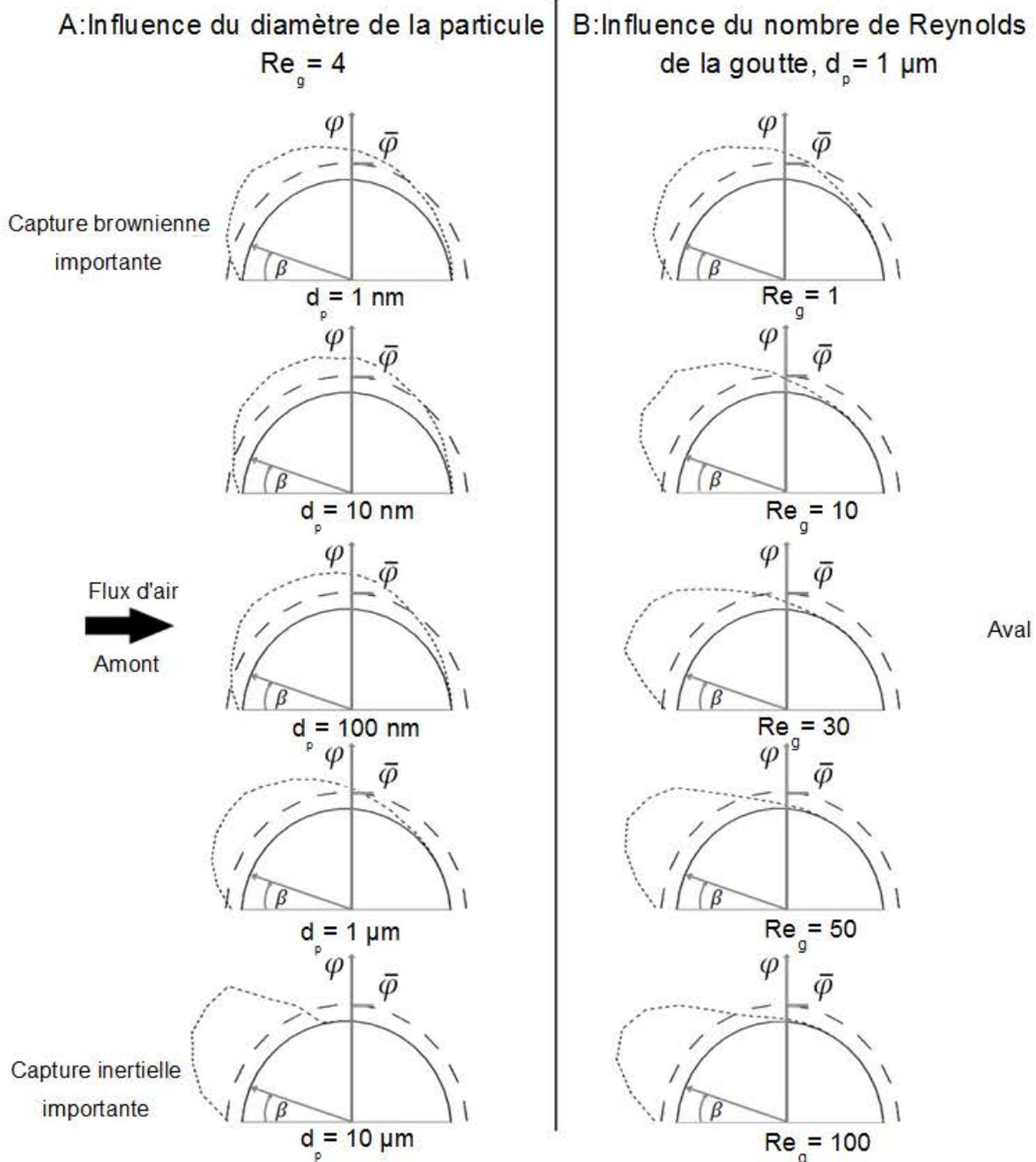


Figure III-16: Flux de particules d'aérosol collectées φ (pointillés) et flux angulaire moyen $\bar{\varphi}$ (tirets) en fonction du diamètre aérodynamique de la particule d'aérosol ($Re_g = 4$ (A)) et en fonction du nombre de Reynolds de la goutte ($d_p = 1 \text{ } \mu\text{m}$ (B)). Les calculs ont été réalisés sur 50 segments sphériques et β correspond à la position angulaire.

Le fait de connaître le flux de particules d'aérosol capturées par la goutte rend aussi possible le calcul de l'efficacité de collecte.

III.6.2 Efficacité de collecte

Les résultats d'efficacité de collecte obtenus par modélisation microphysique peuvent être comparés à des résultats de la littérature. La Figure III-17 présente les résultats issus des modélisations microphysiques, les données du modèle trajectoriel de Grover (Grover *et al.*, 1977), le noyau de collecte de Wang K_W (Equation III-28, (Wang *et al.*, 1978)), la corrélation du noyau de capture de Mohebbi K_I (Equation III-22, (Mohebbi *et al.*, 2003)) et le noyau de collecte de Slinn K_S (Equation III-23, (Slinn, 1977)). Puisque les forces phorétiques et électrostatiques sont inexistantes dans la modélisation microphysique, le noyau de Wang K_W (Equation III-28) peut être remplacé par sa forme limite, le noyau K_B (Equation III-21).

Le noyau de capture de Slinn K_S prend en compte la capture par diffusion brownienne, interception et impaction, suivant :

$$K_S = \frac{\pi}{4} (d_g + d_p)^2 u_g (E_{diff} + E_{int} + E_{imp}) , \quad (III-23)$$

avec E_{diff} l'efficacité de capture par diffusion (Equation III-24), E_{int} l'efficacité de capture par interception (Equation III-25) et E_{imp} celle par impaction (Equation III-26). Elles sont définies ci-dessous :

$$E_{diff} = \frac{4}{Re_g Sc_p} (1 + 0,4 Re_g^{1/2} Sc_p^{1/3}) , \quad (III-24)$$

l'efficacité de capture par interception est donnée par :

$$E_{int} = 4 \frac{d_p}{d_g} \left(\frac{d_p}{d_g} + \frac{1 + 2 \frac{(d_p \mu_g)}{(d_g \mu_f)}}{1 + \frac{\mu_g}{\mu_f} Re_g^{-1/2}} \right) , \quad (III-25)$$

et l'efficacité de capture par impaction est donnée par :

$$E_{imp} = \left(\frac{2St_p - S^*}{2/3 + 2St_p - S^*} \right)^{3/2} , \quad (III-26)$$

avec S^* défini comme :

$$S^* = \frac{\frac{12}{10} + \frac{1}{12} \ln(1 + Re_g)}{1 + \ln(1 + Re_g)} . \quad (III-27)$$

La Figure III-17, en traçant les valeurs du noyau de capture en fonction du diamètre aérodynamique d'une particule d'aérosol, montre que les résultats de la modélisation sont proches de

ceux de Wang *et al.* pour les particules d'aérosol non inertielles. De plus, les résultats de Mohebbi *et al.* et ceux obtenus lors des modélisations sont similaires pour les particules d'aérosol inertielles. Il peut aussi être noté que les résultats obtenus par modélisation microphysique sont semblables aux données de Grover *et al.*, sauf pour les particules d'aérosol du minimum de Greenfield (pour lesquelles le noyau de capture est le plus faible car ces particules d'aérosol sont semblables à des traceurs gazeux qui ne dévient que faiblement des lignes de courant contournant la goutte (Greenfield, 1957)). Le fait que Grover *et al.* obtiennent des valeurs plus faibles que cette étude peut être expliqué par le fait que Grover *et al.* ont négligé le mouvement brownien dans leurs travaux. Cette Figure montre aussi que le noyau de Slinn et les données de cette étude ne sont pas comparables. Par ailleurs, plusieurs auteurs ont publié des articles décrivant le noyau de Slinn comme conduisant à des résultats imprécis (Laakso *et al.*, 2003; Volken and Schumann, 1993).

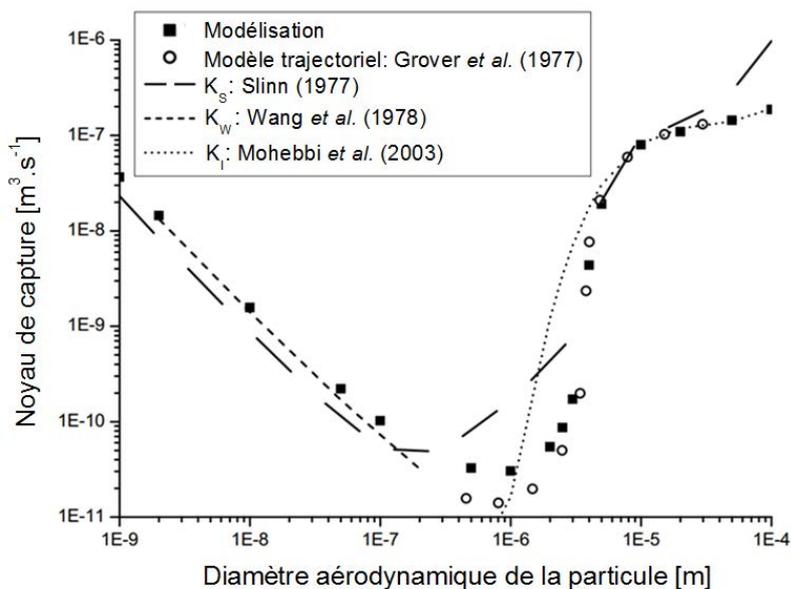


Figure III-17: Noyau de capture en fonction du diamètre aérodynamique de la particule d'aérosol. $Re_g = 30$.

Les Figures III-18 et III-19 permettent de tirer les mêmes conclusions des comparaisons des données de la littérature avec les noyaux de captures obtenues par modélisation microphysique dans le cas d'un nombre de Reynolds de goutte égal à 4 et à 100. Dans ces Figures, le noyau de capture est donné en fonction du diamètre aérodynamique des particules d'aérosol.

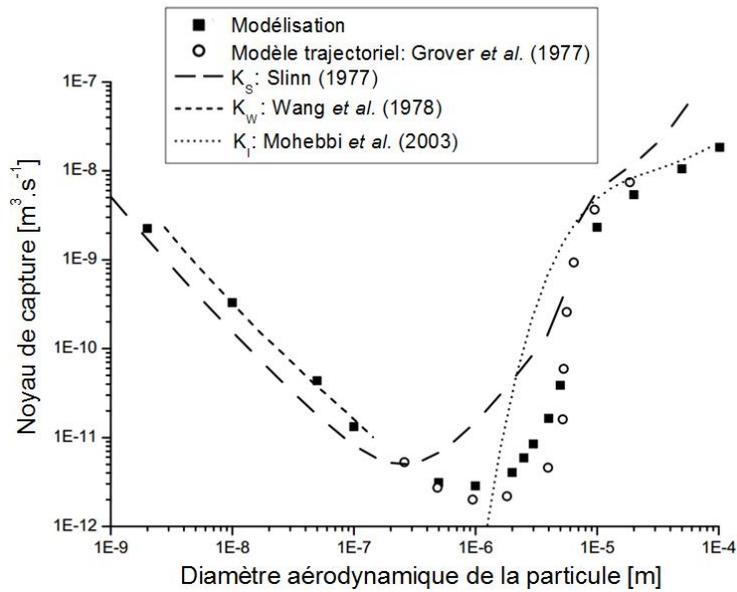


Figure III-18: Noyau de capture en fonction du diamètre aérodynamique de la particule d'aérosol. $Re_g = 4$.

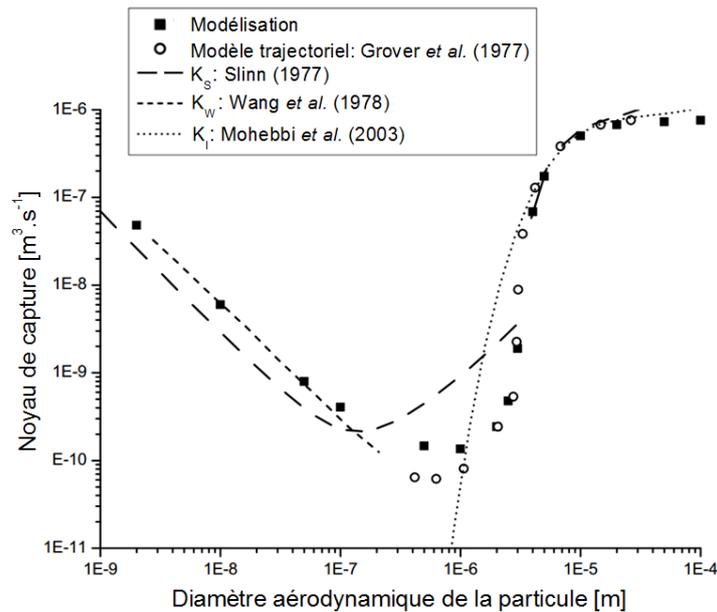


Figure III-19: Noyau de capture en fonction du diamètre aérodynamique de la particule d'aérosol. $Re_g = 100$.

Les modélisations microphysiques mises en place pour obtenir des données de capture unitaire de particules d'aérosol par une goutte ont amélioré la précision des efficacités de capture pour une gamme de particules d'aérosol ayant un diamètre compris entre 1nm et 100 μ m et une gamme de goutte d'eau présentant un nombre de Reynolds de goutte compris entre 1 et 100 ($d_g \in [80; 600]\mu$ m).

III.6.3 Dérivation d'une corrélation pour le noyau de capture

Les efficacités de capture unitaires obtenues via la modélisation microphysique servent de base à la mise en place d'une corrélation menant à l'obtention d'un noyau de capture plus général. Ceci permet d'utiliser plus simplement ces nouvelles données dans une simulation macroscopique

d'abattage humide, en utilisant le noyau de capture comme terme puits dans une équation de conservation de la concentration en particules d'aérosol.

La corrélation proposée ici a pour objectif d'améliorer le noyau de capture de Wang (Wang *et al.*, 1978) en lui permettant de ne plus modéliser uniquement la capture brownienne, phorétique et électrostatique mais de prendre aussi en compte la capture inertielle (interception et impaction). Le noyau de collecte de Wang (rappelé ici en Equation III-28) dépend de plusieurs variables dont le nombre de Sherwood Sh . Ce nombre adimensionnel correspond au ratio de transfert de masse par convection par rapport au transfert de masse par diffusion. Lorsque l'écoulement autour de la goutte se fait à un nombre de Reynolds de goutte très faible ($Re_g \ll 1$), le champ de concentration en particules d'aérosol autour de celle-ci présente une symétrie sphérique centrée sur le centre de la goutte. Dès lors que le nombre de Reynolds de goutte augmente, le champ de concentration particulaire se déforme et ne possède plus cette symétrie sphérique. Le fait que le nombre de Sherwood permette de prendre en compte la déformation du champ de concentration en aérosol autour de la goutte à mesure que le nombre de Reynolds de la goutte augmente, permet de considérer partiellement l'effet de la convection sur la capture. De façon analogue, lorsque l'inertie des particules d'aérosol devient non négligeable, leur champ de concentration autour de la goutte s'éloigne du cas où le champ de concentration présente une symétrie sphérique. Ainsi, la modification du nombre de Sherwood, grâce à une corrélation réalisée à partir des efficacités de captures obtenues précédemment, semble être possible pour permettre au noyau de Wang de prendre en compte la capture inertielle.

$$K_w = \frac{C_w}{\frac{C_w}{e^{\pi Sh D_B d_g} - 1}} , \quad (\text{III-28})$$

avec C_w donné par l'Equation II-38.

L'analyse dimensionnelle réalisée pour cette étude a mis en évidence deux principaux nombres sans dimension reflétant le caractère inertiel d'une situation de capture. Ces deux grandeurs sont le nombre de Stokes de la particule d'aérosol St_p qui caractérise la capacité de la particule d'aérosol à suivre les lignes de courant et le nombre de Reynolds de la goutte Re_g qui renseigne sur la turbulence de l'écoulement autour de celle-ci. Ces deux nombres sont utilisés pour définir une corrélation du nombre de Sherwood Sh' permettant au noyau K_w de prendre en compte la capture inertielle.

La corrélation développée doit valider deux cas limites : celui d'une capture sans inertie et celui d'une capture très inertielle. Ainsi, lorsque la particule d'aérosol ne présente aucune inertie, la corrélation doit correspondre au nombre de Sherwood déjà implanté dans le noyau de Wang (Equation III-29). Dans le cas d'une capture très inertielle, la corrélation doit tendre vers le cas d'une capture balistique (Equation III-30). Des informations sur l'obtention de l'expression du nombre de Sherwood dans le cas du régime balistique sont données en annexe 1.

La limite de la corrélation, lorsque le nombre de Stokes de la particule d'aérosol tend vers zéro, doit correspondre à :

$$\lim_{St \rightarrow 0} Sh' = Sh \quad . \quad (III-29)$$

De façon complémentaire, lorsque le nombre de Stokes de la particule d'aérosol tend vers l'infini, la limite de la corrélation doit correspondre à :

$$\lim_{St \rightarrow \infty} Sh' = Sh^{inf} = \frac{(d_g + d_p)^2 \mu_f Re_g}{4 d_g^2 D_B \rho_f} \quad . \quad (III-30)$$

Dans le régime intermédiaire de calcul, l'expression de la corrélation obéit à (Equation III-31) :

$$Sh'(Re_g, St_p, Sc) = Sh(Re_g, Sc) \cdot F(St_p) + G(Re_g, St_p) \quad , \quad (III-31)$$

avec $F(St_p)$ donné par l'Equation III-32 et $G(Re_g, St_p)$ exprimé dans l'Equation III-33. Ces deux équations ont été obtenues grâce à la corrélation des efficacités de captures obtenues durant les modélisations microphysiques des captures unitaires de particules d'aérosol par une goutte d'eau.

$$F(St_p) = \left(\frac{1 + 2 St_p^{0,43}}{1 + St_p^{0,43}} \right)^{12} \quad . \quad (III-32)$$

$$G(Re_g, St_p) = Sh^{inf} \left(\frac{7,39 St_p^{0,87}}{1 + 7,39 St_p^{0,87}} \right)^{12 - 2 \log_{10}(Re_g)} \quad . \quad (III-33)$$

Le noyau de Wang K_w est remplacé par le noyau K_{w_c} qui dépend de la corrélation de Sh' (Equation III-34).

$$K_{w_c} = \frac{C_w}{e^{\frac{C_w}{\pi Sh' D_B d_g}} - 1} \quad . \quad (III-34)$$

La Figure III-20 présente les valeurs de K_{w_c} pour un nombre de Reynolds de goutte de 30 et une humidité relative Hr de 50 et de 100% en fonction du diamètre aérodynamique d'une particule d'aérosol. Ces résultats sont comparés avec les données du noyau de Wang (Wang *et al.*, 1978) et du modèle trajectorien de Grover (Grover *et al.*, 1977). Cette Figure montre que la dépendance du noyau de capture à l'humidité relative prédite par Wang (Wang *et al.*, 1978) et Grover (Grover *et al.*, 1977) est prise en compte par la corrélation pour K_{w_c} . En effet, lorsque l'humidité relative diminue, les valeurs de référence du noyau de capture augmentent pour des particules d'aérosol dont le diamètre

est compris entre 10 nm et 3 μm environ. Cette évolution est aussi suivie par le noyau de capture défini ici K_{wc} .

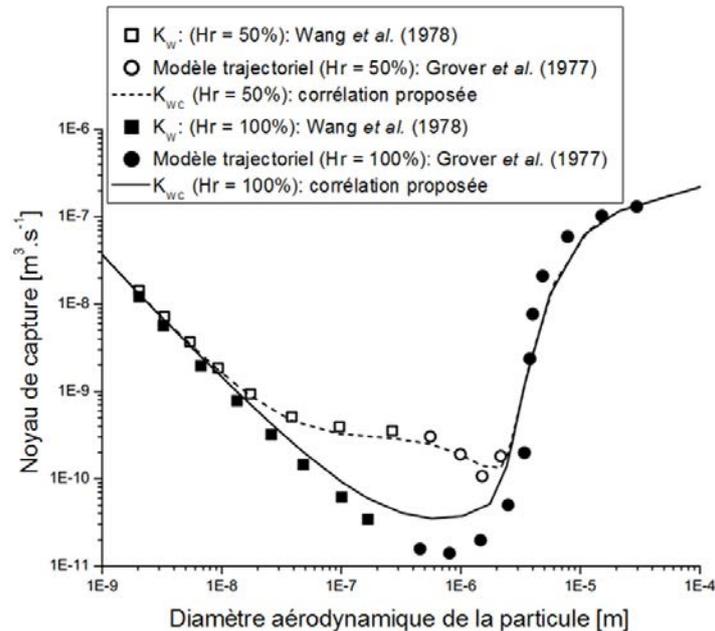


Figure III-20: Noyau de capture en fonction du diamètre aérodynamique de la particule d'aérosol. $Re_g = 30$ et $H_r \in [50; 100]\%$.

Le noyau de Wang ainsi modifié est utilisable pour modéliser la capture brownienne, phorétique, électrostatique et inertielle de particules d'aérosol par une goutte d'eau pour la gamme investiguée dans cette étude, ce qui rend ce travail original.

III.7 Points clefs de ce chapitre

L'objectif de ce chapitre était d'obtenir des efficacités de capture E_c comblant le manque certain de données de référence disponibles dans la littérature pour la plage d'intérêt de cette étude (diamètre aérodynamique de particules d'aérosol $d_p \in [1 \text{ nm}; 100 \mu\text{m}]$, diamètre de gouttes $d_g \in [80; 600] \mu\text{m}$ et nombre de Reynolds de goutte $Re_g \in [1; 100]$). Ainsi, un modèle microphysique de la capture unitaire de particules par une goutte d'eau isolée a été développé. Il représente une goutte tombant à sa vitesse limite de chute u_g^{chute} dans de l'air chargé en particules d'aérosol. Dans ce modèle, les particules sont modélisées via une approche lagrangienne stochastique reposant sur la résolution d'une équation de type Langevin. Les données de capture ainsi obtenues ont permis de combler le manque de données relatives à l'efficacité de capture de particules d'aérosol par une goutte. Ces nouveaux résultats ont rendu possible la définition, par corrélation, d'un noyau de capture prenant en compte simultanément la capture brownienne, phorétique, électrostatique et inertielle pour la gamme étudiée dans cette thèse. Une évaluation de l'extension de ce noyau de capture est détaillée dans l'annexe 2.

Le prochain chapitre est consacré à la mise en place d'une simulation macrophysique de l'abattage humide comme procédé d'assainissement de l'air.

IV.Simulation macrophysique

IV.1 Introduction

Ce chapitre est dédié à la présentation de la méthode de simulation macroscopique de l'abattage humide comme procédé d'assainissement de l'air. Cette simulation, à l'échelle du procédé, permet de calculer l'efficacité de dépollution de l'air liée à l'utilisation d'une pulvérisation de gouttes d'eau. La simulation employée à cet effet est une simulation triphasique prenant en compte les grandeurs macroscopiques de la situation étudiée qui peuvent évoluer dans le temps (état instationnaire, évaporation des gouttes d'eau,...). Au sein de cette simulation numérique, les gouttes d'eau sont étudiées via un point de vue lagrangien, tandis qu'un point de vue eulérien est considéré pour l'air et les particules d'aérosol. Ainsi, le phénomène de capture est pris en compte à travers une équation de transport de la concentration en particules d'aérosol, par l'intermédiaire d'un terme puits dans lequel est implémenté le noyau de capture obtenu dans le chapitre précédent K_{Wc} .

IV.2 Champ d'application et hypothèses de simulation

Le champ d'application de la simulation numérique est choisi pour couvrir les situations couramment rencontrées lors des études d'hygiène industrielle. Ainsi, les caractéristiques de l'air correspondent aux conditions ambiantes généralement rencontrées : la pression atmosphérique est d'environ 1 bar, la température de l'air est supérieure à 0 degré Celsius mais bien inférieure à la température d'ébullition de l'eau, l'hygrométrie ambiante varie entre 0 et 100% et l'écoulement d'air est incompressible (faible nombre de mach) mais potentiellement dilatable (variation maximale de la densité de l'air de 6%). La pollution considérée est uniquement composée de particules d'aérosol solides, indéformables et passives de diamètre aérodynamique compris entre 1 nm et 100 μm . Ce diamètre est supposé petit par rapport au diamètre des gouttes. Ceci permet de supposer que la collision entre une particule d'aérosol et une goutte mène à la capture de la particule d'aérosol et que la capture d'une particule d'aérosol par une goutte ne modifie pas les caractéristiques physiques de la goutte telles que sa tension superficielle, sa densité ou son diamètre. La population de particules d'aérosol peut être polydisperse pour être représentative des phénomènes physiques liés aux situations d'intérêt. Les particules d'aérosol ont des fractions volumiques inférieures à 10^{-4} (ce qui correspond à une suspension diluée). Les gouttes pulvérisées par le dispositif d'abattage humide sont uniquement composées d'eau et la capture de particule par une goutte est supposée ne pas entraîner des modifications de son hydrodynamique. La fraction volumique en goutte est également inférieure à 10^{-4} donc les phénomènes de collisions et de coalescence sont, dans un premier temps, négligés. De plus, les gouttes ne se fragmentent pas. Par ailleurs, la déformation des gouttes d'eau est considérée comme négligeable. D'autre part, les gouttes d'eau ne sont pas constamment à leur vitesse terminale de chute u_g^{chute} mais le nombre de Reynolds des gouttes d'eau est supposé compris entre 1 et 100, conformément aux observations réalisées dans le chapitre III. Ce critère est vérifiable a posteriori. Les phénomènes d'évaporation et de condensation de l'eau ont une influence sur le diamètre et la masse des gouttes d'eau, sur la fraction de vapeur d'eau dans l'air et sur la température de l'air et des gouttes. Mais l'ébullition des gouttes n'est pas traitée dans cette étude.

IV.3 Aperçu de la modélisation physique proposée

IV.3.1 Modélisations des phases et de leurs interactions

Les trois modélisations utilisées pour l'air, les particules d'aérosol et les gouttes sont décrites dans les paragraphes suivants.

IV.3.1.a Modélisation de la phase porteuse

L'air joue ici le rôle de phase porteuse. Son écoulement est modélisé via une approche eulérienne qui consiste à décrire le champ de vitesse de la phase continue en résolvant les équations de Navier-Stokes moyennées sur la grille mise en place pour la simulation. A cet effet, l'écoulement du fluide porteur est résolu via une approche RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes Simulation). Ainsi, les grandeurs obtenues sont les grandeurs moyennes de l'écoulement (vitesse moyenne, pression moyenne,...). Puisque les équations de l'approche RANS ne sont pas fermées, il est nécessaire d'utiliser un modèle de turbulence. Le modèle choisi ici est le modèle de fermeture $k - \varepsilon$ « Realizable » (Shih et al., 1995). L'utilisation d'une approche RANS a été largement validée dans la littérature pour simuler l'écoulement d'air dans un local ventilé ou une conduite (Chen et al., 2006; Holmberg and Li, 1998; Lai et al., 2008; Zhao et al., 2008).

Le système d'équations (Système IV-1) présente les diverses équations de l'approche RANS $k - \varepsilon$ avec la fermeture « Realizable » utilisées pour résoudre la dynamique de l'air ainsi que la loi d'état employée pour obtenir la densité de l'air. En effet, la particularité de notre étude est que les caractéristiques intrinsèques du fluide, essentiellement sa densité et sa température, peuvent changer au cours du temps en raison de l'évaporation des gouttes d'eau.

Le système (IV-1) est détaillé ci-dessous. Dans ces équations, ρ_f est la densité du gaz multi-composant, μ_T est la viscosité turbulente (Equation IV-2), \mathbf{u}_f est le vecteur vitesse de l'air, P est la pression du gaz considéré, $\nabla \mathbf{u}_f^T$ est la transposée de $\nabla \mathbf{u}_f$, δ_{ij} est le symbole de Kronecker, \mathbf{g} est le vecteur gravité, E est l'énergie totale, λ_{c_f} (resp. λ_{t_f}) est la conductivité thermique (resp. conductivité turbulente) de l'air, T_f est la température du fluide porteur, Y_{H_2O} est la fraction massique en vapeur d'eau dans l'air, D_{B_f} (resp. D_{T_f}) est la diffusivité moléculaire (resp. diffusivité turbulente) du gaz, R est la constante universelle des gaz parfaits, M_{H_2O} (resp. M_{air}) est la masse molaire de l'eau (resp. de l'air) et $C_{S_f}^{H_2O}$ (resp. $C_{S_f}^{airsec}$) est la chaleur spécifique de la vapeur d'eau (resp. air sec), k la variation de l'énergie cinétique turbulente, σ_k le nombre de Prandtl turbulent pour k , G_k le terme source d'énergie turbulente dû au gradient de vitesse moyenne (Equation IV-3), ε le taux de dissipation de l'énergie turbulente, σ_ε le nombre de Prandtl turbulent pour ε et C_2 une constante du modèle de turbulence. De plus, Γ_f est le terme source décrivant les échanges de masse de vapeur d'eau par évaporation-condensation des gouttes (détaillé dans l'Equation IV-4), Γ_g^{rainee} est le terme source décrivant les échanges de quantité de mouvement avec les gouttes par frottement (Equation IV-5), Γ_g^{evap} est le terme d'échange de quantité de mouvement dû à la production de vapeur d'eau (Equation IV-5) et Γ_g^{temp} est le terme d'échange d'énergie entre l'air et les gouttes d'eau par convection-diffusion et changement de phase (Equation IV-3). Pour finir, $H_{H_2O} = \int_{T_{ref}}^{T_f} C_{S_f}^{H_2O} dT_f$ est l'enthalpie sensible de la

vapeur d'eau, avec $T_{ref} = 298,15K$; $\boldsymbol{\varphi}_{H2O} = -\left(\rho_f D_{vap} + \frac{\nu_t}{Sc_t}\right) \nabla Y_{H2O}$ est le flux de diffusion de la vapeur d'eau, avec ν_t la viscosité turbulente et Sc_t le nombre de Schmidt turbulent.

Conservation de la masse :

$$\frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \mathbf{u}_f) = \Gamma_f \quad (a)$$

Conservation de la quantité de mouvement :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_f \mathbf{u}_f}{\partial t} + \mathbf{u}_f \nabla \cdot (\rho_f \mathbf{u}_f) \\ = -\nabla P + \nabla \cdot \left[(\mu_f + \mu_T) \left(\nabla \mathbf{u}_f + \nabla \mathbf{u}_f^T - \frac{2}{3} \delta_{ij} \nabla \mathbf{u}_f \right) \right] + \Gamma_g^{trainee} \\ + \Gamma_g^{evap} + \rho_f \mathbf{g} \end{aligned} \quad (b)$$

Conservation de l'énergie totale :

$$\frac{\partial \rho_f E}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_f (\rho_f E + P)) = \nabla \cdot \left[(\lambda_{cf} + \lambda_{tf}) \nabla T_f - H_{H2O} \cdot \boldsymbol{\varphi}_{H2O} \right] + \Gamma_g^{temp} \quad (c)$$

Conservation de la masse de la vapeur d'eau :

$$\frac{\partial \rho_f Y_{H2O}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f Y_{H2O} \mathbf{u}_f) = \nabla \cdot \rho_f (D_{Bf} + D_{Tf}) \nabla Y_{H2O} + \Gamma_f \quad (d) \quad (IV-1)$$

Conservation de la variation de l'énergie cinétique turbulente :

$$\frac{\partial \rho_f k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f k \mathbf{u}_f) = \nabla \cdot \left[\left(\mu_f + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + G_k - \rho_f \varepsilon \quad (e)$$

Conservation du taux de dissipation de l'énergie turbulente :

$$\frac{d \rho_f \varepsilon}{dt} + \nabla \cdot (\rho_f \varepsilon \mathbf{u}_f) = \nabla \cdot \left[\left(\mu_f + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] - \rho_f C_2 \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{\nu_f \varepsilon}} \quad (f)$$

Lois d'état :

$$\rho_f = \frac{P}{R T_f \left(\frac{Y_{H2O}}{M_{H2O}} + \frac{1 - Y_{H2O}}{M_{air}} \right)} \quad (g)$$

$$E = Y_{H2O} \int_{T_{ref}}^{T_f} C_{Sf}^{H2O} dT_f + (1 - Y_{H2O}) \int_{T_{ref}}^{T_f} C_{Sf}^{airsec} dT_f - \frac{P}{\rho_f} + \frac{\mathbf{u}_f^2}{2} \quad (h)$$

La viscosité turbulente μ_T est donnée par l'Equation IV-2 :

$$\mu_T = \rho_f C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}, \quad (IV-2)$$

avec C_μ un terme variable dans le modèle RANS $k - \varepsilon$ « Realizable » (Annexe 3).

Le terme source d'énergie turbulente dû au gradient de vitesse moyenne G_k est donné par l'Equation IV-3 :

$$G_k = \mu_t S^2 \quad , \quad (IV-3)$$

avec $S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}$ où $S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_{fj}}{\partial x_i} + \frac{\partial u_{fi}}{\partial x_j} \right)$.

Le terme Γ_f utilisé dans les Equation (IV-1a et IV-1d) pour prendre en compte le transfert de masse dû à l'évaporation ou à la condensation des gouttes d'eau peut s'écrire sous forme discrétisée à l'échelle d'un volume de contrôle V_o suivant (Equation IV-4) :

$$\Gamma_f = \frac{1}{V_o} \sum_{\substack{\text{gouttes} \\ \text{dans } V_o}} \Delta m_g n_g \quad , \quad (IV-4)$$

avec Δm_g la variation de la masse d'une goutte d'eau lors de la traversée du volume de contrôle considéré et n_g le débit numérique de gouttes d'eau traversant la cellule de calcul.

Les termes $\Gamma_g^{trainee}$ et Γ_g^{evap} qui sont utilisés dans l'Equation (IV-1b) pour prendre en compte les transferts de quantité de mouvement via la trainée des gouttes d'eau et leur évaporation/condensation s'approximent suivant (Equation IV-5):

$$\Gamma_g^{trainee} + \Gamma_g^{evap} = \frac{1}{V_o} \sum_{\substack{\text{gouttes} \\ \text{dans } V_o}} \left[m_{g_0} \frac{18\mu_f}{\rho_g d_g^2} \frac{C_{dg} Re_g}{24} (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_{f@g}^{inst}) \Delta t + \Delta m_g u_g \right] n_g \quad , \quad (IV-5)$$

avec Δt la taille du pas de temps de calcul et $u_{f@g}^{inst}$ la vitesse instantanée du fluide porteur à la position de la goutte.

Le terme Γ_g^{temp} utilisé dans l'Equation (IV-1c) pour prendre en compte l'échange de chaleur entre la goutte et l'air durant son évaporation est égal à (Equation IV-6) :

$$\Gamma_g^{temp} = \frac{\dot{m}_{g_0}}{m_{g_0}} \left[-L_{vap}^{cond} \Delta m_g - m_g^{out} \int_{T_{ref}}^{T_f^{out}} C_{S_f^{H2O}} dT_f + m_g^{in} \int_{T_{ref}}^{T_f^{in}} C_{S_f^{H2O}} dT_f \right] \quad , \quad (IV-6)$$

où \dot{m}_{g_0} est le débit massique de gouttes d'eau, L_{vap}^{cond} est la chaleur latente obtenue pour les conditions du calcul (Equation IV-4), m_g^{in} (resp. m_g^{out}) la masse d'eau à l'entrée (resp. sortie) de la cellule de calcul et T_f^{in} (resp. T_f^{out}) la température de l'eau à l'entrée (resp. sortie) de la cellule de calcul. La chaleur

latente peut être obtenue au niveau des conditions du calcul par l'Equation IV-7 mais nous préférons utiliser celle calculée via UDF et correspondant à l'Equation IV-27.

$$L_{vap}^{cond}(T) = L_{vap}(T_{ref}) - \int_{T_{ref}}^T (Y_{H_2O} C_{S_f}^{H_2O} + (1 - Y_{H_2O}) C_{S_f}^{airsec}) dT_f + \int_{T_{ref}}^T C_{S_f}^{H_2O} dT_f , \quad (IV-7)$$

avec L_{vap} la chaleur latente de vaporisation de l'eau à T_{ref} et T la température ambiante à laquelle le changement de phase se produit.

La loi d'état pour la densité de l'air qui est présentée correspond à un gaz parfait multi-composant, ce qui correspond à nos situations d'intérêt (pression et température proches des conditions normales de température et de pression). Au niveau des conditions aux limites, l'entrée d'air correspond à une entrée à vitesse, humidité relative et température constantes. La sortie d'air obéit à une condition de pression, d'humidité relative et de température constantes. Les parois sont des parois adiabatiques.

La deuxième phase à être étudiée est la phase composée des gouttes d'eau.

IV.3.1.b Modélisation des gouttes d'eau

Les gouttes d'eau sont modélisées via une approche lagrangienne. Ainsi, chaque goutte suivie est considérée comme une particule point et l'ensemble des gouttes pulvérisées dans le domaine d'étude est représenté par un nombre plus faible de gouttes statistiquement représentatives de la population globale. La modélisation des gouttes doit permettre de connaître leur déplacement et leur variation de taille, de masse et de température dues à l'évaporation.

Dans l'approche lagrangienne, chaque trajectoire de goutte d'eau est obtenue grâce à l'Equation suivante (Equation IV-8).

$$\begin{cases} \frac{d(m_g \mathbf{u}_g)}{dt} = \sum \mathbf{F} \\ \frac{d\mathbf{x}_g}{dt} = \mathbf{u}_g \end{cases} . \quad (IV-8)$$

Le système d'équations (Système IV-9) présente les diverses équations de l'approche lagrangienne utilisées pour résoudre la dynamique des gouttes d'eau. Dans ce système, μ_f est la viscosité dynamique de l'air, ρ_g est la densité de l'eau, C_{dg} est le coefficient de trainée de la goutte d'eau, Re_g est le nombre de Reynolds de la goutte d'eau, $\mathbf{u}_{f@g}^{inst}$ est la vitesse instantanée du fluide à la position de la goutte obtenue avec un modèle de dispersion turbulente (EIM, paragraphe suivant), \mathbf{u}_g est la vitesse de la goutte d'eau, T_g est la température de la goutte d'eau, m_g est la masse de la goutte d'eau, C_{S_g} est la chaleur spécifique de l'eau, B_m est le nombre de Spalding massique (Equation IV-10), Nu est le nombre de Nusselt (Equation IV-14), Sh est le nombre de Sherwood qui correspond au ratio de transfert de masse par convection par rapport au transfert de masse par diffusion intervenant lors de l'évaporation ou de la condensation de l'eau.

Le premier terme du membre de droite de l'Equation (IV-9a) correspond à la traînée de la goutte, le deuxième à sa flottabilité et le troisième à sa variation de masse. Le premier terme du membre de droite de l'Equation (IV-9b) correspond au transfert de chaleur entre la goutte et le fluide et le deuxième correspond à l'évaporation de la goutte d'eau.

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \text{Conservation de la quantité de mouvement :} \\
 \frac{d\mathbf{u}_g}{dt} = \frac{18\mu_f}{\rho_g d_g^2} \frac{C_{dg} Re_g}{24} (\mathbf{u}_{f@g}^{inst} - \mathbf{u}_g) + \frac{\mathbf{g}(\rho_g - \rho_f)}{\rho_g} - \frac{\mathbf{u}_g}{m_g} \frac{dm_g}{dt} \quad (a) \\
 \\
 \text{Variation de la température de la goutte d'eau :} \\
 \frac{dT_g}{dt} = \frac{1}{m_g C_{sg}} \left(\pi d_g^2 (T_f - T_g) Nu \frac{\lambda_{cf} \ln(1 + B_m)}{d_g B_m} + \frac{dm_g}{dt} L_{vap} \right) \quad (b) \quad (IV-9) \\
 \\
 \text{Transfert de masse :} \\
 \frac{dm_g}{dt} = -\pi Sh D_{vap} d_g \rho_f \ln(1 + B_m) \quad (c)
 \end{array} \right.$$

Le nombre de Spalding est donné par l'équation suivante (Equation IV-10) :

$$B_m = \frac{Y_{H_2O_{surf}} - Y_{H_2O}}{1 - Y_{H_2O_{surf}}} \quad (IV-10)$$

avec $Y_{H_2O_{surf}}$ la fraction massique en vapeur d'eau à la surface de la goutte (Equation IV-11) :

$$Y_{H_2O_{surf}} = \frac{P_{sat}}{P} \frac{M_{air}}{M_{H_2O} X_{H_2O} + M_{air} (1 - X_{H_2O})} \quad (IV-11)$$

avec X_{H_2O} la fraction molaire en vapeur d'eau dans l'air (Equation IV-13) et P_{sat} la pression de vapeur saturante donnée par la formule de Clapeyron (Equation IV-12) :

$$P_{sat} = P \exp\left(\frac{L_{vap} M_{H_2O}}{R} \left(\frac{1}{T_{ebul}} - \frac{1}{T_g}\right)\right) \quad (IV-12)$$

La fraction molaire en vapeur d'eau dans l'air est définie par (Equation IV-13) :

$$X_{H_2O} = \frac{Y_{H_2O} M_{air}}{(1 - Y_{H_2O}) M_{H_2O} + Y_{H_2O} M_{air}} \quad (IV-13)$$

Le nombre de Nusselt d'une goutte d'eau peut être obtenu par le modèle de Renksizbulut et Yuen (Renksizbulut and Yuen, 1983) (Equation IV-14):

$$Nu = \frac{2 + 0,55 Re_g^{1/2} Pr^{1/3}}{(1 + B_m)^{0,7}}, \quad (IV-14)$$

avec Pr le nombre de Prandtl du fluide porteur égal à (Equation IV-15) :

$$Pr = \frac{\mu_f C_{Sf}}{\lambda_{cf}}. \quad (IV-15)$$

Ce modèle tient compte de la limitation du transfert de chaleur due au flux de vapeur isolant qui apparaît en cas d'évaporation.

Interaction gouttes-turbulence :

L'interaction entre une goutte et la turbulence de l'écoulement peut entraîner la mise en place d'un mécanisme de dispersion de la goutte d'eau. Un modèle communément employé pour décrire la dispersion des particules² dans un écoulement turbulent est le modèle EIM (Eddy Interaction Model). Ce modèle de dispersion, développé par (Hutchinson et al., 1971) et complété par (Gosman and Ioannides, 1983), est implémenté dans le logiciel de CFD Fluent®.

Le modèle EIM est un modèle stochastique grâce auquel les particules interagissent avec la vitesse instantanée du fluide porteur \mathbf{u}_f^{inst} , qui est la somme de sa vitesse moyenne \mathbf{u}_f et de sa fluctuation \mathbf{u}_f' tel que $\mathbf{u}_f^{inst} = \mathbf{u}_f + \mathbf{u}_f'$. En effet, le modèle EIM sert à générer une fluctuation de vitesse du fluide \mathbf{u}_f' à la position de la particule qui permet de reconstruire la vitesse instantanée du fluide porteur à partir de cette fluctuation de vitesse et de la vitesse moyenne du fluide obtenue via le modèle RANS $k - \varepsilon$.

L'EIM modélise la dispersion turbulente d'une particule via une succession d'interactions entre la particule et des tourbillons de longueur L_e et de durée de vie τ_e finies. A cet effet, il est supposé qu'à un temps t_0 , une particule est capturée par un tourbillon se déplaçant à une vitesse composée de la vitesse moyenne du fluide porteur \mathbf{u}_f et d'une composante aléatoire \mathbf{u}_f' jouant le rôle de fluctuation de vitesse. Lorsque le tourbillon meurt ou lorsque la particule sort du tourbillon, une autre interaction est générée avec un tourbillon différent, et ainsi de suite.

La longueur du tourbillon L_e et sa durée de vie τ_e sont obtenues par l'intermédiaire des Equations IV-16 et IV-17 :

$$L_e = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{\varepsilon}, \quad (IV-16)$$

avec k l'énergie cinétique turbulente et ε son taux de dissipation.

² Dans ce paragraphe sur les interactions gouttes-turbulence, le terme particule est employé pour désigner toute particule ponctuelle modélisée avec une approche lagrangienne, ainsi, une goutte est ici une particule.

La durée de vie du tourbillon vaut (Equation IV-17):

$$\tau_e = C_L \frac{k}{\varepsilon}, \quad (\text{IV-17})$$

avec C_μ et C_L sont deux grandeurs du modèle de turbulence RANS $k - \varepsilon$ avec $C_L = C_\mu^{3/4} \sqrt{3/2}$ et C_μ détaillé dans l'Annexe 3.

Les fluctuations de vitesse \mathbf{u}_f' sont obtenues de façon aléatoire à partir d'une distribution Gaussienne (Equation IV-18) :

$$u_{f_i}' = \xi_i \sqrt{u_{f_i}'^2}, \quad (\text{IV-18})$$

avec u_{f_i}' la composante de la vitesse \mathbf{u}_f' suivant i , ξ_i un nombre aléatoire tiré d'une distribution aléatoire normale et $\sqrt{u_{f_i}'^2}$ la moyenne quadratique locale des fluctuations de vitesse (Equation IV-19).

$$\sqrt{u_{f_i}'^2} = \sqrt{\frac{2k}{3}}, \quad (\text{IV-19})$$

quelque soit i .

On remarque que toutes les fluctuations de vitesse sont isotropes (Equation IV-19), chose connue de l'EIM (Mehel et al., 2010). Ainsi, l'utilisation de ce modèle peut avoir un impact sur la représentativité des résultats numériques. En effet, il va fortement sous-estimer l'anisotropie des fluctuations de vitesses.

L'utilisation du modèle EIM permet d'obtenir une vitesse instantanée de l'air utilisable dans les équations lagrangiennes des gouttes d'eau. Nous avons vu que le modèle RANS ne donne que des grandeurs du fluide moyennées, or, dans le suivi lagrangien, la dynamique des gouttes d'eau dépend des grandeurs instantanées du fluide porteur. Ici, l'EIM permet d'obtenir une fluctuation de vitesse qui, ajoutée à la vitesse moyenne fournie par le modèle RANS, permet d'avoir une vitesse instantanée du fluide à la vitesse de la goutte. Cependant, la température du fluide T_f employée dans l'Equation (IV-9b) est la température moyenne du fluide obtenue avec l'approche RANS et non sa température instantanée.

Les conditions limites employées correspondent à une condition de sortie du domaine est fixée au niveau de chaque paroi, de l'entrée d'air et de la sortie d'air.

La troisième phase à être étudiée est la phase composée des particules d'aérosol.

IV.3.1.c Modélisation de l'aérosol polluant

Nous supposons maintenant que l'écoulement de l'air et la dynamique des gouttes d'eau ont été résolus. Par conséquent, les statistiques de l'air telles que la pression, la vitesse, la turbulence, l'humidité relative et la température, ou encore celles des gouttes d'eau comme le diamètre, la vitesse et la température, sont connus. C'est pourquoi nous choisissons de modéliser la dynamique des particules d'aérosol avec une approche eulérienne. Ainsi, l'évolution de la phase particulaire n'est pas modélisée en calculant les trajectoires de chaque particule d'aérosol mais en décrivant le champ moyen de concentration en particules dans la phase porteuse. Pour ce faire, une équation de conservation de la concentration en particule peut être utilisée. Puisque l'aérosol est considéré comme peu inertielle, le transport de sa concentration peut être modélisé par le modèle Diffusion-Inertia de Zaichik *et al.* (Zaichik et al., 2004) (cf III). Ce modèle décrit le transport de la concentration C_p en particules de diamètre d_p en prenant en compte différents phénomènes tels que la sédimentation des particules due à la force de traînée et de gravité, la déviation de celles-ci par rapport aux lignes de courant de l'air par inertie, leur diffusion brownienne et turbulente, et la migration des particules due aux forces turbophorétiques et thermophorétiques. La contribution de la capture des particules par des gouttes d'eau sur la variation de la concentration en particules d'aérosol a été ajoutée au modèle Diffusion-Inertia de Zaichik *et al.* (Zaichik et al., 2004) via le terme $\frac{\partial C_p}{\partial t} \Big|_{capture}$.

Le système d'équations (Système IV-20) présente les diverses équations de l'approche eulérienne utilisées pour résoudre la dynamique des particules d'aérosol :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Transport (modèle de Zaichik } et al. (2004)) : \\ \frac{\partial C_p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \left[u_{f_i} + \tau_p g_i - \tau_p \left(\frac{\partial u_{f_i}}{\partial t} + u_{f_j} \frac{\partial u_{f_i}}{\partial x_j} \right) \right] C_p \right\} = \\ = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(D_{B_p} \delta_{ij} + D_{T_p} \right) \frac{\partial C_p}{\partial x_j} + C_p \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_{B_p} \delta_{ij} + \frac{\Omega}{1 + \Omega} D_{T_p} \right) \right] + \frac{\partial C_p}{\partial t} \Big|_{capture} \quad (a) \\ \text{Dépôt (modèle de Nerisson } et al. (2011)) : \\ \varphi_{dep} = -\mathbf{u}_{fro} \mathbf{u}_{dep}^* C_{pl} \quad (b) \end{array} \right. \quad (IV-20)$$

avec δ_{ij} le symbole de Kronecker, D_{T_p} (resp. D_{B_p}) la diffusivité turbulente (resp. brownienne) des particules, Ω le rapport entre le temps de réponse aérodynamique de la particule τ_p et l'échelle de temps de la turbulence de l'air vue par les particules $\tau_{f@p}^t$ (Equation IV-21), \mathbf{u}_{fro} la vitesse de frottement entre l'air et la paroi où se déposent les particules d'aérosol, C_{pl} est la concentration en particules d'aérosol loin de la paroi et \mathbf{u}_{dep}^* la vitesse adimensionnée de dépôt des particules d'aérosol (Equation IV-22).

Dans l'Equation (E⁽³⁾-(a)), $\frac{\partial}{\partial x_i} (\tau_p g_i) C_p$ est le terme représentant la sédimentation des particules due à la force de traînée et de gravité, $\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\tau_p \left(\frac{\partial u_{f_i}}{\partial t} + u_{f_j} \frac{\partial u_{f_i}}{\partial x_j} \right) \right] C_p$ est le terme de déviation des particules par rapport aux lignes de courant du fluide due aux forces centrifuges, $\frac{\partial}{\partial x_i} \left[(D_{B_p} \delta_{ij} + D_{T_p}) \frac{\partial C_p}{\partial x_j} \right]$ correspond aux effets de la diffusion brownienne et turbulente, le terme $\frac{\partial}{\partial x_i} \left[C_p \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_{B_p} \delta_{ij} + \frac{\Omega}{1+\Omega} D_{T_p} \right) \right]$ rend compte de la migration des particules due aux forces turbophorétiques et thermophorétiques et $\frac{\partial C_p}{\partial t} \Big|_{capture}$ correspond aux effets de la capture des particules d'aérosol sur la variation de leur concentration (Equation IV-24).

Afin de modéliser l'évolution globale de la concentration en particules d'aérosol dans l'air, il n'est pas seulement essentiel de modéliser le transport et la capture des particules d'aérosol mais aussi leur dépôt sur les parois de l'enceinte. Le dépôt des particules d'aérosol est modélisé par l'intermédiaire du modèle CLD (Couche Limite Dynamique) de Nerisson *et al.* (Nerisson *et al.*, 2011). Avec ce modèle, le flux φ_{dep} de particules d'aérosol déposées sur la paroi est imposé sous la forme d'une loi de paroi. Celle-ci a été obtenue en intégrant le profil de concentration en particules d'aérosol dans la couche limite de la paroi. Le principal avantage de cette technique est la possibilité de recourir à une discrétisation spatiale relativement grossière au niveau de la paroi et ainsi de modéliser le dépôt des particules d'aérosol en un temps de calcul raisonnable. Dans le cas de particules polydispersées, compte tenu de l'approche sectionnelle envisagée, il est nécessaire d'associer une phase particulaire par diamètre de particules à représenter.

L'échelle de temps de la turbulence de l'air vue par les particules $\tau_{f@p}^t$ est égale à (Equation IV-21):

$$\tau_{f@p}^t = 0,135 \frac{k}{Sc_t \varepsilon} , \quad (IV-21)$$

avec Sc_t le nombre de Schmidt turbulent.

La vitesse adimensionnée de dépôt des particules d'aérosol correspond à (Equation IV-22):

$$\begin{cases} \mathbf{u}_{dep}^* = \frac{1}{I_p} \text{ pour une paroi verticale } , \\ \mathbf{u}_{dep}^* = \frac{\mathbf{g}^* \mathbf{n}}{1 - \exp(\mathbf{g}^* \mathbf{n} I_p)} \text{ sinon } , \end{cases} \quad (IV-22)$$

avec $\mathbf{g}^* = \frac{\tau_p \mathbf{g}}{u_{fro}}$ le vecteur gravité adimensionné, \mathbf{n} le vecteur normal à la paroi et I_p une fonction définie par l'Equation IV-23 comme étant :

$$I_p = \frac{Sc_t}{k_{vk}} \ln(y^*) + \frac{1}{5,88 \cdot 10^{-4} \tau_p^{*2} + 7,30 \cdot 10^{-2} Sc_B^{-2/3}} , \quad (IV-23)$$

avec Sc_t (resp. Sc_B) le nombre de Schmidt turbulent (resp. brownien), $k_{vk} = 0,41$ la constante de Von Karman, $y^* = \frac{y u_{fro} \rho_f}{\mu_f}$ la distance à la paroi adimensionnée (avec y la distance à la paroi) et $\tau_p^* = \frac{\tau_p u_{fro} \rho_f}{\mu_f}$ le temps de relaxation de la particule d'aérosol adimensionné.

Le terme puits $\left. \frac{\partial C_p}{\partial t} \right|_{capture}$ est défini à partir du noyau de collecte K_{wc} obtenu dans le chapitre précédent via la corrélation III-34 (Equation IV-24) :

$$\left. \frac{\partial C_p}{\partial t} \right|_{capture} = -C_p \int_0^\infty K_{wc}(d_p, d_g) \cdot C_d(d_g) dd_g . \quad (IV-24)$$

Les conditions limites choisies sont les suivantes : l'entrée d'air présente une concentration en particules d'aérosol constante et la sortie d'air utilise une condition de flux nul. Le dépôt des particules d'aérosol a lieu au niveau de chaque paroi.

IV.3.2 Conclusion partielle

En guise de conclusion partielle, sont décrits ci-dessous les systèmes d'équations permettant la modélisation numérique de l'abattage humide comme procédé d'assainissement de l'air.

Gouttes d'eau: Suivi lagrangien, système IV-9

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Conservation de la quantité de mouvement :} \\ \frac{d\mathbf{u}_g}{dt} = \frac{18\mu_f}{\rho_g d_g^2} \frac{C_{dg} Re_g}{24} (\mathbf{u}_{f@g}^{inst} - \mathbf{u}_g) + \frac{\mathbf{g}(\rho_g - \rho_f)}{\rho_g} - \frac{\mathbf{u}_g}{m_g} \frac{dm_g}{dt} \\ \\ \text{Variation de la température de la goutte d'eau :} \\ \frac{dT_g}{dt} = \frac{1}{m_g C_{sg}} \left(\pi d_g^2 (T_f - T_g) Nu \frac{\lambda_{cf} \ln(1 + B_m)}{d_g B_m} + \frac{dm_g}{dt} L_{vap} \right) \\ \\ \text{Transfert de masse :} \\ \frac{dm_g}{dt} = -\pi Sh D_{vap} d_g \rho_f \ln(1 + B_m) \\ \\ \text{Modèle de dispersion turbulente (EIM) :} \\ \mathbf{u}_{f@g_i}^{inst} = \mathbf{u}_{f@g_i} + \mathbf{u}'_{f_i} = \mathbf{u}_{f@g_i} + \xi_i \sqrt{2k/3} \end{array} \right.$$

Fluide (phase porteuse): Point de vue eulérien, système IV-1

Conservation de la masse :

$$\frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \mathbf{u}_f) = \Gamma_f$$

Conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \rho_f \mathbf{u}_f}{\partial t} + \mathbf{u}_f \nabla \cdot (\rho_f \mathbf{u}_f) = -\nabla P + \nabla \cdot \left[(\mu_f + \mu_T) \left(\nabla \mathbf{u}_f + \nabla \mathbf{u}_f^T - \frac{2}{3} \delta_{ij} \nabla \mathbf{u}_f \right) \right] + \Gamma_g^{trainee} + \Gamma_g^{evap} + \rho_f \mathbf{g}$$

Conservation de l'énergie totale :

$$\frac{\partial \rho_f E}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_f (\rho_f E + P)) = \nabla \cdot \left[(\lambda_{cf} + \lambda_{tf}) \nabla T_f - H_{H2O} \cdot \boldsymbol{\Phi}_{H2O} \right] + \Gamma_g^{temp}$$

Conservation de la masse de la vapeur d'eau :

$$\frac{\partial \rho_f Y_{H2O}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f Y_{H2O} \mathbf{u}_f) = \nabla \cdot \rho_f (D_{Bf} + D_{Tf}) \nabla Y_{H2O} + \Gamma_f$$

Conservation de la variation de l'énergie cinétique turbulente :

$$\frac{\partial \rho_f k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f k \mathbf{u}_f) = \nabla \cdot \left[\left(\mu_f + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + G_k - \rho_f \varepsilon$$

Conservation du taux de dissipation de l'énergie turbulente :

$$\frac{\partial \rho_f \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \varepsilon \mathbf{u}_f) = \nabla \cdot \left[\left(\mu_f + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] - \rho_f C_2 \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{v_f \varepsilon}}$$

Lois d'état :

$$\rho_f = \frac{P}{R T_f \left(\frac{Y_{H2O}}{M_{H2O}} + \frac{1 - Y_{H2O}}{M_{air}} \right)}$$

$$E = Y_{H2O} \int_{T_{ref}}^{T_f} C_{Sf}^{H2O} dT_f + (1 - Y_{H2O}) \int_{T_{ref}}^{T_f} C_{Sf}^{airsec} dT_f - \frac{P}{\rho_f} + \frac{\mathbf{u}_f^2}{2}$$

Particules d'aérosol: Point de vue eulérien, système IV-20

Transport (modèle de Zaichik *et al.* (2004)) :

$$\frac{\partial C_p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \left[u_{fi} + \tau_p g_i - \tau_p \left(\frac{\partial u_{fi}}{\partial t} + u_{fj} \frac{\partial u_{fi}}{\partial x_j} \right) \right] C_p \right\} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(D_{Bp} \delta_{ij} + D_{Tp}) \frac{\partial C_p}{\partial x_j} + C_p \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_{Bp} \delta_{ij} + \frac{\Omega}{1 + \Omega} D_{Tp} \right) \right] + \frac{\partial C_p}{\partial t} \Big|_{capture}$$

Dépôt (modèle de Nerisson *et al.* (2011)):

$$\varphi_{dep} = -\mathbf{u}_{fro} \mathbf{u}_{dep}^* C_{pl}$$

Cependant, nous sommes conscients des limitations de ces choix de modèle. Le modèle de dispersion turbulente EIM a une faille qui réside en la non reproduction de l'anisotropie de la turbulence, ce qui peut avoir un impact sur une réalisation 3D réelle d'un procédé d'épuration de l'air (cf V). De plus, la température du fluide utilisée dans les équations lagrangiennes provient directement des équations eulériennes du fluide, ainsi, la fluctuation de la température n'est pas prise en compte dans l'obtention de la température instantanée du fluide. En d'autres termes, la température instantanée est égale à la température moyenne.

Les conditions limites employées pour la modélisation des trois phases sont les suivantes :

- Fluide : l'entrée d'air correspond à une entrée à vitesse, humidité relative et température constantes. La sortie d'air obéit à une condition de pression, d'humidité relative et de température constantes. Les parois sont des parois adiabatiques.
- Gouttes d'eau : une condition de sortie du domaine est fixée au niveau de chaque paroi, de l'entrée d'air et de la sortie d'air.
- Particules d'aérosol : l'entrée d'air présente une concentration en particules d'aérosol constante et la sortie d'air utilise une condition de flux nul. Le dépôt des particules d'aérosol a lieu au niveau de chaque paroi.

Afin de vérifier l'implémentation de tout le système d'équations d'évaporation des gouttes d'eau et de capture des particules d'aérosol par les gouttes d'eau, nous allons réaliser une modélisation 1D d'un cas simplifié d'abattage humide. La solution du cas 1D sera obtenue à l'aide du solveur ODE45 de Matlab®.

IV.4 Vérification de la simulation macroscopique d'abattage humide

Avant de réaliser des simulations macroscopiques de capture de particules par des gouttes d'eau, les différents modèles utilisés par le logiciel de CFD pour simuler l'abattage humide doivent être vérifiés. Ces vérifications concernent à la fois les particules d'aérosol, les gouttes d'eau et le phénomène de capture.

IV.4.1 Cas test

IV.4.1.a Description et système d'équations

Afin de vérifier l'implémentation des modèles dans le code de calcul utilisé, nous nous proposons de considérer le cas test suivant : il s'agit d'un écoulement laminaire co-courant gaz-gouttes suivant la direction x se produisant au sein d'un milieu infini dans les directions y et z . Ce modèle 1D, aussi appelé modélisation linéaire, est présenté dans la Figure IV-1.

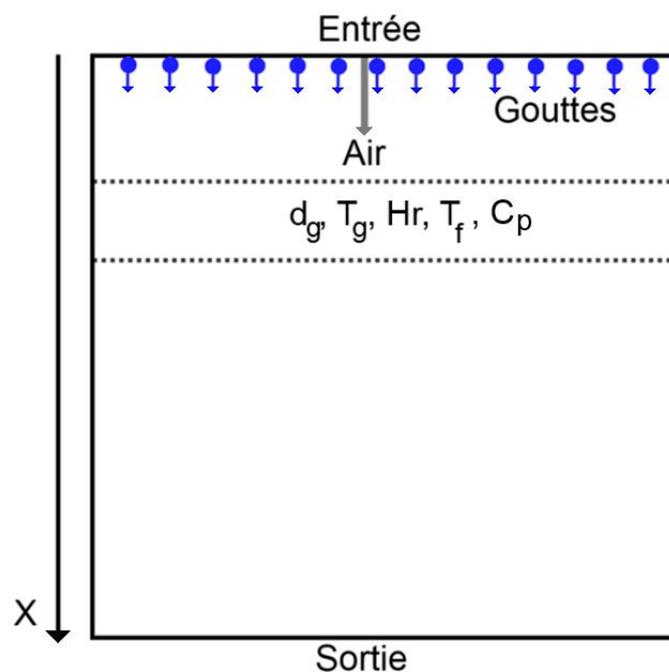


Figure IV-1: Schéma du modèle 1D d'évaporation avec variation de l'humidité relative, du diamètre des gouttes et de la température des gouttes et de l'air.

On considère également les simplifications suivantes par rapport aux modèles présentés précédemment :

- l'impact de la fraction de vapeur d'eau sur la densité de l'air est négligé.
- la vitesse de glissement des gouttes d'eau est imposée (pas de traînée dans l'équation de la quantité de mouvement).
- la diffusivité des espèces et de la température est négligeable par rapport à la convection (écoulement piston).

Suivant ces hypothèses, les équations précédemment présentées peuvent se réduire au système détaillé ci-dessous (Système IV-25). Pour ces équations, on opère le changement de variables $t = \frac{x}{u_g}$, ainsi, elles n'évoluent qu'en fonction de la position x considérée.

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \text{Evolution du diamètre des gouttes d'eau :} \\
 \frac{d d_g^2}{dx} = -4 \frac{\rho_f}{\|\mathbf{u}_g\| \rho_g} D_{vap} \ln(1 + B_m) Sh \quad (a) \\
 \\
 \text{Evolution de la température des gouttes d'eau :} \\
 \frac{dT_g}{dx} = \frac{1}{m_g C_{s_g} \|\mathbf{u}_g\|} \left(\pi d_g (T_f - T_g) Sh_T \frac{k_f \ln(1 + B_m)}{B_m} + \frac{dm_g}{dx} \|\mathbf{u}_g\| L_{vap} \right) \quad (b) \\
 \\
 \text{Evolution de la température du fluide porteur :} \\
 \frac{dT_f}{dx} = \frac{n_g}{\rho_f C_{s_g} \|\mathbf{u}_g^2\|} \pi d_g (T_f - T_g) Sh_T \frac{k_f \ln(1 + B_m)}{B_m} \quad (c) \quad (IV-25) \\
 \\
 \text{Evolution de la fraction massique en vapeur d'eau dans l'air :} \\
 \frac{dY_{H_2O}}{dx} = \frac{-n_g}{\|\mathbf{u}_g\| \rho_f} \frac{dm_g}{dx} \quad (d) \\
 \\
 \text{Evolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air :} \\
 \frac{dC_p}{dx} = \frac{-n_g}{\|\mathbf{u}_g^2\|} C_p K_{W_c} \quad (e)
 \end{array} \right.$$

avec n_g le débit numérique en gouttes d'eau par unité de surface.

Comme le montre ce système d'équation, dans le modèle 1D, la variation du diamètre d'une goutte d'eau n'est pas obtenue à partir de la résolution d'une équation donnant la variation de la masse d'une goutte d'eau par évaporation (Equation IV-9c) mais en utilisant directement la loi du d^2 (Godsave, 1953; Goldsmith and Penner, 1954; Spalding, 1953; Wise et al., 1955) modifié par Ranz et Marshall (Ranz and Marshall, 1952a, 1952b) pour y inclure les effets convectifs sur l'évaporation des gouttes d'eau (Equation IV-25a).

L'équation modélisant l'évolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air est obtenue en réduisant en 1D le terme source de capture détaillé dans la partie précédente $\left(\frac{\partial C_p}{\partial t} \Big|_{capture} = -C_p \int_0^\infty K_{W_c}(d_p, d_g) \cdot C_d(d_g) dd_g \right)$ pour un cas où les particules d'aérosol et les gouttes d'eau sont monodispersées.

L'humidité relative peut être définie par (Equation IV-26) :

$$H_r = \frac{X_{H_2O}}{P_{sat}/P} . \quad (IV-26)$$

Lorsque la fraction molaire en eau dans l'air dépasse la valeur correspondant à 100% d'humidité relative, la vapeur d'eau se condense.

Le système peut être résolu indifféremment par un code de CFD ou par résolution directe à l'aide d'une méthode numérique type différence finie ou autre. Ainsi, comparer les résultats obtenus par CFD avec ceux obtenus par une méthode numérique type différence finie permet de vérifier l'implémentation des modèles dans le code de CFD et d'étudier la sensibilité aux paramètres physiques comme le nombre de Reynolds des gouttes d'eau.

A cet effet, le système d'équations (IV-25) détaillé dans cette partie est implémenté dans le logiciel Matlab® pour modéliser le cas test 1D.

IV.4.2 Résolution du cas test

IV.4.2.a Résolution du cas test avec Matlab®

Le domaine étudié avec Matlab® est celui représenté dans la Figure IV-2. Une fois les différentes variables initialisées, la méthode numérique ODE45 (Ordinary Differential Equation) de Matlab® résout, suivant l'axe x , le système d'équations différentielles ordinaires présenté précédemment. La fonction ODE45 est basée sur un schéma explicite Runge-Kutta du 4^{ème} et 5^{ème} ordre et plus précisément sur la méthode Dormand-Prince avec un pas d'intégration variable (Hairer et al., 2000). Dans ce schéma, la variation automatique de la taille du pas d'intégration employé permet de maximiser à la fois la précision mais aussi la rapidité du calcul : Matlab® réduit la taille du pas d'intégration utilisé lorsque le problème à résoudre varie rapidement alors que sa taille augmente lorsque le problème est relativement constant. Ainsi, cette méthode de résolution par pas d'intégration variable permet d'obtenir des résultats relatifs à l'évaporation-condensation des gouttes d'eau et à leur capture de particules d'aérosol à chaque pas de distance en fonction de la valeur au pas de distance précédent.

IV.4.2.b Résolution du cas test avec Fluent®

Le domaine étudié avec Fluent® est un cube (1m x 1m x 1m) correspondant au cas test présenté précédemment (Figure IV-2).

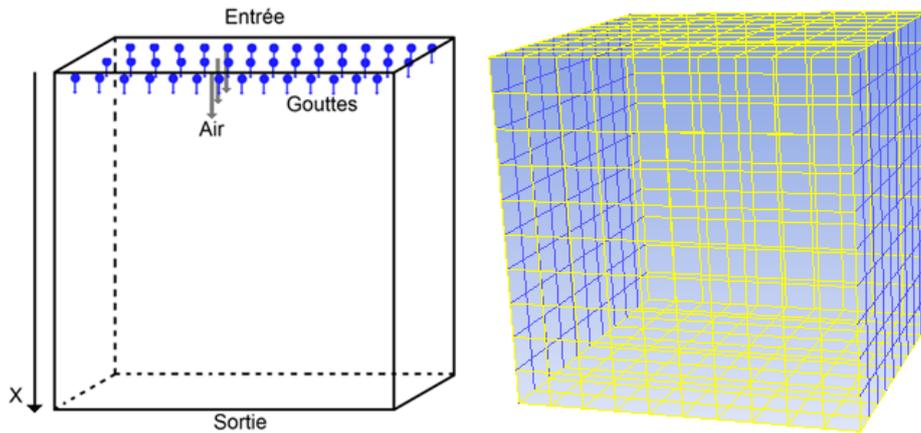


Figure IV-2: Schéma de la géométrie et du maillage du cas Fluent®.

Un maillage régulier constitué d'hexaèdres de taille constante (10 cm x 10 cm x 10 cm) est mis en place pour mailler ce volume cubique.

Les conditions limites utilisées pour l'air dans la simulation numérique sont les suivantes :

- une condition d'entrée d'air à vitesse constante est imposée au niveau de la face supérieure du domaine. Cet air est chargé en particules d'aérosol polydispersées à une concentration fixée à 1.
- une condition de sortie d'air à pression constante est fixée au niveau de la face inférieure du domaine.
- une condition de symétrie est imposée aux niveaux des quatre autres côtés.

L'injection surfacique des gouttes d'eau est réalisée au niveau de la face du dessus. De plus, une condition de sortie est fixée au niveau de chacune des autres faces.

La simulation CFD est stationnaire et son écoulement laminaire est considéré comme incompressible. De plus, l'équation de l'énergie est activée afin de prendre en compte à la fois les échanges thermiques entre l'air et les gouttes d'eau mais aussi la variation d'enthalpie induite par les gouttes d'eau. Parallèlement à cela, les gouttes d'eau sont suivies avec un modèle lagrangien et l'évolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air est calculée avec le modèle Diffusion-Inertia de Zaïchik *et al.* (Zaichik et al., 2004) où le phénomène de capture est pris en compte via un terme puits dépendant du noyau de collecte défini dans le chapitre II (modélisation microphysique).

Techniquement, dans l'optique de faire correspondre au mieux la simulation CFD à la modélisation 1D, plusieurs UDF (User Define Function) sont implémentées dans le logiciel Fluent®. Une UDF a été développée pour donner une valeur nulle de traînée aux gouttes d'eau. Ainsi, la vitesse de glissement des gouttes est imposée et constante. Une deuxième UDF est implémentée pour fixer la diffusivité de la vapeur d'eau dans l'air à une valeur faible afin de rendre le transport convectif de la vapeur d'eau prédominant par rapport à son transport diffusif. Une troisième UDF est utilisée pour calculer la pression de vapeur saturante avec la formule de Clapeyron (Equation 4) où la chaleur latente de vaporisation est définie par l'Equation IV-27.

$$L_{vap} = 10^3 \left(-0,0019 (T_g - T_{ref1})^2 - 2,2366 (T_g - T_{ref1}) + 2499,5 \right) , \quad (IV-27)$$

où T_g est la température des gouttes d'eau s'évaporant (ou de l'eau se condensant) et $T_{ref1} = 273,15 K$.

Ces trois UDF permettent ainsi de réaliser une simulation CFD proche des conditions correspondantes à la modélisation linéaire.

IV.4.3 Résultats de la comparaison entre la simulation CFD 3D et la modélisation 1D Matlab®

Les premiers résultats concernent une modélisation de l'évaporation de gouttes d'eau dans de l'air où les conditions initiales sont : $d_{g0} = 78 \mu m$, $T_{g0} = T_{f0} = 293,15 K$, $u_g = u_f = 1 m.s^{-1}$, $Q_{H2O} = 0,01 l.s^{-1}.m^{-2}$, $HR_0 = 48,85\%$ ($X_{H2O0} = 0,01$). Dans la suite de cette partie, l'indice 0 correspond à la valeur initiale de la grandeur considérée. Les résultats obtenus par l'intermédiaire de Fluent® et ceux de Matlab® sont comparés par la suite. Ceux-ci concernent à la fois les caractéristiques des gouttes d'eau (évolution du diamètre et de la température), les caractéristiques de l'air (évolution de la température et de l'humidité relative de l'air), les caractéristiques des particules d'aérosol (évolution de la concentration en particules d'aérosol) et l'enthalpie du système complet.

IV.4.3.a Evolution du diamètre des gouttes d'eau

La Figure IV-3 montre l'évolution du diamètre des gouttes d_g en fonction de leur position suivant x . Le diamètre initial des gouttes d'eau est $d_{g0} = 78 \mu m$.

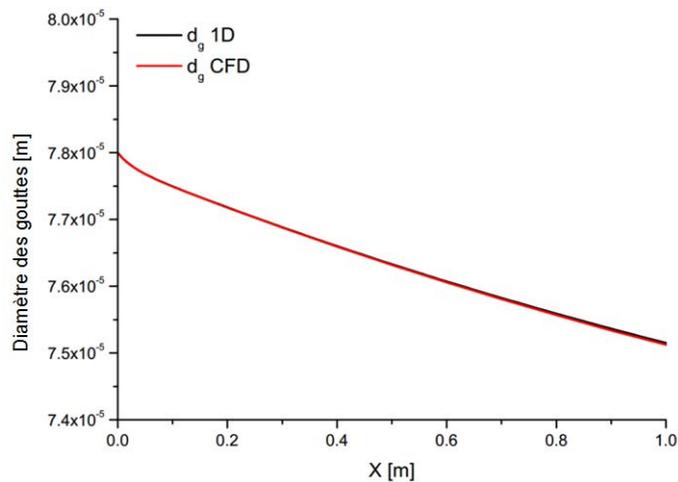


Figure IV-3: Comparaison du diamètre des gouttes en fonction de leur position (x).

La Figure IV-3 montre que le diamètre des gouttes d'eau diminue au fur et à mesure que celles-ci s'évaporent dans le volume de contrôle. Les résultats du modèle 1D et du calcul CFD sont similaires : l'écart relatif pour $x = 1 m$ est de 0,04% ($\approx 0,026 \mu m$) (Tableau IV-1). Ceci permet de vérifier que l'évolution du diamètre d'une goutte d'eau due à son évaporation est correctement modélisée dans le logiciel de CFD.

IV.4.3.b Evolution de la température des gouttes d'eau

La Figure IV-4 montre l'évolution de la température des gouttes T_g en fonction de leur position suivant x . La température initiale des gouttes d'eau est $T_{g0} = 293,15K$.

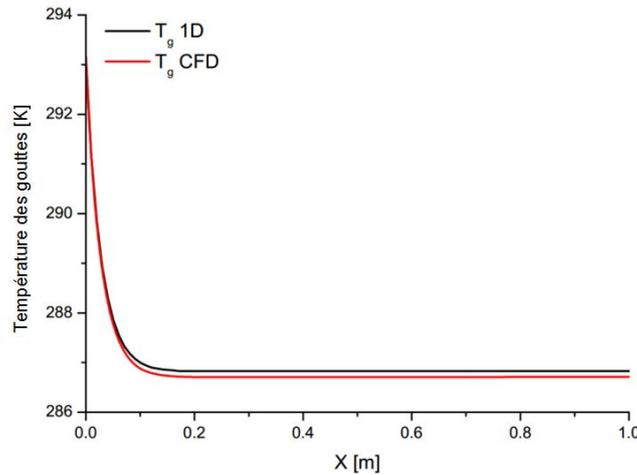


Figure IV-4: Comparaison de la température des gouttes en fonction de leur position (x).

Comme affiché dans la Figure IV-4, la température des gouttes d'eau diminue au fur et à mesure que celles-ci s'évaporent. Les deux résultats (modèle 1D et simulation CFD) sont semblables: l'écart relatif pour $x = 1m$ est de 0,07% ($\approx 0,2 K$) (Tableau IV-1). Ceci permet de vérifier que l'évolution de la température d'une goutte d'eau due à son évaporation est correctement modélisée dans le logiciel de CFD.

IV.4.3.c Evolution de la température de l'air

La Figure IV-5 montre l'évolution de la température de l'air T_{air} en fonction de leur position suivant x . La température initiale de l'air est $T_{f0} = 293,15K$.

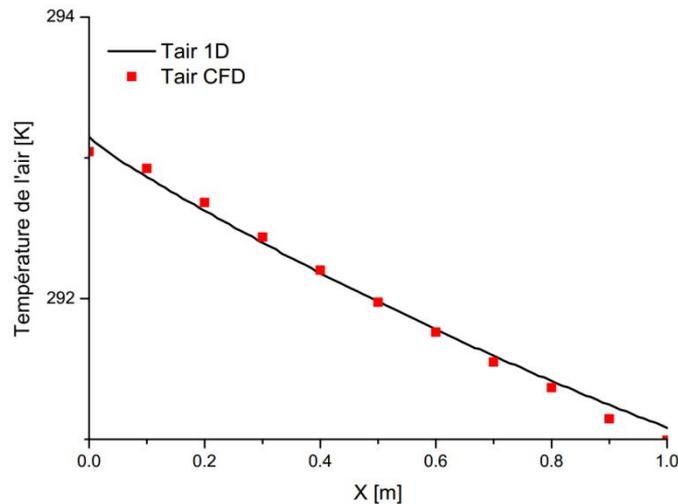


Figure IV-5: Comparaison de la température de l'air en fonction de x.

La Figure IV-5 présente le fait que la température de l'air diminue au fur et à mesure que les gouttes d'eau s'évaporent. Les résultats de simulation CFD et ceux du modèle 1D sont comparables : l'écart relatif pour $x = 1m$ est de 0,5% ($\approx 1,5K$) (Tableau IV-2). Ceci permet de vérifier que

l'évolution de la température de l'air due à l'évaporation de gouttes d'eau est correctement modélisée dans le logiciel de CFD.

IV.4.3.d Evolution de l'humidité relative de l'air

La Figure IV-6 montre l'évolution de l'humidité relative en fonction de x . L'humidité relative de l'air initiale est $Hr_0 = 48,85\%$ ($X_{H_2O_0} = 0,01$).

La Figure ci-dessous (Figure IV-6) décrit le fait que l'humidité relative augmente durant le séjour des gouttes d'eau dans l'air. Les deux résultats présentés (modèle 1D et simulation numérique CFD) sont similaires: l'écart relatif pour $x = 1m$ est de 1,1% ($\approx 0,0099 \%Hr$). Ceci permet de vérifier que l'évolution de l'humidité relative due à l'évaporation de gouttes d'eau est correctement modélisée dans le logiciel de CFD.

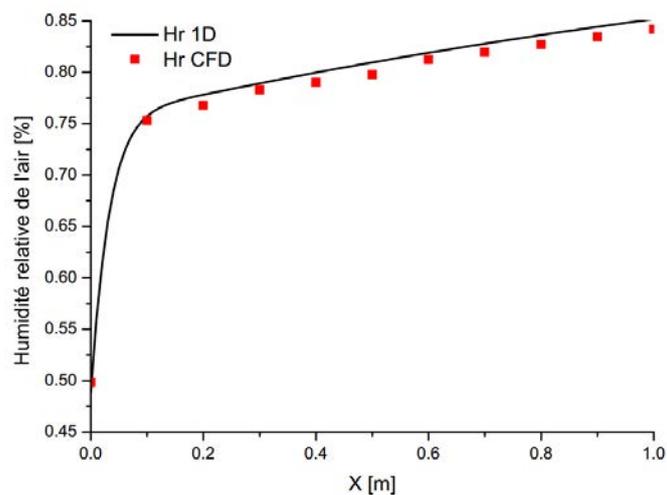


Figure IV-6: Comparaison de l'humidité relative en fonction de x .

IV.4.3.e Evolution de la dépollution de l'air

Pour vérifier la bonne prise en compte de l'épuration de l'air, une vérification est réalisée en comparant les concentrations en particules d'aérosol à différents endroits du domaine de calcul.

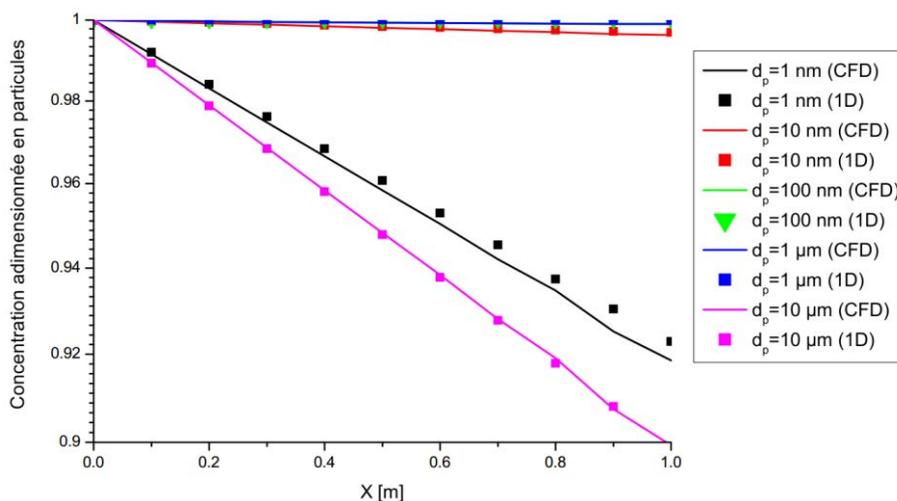


Figure IV-7: Comparaison de la concentration en particules adimensionnée en fonction de x .

L'évolution de la concentration en particules d'aérosol est directement reliée au calcul du puits de capture réalisé (Equation IV-24 et Système IV-25). La figure IV-7 présente l'évolution de la concentration en particules d'aérosols dans l'air au fur et à mesure que des captures se produisent. Celle-ci montre que les résultats obtenus par la simulation macrophysique (CFD) et ceux calculés par le modèle 1D sont semblables : l'écart relatif maximal est obtenu pour les particules d'aérosol de 1 nm de diamètre et pour $x = 1 \text{ m}$. Sa valeur est de $0,4\%$ ($\approx 0,004 C_{p0}$). Ceci permet de vérifier la justesse du calcul de la variation de la concentration en particules due au phénomène de collecte.

IV.4.4 Etude de sensibilité des paramètres

Plusieurs essais ont été réalisés sur la base du cas test présenté dans la section précédente. Les variables modifiées entre les différents cas tests sont le diamètre des gouttes d'eau, leur température, leur nombre de Reynolds, la température de l'air et son humidité relative. Dans ces cas, la longueur du domaine est fixée à 1 m et le débit massique d'eau par unité de surface vaut $0,01 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-2}$. Les résultats retenus pour la comparaison concernent le diamètre des gouttes d'eau, leur température, l'humidité relative de l'air et sa température. Ces valeurs sont relevées au niveau de la sortie du domaine de calcul ($x = x_{end} = 1 \text{ m}$). Ainsi, les résultats présentés correspondent au cumul des écarts de calcul réalisés tout au long de la modélisation. Ces résultats sont détaillés dans les Tableaux suivants (Tableaux IV-1 et IV-2):

Tableau IV-1 : Etude de sensibilité des paramètres initiaux sur la simulation CFD et la modélisation 1D (1/2)

Variables initiales					Résultats ($x = x_{end} = 1$)					
					$d_g [m]$			$T_g [K]$		
d_g	$T_g [K]$	$X_{H2O} [\%]$	$T_f [K]$	Re_g	CFD	1D	Ecart [%]	CFD	1D	Ecart [%]
$78 \mu\text{m}$	293,1	1	293,1	0	75,1	75,1	0,04	286,7	286,9	0,07
$78 \mu\text{m}$	298,1	1	293,1	0	74,9	74,9	0,04	286,8	287	0,07
$78 \mu\text{m}$	293,1	2	293,1	0	77,8	77,9	0,04	292,8	292,9	0,03
$78 \mu\text{m}$	293,1	1	298,1	0	73,7	73,7	0,08	288,4	288,7	0,09
$78 \mu\text{m}$	293,1	1	293,1	1	75,0	74,8	0,20	286,8	286,9	0,04
$202 \mu\text{m}$	293,1	1	293,1	0	200,3	200,3	0,00	286,7	286,9	0,05
$202 \mu\text{m}$	298,1	1	293,1	0	199,9	199,9	0,01	286,9	287,0	0,05
$202 \mu\text{m}$	293,1	2	293,1	0	201,9	201,9	0,01	292,8	292,9	0,03
$202 \mu\text{m}$	293,1	1	298,1	0	199,7	199,8	0,01	288,5	288,7	0,07
$202 \mu\text{m}$	293,1	1	293,1	10	200,2	200,2	0,03	286,9	286,9	0,00
$598 \mu\text{m}$	293,1	1	293,1	100	596,9	596,8	0,01	290,2	290,6	0,04

Tableau IV-2 : Etude de sensibilité des paramètres initiaux sur la simulation CFD et la modélisation 1D (2/2)

Variables initiales					Résultats ($x = x_{end} = 1$)					
					X_{H_2O} [%]			T_f [K]		
d_g	T_g [K]	X_{H_2O} [%]	T_f [K]	Re_g	CFD	1D	Ecart [%]	CFD	1D	Ecart [%]
78 μm	293,1	1	293,1	0	1,14	1,14	0,00	290,6	292,1	0,5
78 μm	298,1	1	293,1	0	1,15	1,15	0,00	291,0	292,1	0,36
78 μm	293,1	2	293,1	0	2,01	2,01	0,00	293,0	293,1	0,03
78 μm	293,1	1	298,1	0	1,21	1,21	0,00	294,8	296,5	0,55
78 μm	293,1	1	293,1	1	1,15	1,13	1,77	290,9	292,1	0,41
202 μm	293,1	1	293,1	0	1,03	1,03	0,00	292,8	293,0	0,06
202 μm	298,1	1	293,1	0	1,04	1,04	0,00	292,8	293,0	0,06
202 μm	293,1	2	293,1	0	2,0	2,0	0,00	293,1	293,1	0,00
202 μm	293,1	1	298,1	0	1,04	1,04	0,00	297,6	297,9	0,10
202 μm	293,1	1	293,1	10	1,03	1,02	0,98	292,8	293,0	0,09
598 μm	293,1	1	293,1	100	1,01	1,0	1,00	293,1	293,1	0,01

Dans ces deux tableaux, l'écart relatif est défini comme étant égal à $ecart = \frac{(résultat_{CFD} - résultat_{1D})}{résultat_{1D}}$.

Les deux tableaux précédents montrent que, pour la gamme de variables initiales étudiée, l'écart relatif entre les résultats obtenus avec Fluent® et ceux obtenus avec Matlab® est inférieur à 2%. En moyenne, la variable qui présente le plus grand écart relatif est la fraction molaire en vapeur d'eau dans l'air. En effet, son écart moyen atteint 0,34%. Globalement, il est aussi montré que la valeur de la température de la goutte donnée par le modèle 1D est supérieure à celle obtenue par simulation CFD. Cette tendance est aussi rencontrée au niveau de la température de l'air. Les deux tableaux montrent également que les écarts les plus importants relatifs au diamètre des gouttes d'eau et à la fraction molaire en vapeur d'eau sont obtenus dans le cas où la vitesse relative entre les gouttes et l'air est non nulle. De façon analogue, les écarts les plus importants au sujet de la température de l'air et des gouttes apparaissent lorsque la température de l'air est supérieure à celle des gouttes d'eau. Ces deux tableaux montrent que les différences entre les résultats obtenus via Fluent® et ceux obtenus par modélisation 1D sont faibles. Ainsi, nous pouvons conclure que l'approche de simulation employée par le logiciel de CFD Fluent® peut être utilisée pour simuler un cas 1D d'abattage humide.

IV.5 Points clefs de ce chapitre

L'objectif de ce chapitre est de présenter et d'évaluer la méthode de simulation macroscopique de l'abattage humide qui permet de simuler, à l'échelle du procédé, des cas de dépollution de l'air via la capture de particules d'aérosol par des gouttes d'eau.

Ici, une modélisation complète du phénomène physique a été proposée (cf IV.3.2). Les hypothèses d'utilisation concernent le gaz porteur qui est considéré comme un gaz parfait multi-composants. Les limites de l'approche présentée proviennent à la fois de l'utilisation de la température moyenne en tant que température instantanée dans les équations lagrangiennes relatives aux gouttes d'eau et à l'emploi de la méthode EIM (Eddy Interaction Model) pour obtenir une vitesse du fluide instantanée utilisée par les équations modélisant la dynamique des gouttes d'eau.

Pour évaluer la méthode de simulation de l'évaporation des gouttes d'eau et de la capture de particules d'aérosol, une comparaison entre des résultats CFD 3D obtenus avec le logiciel Fluent® et des résultats de modélisation 1D obtenus avec Matlab® a été réalisée. En effet, il existe des zones d'ombres sur les équations utilisées par Fluent® pour modéliser les phénomènes physiques. Ainsi, il est important de mettre en place des cas de vérification pour s'assurer que Fluent® simule correctement les différents cas d'étude. A cet effet, l'évolution de la température de l'air et des gouttes d'eau, du diamètre des gouttes d'eau, de l'humidité relative de l'air et de la concentration en particules d'aérosol dans l'air ont été calculées. Les différentes comparaisons ont permis de vérifier l'approche de modélisation de l'abattage humide comme procédé d'assainissement de l'air. En effet, les résultats 3D CFD et ceux 1D de Matlab® sont similaires. Ainsi, l'approche de simulation détaillée dans ce chapitre peut être employée pour simuler un cas 1D d'abattage humide. Cependant, celle-ci reste à valider pour des cas plus complexes.

Le prochain chapitre est consacré à la validation du modèle de simulation numérique en 3D. L'évaluation de la dépollution de l'air prédite est réalisée à partir de comparaisons avec des résultats de la littérature. Une seconde partie détaille la conception d'un banc d'essai dont l'utilisation dont l'objectif est de valider plus finement l'approche de simulation macrophysique.

V. Validation de la simulation macrophysique d'abattage humide

Le chapitre précédent a présenté la méthode de simulation macrophysique de l'abattage humide comme procédé d'assainissement de l'air. Ces simulations numériques ont pour objectif de prédire l'épuration de l'air vicié due à la capture de particules d'aérosol nocives par des gouttes d'eau. En effet, l'implantation du noyau de capture permet de simuler la capture brownienne, phorétique, électrostatique et inertielle. Cette approche de simulation a, tout d'abord, été vérifiée dans le chapitre précédent. L'objectif de ce chapitre est maintenant de la valider. A cet effet, la simulation macrophysique de l'abattage humide est évaluée avec un résultat de la littérature. Ceci permet de confirmer que l'approche de simulation numérique peut être utilisée pour réaliser des modélisations numériques de l'abattage humide comme procédé d'assainissement de l'air. De façon complémentaire, la deuxième partie de ce chapitre détaille la conception d'un banc d'essai qui apportera de nouvelles données sur l'épuration de l'air via abattage humide.

V.1 Expérience TOSQAN

Le premier cas de validation considéré pour évaluer la méthode de simulation envisagée est l'expérience TOSQAN (TONuS Qualification Analytique) de l'IRSN (Institut de Radioprotection et de Sureté Nucléaire).

V.1.1 Présentation

V.1.1.a Cas étudié

L'expérience TOSQAN a été mise en place par l'IRSN pour étudier les phénomènes physiques mis en jeu dans la capture de particules d'aérosol (ici composés de produits de fission) par des gouttes d'eau. Cependant, les conditions expérimentales sont représentatives d'un accident grave de REP (Réacteur à Eau Pressurisée), et non d'une situation d'épuration d'atmosphère telle qu'envisagée dans le cadre de cette thèse. Le banc d'essai TOSQAN est présenté dans la Figure V-1.

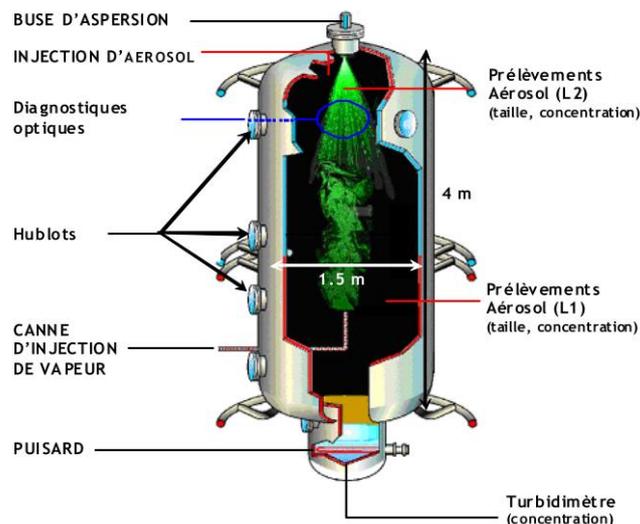


Figure V-1 : Banc d'essai TOSQAN. © (Marchand, 2008).

Il s'agit d'une enceinte cylindrique de 7 m^3 dans laquelle évoluent de l'air, des particules d'aérosol et des gouttes d'eau. Comme le montre la Figure V-1, l'enceinte contient de l'air chargé en particules d'aérosol. Une buse d'aspersion est située sur la face supérieure de l'enceinte. Celle-ci génère un spray à cône plein dont le débit, la granulométrie et la température sont contrôlés. Tout au long de l'expérience, l'eau pulvérisée dans l'enceinte est évacuée au niveau d'un puisard situé sur la face inférieure du banc d'essai. De plus, la double paroi extérieure de l'enceinte permet de contrôler la température du banc d'essai (un fluide caloporteur circule dans cette double paroi). L'évolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air, due à la capture des particules d'aérosol par les gouttes d'eau, est mesurée au niveau de deux points de prélèvement (un en partie haute de l'enceinte, nommé L2 et un en partie basse, dénommé L1). De façon complémentaire, la concentration en particules d'aérosol dans l'eau du puisard est mesurée.

V.1.1.b Protocole expérimental

Le protocole d'essai comporte quatre phases :

1 : La première étape consiste à établir un équilibre thermique de l'enceinte à pression atmosphérique. Pour cela, de l'air à une température de consigne est injecté dans l'enceinte et un fluide caloporteur de même température circule dans la double paroi.

2 : La deuxième étape consiste à injecter de l'air chargé en particules d'aérosol dans l'enceinte afin d'obtenir une concentration homogène en aérosol dans le domaine expérimental.

3 : Ensuite, de la vapeur est injectée dans l'enceinte afin d'atteindre des pressions de l'ordre de celles relatives aux accidents de REP ($P \approx 1,5\text{ bar}$).

4 : Pour finir, l'aspersion est activée pour que les phénomènes de capture se produisent.

Pour chaque essai, le début des expériences (t_0) est fixé au moment où la buse commence à pulvériser de l'eau dans l'enceinte.

V.1.1.c Observations expérimentales

Plusieurs observations relatives aux expériences TOSQAN sont faites de la part des expérimentateurs :

- Avant le début de l'expérience, l'air peut être considéré comme au repos dans l'enceinte et les différentes variables physiques (température, humidité relative, concentration en particules) sont homogènes dans l'espace.
- La perte de masse en particules d'aérosol dans l'air est principalement due à la capture de ces particules par des gouttes d'eau : la sédimentation et le dépôt des particules d'aérosol sont négligeables. Cependant nous verrons que cette observation est contredite par les résultats de l'expérience S0 réalisée sans aspersion, c'est à dire dans des conditions où seul le dépôt joue un rôle.
- Il n'y a aucune source de particules d'aérosol en fonctionnement pendant l'expérience : les particules d'aérosol n'arrivent dans l'enceinte que par l'intermédiaire de l'air pollué injecté avant l'expérience.

V.1.1.d Gamme de variation des paramètres de contrôle

La gamme de variation des paramètres expérimentaux de l'expérience TOSQAN est la suivante (l'indice 0 correspond à la valeur initiale de la variable) :

- La pression initiale de l'air est : $P_0 \approx 1,5 \text{ bar}$.
- La température initiale de l'air vaut : $T_0 \approx 90 \text{ }^\circ\text{C}$.
- L'humidité relative initiale Hr_0 est comprise entre $[57; 71]\%$.
- Le débit massique d'eau entre dans la gamme : $Q_{eau0} \in [5; 20] \text{ g} \cdot \text{s}^{-1}$.
- La température initiale de l'eau est : $T_{g0} \in [25; 120] \text{ }^\circ\text{C}$.
- Le diamètre initial des gouttes d'eau est centré sur $141 \mu\text{m}$.
- La vitesse d'injection des gouttes d'eau obéit à : $u_{g0} \in [3; 10] \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ (les gouttes atteignent leur vitesse limite de chute au plus tard après 50 cm de chute (Marchand, 2008)).
- La concentration initiale en particules d'aérosol est de : $C_{p0} = 0,3 \text{ g} \cdot \text{m}^{-3}$.
- La gamme de l'aérosol d_{p0} varie dans la gamme $[0,08; 10] \mu\text{m}$.

La gamme d'étude montre que les différentes captures prenant place lors de l'expérience sont les captures browniennes, phorétiques et inertielles. Malgré le fait que les caractéristiques de l'air et des gouttes d'eau s'éloignent des caractéristiques fréquemment rencontrées dans les cas d'hygiène industrielle (pression égale à la pression atmosphérique, température proche de $20 \text{ }^\circ\text{C}$,...), la simulation de cette expérience peut permettre d'évaluer l'approche de simulation numérique présentée dans ce manuscrit.

V.1.1.e Résultats expérimentaux disponibles

Plusieurs essais ont été réalisés à l'aide du banc TOSQAN. Les différents paramètres étudiés au cours de ces expériences sont résumés dans la Figure V-2 (Marchand, 2008). Ici, nous nous intéressons plus particulièrement à l'essai qui se rapproche le plus des situations d'hygiènes industrielles couramment rencontrées. Cet essai est le cas AGO.

Les résultats expérimentaux disponibles pour chaque essai concernent la variation du nombre d'aérosol en suspension dans l'enceinte en fonction du temps, ou alors la décroissance relative de la concentration en particules dans l'air en fonction du temps, ou encore la variation de la masse d'aérosol en suspension en fonction du temps (Marchand, 2008). Ces résultats sont disponibles sous forme de graphiques.

L'expérience TOSQAN, permet donc de mettre en place une évaluation de l'approche de simulation macrophysique de l'abattage humide.

	Nom de l'essai	Thermohydrauliques			Aspersion			Aérosols				
		P _{abs} (bar)	T _{gaz} (K)	s	Q _{asp} (g/s)	T _{asp,inj} (K)	d _{goutte,inj} (µm)	Section du spray (m ²)	m _{aérosols,init} (g)	DMM (µm)		
	Essai de référence (sans aspersion)	S0	1,5	363	0,57	-	-	-	-	2	1	
	Essai de référence (avec aspersion)	AG0	1,5	363	0,57	10	298	100	0,37	2	1	
Effets mécaniques	Essai à différents débits	AG10	1,5	363	0,57	5	363	100	0,37	2	1	
		AG11	1,5	363	0,57	10	363	100	0,37	2	1	
		AG12	1,5	363	0,57	20	363	200	0,37	2	1	
	Essai à différentes sections du spray	AG2	1,5	363	0,57	18	363	100	> 0,37	2	1	
	Essai à différents diamètres d'aérosols	AA1	1,5	363	0,57	10	363	100	0,37	2	< 1	
	Essai à différents diamètres de gouttes	AG30	1,5	363	0,57	10	363	200	0,37	2	1	
		AG31	1,5	363	0,57	10	363	400	0,37	2	1	
	Essai à différentes concentrations en aérosols	AA2	1,5	363	0,57	10	363	100	0,37	< 2	1	
	Effets Phorétiques	Thermophorèse	AG4	1,5	363	0,57	10	363 à 393	100	0,37	2	< 0,5
			AG51	1,5	363	0,57	5	298	100	0,37	2	1
Diffusiophorèse		AG52	1,5	363	0,57	20	298	100	0,37	2	1	
		AG6	1,5	363	0,71	10	363	100	0,37	2	1	

Figure V-2 : Plan d'expérience de la campagne TOSQAN. s correspond à l'humidité relative. © (Marchand, 2008).

V.1.2 Simulation d'une expérience TOSQAN

V.1.2.a Présentation de l'expérience S0

L'expérience TOSQAN servant de référence pour l'évaluation du dépôt des particules d'aérosol est l'expérience S0. Cette expérience correspond à un essai TOSQAN où le spray d'eau n'est pas mis en fonctionnement. Ainsi, la température de l'enceinte et son humidité relative sont constantes. De plus, aucune goutte d'eau ne capture des particules d'aérosol. C'est pourquoi, la décroissance de la concentration en particules dans l'air est exclusivement due au phénomène de dépôt et de sédimentation (le phénomène de dépôt est plus important que la sédimentation). Les caractéristiques expérimentales de l'essai S0 sont décrites dans le Tableau V-1. Les conditions initiales sont parfois différentes de celles présentées dans la Figure V-2. Toutefois, les valeurs présentées par le Tableau V-1 correspondent à celles mesurées au début de l'expérience. Celles-ci seront donc admises comme conditions initiales de l'essai S0.

Tableau V-1: Conditions initiales de l'essai de référence sans aspersion de TOSQAN (S0).

Conditions initiales	Air			Gouttes d'eau				Particules d'aérosol	
	P_0 [bar]	T_{f0} [K]	Hr_0 [%]	Q_{eau0} [g.s ⁻¹]	T_{g0} [K]	d_{g0} [μm]	angle du spray [°]	m_{a0} [g]	d_{p0} [μm]
Essai de référence sans aspersion (S0)	1,6	373	0,5	–	–	–	–	2	0,95

Comme le montre le Tableau V-1, la pression initiale de l'enceinte TOSQAN pour l'essai S0 est de 1,6 bar, la température initiale de l'air est de 373 K et son humidité relative est de 50 %. De plus, le diamètre médian en masse des particules d'aérosol est égal à 0,95 μm mais la distribution granulométrique s'étend de 0,2 μm à 3 μm de diamètre.

Le protocole expérimental utilisé au cours de l'expérience S0 est le même que celui décrit précédemment (cf V.1.1.b).

V.1.2.b Présentation de l'expérience AG0

L'expérience TOSQAN servant de référence pour l'évaluation de notre approche de simulation numérique de l'abattage humide est l'expérience AG0. Ses caractéristiques expérimentales sont décrites dans le Tableau V-2. Les conditions initiales sont parfois différentes de celles présentées dans la Figure V-2. Toutefois, les valeurs présentées par le Tableau V-2 correspondent à celles mesurées au début de l'expérience. Celles-ci seront donc admises comme conditions initiales de l'essai AG0.

Tableau V-2: Conditions initiales de l'essai de référence avec aspersion de TOSQAN (AG0).

Conditions initiales	Air			Gouttes d'eau				Particules d'aérosol	
	P_0 [bar]	T_{f0} [K]	Hr_0 [%]	Q_{eau0} [g.s ⁻¹]	T_{g0} [K]	d_{g0} [μm]	angle du spray [°]	m_{a0} [g]	d_{p0} [μm]
Essai de référence avec aspersion (AG0)	1,49	367,5	0,44	10	303	144	19	1	0,8

Comme le montre le Tableau V-2, la pression initiale de l'essai AG0 est de 1,49 bar, la température initiale de l'air est de 367,5 K et son humidité relative est de 44 %. Les gouttes d'eau de diamètre moyen égal à 144 μm sont injectées dans l'enceinte, par l'intermédiaire d'un spray à cône plein de demi angle égal à 19°, à un débit massique de 10 g.s⁻¹. La température de l'eau, avant son aspersion, est de 303 K. La masse initiale en particules d'aérosol dans l'enceinte TOSQAN est de 1 g et leur diamètre médian en masse est égal à 0,8 μm. Cependant, la distribution granulométrique de l'aérosol s'étend de 0,2 μm à 3 μm de diamètre.

Le protocole expérimental utilisé au cours de l'expérience AGO est le même que celui décrit précédemment (cf V.1.1.b).

V.1.2.c Observations sur le comportement de l'expérience AGO

Marchand décrit que, durant les 200 premières secondes de l'essai AGO, les gouttes d'eau sont entièrement vaporisées (Marchand, 2008). Ceci entraîne une augmentation de la pression dans l'enceinte et une augmentation de l'humidité relative de l'air. A la suite de cette première phase, l'air est saturé en humidité et les gouttes d'eau sortent de l'enceinte TOSQAN par l'intermédiaire du puisard.

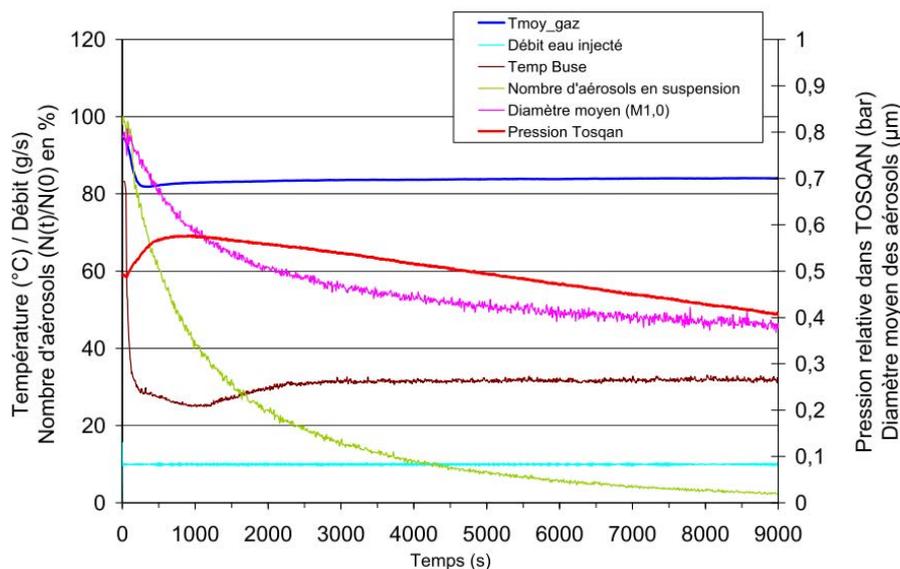


Figure V-3 : Evolution des grandeurs relatives à l'expérience AGO en fonction du temps. Les mesures sont réalisées en L1. © (Marchand, 2008)

L'évolution des grandeurs relatives à l'expérience est donnée dans la Figure V-3. Celle-ci montre que la pression dans l'enceinte (désignée sur la Figure V-3 par Pression Tosqan) augmente au cours des 800 premières secondes pour atteindre environ 1,6 bar puis diminue par la suite jusqu'à 1,4 bar. Ceci est dû à la forte évaporation de l'eau du début de l'expérience suivie d'une phase de refroidissement pour atteindre l'équilibre thermique. La Figure V-3 renseigne aussi sur les valeurs de température relatives à l'expérience. La température de l'eau dans la buse d'injection (désigné Temp buse sur la Figure V-3) est d'environ 82 °C au début de l'aspersion des gouttes d'eau puis diminue et se stabilise vers 2500 secondes à une valeur de 30 °C. La température de l'eau au début de l'expérience n'est pas celle de consigne (Tableau V-2) car la chaleur du banc d'essai réchauffe l'eau avant sa pulvérisation. De plus, durant les 200 premières secondes d'aspersion, la température de l'air de l'enceinte (désigné dans la Figure V-3 par Tmoy_gaz) décroît de 94 °C à 82 °C. Ce refroidissement est lié à la faible température de l'eau par rapport au gaz et à l'évaporation des gouttes d'eau.

V.1.2.d Paramètres et hypothèses de simulation

Le domaine simulé est présenté par la Figure V-4. Celui-ci correspond à un secteur angulaire de 45° de l'enceinte du banc d'essai TOSQAN. Il s'agit donc d'un volume égal à un huitième d'un cylindre de 4m de haut, de 0,75m de rayon, sous lequel un volume de même forme (de 0,37 m de

haut, de 0,34 m de rayon) joue le rôle du puisard. Il est possible de modéliser ce volume pour simuler l'expérience TOSQAN car le banc d'essai et ses différents composants (spray,...) présentent un axe de symétrie cylindrique aligné avec la hauteur du cylindre.

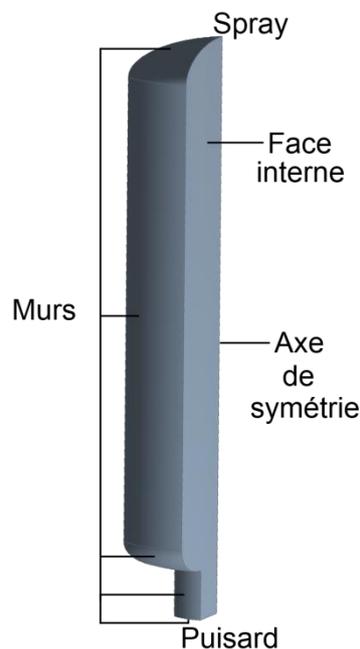


Figure V-4: Domaine simulé représentant TOSQAN.

Le maillage utilisé dans le logiciel de CFD pour mailler le domaine présenté dans la Figure V-4 est composé d'hexaèdres et de tétraèdres au niveau de la partie angulaire de l'enceinte.

Plusieurs conditions limites sont appliquées à la simulation numérique. Les gouttes d'eau sont injectées en haut de l'enceinte via un spray correspondant à une fraction d'un cône plein de demi-angle égal à 19° , obtenue par découpe de celui-ci suivant un angle de 45° . Ces gouttes d'eau ont une condition de sortie au niveau de chaque mur de l'enceinte et du puisard. Il n'y a ni entrée, ni sortie d'air. Les particules d'aérosol se déposent sur chaque mur de l'enceinte et sur le puisard. La découpe du banc d'essai suivant l'angle de 45° crée deux faces internes qui ont comme condition limite une condition de symétrie.

Nous faisons plusieurs hypothèses, basées sur des observations expérimentales, pour simuler l'essai AGO suivant la méthode présentée dans le chapitre précédent (Simulation macrophysique). Par ailleurs, ces hypothèses imposent certains paramètres d'initialisation. L'enceinte est en permanence parfaitement homogène en concentration en particules d'aérosol et en température. De plus, le début de la simulation coïncide avec la fin de la phase d'évaporation complète des gouttes d'eau de l'expérience ($t = 200\text{ s}$). Ainsi, l'air est saturé en humidité. Dans une première série de cas tests, trois simplifications sont réalisées : le spray d'eau est considéré comme générant des gouttes d'eau de $141\ \mu\text{m}$ de diamètre, la température d'injection des gouttes d'eau, égale à 355 K , est supposée égale à celle de l'air et les parois sont considérées comme des parois adiabatiques. C'est pourquoi la température est constante tout au long de la simulation dans ces premiers cas test. Les gouttes d'eau sont supposées avoir un diamètre compris entre $85\ \mu\text{m}$ et $275\ \mu\text{m}$ au moment de leur injection. Dans une deuxième série de cas tests, la granulométrie des gouttes est définie grâce à une distribution Rosin-Rammler dont le diamètre moyen des gouttes correspond à $196\ \mu\text{m}$ et le paramètre de

dispersion est égal à 4,57, la température d'injection des gouttes d'eau est fixée égale à 303 K, l'air est supposé être à une température de 355 K au début de la simulation et les parois présentent une température constante de 355 K, ce qui correspond à des conditions plus proches des conditions expérimentales. Par ailleurs, le débit d'air prélevé tout au long de l'expérience pour mesurer la concentration en particules d'aérosol dans l'air est supposé avoir un effet négligeable sur les phénomènes de capture et n'est donc pas simulé. En effet, la variation de pression dans l'enceinte due au prélèvement de 10 l. min^{-1} d'air est d'environ 20% à la fin de l'essai.

Les modèles numériques utilisés sont les mêmes que ceux employés dans le chapitre précédent. C'est-à-dire qu'un modèle RANS $k - \epsilon$ réalisable est utilisé pour modéliser l'écoulement d'air, une approche lagrangienne est employée pour simuler les gouttes d'eau, le modèle Diffusion-inertia de Zaïchik *et al.* (Zaichik *et al.*, 2004) permet de calculer le transport des particules d'aérosol et le modèle de Couche Limite Dynamique de Nérisson *et al.* (Nerisson *et al.*, 2011) modélise leur dépôt sur les parois. De plus, la simulation du banc d'essai TOSQAN est réalisée en instationnaire.

La simulation de l'expérience S0 et AG0 du banc d'essai TOSQAN permet d'obtenir les résultats présentés dans la partie suivante. Les conditions initiales des deux essais sont rappelées dans le tableau suivant (Tableau V-3).

Tableau V-3: Conditions initiales de l'essai de référence sans aspersion S0 et avec aspersion AG0 de TOSQAN.

Conditions initiales	Air			Gouttes d'eau				Particules d'aérosol	
	P_0 [bar]	T_{f0} [K]	Hr_0 [%]	Q_{eau0} [g.s ⁻¹]	T_{g0} [K]	d_{g0} [μm]	angle du spray [°]	m_{a0} [g]	d_{p0} [μm]
Essai de référence sans aspersion (S0)	1,6	373	0,5	—	—	—	—	2	0,95
Essai de référence avec aspersion (AG0)	1,49	367,5	0,44	10	303	144	19	1	0,8

V.1.2.e Mise en place d'une simulation numérique de l'expérience TOSQAN

La simulation numérique de l'essai S0 (pas de spray d'eau) a été réalisée pour étudier la sédimentation et le dépôt des particules d'aérosol dans l'enceinte TOSQAN. A cet effet, une simulation numérique a été réalisée avec Fluent® en suivant les paramètres de simulation présentés dans la partie précédente. Les résultats de cette simulation sont comparés aux résultats disponibles dans Marchand (Marchand, 2008). Les résultats expérimentaux concernant l'évolution du nombre normé de particules d'aérosol en suspension dans l'air sont présentés dans la Figure V-5 :

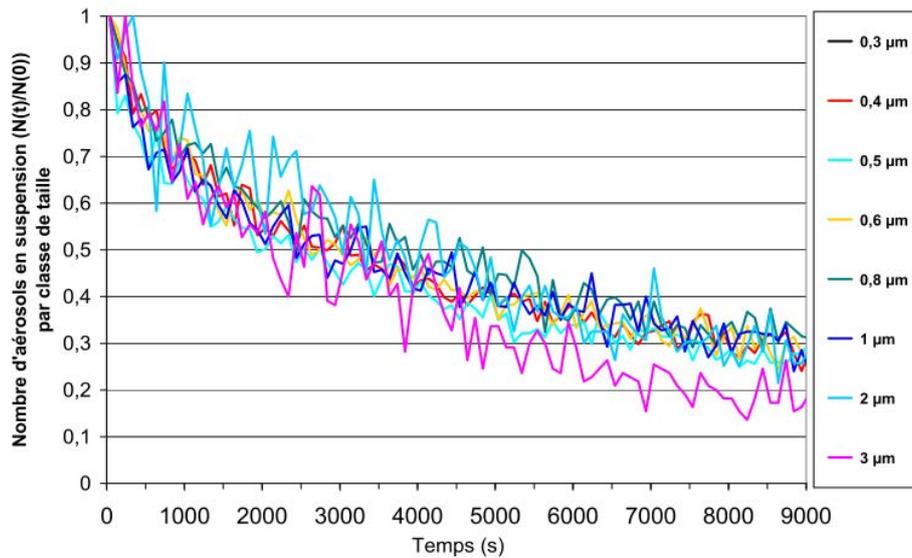


Figure V-5 : Evolution du nombre normé de particules d'aérosol dans l'air en fonction du temps. Mesure pour l'essai S0. © (Marchand, 2008)

La figure ci-dessus montre que la concentration en particules d'aérosol dans l'air diminue pendant l'essai S0. Tous diamètres d'aérosol confondus, la concentration adimensionnée de particules d'aérosol dans l'air diminue jusqu'à une valeur comprise entre 0,18 et 0,32 environ au bout de 9000 secondes. Cette variation de la quantité de particules d'aérosol dans l'air est uniquement liée aux phénomènes de dépôt et de sédimentation.

L'évolution du nombre normé de particules d'aérosol dans l'air obtenue par simulation numérique est donnée dans la Figure V-6 :

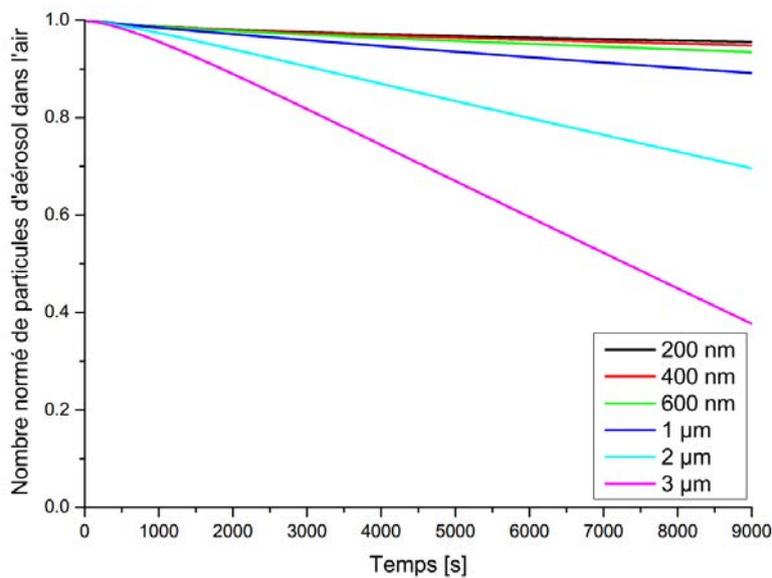


Figure V-6 : Evolution du nombre normé de particules d'aérosol dans l'air en fonction du temps et du diamètre aérodynamiques des particules d'aérosol. Simulation de l'essai S0.

La Figure ci-dessus montre que le nombre de particules d'aérosol en suspension dans l'air diminue au fur et à mesure du temps. La concentration adimensionnée de particules d'aérosol de 400 nm de diamètre diminue de 1 à 0,95 en 9000 secondes. Celui relatif aux particules d'aérosol de

3 μm de diamètre diminue de 1 à 0,38 durant la même période. En comparant la Figure V-6 avec la Figure V-5, nous pouvons conclure que, quel que soit la classe de particule étudiée, le dépôt simulé en inférieur à celui obtenu expérimentalement.

Dans son mémoire de thèse, Marchand (Marchand, 2008) présente l'évolution, en fonction du temps, de la granulométrie des particules d'aérosol prélevées en L1 durant l'essai S0 (Figure V-7).

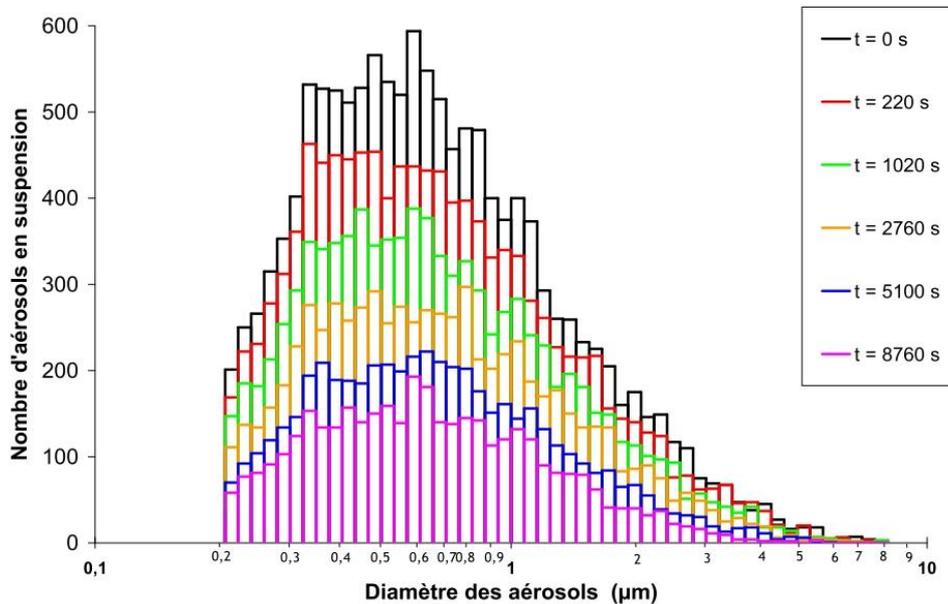


Figure V-7 : Distribution des particules d'aérosol pour l'essai S0. © (Marchand, 2008)

En se basant sur ces résultats, il est possible d'étudier l'évolution totale de la concentration en particules d'aérosol dans l'air. Ainsi, la Figure V-8 présente la variation de la concentration en particules d'aérosol dans l'air, toutes classes confondues. Cette figure compare les résultats expérimentaux de l'essai S0 avec les résultats numériques obtenus via une simulation Fluent®, une modélisation 0D et une modélisation 1D de la variation de la concentration en particules d'aérosol dans l'enceinte TOSQAN. La simulation Fluent® est réalisée suivant les paramètres détaillés précédemment. La modélisation 0D de la sédimentation des particules d'aérosol correspond à un cas parfaitement mélangé (homogénéisation parfaite de l'enceinte) et repose sur le modèle de Couche Limite Dynamique de Nérissou *et al.* (Nérissou *et al.*, 2011). Quant à la modélisation 1D, elle correspond à une vidange à vitesse constante de l'enceinte TOSQAN (écoulement piston pour les particules d'aérosol). Dans ce cas-là, la vitesse de vidange correspond à la vitesse de sédimentation des particules d'aérosol qui est égale à $u_{sedim} = \tau_p g$, avec τ_p le temps de réponse aérodynamique de la particule d'aérosol et g l'accélération de la pesanteur. Ainsi, il est possible d'en déduire que le temps nécessaire à la vidange de l'enceinte (concentration en particules d'aérosol nulle) est égal à $t_{total} = L/(\tau_p g)$, avec L la longueur de l'enceinte.

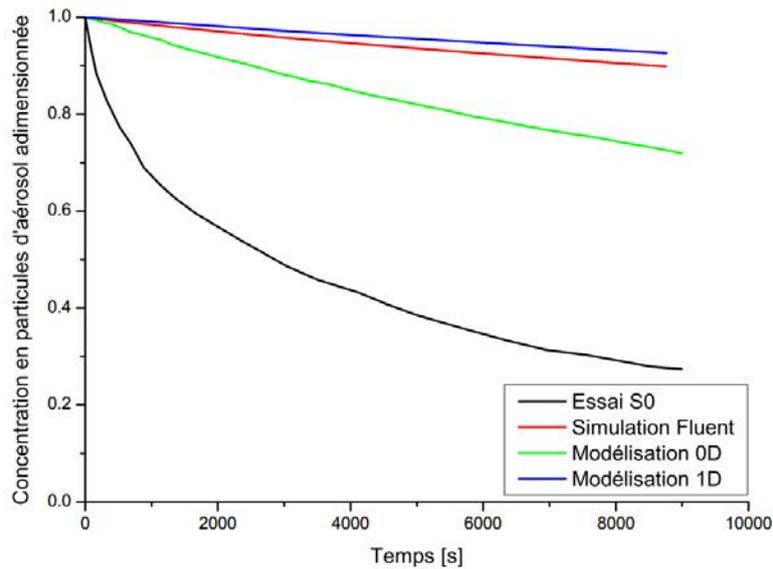


Figure V-8 : Evolution de la concentration adimensionnée en particules d'aérosol dans l'air en fonction du temps. Les données correspondent à la population globale des particules d'aérosol. Simulation de l'essai S0.

La figure ci-dessus (Figure V-8) montre que la simulation Fluent®, la modélisation 0D et la modélisation 1D de l'essai S0 présentent une baisse de la concentration en particules d'aérosol dans l'air bien plus faible que celle mesurée dans l'expérience. Les résultats numériques les plus proches des résultats expérimentaux sont ceux obtenus par l'intermédiaire de la modélisation 0D. En effet, la décroissance de la concentration en particules d'aérosol simulée par Fluent® est d'environ 10 % de la concentration initiale, celle modélisée par le modèle 1D est proche de 8%, celle obtenue par le modèle 0D est environ égale à 28% tandis que celle mesurée par l'expérience S0 est d'environ 73 %. Ces différences importantes entre simulations et expérience pour ce cas expérimental très simple interpellent : la discussion relative à cette comparaison est faite dans la partie V.1.2.f.

En ce qui concerne la simulation du cas AG0, plusieurs simulations numériques ont été réalisées pour étudier la sensibilité des résultats numériques de AG0 aux paramètres de simulation. Ainsi, l'impact du maillage utilisé, du nombre de trajectoires de gouttes d'eau simulées, de l'angle du spray envisagé, de la température de l'eau et de l'air employés et du pas de temps d'intégration des trajectoires des gouttes a été étudié. Les différents essais réalisés sont présentés dans le tableau suivant (Tableau V-4) :

Tableau V-4: Paramètres de simulations utilisés dans les différents essais.

N°	Température de l'air [K]	Température des gouttes [K]	Maillage	Nombre de trajectoires de gouttes	Angle du demi-spray [°]	Pas de temps d'intégration [s]
1	355	355	1	5	19	$6,25 \cdot 10^{-3}$
2	355	355	2	156	19	$8 \cdot 10^{-2}$
3	355	355	2	312	19	$4 \cdot 10^{-2}$
4	355	303	2	312	19	$4 \cdot 10^{-2}$
5	355	303	3	312	19	$8 \cdot 10^{-2}$
6	355	303	3	312	19	$4 \cdot 10^{-2}$
7	355	303	4	312	19	$8 \cdot 10^{-2}$
8	355	303	3	312	45	$8 \cdot 10^{-2}$
9	355	303	3	312*	19	$8 \cdot 10^{-2}$

Dans ce tableau, le chiffre donné pour le maillage correspond au nombre de raffinements réalisés sur le maillage initial. Ainsi, le chiffre 1 correspond au maillage initial alors que le chiffre 4 correspond au maillage initial raffiné 4 fois 4 fois (nombre de mailles multiplié par $8^4 = 4096$). Les différents essais présentés ont été réalisés avec un spray générant des gouttes d'eau monodisperses de diamètre égal à $141 \mu m$. Seul l'essai 9 utilise des gouttes d'eau polydisperses dont la granulométrie est donnée par une distribution Rosin-Rammler dont le diamètre moyen en masse correspond à $196 \mu m$ et le paramètre de dispersion est égal à 4,57.

L'évolution de la concentration en particules d'aérosol de $3 \mu m$ de diamètre dans l'enceinte TOSQAN (au point de prélèvement L1) est donnée dans la Figure V-9. Dans cette figure, les ronds noirs correspondent aux données de Marchand (Marchand, 2008) sur l'expérience AG0 de TOSQAN et les autres courbes correspondent aux simulations réalisées avec les paramètres donnés dans le tableau précédent (Tableau V-4). Les résultats de simulation numériques ne sont donnés qu'à partir de $t = 200s$ car, durant ces 200 premières secondes, toutes les gouttes d'eau injectées dans l'enceinte TOSQAN sont entièrement vaporisées et ce phénomène n'est pas simulé dans les simulations numériques réalisées par nos soins.

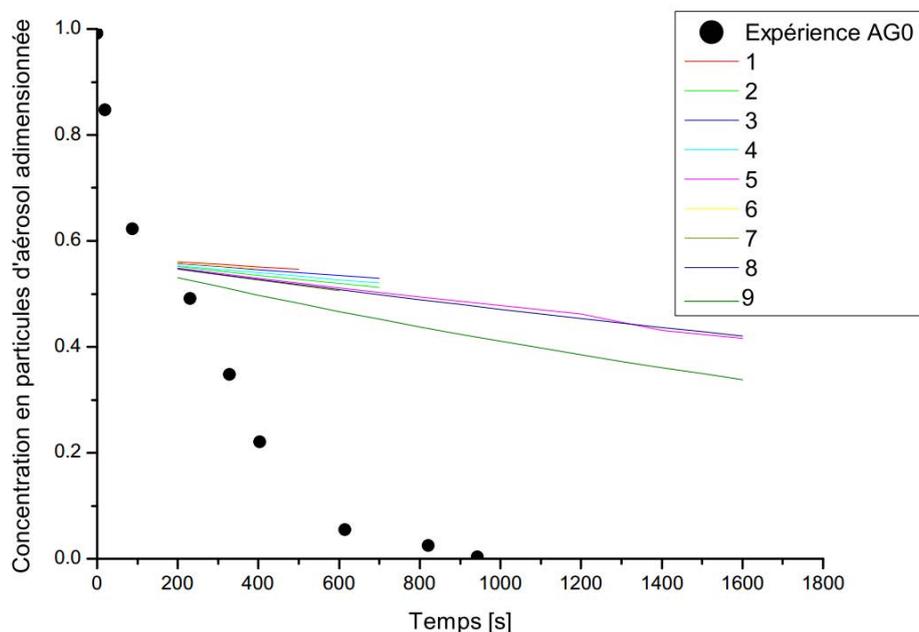


Figure V-9 : Evolution de la concentration en particules d'aérosol adimensionnée en fonction du temps. Particules d'aérosol de $3 \mu m$ de diamètre. Simulation de l'essai AG0.

La figure précédente (Figure V-9) montre qu'il y a une différence importante entre les résultats expérimentaux (ronds noirs) et les différents résultats de simulation numérique (lignes). Cependant, comme le montrent les différentes courbes représentant les résultats de nos simulations numériques, l'impact des différents paramètres étudiés (maillage, nombre de gouttes d'eau, angle du spray, granulométrie des gouttes d'eau, température de l'eau et de l'air et pas de temps d'intégration) sur la variation de la concentration en particules d'aérosol dans l'air est faible par rapport à l'écart entre les résultats numériques et ceux expérimentaux. Ceci permet de conclure que l'écart entre les simulations numériques et l'expérience n'est pas majoritairement dû aux paramètres numériques de simulation choisis dans notre étude. La discussion relative à cette comparaison est présentée dans la partie V.1.2.f.

V.1.2.f Discussion sur les simulations numériques des expériences de TOSQAN

Les comparaisons des résultats numérique d'évolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air, que ce soit avec les essais S0 (sans aspersion, sédimentation seule) ou AG0 (aspersion, abattage humide) avec les résultats expérimentaux n'ont pas permis de valider notre approche de simulation de l'abattage humide. En plus du fait que les conditions expérimentales de ces deux essais diffèrent fortement des conditions couramment rencontrées dans le cadre de problématiques d'hygiène industrielle (température, humidité relative, pression,...), des hypothèses peuvent être avancées pour expliquer les écarts observés.

Concernant l'essai S0 qui correspond à un essai sans aspersion, une des explications envisageables pouvant expliquer les écarts dans les résultats est que les diamètres simulés ne correspondent pas aux diamètres aérodynamiques réels des particules d'aérosol présentes dans l'enceinte. En effet dans l'expérience les particules sédimentent beaucoup plus vite. Cette différence pourrait être due à une mauvaise interprétation des mesures granulométriques présentées par Marchand (Marchand, 2008). En effet les particules d'aérosol employées lors des expériences TOSQAN sont des particules de SiC non sphériques de masse volumique égale à 3,21. De plus, les mesures ont été réalisées avec des granulomètres qui ne mesurent pas directement le diamètre aérodynamique utilisé dans les simulations : lors des expériences, le diamètre optique des particules d'aérosol est mesuré par un granulomètre WELAS. Ensuite, ce diamètre optique est traduit en diamètre aérodynamique grâce à un facteur correctif obtenu lors d'expériences de calibration. Durant la calibration, des Monospher 1000 (particules sphériques de SiO₂, masse volumique égale à 2,65) ont vu leur diamètre mesuré avec un granulomètre WELAS (diamètre optique) et un APS (Aerodynamic Particle Sizer, diamètre aérodynamique). Ces deux mesures ont ainsi permis de définir le facteur traduisant le diamètre optique mesuré par le WELAS en un diamètre aérodynamique. Une autre hypothèse possible est que la cinétique de purge de l'aérosol dans l'enceinte TOSQAN est perturbée par l'appareil de mesure de la concentration en particules d'aérosol. En effet, celui-ci prélève de l'air à un débit de 5l/min en L1 et de 5l/min en L2 et peut donc perturber la sédimentation des particules d'aérosol. De plus, il est possible que les particules d'aérosol se déposent sur les parois de l'enceinte durant l'expérience via dépôt électrostatique.

Plusieurs hypothèses peuvent être avancées au sujet des causes possibles engendrant les différences constatées entre les résultats numériques et les résultats expérimentaux de l'essai AG0. En premier lieu, les hypothèses avancées pour expliquer les écarts simulations/expérience de l'essai S0 sont toujours valables. D'autres causes d'écart probables viennent s'y ajouter : l'impact de la traînée des gouttes d'eau sur les mouvements d'air (homogénéisation de l'enceinte) peut être sous-estimé au niveau de la simulation (transfert de quantité de mouvement), ou encore, un phénomène physique ayant un impact non négligeable sur l'évolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air n'est pas pris en compte. Le phénomène en question peut correspondre aux 200 premières secondes de l'expérience au cours desquelles les gouttes d'eau sont entièrement vaporisées. En effet, même si la capture des particules d'aérosol par des gouttes d'eau ne se produit pas durant cette première phase expérimentale, le spray d'eau met en mouvement l'air présent dans l'enceinte. Ce mouvement d'air peut améliorer l'homogénéisation du banc d'essai et ainsi avoir un effet sur la capture des particules d'aérosol.

D'une manière générale, les courbes de la concentration en particules d'aérosol dans l'air tracées à partir des résultats des simulations numériques sont linéaires décroissantes (Figures V-6, V-

8 et V-9), tandis que celles présentant les résultats expérimentaux ont une forme exponentielle décroissante (Figures V-5, V-8 et V-9). La forme linéaire des courbes montre que les puits de concentration en particules d'aérosol dans l'air ne sont pas homogènes dans l'espace. Ceci interpelle sur le fait qu'il y a un défaut de mélange dans les simulations numériques par rapport aux expériences.

V.2 Proposition et dimensionnement d'un banc d'essai de validation

Afin de poursuivre la validation de la méthode de simulation développée, un banc d'essai est proposé et dimensionné dans cette partie de chapitre. Ce banc d'essai doit être représentatif des situations principalement rencontrées dans les problématiques d'hygiène industrielle.

V.2.1 Cahier des charges

V.2.1.a Contraintes

L'objectif du banc d'essai est d'évaluer la méthode de simulation numérique de l'abattage humide par rapport à des situations représentatives de problématiques d'hygiène industrielle couramment rencontrées. Par conséquent, le banc d'essai doit comprendre une génération de gouttes d'eau et un volume où de l'air chargé en particules d'aérosol s'écoule. Puisque la simulation numérique utilise le noyau de capture K_{wc} , les caractéristiques des captures doivent correspondre à la gamme modélisée par ce noyau de capture ($d_p \in [1 \text{ nm}; 100 \text{ }\mu\text{m}]$, $d_g \in [80; 600] \mu\text{m}$ et $Re_g \in [1; 100]$). De plus, l'efficacité d'assainissement de l'air doit pouvoir être facilement et précisément mesurée puisque ce sera la grandeur comparée avec les résultats de la simulation numérique. Ainsi, plusieurs contraintes pour le banc d'essai sont fixées :

- Au niveau de l'air chargé en particules d'aérosol : la température et l'humidité relative de l'air doivent être connues et contrôlables. De plus, ces grandeurs doivent être mesurées en temps réel et tout au long de l'expérience.
- Concernant les particules d'aérosol : elles doivent avoir un diamètre aérodynamique appartenant à la gamme d'intérêt de l'étude ($d_p \in [1 \text{ nm}; 100 \text{ }\mu\text{m}]$). De plus, le dépôt des particules d'aérosol sur les parois du banc d'essai, ainsi que leur sédimentation, doivent être négligeables devant le phénomène de capture.
- Au niveau des gouttes d'eau : leur granulométrie doit correspondre à un diamètre compris entre 80 et 600 μm et leur température doit être connue et contrôlable. De plus, les sprays d'eau doivent générer des gouttes d'eau qui ne vont que très rarement impacter les parois du banc d'essai afin d'empêcher le ruissellement de l'eau sur les parois et son impact sur l'évolution de la dépollution de l'air. Par ailleurs, la durée de vie des gouttes d'eau dans l'enceinte doit être suffisamment grande pour que leur temps de contact avec l'air chargé en particules d'aérosol mène à des efficacités de captures assez importantes pour être mesurées précisément. Par ailleurs, au moment de la capture de la capture des particules d'aérosol par les gouttes d'eau, le nombre de Reynolds des gouttes d'eau doit être inférieur à 100 pour correspondre à la gamme de nombre de Reynolds d'étude.
- D'un point de vue général, l'évolution de la capture des particules d'aérosol par les gouttes d'eau doit pouvoir être mesurée via l'analyse de la concentration en particules d'aérosol dans l'air (dépollution de l'air) et via la mesure de la quantité de particules d'aérosol présentes dans l'eau des gouttes (pollution de l'eau). De plus, puisque des mesures par laser (PIV : vélocimétrie par image de particule, PDA : anémomètre à phase Doppler) doivent être réalisées au niveau du banc d'essai, celui-ci doit être compatible avec la réalisation de mesures optiques. Ainsi, il est préférable que les parois du banc d'essai soient transparentes et planes. Ces mesures serviront à

caractériser les gouttes d'eau et le flux d'air s'écoulant dans l'enceinte. Par ailleurs, le banc d'essai doit avoir une taille réduite (de l'ordre de 3m de haut) pour pouvoir être installé dans une salle d'essai lambda.

Ces différentes contraintes imposent des restrictions dans la définition d'un banc d'essai.

V.2.1.b Principe général

Le principe général retenu pour le banc d'essai est le principe de la tour de lavage qui correspond à une enceinte verticale où s'écoulent, à contre-courant, des gouttes d'eau et de l'air chargé en polluants (Figure V-10).

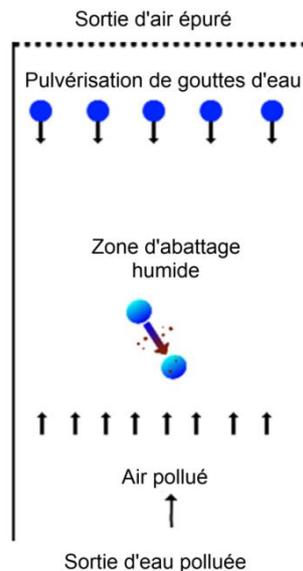


Figure V-10 : Schéma d'une tour de lavage.

Dans le banc d'essai envisagé comme une tour de lavage, l'air chargé en polluant s'écoule du bas vers le haut et les gouttes d'eau tombent de la partie haute vers la partie basse. De plus, la zone d'abattage humide (zone où ont lieu les captures) doit être suffisamment grande pour que l'épuration de l'air soit précisément mesurable. La mesure de la concentration en particules d'aérosol dans l'air se fait au niveau de l'entrée d'air et de la sortie d'air. Ceci permet de calculer de façon précise la décroissance en pollution dans l'air. Une mesure de la concentration en particules dans l'eau, au niveau de la sortie d'eau, peut être envisagée pour vérifier les mesures réalisées sur l'air.

Cette partie du chapitre montre que la conception du banc d'essai doit prendre en compte différentes contraintes et peut correspondre à une tour de lavage. Ainsi, les caractéristiques d'une tour de lavages sont retenues pour étudier la faisabilité du banc d'essai.

V.2.2 Conception du banc d'essai

La conception du banc d'essai est réalisée en deux phases. La phase de conception commence par une étude de faisabilité. Celle-ci consiste à prédimensionner le banc d'essai en réalisant une modélisation 1D de celui-ci avec le logiciel Matlab®. Ensuite, le banc d'essai prédimensionné est simulé à l'aide du logiciel de CFD Fluent®. Ainsi, l'utilisation de l'approche de simulation macrophysique

permet de prédire les résultats d'épuration de l'air de chaque banc d'essai imaginé et ainsi de sélectionner les configurations qui apporteront les résultats attendus en termes d'efficacité de capture (résultats mesurables précisément).

V.2.2.a Etude de faisabilité

Cette première phase consiste à étudier la faisabilité de la conception du banc d'essai en le modélisant en 1D à l'aide du logiciel Matlab®.

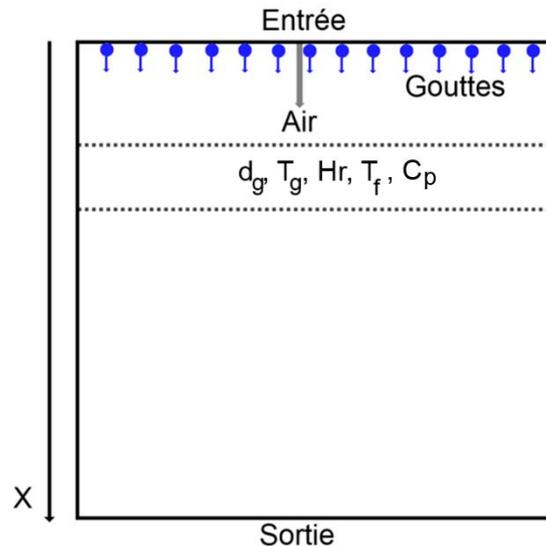


Figure V-11 : Schéma du banc d'essai modélisé en 1D.

Cette modélisation 1D possède les mêmes caractéristiques que celles présentées dans le chapitre précédent (cf IV.4.1.a). Ainsi, la modélisation réalisée (Figure V-11) est celle d'un écoulement co-courant air/gouttes d'eau où la vitesse de glissement des gouttes d'eau est constante, l'impact de l'évolution de la fraction de vapeur d'eau dans l'air sur sa densité est négligé et la diffusivité des espèces et de la température est négligeable par rapport au phénomène de convection.

Les Figures suivantes (Figure V-12 et V.13) présentent l'évolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air en fonction de l'axe x pour une modélisation représentant un volume de $2 m^3$ (hauteur suivant x de $2m$) ayant comme grandeurs initiales :

- Pour les gouttes d'eau : diamètre égal à $300 \mu m$ (Figure V-12) ou $200 \mu m$ (Figure V-14), température égale à $293,15 K$, débit d'eau égal à $3 \cdot 10^{-2} m^3 min^{-1}$, vitesse relative égale à la vitesse limite de chute des gouttes d'eau (soit $1,17 m s^{-1}$ pour la Figure V-12 et $0,71 m s^{-1}$ pour la Figure V-13).
- Pour l'air : humidité relative de l'air égale à 40% et température de l'air égale à celle des gouttes d'eau.
- Pour les particules : diamètre compris entre $1 nm$ et $10 \mu m$.

Figure V-12 décrit la variation de concentration en particules d'aérosol obtenue numériquement avec les paramètres de modélisation 1D présentés dans le paragraphe précédent ($d_p = 300 \mu m$). Cette Figure montre que la concentration en particules d'aérosol dans l'air ne varie que peu pour les particules d'aérosol de diamètre aérodynamique étudiées. En effet, la variation

maximale de la concentration en particules d'aérosol dans l'air n'atteint que 10 % environ. Cette valeur, bien qu'elle soit non négligeable, ne permettra pas d'évaluer convenablement l'approche de simulation macrophysique. En effet, les incertitudes de mesures ne sont pas négligeables devant ces faibles valeurs d'épuration de l'air.

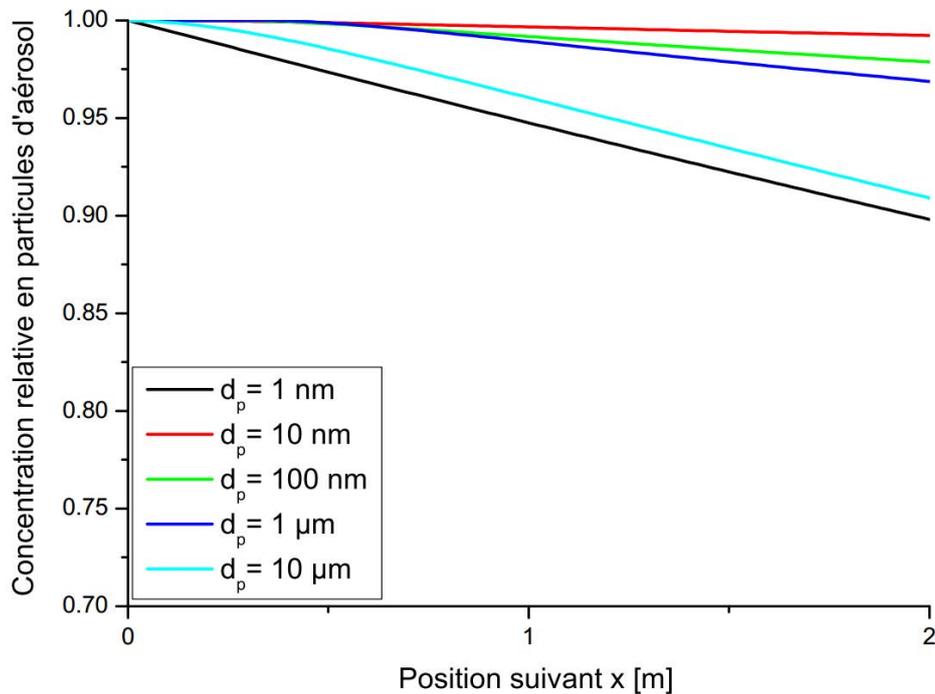


Figure V-12 : Evolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air en fonction de x . $d_g = 300 \mu m$.

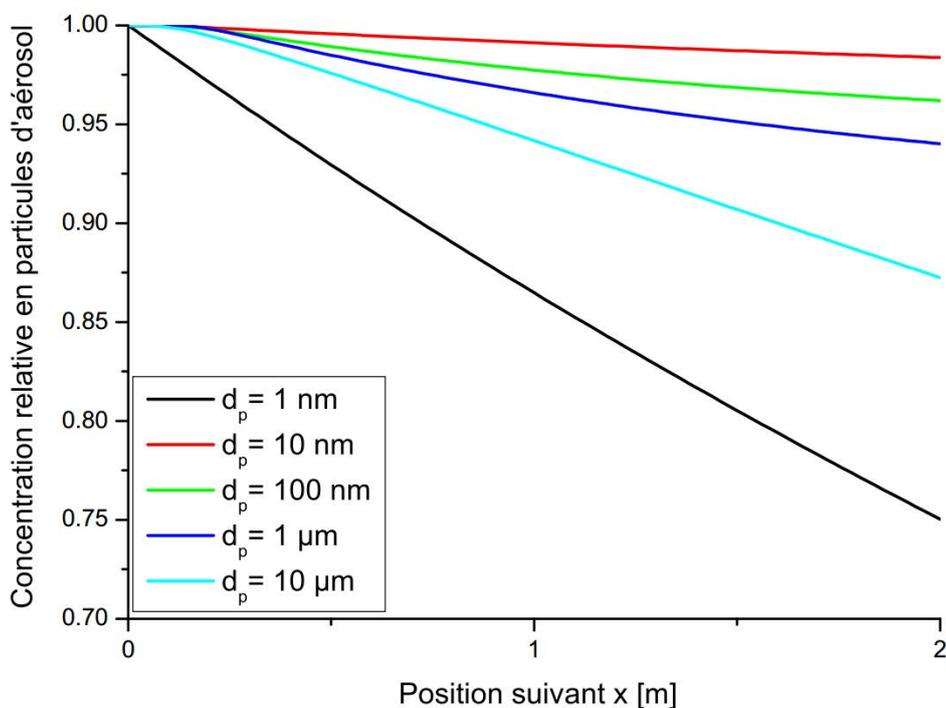


Figure V-13 : Evolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air en fonction de x . $d_g = 200 \mu m$.

Quant à elle, la Figure V-13 ($d_p = 200 \mu m$) montre que la concentration en particules d'aérosol dans l'air varie sensiblement pour les particules d'aérosol de diamètre aérodynamique

inférieur à 10 *nm* et supérieur à 1 μm . Pour la gamme intermédiaire de particules, la variation n'est pas suffisante pour être précisément mesurée de façon expérimentale. Ceci laisse supposer que le banc d'essai, s'il obéit aux mêmes paramètres, ne pourra pas être utilisé pour vérifier la bonne simulation de la capture de particules d'aérosol appartenant à cette gamme intermédiaire de diamètre. Pour obtenir une épuration plus importante, il est envisageable d'augmenter le débit d'eau, la hauteur de chute des gouttes d'eau (augmentation du temps de présence) ou encore d'augmenter la différence de température entre l'air et l'eau ou d'abaisser la valeur de l'humidité relative de l'air entrante dans le banc d'essai (capture phorétique).

Les Figures (Figure V-12 et V-13) ci-dessus permettent de valider la faisabilité de l'approche expérimentale reposant sur l'utilisation d'un banc d'essai basé sur le principe de la tour de lavage. En effet, les résultats présentés précédemment montrent que l'évolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air devrait être suffisamment importante pour que les mesures de concentration en particules d'aérosol soient significatives. De plus, en donnant des informations quant au taux d'épuration de l'air pour diverses modélisations 1D du banc d'essai, ces Figures permettent de mettre en avant les valeurs initiales des différentes variables (taille des gouttes, vitesse relative,...) qui semblent mener à un banc d'essai utilisable. Néanmoins, plusieurs phénomènes ne sont pas pris en compte dans la modélisation 1D (dépôt des particules d'aérosol, vitesse relative des gouttes d'eau non constante, ...).

Cette première phase de conception a permis de s'assurer de la faisabilité de la conception d'un banc d'essai pour évaluer notre approche de simulation macrophysique de l'abattage humide. Par ailleurs, les divers résultats de dépollution de l'air obtenus ont servi à prédimensionner le banc d'essai.

Cependant, il est essentiel de réaliser une simulation macrophysique d'abattage humide pour étudier plus précisément le phénomène de dépollution.

V.2.2.b Dispositif modélisé

Puisque le dispositif envisagé pour le banc d'essai est basé sur le principe de la tour de lavage, il peut correspondre à celui présenté dans la Figure V-14.

Le dispositif présenté dans la Figure V-14 valide les différentes contraintes posées dans la partie précédente. L'air chargé en polluant entre dans l'enceinte par le côté droit et ressort de celle-ci par le haut. Les gouttes d'eau sont générées au niveau de la partie supérieure du banc d'essai et en sortent par le puisard situé en sa partie inférieure et la taille de la zone utile à l'épuration de l'air peut être adaptée aux besoins de l'étude. Les deux zones de prélèvement d'air pour la mesure de la décroissance en polluant de l'air sont les zones de prélèvement 1 et 2. La zone de prélèvement 3 sert à l'étude de la pollution de l'eau.

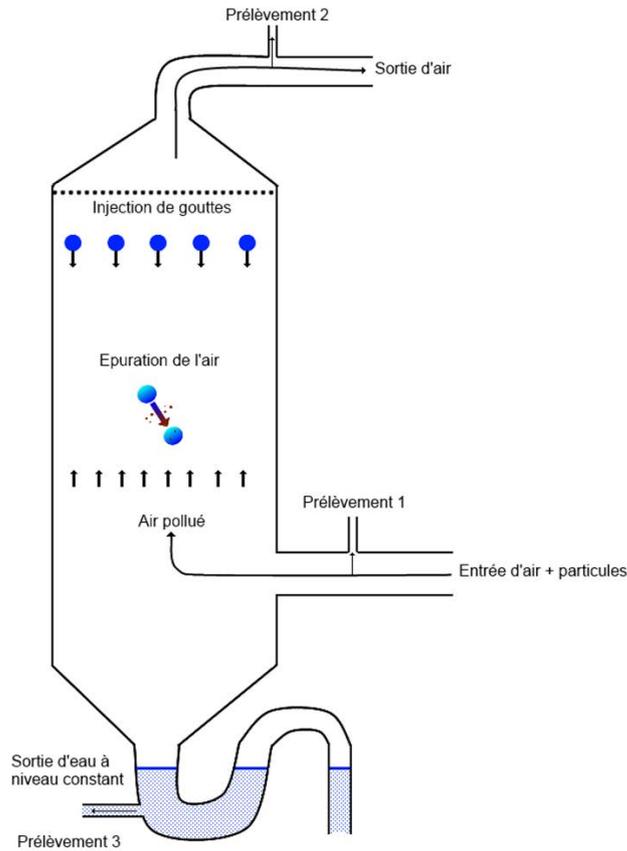


Figure V-14 : Dispositif de banc d'essai envisagé.

Ce dispositif de banc d'essai a été modélisé avec le logiciel de CFD afin de réaliser des simulations d'abattage humide (Figure V-15).

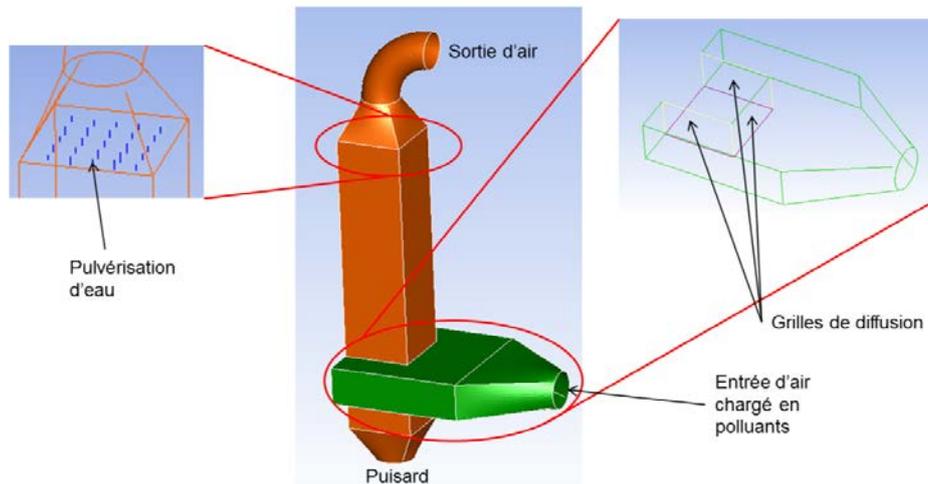


Figure V-15 : Schéma du banc d'essai modélisé avec le logiciel de CFD.

Comme le montre la Figure V-15, le banc d'essai possède trois grilles de diffusion : deux verticales au niveau de son entrée d'air (en jaune) et une horizontale au niveau de la sortie de l'eau (en violet). Celles-ci servent à la fois à diminuer l'impact de la forme de l'entrée d'air sur l'écoulement d'air s'établissant dans l'enceinte où se produit la capture et aussi à réduire sa turbulence. Sur cette Figure (Figure V-15), le puisard et les zones de prélèvement ne sont pas représentés car il est supposé

que ces parties n'influencent que de façon négligeable les résultats de simulation. La Figure V-15 montre que les buses choisies sont disposées de façon régulière sur un maillage carré. Ces buses génèrent les gouttes d'eau par un train de goutte régulier. Ceci permet d'éviter que les gouttes ne viennent impacter les parois verticales. Le maillage utilisé pour la simulation du banc d'essai est un maillage régulier hexaédrique.

Plusieurs hypothèses de simulation et modèles numériques sont nécessaires pour simuler ce banc d'essai.

V.2.2.c Hypothèses de simulation et modèles

Le banc d'essai est simulé avec le logiciel de CFD Fluent® en suivant les mêmes paramètres de simulation que ceux présentés dans le chapitre précédent (cf IV.4.3). Ainsi, l'écoulement d'air est modélisé avec un modèle RANS $k - \varepsilon$ réalisable, le suivi des gouttes d'eau se fait avec une approche lagrangienne, le transport des particules d'aérosol est modélisé avec le modèle Diffusion-inertia de Zaïchik *et al.* (Zaichik *et al.*, 2004) et leur dépôt est modélisé avec le modèle de Couche Limite Dynamique de Nérison *et al.* (Nerisson *et al.*, 2011). Par ailleurs, l'impact des trois grilles de diffusion sur l'écoulement d'air est modélisé par l'intermédiaire du modèle de saut de pression du logiciel Fluent® (porous jump boundary condition, Equation V-1). Cette équation relie la différence de pression imposée à l'air au moment de son passage au travers d'une grille de diffusion aux caractéristiques physiques de cette grille.

$$\Delta P = - \left(\frac{\mu_f}{\alpha} \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{n} + \frac{1}{2} C_1 \rho_f (\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{n})^2 \right) Ep , \quad (V-1)$$

avec μ_f la viscosité dynamique de l'air, α la perméabilité de la grille, \mathbf{u}_f la vitesse de l'air au voisinage de la grille, \mathbf{n} le vecteur normal à la grille, ρ_f la densité de l'air, C_1 le coefficient de saut de pression et Ep l'épaisseur de la grille. Les grilles disponibles pour le banc d'essai présentent les paramètres suivants: $\alpha = 2,16 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2$ et $C_1 = 10,28 \text{ m}^{-1}$.

Diverses conditions limites sont utilisées dans ces simulations :

- L'entrée d'air correspond à une entrée d'air à pression constante égale à la pression atmosphérique. La température de l'air est égale à la température initiale fixée par le cas. Il en est de même pour la fraction molaire en vapeur d'eau dans l'air. De plus, l'air entrant est chargé en particules d'aérosol.
- Les parois extérieures du banc d'essai et le puisard situé en bas de celui-ci sont des murs adiabatiques. Une condition de sortie pour les gouttes d'eau et une condition de dépôt pour les particules d'aérosol sont utilisées.
- Les conditions limites pour les grilles de diffusion sont de type saut de pression et leur influence sur l'écoulement d'air est simulée via l'Equation V-1. Par ailleurs, les gouttes d'eau sont évacuées du domaine quand elles touchent ces grilles.
- La sortie d'air de l'enceinte est une sortie d'air à vitesse constante. Une condition de flux nul est utilisée pour les particules d'aérosol.

- La pulvérisation des gouttes d'eau a lieu au-dessus de la zone de capture (Figure V-16). Les conditions employées ici correspondent à une injection de type groupe où les gouttes d'eau ont un diamètre égal au diamètre initial fixé par le cas d'étude.

Les différentes caractéristiques de simulation retenues pour la simulation de banc d'essai sont détaillées dans la partie suivante.

V.2.2.d Etude paramétrique et résultats de simulation

Pour optimiser la conception du banc d'essai, une étude paramétrique a été menée en faisant varier les paramètres suivants :

- La longueur de la zone du banc d'essai où se produisent les captures.
- Le diamètre, la température, le débit et la vitesse d'injection des gouttes d'eau.
- Le débit, la température et l'humidité relative de l'air.
- La granulométrie des particules d'aérosol.

L'objectif de ces différentes simulations est de concevoir un banc d'essai dont l'efficacité d'assainissement soit précisément mesurable, c'est-à-dire, supérieure au seuil de détection des outils de mesure et supérieure aux imprécisions de mesures. Pour ce faire, il faut définir des valeurs pour chacune des variables listées précédemment. Puisque les gradients de fraction de vapeur d'eau et de température dans l'air augmentent les efficacités de capture (diffusiophorèse et thermophorèse), la conception du banc d'essai est réalisée en fixant la température des gouttes d'eau égale à celle de l'air et l'humidité relative de l'air égale à 40 %.

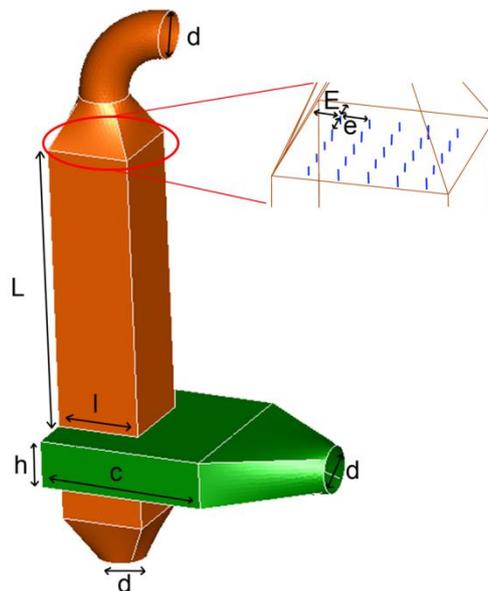


Figure V-16 : Caractéristiques géométriques du banc d'essai.

Les caractéristiques de simulation retenues sont les suivantes :

- Caractéristiques géométriques du banc d'essai (Figure V-16) : les conduits pour la sortie d'eau, ainsi que l'entrée et la sortie d'air, ont un diamètre de 20 cm (d sur la

Figure V-16). Le volume où passe l'air avant d'entrer dans la zone de capture fait une longueur de 70 cm (c sur la Figure V-16) et une hauteur de 20 cm (h sur la Figure V-16). Pour finir, la zone parallélépipédique de capture fait une longueur de 2,4 m (L sur la Figure V-16) et une largeur de 35 cm (l sur la Figure V-16).

- Caractéristiques de l'air : l'air est injecté dans l'enceinte à un débit de $3,7 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, à une température de $293,15 \text{ K}$ et à une humidité relative de 35 %. Le débit d'air est fixé par la valeur minimale requise pour la vitesse de l'air dans la zone de capture : la vitesse de l'air ascendant doit être supérieure à $0,3 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ pour pouvoir éviter les écoulements non maîtrisés dus à la convection naturelle.
- Caractéristiques des particules d'aérosol : les particules d'aérosol sont des sphères de densité unitaire et ont un diamètre compris entre 1 nm et $10 \mu\text{m}$.
- Caractéristiques des gouttes d'eau : les gouttes d'eau sont générées via 25 buses réparties de façon homogène sur une nourrice (5 buses par 5 buses, toutes espacées les unes des autres de façon constante, (Figure V-16)). La distance entre chaque buse est de 5,75 cm (e sur la Figure V-16) et la distance entre la première (et la dernière) buse de chaque rangée et la paroi est de 6 cm (E sur la Figure V-16). Ces buses pulvérisent des gouttes d'eau suivant un train de gouttes dont le débit total est de 2 litres par minute. Les gouttes d'eau générées ont un diamètre de $200 \mu\text{m}$ ou de $300 \mu\text{m}$, une vitesse d'injection de $16 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ et une température égale à celle de l'air.

La simulation des interactions entre les gouttes d'eau et les particules d'aérosol se produisant dans ce banc d'essai permet d'obtenir des résultats d'efficacité d'assainissement de l'air.

Résultats de simulation :

La simulation d'un banc d'essai correspondant aux caractéristiques détaillées dans le paragraphe précédent permet d'obtenir des informations quant à l'air, à l'évolution de la concentration en particules d'aérosol et aux gouttes d'eau. Comme présenté précédemment, les caractéristiques des simulations numériques sont: $Q_{air} = 3,7 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$; $H_{r_0} = 0,35$; $T_{air_0} = T_{g_0} = 293,15 \text{ K}$; $Q_g = 3,3 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ et $u_{g_0} = 16 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$.

Les Figure V-17, V-18 et V-19 présentent les évolutions du diamètre, du nombre de Reynolds et de la température des gouttes d'eau dans le cas où leur diamètre initial fait $200 \mu\text{m}$ et $300 \mu\text{m}$.

La Figure V-17 montre que, dans les conditions de simulations étudiées, le diamètre des gouttes d'eau ne varie que de façon négligeable dans la zone de capture. En effet, la diminution maximale de diamètre est inférieure à 1% de la taille initiale des gouttes.

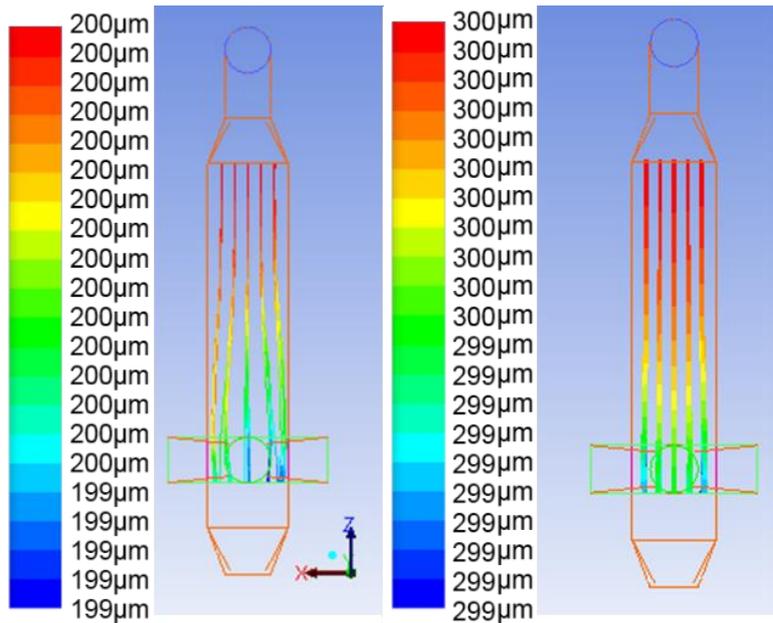


Figure V-17: Trajectoire des gouttes d'eau et évolution de leur diamètre. Diamètre initial des gouttes égal à 200 μm (gauche) ou 300 μm (droite).

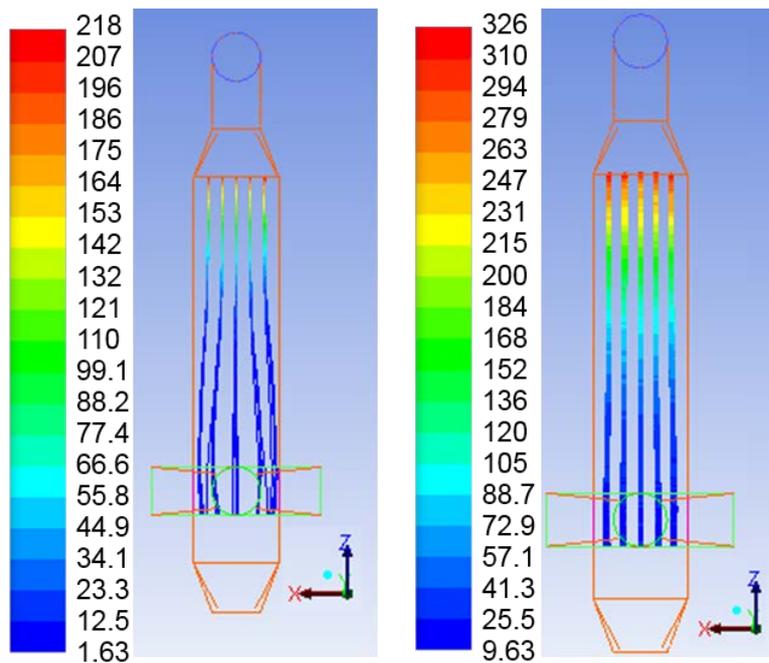


Figure V-18 : Trajectoire des gouttes d'eau et évolution de leur nombre de Reynolds. Diamètre initial des gouttes égal à 200 μm (gauche) ou 300 μm (droite).

Comme présenté dans la Figure V-18, le nombre de Reynolds de la goutte est supérieur à 100 dans la zone proche de l'aspersion : pour les gouttes de 200 μm de diamètre, le nombre de Reynolds de goutte est presque égal à 220 puis diminue jusqu'à environ 2 en bas de la zone de capture; la valeur maximale du nombre de Reynolds de goutte pour les gouttes de 300 μm de diamètre dépasse 325 puis baisse jusqu'à environ 10. Ainsi, la hauteur de chute des gouttes d'eau sur laquelle leur nombre de Reynolds est compris entre 1 et 100 est d'approximativement 85% de la hauteur totale pour $d_{g0} = 200 \mu\text{m}$, contre 60% pour $d_{g0} = 300 \mu\text{m}$. Par conséquent, l'épuration de l'air qui aura lieu en dehors de ces zones fait partie des limitations et incertitudes liées à ce banc d'essai. Cette Figure indique qu'il

est préférable d'utiliser des gouttes de 200 μm de diamètre pour augmenter la taille de la zone où les gouttes ont un nombre de Reynolds correspondant à la gamme d'étude de cette thèse.

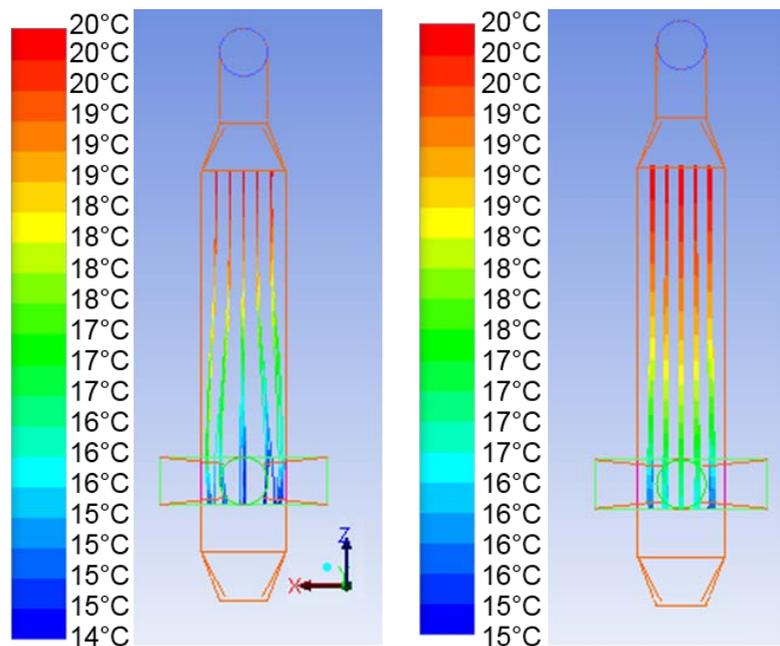


Figure V-19 : Trajectoire des gouttes d'eau et évolution de leur température. Diamètre initial des gouttes égal à 200 μm (gauche) ou 300 μm (droite).

Au niveau de la zone de capture, l'évolution de la température des gouttes d'eau correspond à une baisse d'environ 5 degrés (Figure V-19). Cette baisse de température est semblable pour les gouttes de 200 μm et pour celles de 300 μm de diamètre.

Les trois Figures précédentes (Figures V-17, V-18 et V-19) montrent que le diamètre des gouttes d'eau impacte fortement leur trajectoire. En effet, les gouttes d'eau de 300 μm de diamètre ont une trajectoire quasi-rectiligne lors de leur chute alors que celles de 200 μm ont une trajectoire non-rectiligne en raison d'une plus grande sensibilité aux écoulements d'air (plus faible inertie).

La Figure V-20 montre l'évolution de la vitesse, de la fraction en vapeur d'eau et de la température de l'air dans le cas où des gouttes de 200 μm sont utilisées. La Figure de gauche représente les lignes de courant de l'air et sa vitesse. La vitesse de l'air est globalement supérieure à $0,3 \text{ m s}^{-1}$ dans la zone de capture, ce qui devrait être suffisant pour limiter l'influence de la convection naturelle. La Figure du milieu décrit l'évolution de la fraction molaire en vapeur d'eau dans l'air suivant un plan médian. L'humidité relative augmente au fur et à mesure du temps de présence de l'air dans l'enceinte du fait de l'évaporation des gouttes d'eau. La Figure de droite présente la température de l'air suivant le même plan médian. En mettant en relation cette Figure et la Figure V-19 (gauche), on peut constater que la température de l'air évolue de façon similaire à celle des gouttes d'eau. De plus, les valeurs affichées sont comparables.

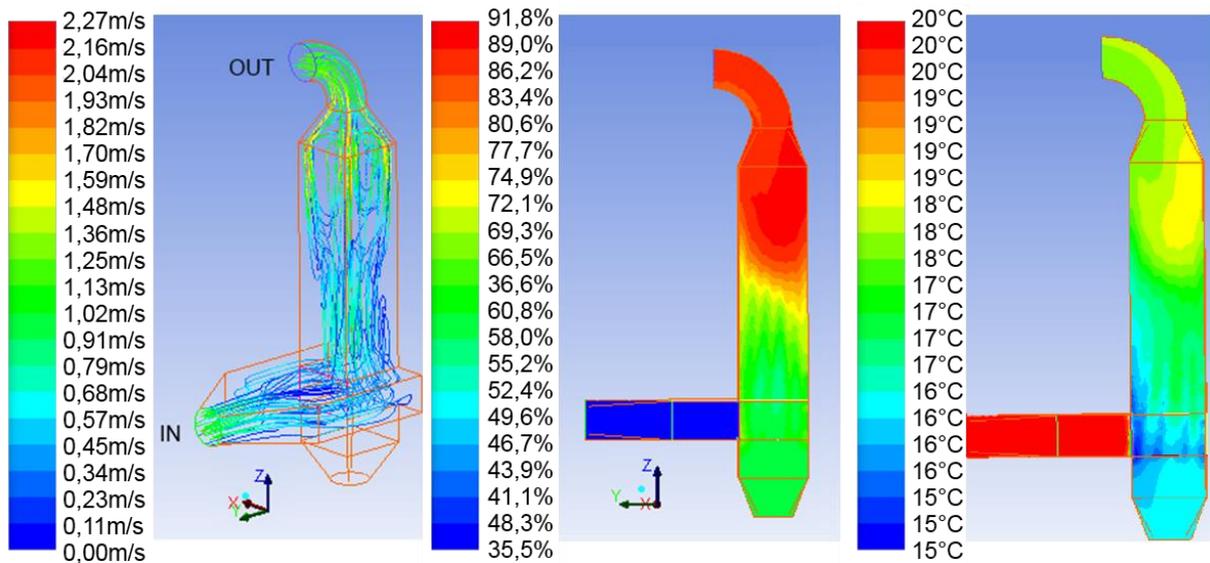


Figure V-20 : Evolution de la vitesse de l'air (lignes de courant, gauche), de l'humidité relative dans l'air (milieu) et de la température de l'air (droite). Diamètre initial des gouttes égal à 200 μm .

Les Figure V-17 à V-20 ont présenté l'évolution des caractéristiques des gouttes et de l'air en fonction de leur position dans l'enceinte du banc d'essai. Les résultats suivants concernent l'évolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air. Les résultats présentés dans les Tableaux V-5 à V-7 concernent l'épuration de l'air qui est définie comme étant égale à $1 - \frac{C_p^{out}}{C_p^{in}}$, avec C_p^{out} correspondant à la concentration en particules d'aérosol dans l'air au niveau de la sortie du banc d'essai et C_p^{in} désignant la concentration en particules d'aérosol au niveau de l'injection d'air. Ces résultats sont obtenus par l'intermédiaire des mêmes simulations numériques dont les caractéristiques de simulation sont détaillées dans la section précédente. Elles sont rappelées ici : $Q_{air} = 3,7 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$; $H_{r_0} = 0,4$; $T_{air_0} = T_{g_0} = 293,15 \text{ K}$; $Q_g = 3,3 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ et $u_{g_0} = 16 \text{ m s}^{-1}$.

Le Tableau V-5 présente l'évolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air dans le cas où les gouttes d'eau ont un diamètre de 200 μm . Les résultats présentés dans le Tableau V-5 montrent que la baisse de la concentration en particules d'aérosol dans l'air dû à leur dépôt sur les parois est inférieure à celle due à la capture par des gouttes d'eau. Dans le cas le moins favorable pour les mesures, l'épuration de l'air due au dépôt vaut 30% de l'épuration globale. Cette situation est rencontrée pour les particules d'aérosol d'un nanomètre de diamètre. De plus, les particules d'aérosol dont le diamètre est d'environ 100 nm ne sont pas suffisamment capturées pour que cette capture soit mesurable. Cependant, la baisse de la concentration en particules d'aérosol dans l'air est suffisamment importante pour être mesurée précisément dès lors que le diamètre des particules d'aérosol est inférieur à 10 nm environ ou supérieur à 1 μm environ.

Tableau V-5: Evolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air en fonction du diamètre aérodynamique des particules d'aérosol. $d_g = 200 \mu\text{m}$. L'épuration de l'air est égale à $1 - \frac{C_p^{out}}{C_p^{in}}$.

	d_p [m]	10^{-9}	10^{-8}	10^{-7}	10^{-6}	10^{-5}
Epuración de l'air [%]	Dépôt	22	2	≈ 0	≈ 0	5
	Capture	69	15	≈ 1	5	84
	Total	91	17	≈ 1	5	89

Dans le cas où les gouttes d'eau présentent un diamètre de $300 \mu m$, l'évolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air est détaillée dans le Tableau V-6.

Tableau V-6 : Evolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air en fonction du diamètre aérodynamique des particules d'aérosol. $d_g = 300 \mu m$. L'épuration de l'air est égale à $1 - \frac{C_p^{out}}{C_p^{in}}$.

	$d_p [m]$	10^{-9}	10^{-8}	10^{-7}	10^{-6}	10^{-5}
Epuración de l'air [%]	Dépôt	26	2	≈ 0	≈ 0	5
	Capture	66	9	≈ 1	3	87
	Total	92	11	≈ 1	3	92

La comparaison du Tableau V-6 avec le Tableau V-5 montre que lorsque le diamètre des gouttes d'eau augmente, l'efficacité de capture des particules d'aérosol de diamètre inférieur à environ $10 \mu m$ diminue mais celle correspondant à des particules d'aérosol de diamètre supérieur à environ $10 \mu m$ augmente.

Le Tableau V-7 détaille l'évolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air pour la gamme de particules d'aérosol $d_p \in [0,5; 5] \mu m$ et des gouttes d'eau de $300 \mu m$ de diamètre. Cette gamme est celle qu'il est prévu de générer dans le banc d'essai.

Tableau V-7 : Evolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air en fonction du diamètre aérodynamique des particules d'aérosol. $d_g = 300 \mu m$. L'épuration de l'air est égale à $1 - \frac{C_p^{out}}{C_p^{in}}$.

	$d_p [m]$	$5 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-6}$	$4 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-6}$
Epuración de l'air [%]	Dépôt	≈ 0	≈ 0	$\approx 0,3$	$\approx 0,7$	$\approx 1,1$	$\approx 1,6$
	Capture	0,7	2,9	24,6	41,8	56,7	68,6
	Total	0,7	2,9	24,9	42,5	57,8	70,2

Pour la gamme d'aérosol simulée dans le Tableau V-7, le taux d'épuration de l'air dû au dépôt des particules d'aérosol sur les parois est toujours négligeable devant le phénomène de capture. De plus, dès lors que le diamètre des particules d'aérosol est supérieur à $1 \mu m$, l'efficacité d'assainissement de l'air pourra être mesurée de façon précise.

Ces résultats de simulation numérique laissent envisager qu'un banc d'essai conçu à partir des caractéristiques présentées précédemment apporterait des résultats d'efficacité d'assainissement de l'air mesurables. Ainsi, il sera possible de comparer les résultats expérimentaux avec les résultats de simulations et, par conséquent, d'évaluer l'approche de simulation macrophysique de l'abattage humide comme procédé d'assainissement de l'air.

V.2.3 Réalisation du banc d'essai

La simulation numérique exposée dans la partie précédente a permis de concevoir un banc d'essai qui peut servir à valider notre approche de simulation de la capture de particules d'aérosol par des gouttes d'eau. Une fois cette conception menée à bien, il est possible de réaliser le banc d'essai.

V.2.3.a Dessin technique du banc d'essai

Le dessin technique du banc d'essai est basé sur la phase de conception de ce même banc d'essai réalisée grâce à sa simulation numérique. Ce dessin technique est présenté par la Figure V-21.

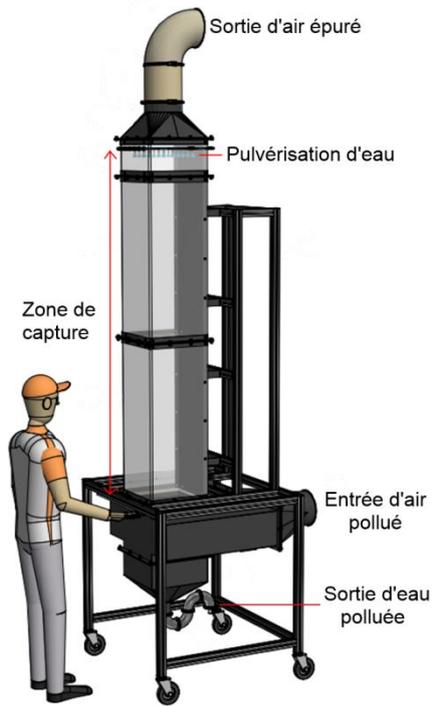


Figure V-21 : Dessin technique du banc d'essai.

Ce dessin technique (Figure V-21) présente le banc d'essai en condition d'utilisation. Les côtes sont les mêmes que celles détaillées dans la partie précédente. Puisqu'il est nécessaire de pouvoir réaliser des mesures optiques dans cette zone de capture, trois faces sur les quatre de la zone de capture sont en matériau transparent. Les autres parties du banc d'essai sont en acier inoxydable. Le banc d'essai est fixé sur une armature métallique possédant des roues pour pouvoir être déplacé au besoin.

Le dessin technique n'est pas l'unique ressource nécessaire à la mise en place du banc d'essai. Ce dessin technique est complété par une liste exhaustive des divers matériels nécessaires à la réalisation des expériences.

V.2.3.b Réflexions concernant l'exploitation du banc d'essai

Les paragraphes suivants présentent la réflexion menée au sujet de l'exploitation du banc d'essai. Ils présentent le matériel qui pourrait être essentiel à la mise en place du banc d'essai, la méthode de caractérisation du banc expérimental, le protocole de validation du banc d'essai et la campagne expérimentale envisagée.

V.2.3.b.i Matériel nécessaire à la mise en place du banc d'essai

Une liste du matériel nécessaire au bon fonctionnement du banc d'essai est détaillée dans ce paragraphe. Il est supposé maintenant que le banc d'essai a été créé, ainsi, les matériaux utilisés dans sa conception ne sont pas détaillés ici.

L'air utilisé dans le banc d'essai s'écoule à environ $0,3 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ dans la zone de capture. Ainsi, le ventilateur servant à injecter l'air dans l'enceinte doit pouvoir apporter un débit d'air de plus de $130 \text{ m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$ dont la température et l'humidité relative sont contrôlées grâce à un condenseur pour déshumidifier et refroidir l'air au besoin, un chauffage pour amener l'air à la température désirée et un humidificateur pour contrôler l'humidité de l'air. Ces trois dispositifs sont installés en amont de l'entrée d'air du banc d'essai (Figure V-22).

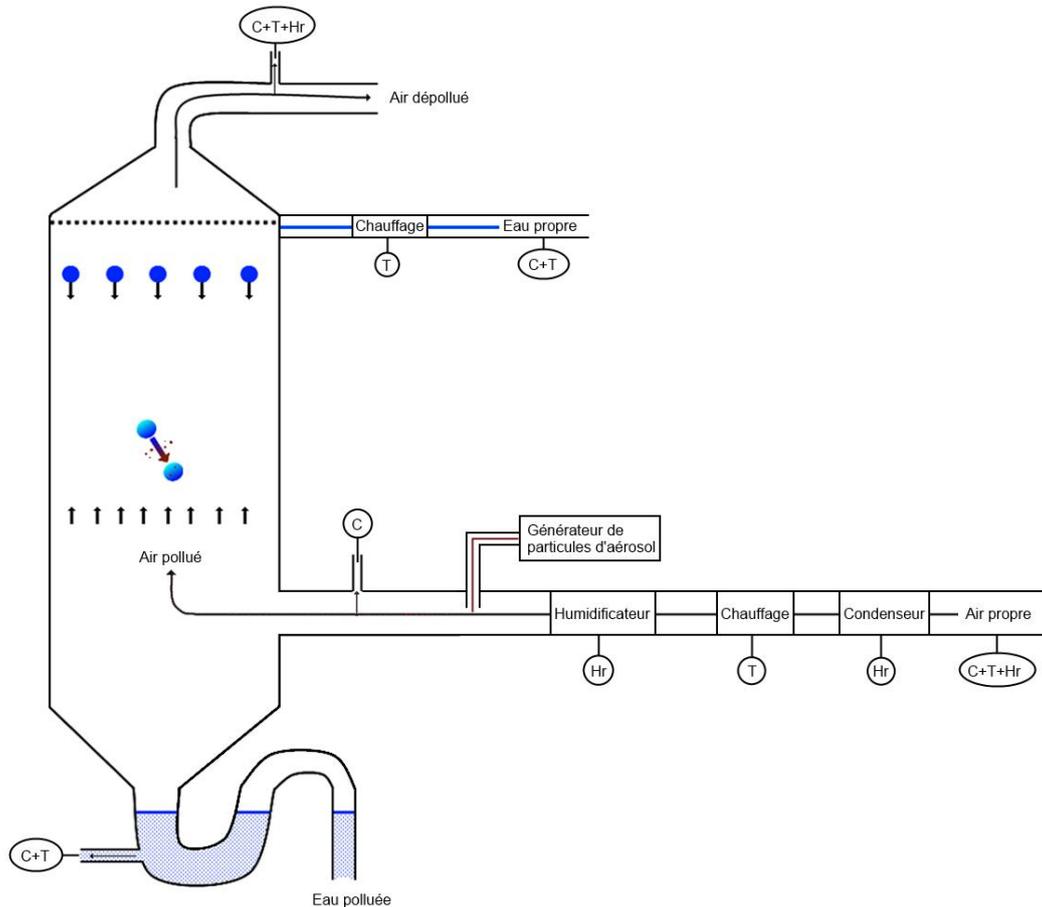


Figure V-22 : Schéma du banc d'essai avec les instruments de mesure et le matériel de contrôle de la température et de l'humidité. Le sigle Hr correspond à un capteur d'humidité, la lettre C correspond à un capteur de concentration en particules d'aérosol et la lettre T correspond à un capteur de température.

Les particules d'aérosol jouant le rôle du polluant peuvent être produites via un disperseur de poudre à brosse rotative (Palas®). Ce dispositif permet d'injecter dans l'air un débit de particules préalablement caractérisées (granulométrie, masse) tout en évitant leur agglomération.

Les gouttes d'eau qui abattent les particules d'aérosol sont générées via 25 buses plates possédant un angle de pulvérisation nul. Cette situation correspond à un train de gouttes. Les buses génèrent des gouttes d'eau quasi-monodispersées de diamètre compris entre $100 \mu\text{m}$ et 1 mm de diamètre dont la taille dépend de la pression de l'eau au niveau des buses. Les caractéristiques de ces buses sont données dans le Tableau V-8 (deux références de buses sont envisagées).

Tableau V-8 : Débit d'eau pulvérisé par une buse en fonction de son type et de la pression.

Type de buse	Diamètre d'orifice équivalent [mm]	Pression d'admission de l'eau [bar]		
		0,7	1,5	3
Buse 1	0,33	$Q_g = 0,04 \text{ l. min}^{-1}$	$Q_g = 0,059 \text{ l. min}^{-1}$	$Q_g = 0,083 \text{ l. min}^{-1}$
Buse 2	0,48	$Q_g = 0,095 \text{ l. min}^{-1}$	$Q_g = 0,14 \text{ l. min}^{-1}$	$Q_g = 0,20 \text{ l. min}^{-1}$

Comme le montre le Tableau V-8, les documents du fournisseur de la buse présentent le débit de gouttes d'eau généré en fonction de la pression de l'eau au niveau celle-ci mais leur diamètre et leur vitesse d'injection ne sont pas indiqués. Cependant, le constructeur affirme que le diamètre des gouttes d'eau est dépendant de la pression de l'eau et est compris entre $100 \mu\text{m}$ et 1 mm . De plus, la vitesse d'injection des gouttes d'eau peut être approximée à partir du diamètre d'orifice équivalent. Ainsi, les vitesses d'injection des gouttes d'eau sont approximativement comprises entre $7,8 \text{ m. s}^{-1}$ pour la buse 1 fonctionnant à 0,7 bar et $18,4 \text{ m. s}^{-1}$ pour la buse 2 fonctionnant à 3 bar. La caractérisation de la buse permettra de réaliser des simulations numériques plus représentatives de l'expérience.

Les dispositifs présentés ci-dessus servent à réaliser l'expérience. Cependant, une dernière catégorie d'outils est nécessaire pour mener à bien les expériences: les outils de mesures. Différents outils sont utilisés pour mesurer l'humidité relative de l'air, sa température et celle de l'eau, la concentration en particules d'aérosol dans l'air et la quantité de particules présentes dans l'eau.

Les mesures de la température, de l'humidité relative et de la concentration en particules d'aérosol dans l'air sont réalisées à l'amont de l'entrée d'air. La température est mesurée au niveau du chauffage de l'air, l'humidité relative est mesurée au niveau de l'humidificateur et la concentration en particules d'aérosol est mesurée via un TEOM® (analyseur de la masse d'aérosol dans l'air) ou un APS® (compteur de particules d'aérosol dans l'air) au niveau du piquage dans la veine d'entrée. Les mêmes mesures sont réalisées au niveau de la sortie d'air du banc d'essai (Figure V-23).

La température de l'eau est mesurée avant d'arriver au niveau des buses. De plus, l'eau du puisard est caractérisée au niveau de sa température et de sa concentration en particules d'aérosol (Figure V-23).

Ces différents instruments de mesure ont pour objectif de mesurer, à tout instant, la variation de la concentration en particules d'aérosol dans l'air liée à la capture des particules par les gouttes d'eau mais aussi les grandeurs expérimentales qui ont un impact sur la collecte.

Avant de pouvoir utiliser le banc d'essai pour réaliser des expériences d'abattage humide, il est nécessaire de le caractériser d'un point de vue aéraulique. De façon analogue, la caractérisation des gouttes d'eau générées par les buses est primordiale. De même, les caractéristiques des particules d'aérosol injectées dans l'air porteur doivent être connues au préalable. Les paragraphes suivants détaillent la démarche qui a été envisagée pour réaliser les mesures d'efficacité d'assainissement de l'air à partir de ce banc d'essai. Cependant, la caractérisation du banc d'essai, sa validation et les expériences n'ont pas été réalisées durant cette thèse et font office de perspectives détaillées.

V.2.3.c Caractérisation du banc d'essai

Trois caractérisations sont nécessaires avant de réaliser la campagne expérimentale. Il est nécessaire de connaître l'écoulement d'air existant dans la zone de capture de l'enceinte. La granulométrie et la masse volumique des particules d'aérosol sont des données clés pour la compréhension du phénomène de capture. De même, la connaissance du diamètre et de la vitesse d'injection des gouttes d'eau fait partie des variables d'intérêt.

La caractérisation de l'aéraulique du banc d'essai peut se faire à l'aide de mesures PIV qui, une fois l'airensemencé avec des particules, permettent de tracer les lignes de courant s'établissant dans l'enceinte expérimentale.

La caractérisation des gouttes d'eau générées par les buses d'aspersion peut être réalisée avec un PDA. Quant à elle, la granulométrie des particules d'aérosol peut être caractérisée par l'intermédiaire d'un APS© car il permet de mesurer directement la granulométrie d'un aérosol à partir du temps que mettent ses particules pour passer entre deux capteurs optiques. Même si l'APS© donne directement le diamètre aérodynamique des particules d'aérosol, la masse volumique des particules d'aérosol peut être déduite de la composition chimique de celles-ci.

Une fois ces caractérisations réalisées, le banc d'essai est utilisable pour mesurer des efficacités d'assainissement de l'air. Pour connaître la part d'assainissement à attribuer à la capture des particules par les gouttes d'eau, il est nécessaire de mesurer le dépôt des particules d'aérosol sur toutes les surfaces du banc d'essai (parois, grilles de diffusion,...). De plus, il est important de s'assurer de la reproductibilité des mesures expérimentales.

V.2.3.d Validation du banc d'essai

La validation du banc d'essai est la dernière étape avant de pouvoir obtenir des efficacités de collecte de particules d'aérosol par des gouttes d'eau et ainsi évaluer l'approche de simulation macrophysique de l'abattage humide.

La mesure du dépôt des particules d'aérosol au cours d'une expérience est obligatoire pour pouvoir déduire une efficacité de capture de particules d'aérosol par des gouttes d'eau à partir d'un taux de dépollution de l'air. Pour quantifier ce dépôt, il est possible de réaliser des expériences sans pulvérisation d'eau. Ainsi, la décroissance de la concentration en particules d'aérosol dans l'air ne sera due qu'au phénomène de dépôt. Ces mesures, à différentes humidités relatives et différentes températures, mais avec le même aérosol, permettront d'évaluer le dépôt d'aérosol en fonction des différentes variables d'influence (température, humidité relative, Tableau V-9). Cette approche présente l'inconvénient de ne pas prendre en compte le véritable écoulement d'air existant en cas d'aspersion, lequel diffère de l'écoulement sans aspersion, en raison de l'influence des gouttes d'eau. Ainsi, les résultats de dépôt et de sédimentation obtenus peuvent ne pas être représentatifs des phénomènes de dépôt et de sédimentation des particules d'aérosol qui prendront réellement place lors des expériences.

Tableau V-9 : Conditions expérimentales pour la caractérisation du dépôt des particules d'aérosol sur les surfaces du banc d'essai. La pression de l'air est constante et égale à la pression atmosphérique, la granulométrie et la nature de l'aérosol sont constantes et le débit d'air est constant.

Objectif de l'essai	Conditions d'injection des gouttes d'eau		Conditions d'entrée de l'air	
	$d_g [\mu m]$	$T_g [K]$	$Hr [\%]$	$T_f [K]$
Evaluation du banc sans aspersion : dépôt de l'aérosol sur les surfaces	\emptyset	\emptyset	100 %	293 K
	\emptyset	\emptyset	100 %	298 K
	\emptyset	\emptyset	50 %	298 K
	\emptyset	\emptyset	50 %	293 K

Ces quatre expériences permettent de caractériser la quantité de particules d'aérosol qui est déposée sur les surfaces du banc d'essai pour différentes conditions initiales. Cette première phase expérimentale permet aussi de tester la reproductibilité des expériences réalisées dans le banc d'essai.

L'étude de la reproductibilité complète des expériences nécessite de recourir à la génération des gouttes d'eau. La réalisation de plusieurs expériences, basées sur les mêmes paramètres expérimentaux, permettra d'étudier la reproductibilité des mesures expérimentales. Par la suite, cela permet de s'assurer que les résultats obtenus sont représentatifs d'une situation donnée mais aussi de quantifier les imprécisions de mesures des différents appareils.

Dès lors que cette phase de validation est menée à bien, le banc d'essai est disponible pour obtenir de nouvelles données de références concernant les efficacités de capture de particules d'aérosol par des gouttes d'eau.

V.2.3.e Campagne expérimentale

L'objectif final de la campagne expérimentale est de permettre l'évaluation de l'approche de simulation macrophysique détaillée dans le chapitre précédent. Pour ce faire, les résultats d'efficacité d'assainissement obtenus expérimentalement seront comparés aux résultats de simulation numérique. Cette comparaison nécessite d'acquérir de nouvelles données d'efficacité de capture de particules d'aérosol par des gouttes d'eau qui couvrent une partie de la gamme investiguée par cette étude, que ce soit en termes de taille de particules d'aérosol et de gouttes d'eau, de température ou d'humidité relative.

Une expérience peut se dérouler en quatre phases proposées ici:

1 : De l'air propre, à une température et humidité relative connues, est injecté dans le banc d'essai afin de nettoyer l'enceinte et de la stabiliser en termes de température et d'humidité relative.

2 : Ensuite vient l'ensemencement de l'air en particules d'aérosol. La mesure de la concentration en particules dans l'air, à l'entrée et à la sortie de l'enceinte, permet de définir le début d'un régime établi. Ceci marque la possibilité de commencer le processus d'abattage humide.

3 : Les systèmes d'aspersion d'eau sont activés et la capture des particules d'aérosol commence. La mesure de la concentration en particules d'aérosol dans l'air et dans l'eau du puisard permet de suivre l'évolution de la collecte des particules. Une fois que les mesures de la pollution de l'air et de l'eau sont stabilisées, l'expérience entre en régime stationnaire.

4 : A ce moment-là, le taux d'épuration de l'air obtenu peut jouer le rôle de résultat de référence mais le fait de moyenniser les mesures, sur une période à définir, permet d'améliorer la qualité du résultat. Cette période doit être suffisamment longue pour que les résultats soient de qualité mais elle doit être assez courte pour éviter que les conditions extérieures à l'enceinte ne viennent perturber l'équilibre de celle-ci.

La campagne expérimentale devra comporter certaines expériences primordiales pour l'évaluation de la méthode de simulation macrophysique de l'abattage humide (Tableau V-7).

Tableau V-10 : Plan d'expérience pour le banc d'essai. La pression de l'air est constante et égale à la pression atmosphérique, la granulométrie et la nature de l'aérosol sont constantes, le débit d'air est constant et le débit d'eau est fixé par le diamètre recherché pour les gouttes d'eau.

Objectif de l'essai	Conditions d'injection des gouttes d'eau		Conditions d'entrée de l'air	
	$d_g [\mu m]$	$T_g [K]$	$Hr [\%]$	$T_f [K]$
Evaluation du banc avec aspersion : référence	300 μm	293 K	100 %	293 K
Evaluation de la capture inertielle	200 μm	293 K	100 %	293 K
	600 μm	293 K	100 %	293 K
Evaluation de la capture diffusiphorétique	300 μm	293 K	50 %	293 K
Evaluation de la capture thermophorétique	300 μm	298 K	100 %	293 K
	300 μm	293 K	100 %	298 K
Evaluation des captures phorétique	300 μm	298 K	50 %	293 K
	300 μm	293 K	50 %	298 K

Comme présenté dans le Tableau V-10, l'évaluation du banc d'essai avec aspersion permet d'obtenir des données de référence pour évaluer l'évolution du taux d'épuration de l'air en fonction des différentes variables expérimentales (diamètre et température des gouttes d'eau, température et humidité relative de l'air). Les sept autres expériences ont pour objectif d'étudier les captures inertielles et phorétiques. En parallèle de l'expérimentation, l'expérience est simulée avec l'approche de simulation macrophysique.

Les deux taux d'épuration d'air (expérimental et numérique) sont comparés. Ceci permettra d'évaluer la justesse des résultats d'efficacité de capture des simulations numériques de la capture de particules d'aérosol par des gouttes d'eau.

V.3 Points clefs de ce chapitre

Ce chapitre détaille les deux méthodes d'évaluation de l'approche de simulation macrophysique envisagées. La première repose sur la comparaison des résultats d'efficacité d'épuration de l'air de l'expérience TOSQAN avec des résultats prédits par la simulation numérique. Cependant, ces données expérimentales sont issues d'expériences ne reproduisant pas les conditions expérimentales couramment rencontrées dans le cadre de problématiques d'hygiène industrielle (température, humidité relative, pression,...). La confrontation des résultats numériques avec les données expérimentales n'a pas permis de valider l'approche de simulation macrophysique que nous proposons dans le chapitre IV. Effectivement, la prédiction de l'évolution de la concentration en particules d'aérosol en suspension, qu'elle soit due au phénomène de sédimentation ou au

phénomène de sédimentation couplé à l'abattage humide, ne correspond pas aux données expérimentales (essai S0 et essai AG0). Partant de cette observation, plusieurs hypothèses pouvant expliquer cet écart sont proposées : le diamètre des particules d'aérosol simulées ne correspond pas au diamètre réel des particules d'aérosol présentes dans l'enceinte, les gouttes d'eau ne mettent pas suffisamment en mouvement l'air, ou un phénomène physique ayant un impact non négligeable sur l'évolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air n'est pas pris en compte (dépôt électrostatique,...). Puisque ces comparaisons avec les résultats de TOSQAN n'ont pas pu valider l'approche de simulation macroscopique d'abattage humide, un banc d'essai a été dimensionné. Celui-ci va apporter la possibilité d'évaluer l'approche de simulation dans des conditions proches de celles d'intérêt pour cette étude ($d_p \in [1 \text{ nm}; 100 \text{ }\mu\text{m}]$, $d_g \in [80; 600] \mu\text{m}$, $Re_g \in [1; 100]$ et $[T_f, T_g] \approx [20; 25]^\circ\text{C}$). Le recours à ce banc d'essai permettra d'évaluer précisément la méthode de simulation numérique proposée dans le chapitre précédent.

VI. Conclusion générale et perspectives

L'objectif général de ce doctorat intitulé « Modélisation numérique de l'abattage humide comme procédé d'assainissement de l'air » était de développer une méthodologie permettant d'optimiser un dispositif d'abattage humide. Cette optimisation doit prendre en compte les différents paramètres d'une situation d'hygiène industrielle tels que les caractéristiques des gouttes d'eau et des particules,.... Ceci implique la mise en place d'une simulation numérique de l'abattage humide reliant un taux d'épuration de l'air aux caractéristiques microphysiques et macrophysiques de la situation étudiée (taille des particules d'aérosol ; diamètre, température et vitesse des gouttes d'eau ; température et humidité relative de l'air pollué ;...Figure VI-1). La première étape de ce doctorat consistait à prédire l'efficacité de collecte unitaire de particules d'aérosol par une unique goutte d'eau. Cette prédiction n'est rendue possible que par l'intermédiaire de l'amélioration de la compréhension de la physique prenant place dans les phénomènes d'abattage humide. En effet, l'étude bibliographique sur l'abattage humide a montré qu'aucun noyau de collecte préexistant ne modélise correctement l'ensemble des différentes captures de particules d'aérosol par une goutte d'eau (capture brownienne, phorétique, électrostatique et inertielle).

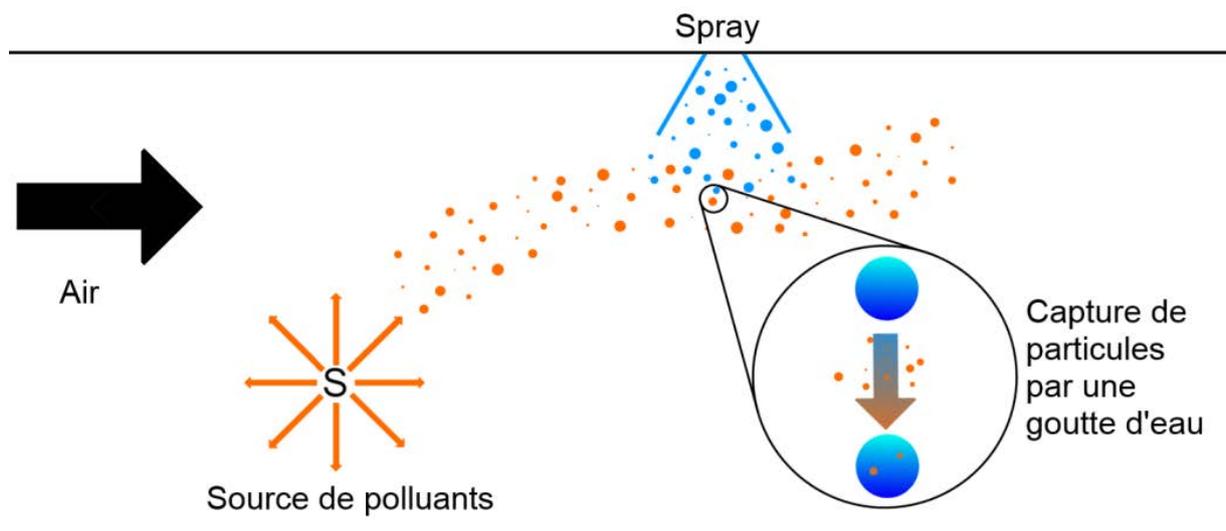


Figure VI-1: Schéma d'une situation d'abattage humide.

Cependant, cette étude bibliographique a aussi mis en évidence que le noyau de capture de Wang *et al.* (Wang *et al.*, 1978) prédit de manière convaincante plusieurs collectes telles que la capture brownienne, phorétique (diffusiophorétique et thermophorétique) et électrostatique. Ainsi, la démarche de la première partie de cette thèse a consisté à améliorer ce noyau de collecte en lui permettant de prendre en compte la capture par interception et par impaction. Cette modification a été réalisée en corrélant un des termes du noyau de Wang *et al.* (Wang *et al.*, 1978) à partir de données d'efficacité de collecte unitaire obtenus par simulation numérique. Ces nouvelles données sont obtenues par des modélisations microphysiques (à l'échelle d'une goutte) de la capture inertielle et brownienne de particules d'aérosol par une goutte d'eau (Figure VI-2).

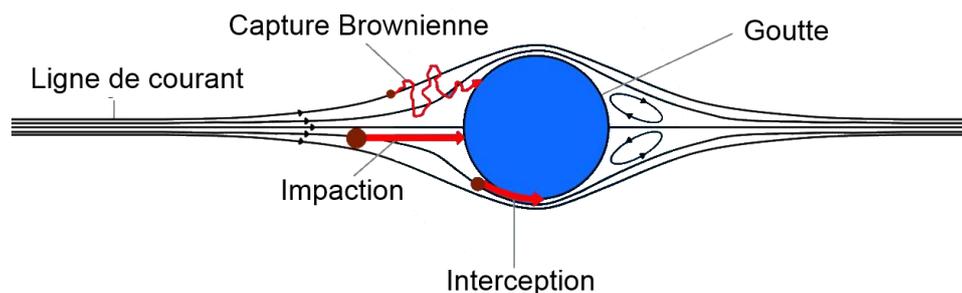


Figure VI-2: Modélisation microphysique de la capture de particules d'aérosol par une goutte d'eau.

Ces modélisations doivent simuler l'interaction entre trois phases : la goutte d'eau, l'air qui s'écoule autour de celle-ci et les particules d'aérosols polluantes. C'est pourquoi elles ont été réalisées à l'aide d'un couplage entre un logiciel de CFD (Fluent®) et un logiciel de calcul numérique (Matlab®). En effet, le logiciel de CFD a été utilisé pour résoudre les deux phases fluides (air et eau) et le logiciel de calcul numérique a été employé pour résoudre, à partir des résultats de CFD, le déplacement des particules d'aérosol dans l'environnement proche de la goutte d'eau. Dans cette optique-là, le schéma explicite de Mohaupt *et al.* (Mohaupt *et al.*, 2011) a été utilisé pour modéliser la dynamique des particules d'aérosol (approche lagrangienne). Celui-ci permet de calculer, avec de grands pas de temps (supérieurs au temps de réponse aérodynamique de la particule), le déplacement d'une particule dans un champ fluide en prenant en compte la vitesse du fluide, la force de traînée s'exerçant sur la particule et son agitation brownienne. Ces modélisations microphysiques ont apporté des valeurs d'efficacité de capture unitaire de particules d'aérosol par une goutte d'eau. Celles-ci concernent la collecte brownienne et inertielle de particules d'aérosol de diamètre aérodynamique compris entre 1 nm et 100 μm par une goutte d'eau de diamètre variant entre 80 μm et 600 μm pour des nombres de Reynolds de la goutte compris entre 1 et 100. Ensuite, ces résultats de capture unitaire ont été comparés avec les données de la littérature, ce qui a permis d'étendre le champ d'application du noyau de capture de Wang *et al.* (Wang *et al.*, 1978) en corrélant un de ses coefficients. Par la suite, le noyau de capture de Wang *et al.* (Wang *et al.*, 1978) modifié par la corrélation a été confronté à des résultats expérimentaux, numériques et théoriques extraits de la littérature. Cette comparaison a permis de valider le noyau de collecte pour la gamme investiguée.

Le recours à la version du noyau de capture amélioré par la corrélation, offre la possibilité de modéliser les différents types de capture de particules d'aérosol par une goutte d'eau (collecte brownienne, phorétique, électrostatique et inertielle). C'est pourquoi, dans la deuxième partie de ce doctorat, ce noyau de capture a été utilisé dans une simulation macroscopique d'abattage humide représentant la dépollution de l'air via pulvérisation de gouttes d'eau. Dans cette simulation, le flux d'air est modélisé avec un point de vue eulérien, les gouttes d'eau sont modélisées avec une approche lagrangienne et l'évolution de l'aérosol polluant est déterminée grâce à une Equation de transport. Cette méthode de simulation permet de prendre en compte l'évolution du flux d'air (vitesse, turbulence, température, humidité relative), des gouttes d'eau (vitesse, température, évaporation : masse, température) et des particules d'aérosol (diamètre). Dans l'optique de prédire la décroissance de la concentration en polluants dans l'air due au phénomène de capture, le noyau de collecte modifié de Wang *et al.* (Wang *et al.*, 1978) a été implémenté dans un terme source dans l'Equation de conservation de la concentration en aérosol (modèle Diffusion-Inertie de Zaïchik *et al.* (Zaichik *et al.*, 2004)). Ainsi, la corrélation définie dans la partie dédiée à la modélisation microphysique (Chapitre III) est utilisée dans les simulations macroscopiques pour quantifier le taux d'épuration de l'air d'une

situation d'hygiène industrielle (Chapitre IV). Ceci donne la possibilité d'optimiser un dispositif d'assainissement de l'air à partir des caractéristiques d'une situation globale d'hygiène industrielle. Cependant, même si le noyau de capture modifié par corrélation a été validé d'un point de vue microphysique (capture unitaire à l'échelle d'une goutte), la simulation macrophysique a elle aussi nécessité une validation (partie 3).

L'évaluation de l'approche de simulation macrophysique a été réalisée durant la troisième phase de ce doctorat. Cette évaluation est basée sur la comparaison de données de taux d'épuration de l'air fournies par l'IRSN avec des résultats obtenus par notre simulation macrophysique. Ces données proviennent de l'expérience TOSQAN qui a été mise en place pour étudier l'épuration de l'air due à des sprays d'eau utilisés dans le cas d'accident de REP. Toutefois, les conditions expérimentales, que ce soit en termes de température ou de pression, ne sont pas identiques à celles couramment rencontrées dans les situations industrielles d'abattage humide. Les comparaisons entre les données expérimentales de TOSQAN et les résultats que nous avons obtenus numériquement ne permettent pas, pour le moment, de valider l'approche de simulation macrophysique que nous avons proposée. En effet, l'évolution de la concentration en particules d'aérosol simulée numériquement diffère de celle obtenue expérimentalement par l'IRSN. Plusieurs hypothèses ont été avancées pour expliquer les écarts existants entre nos résultats et les résultats. L'étude d'un essai TOSQAN sans aspersion a montré que le dépôt et la sédimentation des particules d'aérosol mesurés expérimentalement ne sont pas cohérents d'un point de vue théorique ou numérique. En effet, ils sont bien trop élevés pour correspondre à du dépôt par diffusion-sédimentation. Ceci laisse par exemple supposer que la taille réelle des particules d'aérosol dans l'enceinte était supérieure à celle utilisée dans les simulations, qui est la taille reprise de (Marchand, 2008), ou alors qu'un dépôt électrostatique des particules d'aérosol prend place durant l'expérience. Une autre hypothèse concerne la quantité de mouvement transmise par les gouttes d'eau à l'air. Il est probable que les gouttes d'eau ne mettent pas suffisamment en mouvement l'air de l'enceinte car on constate un défaut d'homogénéité du mécanisme d'abattage humide. Ceci résulterait en une homogénéisation trop faible de l'enceinte en termes de concentration en particules d'aérosol. Une dernière hypothèse repose sur le fait qu'un phénomène physique ayant un impact non négligeable sur l'évolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air n'est pas pris en compte. Cependant, afin d'apporter une évaluation complémentaire de la méthodologie de simulation macrophysique proposée dans ce manuscrit, un banc d'essai a été dimensionné (partie 4). Celui-ci correspond à une tour de lavage verticale où de l'air et de l'eau se déplacent à contre-courant. Afin d'obtenir des mesures d'efficacité d'assainissement de l'air correspondantes aux situations généralement rencontrées dans les problématiques d'hygiène industrielle, les conditions expérimentales de ce banc sont proches de celles couramment rencontrées dans les situations d'abattage humide (température d'environ 20-25 °C, pression égale à la pression atmosphérique, diamètre des gouttes d'eau de quelques centaines de micromètres,...). Ainsi, la réalisation d'une campagne expérimentale avec ce banc d'essai devrait permettre d'étudier l'impact des paramètres expérimentaux sur l'efficacité globale de collecte des particules d'aérosol par des gouttes d'eau. Par conséquent, il devrait être possible d'étudier l'influence de la taille des gouttes d'eau, de leur température, de la température de l'air, de son humidité, de la vitesse relative entre l'air et les gouttes d'eau et de la taille des particules d'aérosol sur la dépollution de l'air par abattage humide. Grâce aux mesures de l'évolution de la concentration en particules d'aérosol dans l'air, il sera ainsi possible d'étudier la capture brownienne, phorétique (thermophorétique et diffusiphorétique) et inertielle

des particules d'aérosol par des gouttes d'eau. Ces données expérimentales pourront servir à évaluer l'approche de simulation macrophysique présentée dans ce manuscrit.

Plusieurs perspectives ont été identifiées tout au long de ce travail. Tout d'abord, lorsque le banc d'essai dimensionné durant ce travail sera disponible, il sera possible de le mettre en place, de le caractériser (écoulement d'air, taille des gouttes d'eau,...) puis de l'utiliser. Les expériences réalisées sur ce banc d'essai devraient permettre d'évaluer l'approche de simulation macroscopique de l'abattage humide pour des conditions expérimentales plus proches des conditions couramment rencontrées dans les situations d'hygiène industrielle. De plus, ce banc d'essai pourrait être modifié pour pouvoir expérimenter l'impact des charges électriques sur le taux d'épuration de l'air. Ceci pourrait se faire en incorporant des charges électriques dans les particules d'aérosol et l'eau avant la génération de gouttes. Les résultats ainsi obtenus seraient disponibles pour évaluer la capture électrostatique. Ainsi, les différents types de collecte (brownienne, phorétique, électrostatique et inertielle) pourraient être étudiés au sein de ce banc d'essai. Ce travail à partir du banc d'essai pourra faire l'objet d'une autre étude.

La perspective suivante concerne plus particulièrement le monde de l'hygiène industrielle et de la prévention des maladies professionnelles. Le modèle d'abattage humide linéaire (1D) qui a été développé dans cette étude pourrait être utilisé dans la création d'un logiciel prédictif. Ce logiciel, à destination du public professionnel, pourrait permettre de réaliser un état des lieux approximatif d'une situation industrielle à risque. Ainsi, il serait facile et rapide, pour un professionnel, de faire le point sur l'épuration de l'air due à une éventuelle installation d'un dispositif d'abattage humide.

Le phénomène d'abattage humide décrit dans ce manuscrit correspond à la capture de particules d'aérosol par des gouttes d'eau dans de l'air pollué. Une deuxième facette de l'abattage humide concerne l'absorption de polluants gazeux. En effet, les gouttes d'eau, par l'intermédiaire de l'absorption de gaz, peuvent assainir de l'air chargé en composants gazeux nocifs. La dernière perspective concerne donc ce mécanisme de dépollution. Une modélisation de l'interaction entre les gouttes d'eau et les gaz environnant permettrait d'étendre le champ d'application de l'abattage humide comme procédé d'assainissement de l'air.

Bibliographie

- Ananthanarayanan, N.V., Viswanathan, S., 1998. Estimating Maximum Removal Efficiency in Venturi Scrubbers. *AIChE J.* 44, 2549–2560.
- Ardon-Dryer, K., Huang, Y.-W., Cziczo, D.J., 2015. Laboratory studies of collection efficiency of sub-micrometer aerosol particles by cloud droplets on a single-droplet basis. *Atmos. Chem. Phys.* 15, 9159–9171.
- Avy, A.P., 1956. *Les aérosols*. DUNOD.
- Balachandran, W., Jaworek, A., Krupa, A., Kulon, J., 2003. Efficiency of smoke removal by charged water droplets. *J. Electrostat.* 58, 209–220.
- Barlow, A.K., Latham, J., 1983. A laboratory study of the scavenging of sub-micron aerosol by charged raindrops. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 109, 763–770.
- Beard, K., 1974. Experimental and Numerical Collision Efficiencies for Submicron Particles Scavenged by Small Raindrops. *J. Atmos. Sci.* 31.
- Beard, K. V, Grover, S.N., 1974. Numerical Collision Efficiencies for Small Raindrops Colliding with Micron Size Particles. *J. Air Pollut. Control Assoc.* 31.
- Beard, K. V, Pruppacher, H.R., 1971. A Wind Tunnel Investigation of the Rate of Evaporation of Small Water Drops Falling at Terminal Velocity in Air. *J. Atmos. Sci.* 28, 1455–1464.
- Belut, E., 2014. Simulation numérique de l'abattage humide des aérosols, in: CFA.
- Berg, T.G.O., Gaukler, T.A., Vaughan, U., 1970. Collisions in washout. *J. Atmos. Sci.* 27, 435–442.
- Box, G.E.P., Muller, E., 1958. A Note On The Generation Of Random Normal Deviates. *Ann. Math. Stat.* 610–611.
- Brodkey, R.S., 1969. *The Phenomena of Fluid Motions*. Addison Wesley.
- Byrne, M.A., Jennings, S.G., 1993. Scavenging of sub-micrometre aerosol particles by water drops. *Atmos. Environ. Part A. Gen. Top.* 27, 2099–2105.
- Calec, N., 2013. Dépôt sec des aérosols submicroniques sur une surface liquide en mouvement.
- Calvert, S., Lundgren, D., Mehta, D.S., 1972. Venturi Scrubber Performance. *J. Air Pollut. Control Assoc.* 22, 529–532.
- Chate, D.M., Kamra, A.K., 1997. Collection efficiencies of large water drops collecting aerosol particles of various densities. *Atmos. Environ.* 31, 1631–1635.
- Chen, F., Yu, S.C.M., Lai, A.C.K., 2006. Modeling particle distribution and deposition in indoor environments with a new drift – flux model. *Atmos. Environ.* 40, 357–367.
- Clift, R., Grace, J.R., Weber, M.E., 1978. *Bubbles, Drops, and Particles*.
- Ebert, P., Kibler, M., Mainka, A., Tenberken, B., Baechmann, K., Frank, G., Tschiersch, J., 1998. A field study of particles scavenging by raindrops of different sizes using monodisperse trace aerosol. *J. Aerosol Sci.* 29, 173–186.

- Einstein, A., 1956. investigation on the theory of the Brownian movement. Dover, New York 1–18.
- Elghobashi, S., 1994. On predicting particle-laden turbulent flows. *Appl. Sci. Res.* 52, 309–329.
- Engelmann, R.J., 1965. Rain scavenging of Zinc Sulfide particles. *J. Atmos. Sci.* 22, 719–727.
- Feng, Z., Michaelides, E.E., 2001. Drag Coefficients of Viscous Spheres at Intermediate and High Reynolds Numbers. *J. Fluids Eng.* 123, 841–849.
- Fuchs, N.A., 1964. *The Mechanics of Aerosols*, Pergamon Press, Oxford.
- Gerardin, F., Midoux, N., 2016. Attenuation of road dust emissions caused by industrial vehicle traffic. *Atmos. Environ.* 127, 46–54.
- Godsave, G.A.E., 1953. Studies of the combustion of drops in a fuel spray—the burning of single drops of fuel. *Symp. Combust.* 4, 818–830.
- Goldsmith, M., Penner, S.S., 1954. On the burning of single drops of fuel in an oxidizing atmosphere. *J. Jet Propuls.* 24, 245–251.
- Gosman, A.D., Ioannides, E., 1983. Aspects of computer simulation of liquid-fuelled combustors. *J. Energy* 7, 482–490.
- Greenfield, S.M., 1957. Rain scavenging of radioactive particulate matter from the atmosphere. *J. Meteorol.* 14, 115–125.
- Grover, S.N., Pruppacher, H.R., Hamielec, A.E., 1977. A numerical determination of the efficiency with which spherical aerosol particles collide with spherical water drops due to inertial impaction, and phoretic and electrical forces. *J. Atmos. Sci.* 34, 1655–1663.
- Hadamard, J.S., 1911. Mouvement permanent lent d'une sphere liquide et visqueuse dans un liquide visqueux. *CR Acad. Sci.* 1735.
- Hairer, E., Norsett, S.P., Wanner, G., 2000. *Solving Ordinary Differential Equations I , Nonstiff problems*. Springer-Verlag.
- Hall, F.F., 1981. Visibility reductions from soil dust in the Western U.S. *Atmos. Environ.* 15, 1929–1933.
- Henry, C., Minier, J.-P., Mohaupt, M., Profeta, C., Pozorski, J., Tanière, A., 2014. A stochastic approach for the simulation of collisions between colloidal particles at large time steps. *Int. J. Multiph. Flow* 61, 94–107.
- Holmberg, S., Li, Y., 1998. Modelling of the Indoor Environment – Particle Dispersion and Deposition. *Indoor Air* 8, 113–122.
- Hsiang, L.P., Faeth, G.M., 1992. Near-limit drop deformation and secondary breakup. *Int. J. Multiph. Flow* 18, 635–652.
- Hutchinson, P., Hewit, G.F., Dukler, A.E., 1971. Deposition of liquid or solid dispersions from turbulent gas streams : a stochastic model. *Chem. Eng. Sci.* 26, 419–439.
- Itô, K., McKean, H.P., 1965. *Diffusion Processes and Their Sample Paths*. Grundlehren der Math. Wissenschaften 125.
- Janès, A., Chaineaux, J., 2010. Explosions de poussières dans les lieux de travail. *Hygiène sécurité du*

Trav. 3–13.

- Jennings, S.G., 1988. The mean free path in air. *J. Aerosol Sci.* 19, 159–166.
- Jin, T., Yamada, T., 1985. Irritating effects of fire smoke on visibility. *Fire Sci. Technol.* 5, 79–90.
- Juncu, G., 1999. A numerical study of steady viscous flow past a fluid sphere. *Int. J. Heat Fluid Flow* 20, 414–421.
- Kerker, M., Hampl, V., 1974. Scavenging of Aerosol Particles by a Falling Water Drop and Calculation of Washout Coefficients. *J. Atmos. Sci.* 31, 1368–1376.
- Laakso, L., Gr, T., Rannik, U., Kosmale, M., Kulmala, M., Fiedler, V., Vehkam, H., 2003. Ultrafine particle scavenging coefficients calculated from 6 years field measurements. *Atmos. Environ.* 37, 3605–3613.
- Ladino, L., Stetzer, O., Hattendorf, B., Günther, D., Croft, B., Lohmann, U., 2011. Experimental Study of Collection Efficiencies between Submicron Aerosols and Cloud Droplets. *J. Atmos. Sci.* 68, 1853–1864.
- Lai, A.C.K., Wang, K., Chen, F.Z., 2008. Experimental and numerical study on particle distribution in a two-zone chamber. *Atmos. Environ.* 42, 1717–1726.
- Lai, K.-Y., Dayan, N., Kerker, M., 1978. Scavenging of Aerosol Particles by a Falling Water Drop. *J. Atmos. Sci.* 35, 674–682.
- LeClair, B.P., Hamielec, A.E., Pruppacher, H.R., Hall, W.D., 1972. A Theoretical and Experimental Study of the Internal Circulation in Water Drops Falling at Terminal Velocity in Air. *J. Atmos. Sci.* 29, 728–740.
- Lemaitre, P., Querel, A., Monier, M., Menard, T., Porcheron, E., Flossmann, A.I., 2017. Experimental evidence of the rear capture of aerosol particles by raindrops. *Atmos. Chem. Phys. Discuss.* 1–24.
- Leong, K.H., Beard, K. V, Ochs, H.T., 1982. Laboratory Measurements of Particle Capture by Evaporating Cloud Drops. *J. Atmos. Sci.* 39, 1130–1140.
- Marchand, D., 2008. Etude du rabattement des produits de fission sous forme aérosol par une pulvérisation de gouttelettes d'eau générée par un système d'aspersion de REP.
- Mehel, A., Tanière, A., Oesterlé, B., Fontaine, J.R., 2010. The influence of an anisotropic Langevin dispersion model on the prediction of micro- and nanoparticle deposition in wall-bounded turbulent flows. *J. Aerosol Sci.* 41, 729–744.
- Minier, J.-P., Peirano, E., 2001. The pdf approach to turbulent polydispersed two-phase flows. *Phys. Rep.* 352, 1–214.
- Mohaupt, M., 2011. Modélisation et simulation de l'agglomération des colloïdes dans un écoulement turbulent.
- Mohaupt, M., Minier, J.-P., Tanière, A., 2011. A new approach for the detection of particle interactions for large-inertia and colloidal particles in a turbulent flow. *Int. J. Multiph. Flow* 37, 746–755.
- Mohebbi, A., Taheri, M., Fathikaljahi, J., Talaie, M.R., 2003. Simulation of an orifice scrubber performance based on Eulerian/Lagrangian method. *J. Hazard. Mater.* 100, 13–25.

- Monteiller, C., Tran, L., Macnee, W., Faux, S., Jones, A., Miller, B., Donaldson, K., 2007. The pro-inflammatory effects of low-toxicity low-solubility particles, nanoparticles and fine particles, on epithelial cells in vitro: the role of surface area. *Occup. Environ. Med.* 64, 609–6015.
- Murata, K.K., Williams, D.C., Tills, J., Griffith, R.O., Gido, R.G., Tadios, E.L., Davis, F.J., Martinez, G.M., Washington, K.E., 1997. Code Manual for Contain 2.0: A Computer Code for Nuclear Reactor Containment Analysis.
- Nerisson, P., Simonin, O., Ricciardi, L., Douce, A., Fazileabasse, J., 2011. Improved CFD transport and boundary conditions models for low-inertia particles. *Comput. Fluids* 40, 79–91.
- Oesterlé, B., 2006. *Ecoulements multiphasiques*, Hermes-Lav. ed. Paris.
- Oliver, D.L.R., Chung, J.N., 1985. Steady flows inside and around a fluid sphere at low Reynolds numbers. *J. Fluid Mech.* 154, 215–230.
- Pak, S.I., Chang, K.S., 2006. Performance estimation of a Venturi scrubber using a computational model for capturing dust particles with liquid spray. *J. Hazard. Mater.* 138, 560–73.
- Pope III, C.A., Dockery, D.C., 2006. Health Effects of Fine Particulate Air Pollution : Lines that Connect. *J. Air Waste Manag. Assoc.* 56, 709–742.
- Pranisha, T., Kamra, A., 1997. Scavenging of aerosol particles by large water drops 2. The effect of electrical forces. *J. Geophys. Res.* 102, 23937–23946.
- Pranisha, T., Kamra, A., 1996. Scavenging of aerosol particles by large water drops 1. neutral case. *J. Geophys. Res.* 101, 23373–23380.
- Press, W.H., Flannery, B.P., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T., 1992. *Numerical recipes in C: The Art of Scientific Computing*.
- Prodi, F., Santachiara, G., Belosi, F., Vedernikov, A., Balapanov, D., 2014. Phoretic forces on aerosol particles surrounding an evaporating droplet in microgravity conditions. *Atmos. Res.* 142, 40–44.
- Pruppacher, H.R., Klett, J.D., 2010. *Microphysics of Clouds and Precipitation*.
- Quérel, A., 2012. *Lessivage de l’atmosphère par la pluie: approche microphysique*.
- Quérel, A., Lemaitre, P., Monier, M., Porcheron, E., Flossmann, A.I., Hervo, M., 2014. An experiment to measure raindrop collection efficiencies : influence of rear capture. *Atmos. Meas. Tech. Discuss.* 7, 509–539.
- Ranz, W.E., Marshall, W.R., 1952a. Evaporation from drops part 1. *Chem. Eng. Prog.* 48, 141–146.
- Ranz, W.E., Marshall, W.R., 1952b. Evaporation from drops part 2. *Chem. Eng. Prog.* 48, 173–180.
- Renksizbulut, M., Yuen, M.C., 1983. Experimental Study of Droplet Evaporation in a High-Temperature Air Stream. *J. Heat Transfer* 105, 384–388.
- Renoux, A., Boulaud, D., 1998. *Les aérosols: physique et métrologie*. Lavoisier TEC & DOC.
- Rivkind, V.Y., Ryskin, G.M., 1976. Flow structure in motion of a spherical drop in a fluid medium at intermediate Reynolds numbers. *Fluid Dyn.* 11, 5–12.
- Rivkind, V.Y., Ryskin, G.M., Fishbein, G.A., 1976. Flow around a spherical drop at intermediate

- Reynolds numbers. *PMM* 40, 741–745.
- Saboni, A., Alexandrova, S., Gourdon, C., 2004. Détermination de la traînée engendrée par une sphère fluide en translation. *Chem. Eng. J.* 98, 175–182.
- Shapiro, S.S., Wilk, M.B., 1965. An analysis of variance test for normality (complete samples). *Biometrika* 52, 591–611.
- Shih, T.H., Liou, W.W., Shabbir, A., Yang, Z., Zhu, J., 1995. A new k-e eddy viscosity model for high reynolds number turbulent flows. *Comput. Fluids* 24, 227–238.
- Slinn, W.G.N., 1977. Some approximations for the wet and dry removal of particles and gases from the atmosphere. *Water. Air. Soil Pollut.* 7, 513–543.
- Sow, M., Lemaitre, P., 2015. Influence of electric charges on the washout efficiency of atmospheric aerosols by raindrops. *Ann. Nucl. Energy* 93, 107–113.
- Spalding, D.B., 1953. The combustion of liquid fuels. *Symp. Combust.* 4, 847–864.
- Starr, J.R., Mason, B.J., 1966. The capture of airborne particles by water drops and simulated snow crystals. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 92, 490–499.
- Taniere, A., 2010. Modélisation stochastique et simulation des écoulements diphasiques dispersés et turbulents.
- Tinsley, B.A., Zhou, L., 2015. Parameterization of aerosol scavenging due to atmospheric ionization. *J. Geophys. Res. Atmos.* 8389–8410.
- Tinsley, B.A., Zhou, L., Plemmons, A., 2006. Changes in scavenging of particles by droplets due to weak electrification in clouds. *Atmopsheric Res.* 79, 266–295.
- Vohl, O., Mitra, S.K., Diehl, K., Huber, G., 2001. A Wind Tunnel Study of Turbulence Effects on the Scavenging of Aerosol Particles by Water Drops. *J. Atmos. Sci.* 58, 3064–3072.
- Volken, M., Schumann, T., 1993. A critical review of below-cloud aerosol scavenging results on mt. Rigi. *Water. Air. Soil Pollut.* 68, 15–28.
- Walton, W.M., Woolcock, A., 1960. The suppression of airborne dust by water spray. *Int. J. Air Pollut.* 3, 129–153.
- Wang, A., Song, Q., Yao, Q., 2015. Study on inertial capture of particles by a droplet in a wide Reynolds number range. *J. Aerosol Sci.* 93, 1–15.
- Wang, P.K., Grover, S.N., Pruppacher, H.R., 1978. On the Effect of Electric Charges on the Scavenging of Aerosol Particles by Clouds and Small Raindrops. *J. Atmos. Sci.* 35, 1735–1743.
- Wang, P.K., Pruppacher, H.R., 1977. An Experimental Determination of the Efficiency with Which Aerosol Particles are Collected by Water Drops in Subsaturated Air. *J. Atmos. Sci.* 34, 1664–1669.
- Weber, E., 1969. Stand und Ziel der Grundlagenforschung bei der Nassentstaubung. *Staub-Reinhalt Luft* 29, 272–277.
- Wellek, R.M., Agrawal, A.K., Skelland, A.H.P., 1966. Shape of Liquid Drops Moving in Liquid Media. *AIChE* 854–862.

- Wham, R.M., Basaran, O. a., Byers, C.H., 1997. Wall effects on flow past fluid spheres at finite Reynolds number: wake structure and drag correlations. *Chem. Eng. Sci.* 52, 3345–3367.
- Willeke, K., 1976. Temperature dependence of particle slip in a gaseous medium. *J. Aerosol Sci.* 7, 381–387.
- Wise, H., Lorell, J., Bernard, J.W., 1955. The effects of chemical and physical parameters on the burning rate of a liquid droplet. *Symp. Combust.* 5, 132–141.
- Zaichik, L.I., Skibin, A.P., Soloviev, S.L., 2004. Simulation of the Distribution of Bubbles in a Turbulent Liquid Using a Diffuion-Inertia Model. *Heat Mass Transf. Phys. Gasdyn.* 42, 111–117.
- Zhao, B., Yang, C., Yang, X., Liu, S., 2008. Particle dispersion and deposition in ventilated rooms : Testing and evaluation of different Eulerian and Lagrangian models. *Build. Environ.* 43, 388–397.

Table des annexes

Annexe 1.	Nombre de Sherwood balistique.....	159
Annexe 2.	Extension du noyau de capture	161
Annexe 3.	Calcul du terme C_μ dans le modèle RANS $k - \varepsilon$ « Realizable ».....	167
Annexe 4.	Publication.....	169

Annexe 1. Nombre de Sherwood balistique

Lorsqu'une particule d'aérosol est très inertielle, le nombre de Sherwood implémenté dans le noyau de capture K_{W_c} tend vers une forme limite correspondant à une capture purement inertielle. Pour obtenir son expression, il est possible de se baser sur l'expression du noyau de Wang (Wang et al., 1978) qui est donnée par l'Equation A1-1 :

$$K_W = \frac{\frac{4 H C u}{3 d_p \mu_f}}{\frac{4 H C u}{e^{3 \pi d_p \mu_f Sh D_B d_g} - 1}} , \quad (A1-1)$$

avec H une fonction modélisant les forces phorétiques et électrostatiques.

Dans le cas d'une capture de particules d'aérosol très inertielles, l'inertie des particules d'aérosol est telle que leurs trajectoires peuvent être vues comme un mouvement rectiligne (dit balistique). Lors d'une capture balistique, la contribution des forces phorétiques et électrostatiques sur la capture des particules est nulle. Ainsi, K_W tend vers K_B (Equation A1-2).

$$\lim_{St \rightarrow \infty} K_W = K_B = \pi d_g Sh D_B . \quad (A1-2)$$

De plus, il est supposé que le régime balistique présente une efficacité de capture égale à 1. En effet, lors d'une capture complètement balistique, toutes les particules présentes dans le volume de capture de la goutte sont capturées. Ainsi, il est possible d'écrire (Equation A1-3):

$$\lim_{St \rightarrow \infty} Ec = \lim_{St \rightarrow \infty} \frac{K(d_g, d_p)}{\pi \left(\frac{d_g + d_p}{2} \right)^2 \| \mathbf{u}_g - \mathbf{u}_p \|} = 1 . \quad (A1-3)$$

Ceci permet de poser (Equation A1-4):

$$\lim_{St \rightarrow \infty} K = \frac{\pi}{4} (d_g + d_p)^2 \| \mathbf{u}_g - \mathbf{u}_p \| \approx \frac{\pi}{4} (d_g + d_p)^2 \| \mathbf{u}_g \| \quad \text{pour } \mathbf{u}_p \ll \mathbf{u}_g . \quad (A1-4)$$

En combinant les Equations A1-2 et A1-4, la limite du nombre de Sherwood en cas de régime balistique est obtenue (Equation A1-5) :

$$\lim_{St \rightarrow \infty} Sh = \frac{(d_g + d_p)^2 \mu_f Re_g}{4 d_g^2 D_B \rho_f} . \quad (A1-5)$$

Annexe 2. Extension du noyau de capture

L'objectif de cette annexe est d'évaluer le noyau de capture sur des cas de collecte où le nombre de Reynolds de goutte est supérieur à 100. En effet, le noyau de capture K_{w_c} développé dans ce manuscrit (Equation A2-1) permet de prédire la capture unitaire de particules d'aérosol par une goutte d'eau dans la gamme suivante : diamètre aérodynamique de particules d'aérosol compris entre 1 nm et 100 μm , diamètre de goutte d'eau variant entre 80 μm et 600 μm et nombre de Reynolds de goutte s'étalant entre 1 et 100. Lorsque la goutte d'eau se déforme (nombre de Reynolds plus élevé), le diamètre correspondant à sa section de capture peut être approximé par l'Equation A2-10.

$$K_{w_c} = \frac{C_w}{e^{\frac{C_w}{\pi Sh' D_B d_g}} - 1}, \quad (A2-1)$$

où C_w est donné par l'Equation A2-2, Sh' est donné par l'Equation A2-6, D_B est la diffusivité brownienne de la particule d'aérosol et d_g est le diamètre de la goutte d'eau.

$$C_w = \frac{4HCu}{3d_p\mu_f}, \quad (A2-2)$$

où H est une fonction modélisant la contribution des forces diffusiophorétiques (H_{df} , Equation A2-3), thermophorétiques (H_{th} , Equation A2-4) et électrostatiques (H_e , Equation A2-5) de telle sorte que $H = H_{df} + H_{th} + H_e$. Soit :

$$H_{df} = -0,55\pi \mu_f D_{vap} Sh d_g d_p \frac{(X_{H_2O} - X_{H_2O_{surf}})}{Cu(1 - X_{H_2O})}, \quad (A2-3)$$

avec X_{H_2O} (resp. $X_{H_2O_{surf}}$) la fraction molaire de vapeur d'eau dans l'air loin (resp. à la surface) de la goutte. Pour H_{th} , il vient :

$$H_{th} = -0,3\pi \mu_f Sh d_g d_p \frac{\lambda_f \left(\frac{k_f}{k_p} + 2,5Kn \right) (T_f - T_{f_{surf}})}{(1 + 3Kn) \left(1 + 2 \frac{k_f}{k_p} + 5Kn \right) P}. \quad (A2-4)$$

La fonction H_e est donnée par :

$$H_e = \frac{q_g q_p}{4\pi\epsilon_0}. \quad (A2-5)$$

Le nombre de Sherwood Sh' est donné par l'équation :

$$Sh'(Re_g, St_p, Sc) = Sh(Re_g, Sc) \cdot F(St_p) + G(Re_g, St_p) , \quad (A2-6)$$

avec Sh le nombre de Sherwood de la particule d'aérosol (Equation A2-7), F la fonction donnée par l'Equation A2-8 et G la fonction exprimée par l'Equation A2-9.

$$\begin{cases} Sh = 1,56 + 0,616 Re_g^{1/2} Sc^{1/3} & \text{quand } Re_g^{1/2} Sc^{1/3} > 1,4 , \\ Sh = 2 + 0,216 Re_g Sc^{2/3} & \text{quand } Re_g^{1/2} Sc^{1/3} \leq 1,4 , \end{cases} \quad (A2-7)$$

avec Re_g le nombre de Reynolds de la goutte et Sc le nombre de Schmidt de la particule d'aérosol.

La fonction F est égale à (Equation A2-8):

$$F(St_p) = \left(\frac{1 + 2 St_p^{0,43}}{1 + St_p^{0,43}} \right)^{12} . \quad (A2-8)$$

La fonction G est égale à (Equation A2-9):

$$G(Re_g, St_p) = Sh^{inf} \left(\frac{7,39 St_p^{0,87}}{1 + 7,39 St_p^{0,87}} \right)^{12 - 2 \log_{10}(Re_g)} . \quad (A2-9)$$

Le diamètre correspondant à la section de capture d'une goutte déformée peut être approximé par l'Equation A2-10 (Hsiang and Faeth, 1992; Pak and Chang, 2006) :

$$d_g^{def} = \left(1 + 0,19 \sqrt{We_g} \right) d_g \quad \text{pour } We_g \leq 3 , \quad (A2-10)$$

où d_g^{def} est le diamètre de la goutte déformée et We_g est son nombre de Weber (Equation A2-11).

$$We_g = \frac{\rho_f \|\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_g\|^2 d_g}{\gamma} , \quad (A2-11)$$

avec \mathbf{u}_f la vitesse de l'air au voisinage de la goutte et γ la tension de surface de la goutte.

Le résultat du noyau de capture K_{w_c} (Equation A2-1) couplé avec l'équation prédisant le diamètre de la goutte déformé (Equation A2-10) est comparé ici à des données de la littérature concernant des gouttes dont le nombre de Reynolds est supérieur à 100. Ainsi, il est possible d'évaluer le noyau de capture pour des situations où les gouttes d'eau se déforment.

Deux résultats de la littérature sont utilisés ici pour cette évaluation :

- le résultat expérimental de Starr & Mason (Starr and Mason, 1966) qui correspond à la capture unitaire d'une particule de $13 \mu m$ de diamètre par une goutte d'eau présentant un nombre de Reynolds inférieur à 1100.
- le résultat expérimental de Quérel (Quérel, 2012) correspondant à la capture, par une goutte d'eau de nombre de Reynolds égal à 1000, de particules d'aérosol de diamètre aérodynamique compris entre $0,3 \mu m$ et $3 \mu m$.

A2.1 Starr and Mason (1966)

Lors de leurs travaux, Starr et Masson (Starr and Mason, 1966) ont expérimenté la capture de pollen de mûrier de Chine ($d_p = 13 \mu m$) par des gouttes d'eau présentant un nombre de Reynolds inférieur à 1100. Les expériences se sont déroulées à une température de $293 K$ dans de l'air chargé en humidité. Ainsi, seule la capture inertielle prend place (la capture brownienne peut être supposée négligeable pour cette taille de particule d'aérosol). La Figure A2-1 présente la comparaison entre les résultats expérimentaux et la prédiction de l'efficacité de capture obtenue par l'intermédiaire du noyau de capture K_{wc} où le diamètre de la goutte d'eau est recalculé avec l'Equation A3-10.

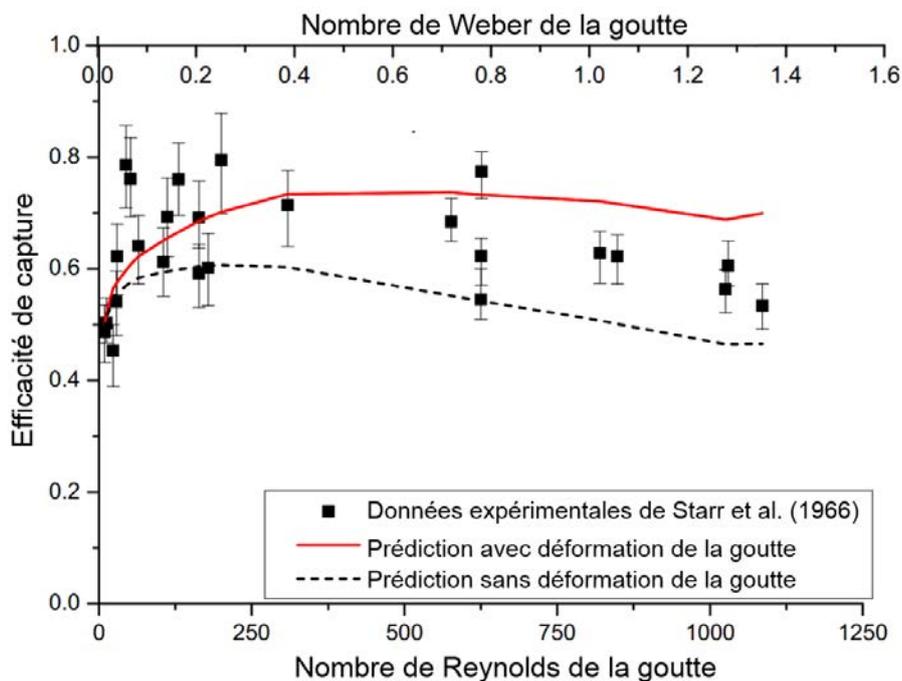


Figure A2-1: Comparaison de l'efficacité de capture expérimentale et prédite pour un nombre de Reynolds de goutte inférieur à 1100 et une particule d'aérosol de diamètre aérodynamique de $13 \mu m$.

La Figure A2-1 montre que la prise en compte de la déformation de la goutte via le calcul de son diamètre déformé semble améliorer la prédiction de l'efficacité de capture unitaire pour un nombre de Reynolds modéré ($Re_g < 500$). Cependant, pour un nombre de Reynolds de goutte supérieur, il n'est pas possible de conclure car la dispersion des résultats expérimentaux est trop importante. Néanmoins, l'ordre de grandeur de l'efficacité de capture semble correctement prédit.

A2.2 Quérel (2012)

Les travaux de Quérel (Quérel, 2012) concernent le banc d'essai BERGAME de l'IRSN. Lors de sa campagne expérimentale, Quérel a étudié la capture unitaire de particules d'aérosol de diamètre aérodynamique compris entre $0,3 \mu m$ et $3 \mu m$ par une goutte d'eau de nombre de Reynolds environ égal à 1000 ($We \approx 1,85$). L'humidité relative de l'air varie entre 50 % et 85 % mais l'auteur rapporte que l'influence de l'humidité de l'air sur l'efficacité de capture n'est pas mesurable. La température des essais est de $293 K$. La Figure A2-2 présente la comparaison des résultats expérimentaux avec les résultats prédits par le noyau de capture développé dans cette étude, complété avec la prise en compte de la déformation de la goutte d'eau.

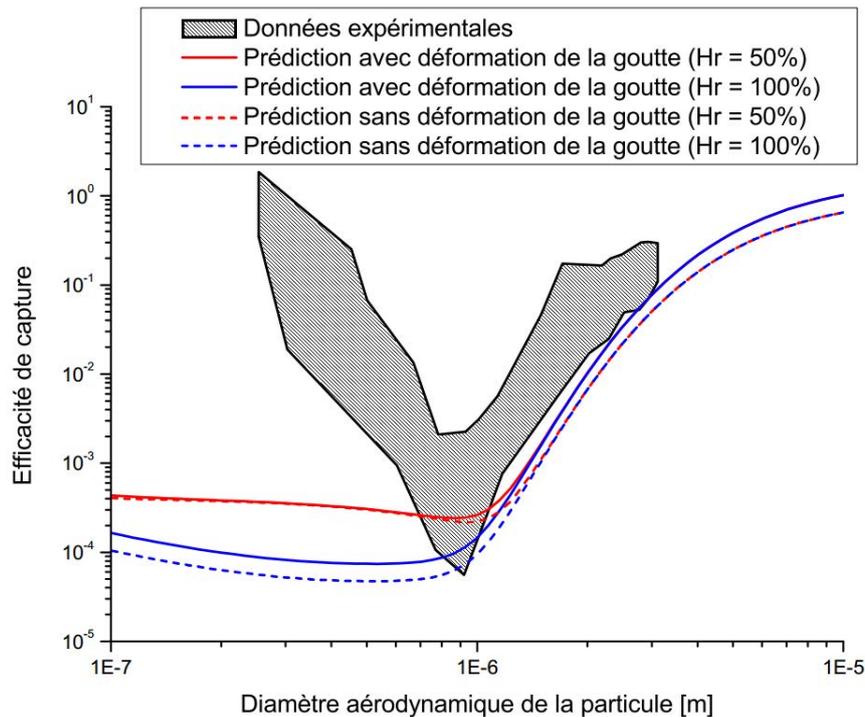


Figure A2-2: Comparaison de l'efficacité de capture expérimentale et modélisée pour un nombre de Reynolds de goutte égal à 1000 et une particule d'aérosol de diamètre aérodynamique variant entre $0,3$ et $3 \mu m$.

La Figure A2-2 montre que la prise en compte de la déformation de la goutte d'eau dans le noyau de capture permet d'approximer la tendance de l'évolution de l'efficacité de capture pour des particules d'aérosol de diamètre compris entre $0,8 \mu m$ et $3 \mu m$, lorsque la goutte d'eau présente un nombre de Reynolds égal à 1000. Cependant, pour des particules d'aérosol de diamètre inférieur à $0,8 \mu m$, le noyau de capture présente une différence importante par rapport aux résultats expérimentaux. En effet, pour les particules d'aérosol plus petites, le rebond de l'efficacité de capture est lié à la capture arrière (cf II.1.2.e.ii). Or, le noyau de capture actuel ne peut pas la prédire.

Les deux comparaisons présentées ici montrent que le noyau de capture K_{w_c} , dès lors qu'il prend en compte la déformation de la goutte d'eau, peut prédire l'ordre de grandeur de l'efficacité de capture d'une particule par une goutte d'eau. Cependant, il est primordial de se restreindre à l'étude de la capture inertielle ($d_p > 1 \mu m$). En effet, il n'est pas possible de prédire la capture arrière avec cette méthode de modélisation. Ainsi, il est plutôt conseillé de n'utiliser le noyau de capture K_{w_c} que pour la prédiction de la collecte de particules d'aérosol correspondant à la gamme d'étude $d_p \in [1 nm, 100 \mu m]$, $d_g \in [80, 600] \mu m$ et $Re_g < 100$ ou $d_p > 1 \mu m$ et $Re_g < 1000$. Cependant, il peut

être utilisé pour obtenir une approximation de l'ordre de grandeur de l'efficacité de capture inertielle de particules d'aérosol pour un nombre de Reynolds supérieur à 100.

Annexe 3. Calcul du terme C_μ dans le modèle RANS $k - \varepsilon$ « Realizable »

Dans le modèle de turbulence RANS $k - \varepsilon$ avec « Realizable », le terme C_μ qui est employé dans la définition de la viscosité turbulente est variable. Celui-ci est donné par l'Equation A3-1 :

$$C_\mu = \frac{1}{A_0 + A_S \frac{k U^*}{\varepsilon}} , \quad (\text{A3-1})$$

avec k la variation de l'énergie cinétique turbulente, ε le taux de dissipation de l'énergie turbulente, U^* donné par l'Equation A3-2, A_0 égal à 4,04 et A_S présenté dans l'Equation A3-5.

Le terme U^* correspond à :

$$U^* = \sqrt{S_{ij}S_{ij} + \widetilde{\Omega}_{ij}\widetilde{\Omega}_{ij}} , \quad (\text{A3-2})$$

où $\widetilde{\Omega}_{ij}$ est donné par l'Equation A3-3 et S_{ij} par l'Equation A3-9.

$$\widetilde{\Omega}_{ij} = \Omega_{ij} - 2\varepsilon_{ijk}\omega_k , \quad (\text{A3-3})$$

avec Ω_{ij} égal à (Equation A3-4) :

$$\Omega_{ij} = \overline{\Omega}_{ij} - \varepsilon_{ijk}\omega_k , \quad (\text{A3-4})$$

où $\overline{\Omega}_{ij}$ est le tenseur moyen du taux de rotation vu dans un référentiel se déplaçant avec une vitesse angulaire ω_k .

Le terme A_S est détaillé dans l'Equation A3-5 :

$$A_S = \sqrt{6} \cos(\varphi) , \quad (\text{A3-5})$$

avec φ égal à (Equation A3-6) :

$$\varphi = \frac{1}{3} \cos^{-1}(\sqrt{6}W) , \quad (\text{A3-6})$$

où W correspond à (Equation A3-7) :

$$W = \frac{S_{ij}S_{jk}S_{ki}}{\tilde{S}^3}, \quad (\text{A3-7})$$

avec \tilde{S} donné par l'Equation A3-8 :

$$\tilde{S} = \sqrt{S_{ij}S_{ij}}, \quad (\text{A3-8})$$

où S_{ij} est égal à (Equation A3-9) :

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right), \quad (\text{A3-9})$$

Annexe 4. Publication

Gaël Cherrier, Emmanuel Belut, Fabien Gerardin, Anne Tanière, Nicolas Rimbert, Aerosol particles scavenging by a droplet: Microphysical modeling in the Greenfield gap, In Atmospheric Environment, Volume 166, 2017, Pages 519-530, ISSN 1352-2310.

<https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2017.07.052>.

Aerosol particles scavenging by a droplet: microphysical modeling in the Greenfield gap

Gaël Cherrier^{a,b,c}, Emmanuel Belut^{a*}, Fabien Gerardin^a, Anne Tanière^{b,c} and Nicolas Rimbart^{b,c}

^a Département Ingénierie des Procédés, Institut National de Recherche et de Sécurité, Rue du Morvan CS 60027, 54519, Vandoeuvre Cedex, France

^b LEMTA, CNRS, UMR 7563, 2 Avenue de la Forêt de Haye BP 90161, 54505, Vandoeuvre Cedex, France

^c Université de Lorraine, 34 Cours Léopold, 54000, Nancy, France

* Corresponding author: E-mail address: emmanuel.belut@inrs.fr (E. Belut).

ABSTRACT

Studying the scavenging of aerosol particle by drops has been a key topic of atmospheric science since the late seventies, given its relationships with atmospheric depollution, with the physics of clouds and precipitations and with global warming. However, the efficiency with which falling droplets capture aerosol particles is still imprecisely known for a wide range of drop Reynolds number, Weber numbers, aerosol particles inertia and Brownian Schmidt number. In this paper, microphysical modeling is used to compute precisely the drop collection efficiency for aerosol particles around the Greenfield gap which are submitted to both drag force and Brownian motion, for droplets falling in quiescent air at moderate Reynolds number ($Re_d \leq 100$). Depending on the impactional or diffusional parameters, the collection regions on the drop surface are highlighted. The results are then compressed by a correlation which extends the field of use of the theoretical model of Wang et al. (1978) by taking inertial capture into account. The proposed correlation is suitable to estimate the aerosol scavenging efficiency for a non-evaporating, non-deforming drop with $Re_d \leq 100$ and particle Stokes number $St_p \in [0; +\infty]$. In case of evaporating or condensing droplets, the effect of thermophoresis and diffusiophoresis are also taken into account through an extension of the formulation proposed by Wang et al. (1978) and hence with similar accuracy.

Keywords: Droplet, aerosol particles, scavenging, collection kernel.

1. Introduction

Since the seventies, aerosol particle scavenging by raindrops has been an important topic in the field of atmospheric physics with the work of Pruppacher's team at the University of California, Los Angeles (Pruppacher and Beard, 1970; Beard and Pruppacher, 1971; LeClair et al., 1972; Grover et al., 1977; Wang and Pruppacher, 1977a, 1977b, 1980; Wang et al., 1978; Walcek et al., 1981; Pruppacher and Klett, 2010). Recently, the global warming process related to the interaction of particles with clouds (Ladino et al., 2011; Ardon-Dryer et al., 2015) has pushed the study of aerosol scavenging by drops to be actual again for the understanding of the atmospheric physics. In the field of occupational and public health, the process of aerosol scavenging by drops is also of major interest since spraying systems constitute remediation techniques that can be used to lower the concentration of atmospheric inhalable particles and thus to prevent people exposure to hazardous contaminants. This is particularly the case when usual depollution techniques such as ventilation are not perfectly adapted to the situation, for instance in open-air construction sites, in demolition industries or in confined area (tunnels).

In this context, it is apparent that there is a need of knowing precisely the efficiency with which an individual droplet scavenges aerosol particles in various situations. However, despite its extension, the literature on the subject does still not provide fully complete data concerning these efficiencies.

42 When a droplet goes through a cloud of aerosol, the main aerosol collection mechanisms
 43 that occur are (Wang et al., 1978) direct inertial impaction of aerosols on the drop surface,
 44 Brownian diffusion of aerosol particles to the drop surface, diffusio-phoretic and thermophoretic
 45 attraction or repulsion for evaporating or condensing droplets, and deposition due to various
 46 electrical interactions. Not only do these processes act simultaneously, but they also act in
 47 interaction with the aerosol concentration field, with the temperature field and with the water vapor
 48 concentration field around the drop, all depending on the flow regime past the drop. To add to this
 49 complexity, a coupling also exists between the air flow outside the drop, the water flow inside the
 50 drop, and the shape of the drop (Hadamard, 1911; Rivkind and Ryskin, 1976; Oliver and Chung,
 51 1985; Feng and Michaelides, 2001; Saboni et al., 2004) which affects the scavenging process.
 52 Subsequently, the efficiency with which a droplet scavenges aerosol particles depends on multiple
 53 parameters and cannot be easily derived for all possible combinations of these parameters.

54 Determining this collection efficiency has been widely studied in the past since the pioneer
 55 work of Greenfield (1957), followed by many others (Starr and Mason, 1966; Berg et al., 1970;
 56 Grover et al., 1977; Slinn, 1977; Wang and Pruppacher, 1977b; Wang et al., 1978, 2015; Lai et al.,
 57 1978; Leong et al., 1982; Mohebbi et al., 2003; Quérel et al., 2014; Sow and Lemaitre, 2015). The
 58 collection efficiency E_c is defined classically as the fraction of particles which is captured within
 59 the droplet track. It is related to the collection kernel K through Equation (1) (assuming spherical
 60 droplet and aerosol particles):

$$E_c = \frac{K}{\pi \left(\frac{d_d + d_p}{2} \right)^2 \|U_d - U_p\|} , \quad (1)$$

61 where d_d (resp. d_p) is the droplet (resp. particle) diameter, $\|U_d - U_p\|$ is the slip velocity
 62 magnitude between the droplet and the particle cloud, subscript d referring to the droplet and
 63 subscript p referring to the particles.

64 The collection kernel K is defined through Equation (2) which describes the aerosol
 65 concentration sink term due to scavenging:

$$\frac{\partial n_p(d_p)}{\partial t} = -n_p(d_p) \int_0^\infty K n_d(d_d) dd_d , \quad (2)$$

66 where $n_p(d_p)$ (resp. $n_d(d_d)dd_d$) is the numerical concentration of particles of diameter d_p (resp.
 67 drops which diameters range in $[d_d; d_d + dd_d]$) and t refers to the time.

68 The collection kernel K , and then E_c , depends mainly on the following parameters : particle
 69 and drop diameters, drop Reynolds and Weber numbers Re_d and We_d characterizing the flow
 70 regime past the drop and the flow-induced deformation of the drop, temperature and relative
 71 humidity around the drop, aerosol particles Brownian diffusivity, particles aerodynamic relaxation
 72 time τ_p , and aerosol and drop electrical charges. The aerosol particle Stokes number $St_p =$
 73 $\tau_p U_d / d_d$, which is the ratio of particle relaxation time over the typical transit time of the flow past
 74 the drop, can be introduced as a convenient way of characterizing the importance of inertial
 75 impaction on scavenging. In the literature, E_c was derived for various subsets of these dimensioning
 76 parameters by means of three different techniques, that is either theoretically (Wang et al., 1978),
 77 by numerical simulations (Grover et al., 1977; Wang et al., 2015), or experimentally (Starr and
 78 Mason, 1966; Berg et al., 1970; Wang and Pruppacher, 1977b; Lai et al., 1978; Leong et al., 1982;
 79 Quérel et al., 2014; Sow and Lemaitre, 2015).

80 Thus, Wang et al. (1978) derived a theoretical model for low inertia particles undergoing
81 Brownian capture, thermophoresis, diffusiophoresis and Coulombic attraction but not inertial
82 impaction in quiescent air at moderate droplet Reynolds number. The efficiency of capture
83 predicted by this model was obtained thanks to an Eulerian approach, by computing the flux of
84 aerosol particle to the surface of an isolated droplet falling at terminal velocity in air. This flux was
85 calculated by solving the mass conservation equation of aerosol particles submitted to Brownian
86 diffusion, electric forces, thermophoresis and diffusiophoresis induced by the evaporation of the
87 drop. Particle inertial effects were not considered, and it was assumed that the drop remained
88 spherical and that the fields of temperature and vapor concentration presented a spherical symmetry
89 due to negligible drop movement with respect to the surrounding air. Following these assumptions,
90 phoretic forces were distributed as inverse square fields centred on the drop and it was assumed that
91 electric forces could be simplified similarly. This allowed solving analytically the aerosol mass
92 conservation equation and obtaining the expression for the capture efficiency described in section
93 4.2 (Equation (20)). Since the basic hypothesis of spherical symmetry does not hold when the drop
94 Reynolds number is not negligible, a first order correction was also introduced by Wang et al.
95 (1978) by means of corrective coefficients based on correlations for the flux of heat, vapor and
96 aerosol particles. For these reasons this model is limited to moderate Reynolds number and to
97 particles with negligible inertia (small particle Stokes numbers).

98 Besides this theoretical approach, Grover et al. (1977) achieved Lagrangian numerical
99 simulations of inertial particles $d_p \in [1.4; 28] \mu\text{m}$ scavenged by inertial impaction, thermophoresis,
100 diffusiophoresis and electrophoresis but not by Brownian diffusion, at moderate Reynolds number
101 $Re_d \in [1; 210]$ ($St_p \in [0.016; 9.98]$). Later on, Wang et al. (2015) used also a Lagrangian
102 approach to simulate the scavenging of particles by a drop of $d_d = 2000 \mu\text{m}$ ($Re_d \in [50; 950]$),
103 taking into account only pure inertial impaction for particles Stokes number between $St_p = 0.23$
104 and $St_p = 1$. In these works, the droplet was assumed to remain spherical, which is only partly
105 justified for Wang et al. (2015), the studied Weber number reaching 1.73, which leads to an
106 eccentricity of the drop of 20 % (Wellek et al., 1966). In this work, the effect of internal water
107 circulation in the droplet on the flow was neglected, which is also questionable.

108 Finally, the aerosol collection efficiency was also measured experimentally by several
109 authors. Thus, Starr and Mason (1966) derived the capture efficiencies of inertial particles ($d_p \in$
110 $[4; 13] \mu\text{m}$) by evaporating drops for $Re_d \in [10; 1085]$ ($St_p \in [0.155; 2.29]$). Experimental data
111 about the capture of particles of $d_p = 0.57 \mu\text{m}$ ($St_p \in [0.168; 2.15]$) by droplets at $Re_d \in$
112 $[24; 5260]$ can also be found in (Wang and Pruppacher, 1977b). Lai et al. (1978) performed
113 scavenging experiments of aerosol particles ($d_p \in [0.7; 2.3] \mu\text{m}$) by water drops for $Re_d \in$
114 $[405; 950]$ ($St_p \in [0.005; 0.063]$), with and without electrical charges. Leong et al. (1982)
115 realized some experiments about both inertial and phoretic capture of inertial particles $d_p \in$
116 $[1.4; 8.5] \mu\text{m}$ ($St_p \in [0.017; 0.78]$) at low Reynolds number $Re_d \in [2; 8]$. More recently,
117 experiments on the capture of particles of $d_p \in [0.38; 4.4] \mu\text{m}$ ($St_p \in [0.002; 0.217]$) by drops at
118 high Reynolds number $Re_d \in [987; 1597]$ have been conducted by Qu  rel et al. (2014). The
119 same range of particles and droplet Reynolds number has been investigated by Sow and Lemaitre
120 (2015) but for electrically charged particles and droplets.

121 This review shows that, whichever the method employed to obtain aerosol collection
122 efficiencies, there exists a lack of reference data for aerosol particles of intermediate inertia, that is
123 particles which are significantly sensitive to both inertia and to Brownian motion (roughly, particles
124 with aerodynamic diameter between 50 nm and 2 μm). These particles are these of the so-called
125 Greenfield gap (Greenfield, 1957), in which the collection efficiency is minimum due to a tracer-
126 like behavior of particles around the drop, the deviation of particles from the streamlines being

127 minimum. This minimal collection efficiency explains the difficulty of obtaining precise
128 experimental data.

129 This lack of precision on E_c in this range constitutes a drawback to effectively design
130 remediation processes based on water sprays, since droplets presenting low collection efficiencies
131 can in certain case be very effective in removing aerosol particles, because of high residence time.
132 In these cases, an error on E_c , as typically exists in available data, can result on large overestimation
133 of the overall efficiency, as shown in (Cherrier et al., 2016). In this context, the purpose of present
134 paper is hence first to obtain data more accurate than available for E_c in the Greenfield gap, for
135 droplets at moderate Reynolds number ($Re_d < 100$) in air saturated with humidity and without
136 electrical forces, i.e. when only Brownian and inertial capture occur simultaneously. To do so, a
137 Lagrangian approach is considered similarly to (Beard, 1974; Beard and Grover, 1974), but with a
138 new approach which allows taking efficiently Brownian motion into account. Our second aim with
139 this paper is to integrate these new results in a correlation for E_c that would describe the coupling
140 between Brownian, phoretic, electrostatic and inertial scavenging for aerosol particles of
141 aerodynamic diameter lower than $100 \mu m$ and moderate droplet Reynolds number ($Re_d < 100$).

142 A detailed numerical simulation of the particle laden flow past an isolated droplet is first
143 conducted and assessed by comparison with available reference data in order to achieve these
144 objectives. The expression for the collection kernel derived by Wang et al. (1978) is then modified
145 to take into account the effect of particles inertia according to the data obtained numerically.

146 The paper is organized as follow: section 2 introduces the overview of the multiphase
147 simulation for the flow field and for the particulate phase and section 3 details the simulation
148 conditions and the verification and validation of the model. Section 4 presents the new results and
149 the correlation for the efficiency of capture derived from them.

150 2. Overview of the multiphase simulation

151 This study aims first at fulfilling the lack of data for capture efficiencies for aerosols of
152 aerodynamic diameter ranging from $1 nm$ to $100 \mu m$ and droplet diameter ranging from $80 \mu m$ to
153 $600 \mu m$ with corresponding Reynolds number Re_d ranging from 1 to 100, with (Equation (3)):

$$154 Re_d = \frac{U_d d_d}{\nu_a} , \quad (3)$$

155 where U_d is the droplet terminal velocity and ν_a is the air kinematic viscosity.

156 A modeling of the motion of a single isolated droplet in a particle laden air flow is set up to
157 reach this goal. The assumed low volume fraction of aerosol particles in the air ($\alpha_p < 10^{-6}$) allows
158 a one way coupling modeling (Elghobashi, 1994).

159 Thanks to the one way coupling point of view, the effects of the presence of the discrete
160 phase on the dynamic of the continuous phase are neglected. As a consequence, the modeling of the
161 flow of the continuous phase (inside and outside the droplet) can be done independently from the
162 modeling of the discrete phase.

162 2.1. Flow inside and around a droplet

163 We consider a droplet of diameter $d_d \in [80; 600] \mu m$ falling at a constant velocity U_d in air
164 at rest which is saturated with humidity and homogeneous in temperature. The droplet Reynolds
165 number Re_d ranges from 1 to 100, so the velocity U_d is chosen accordingly. In these conditions, the
166 airflow is laminar and the droplet Weber number We_d is sufficiently small to assume that the
167 droplet remains spherical (Rimbert et al., 2014) i.e. $We_d = \rho_a U_d^2 d_d / \gamma < 0.06$ with ρ_a

168 corresponding to the air density and γ being the surface tension of the droplet (later on, the
 169 subscript a refers to the air and the subscript l refers to the water). Two continuous incompressible
 170 phases, separated by a non-deformable interface are then present. The flows inside and outside the
 171 drop are laminar and modeled by the Navier-Stokes equations discretized and solved by means of a
 172 second order “Quick” finite-volume approach. The fluid governing equations are
 173 nondimensionalized by introducing the reference dimensions of the case, namely U_d , d_d and
 174 $\frac{1}{2}\rho_f U_d^2$ respectively for the droplet velocity, the droplet diameter and the dynamic pressure. This
 175 allows modeling different situations depending on (Re_d, d_d) by modifying only the value of each
 176 fluid f nondimensionalized dynamic viscosity μ_f^* (Equation (4)) :

$$\mu_f^* = \frac{1}{Re_f} , \quad (4)$$

177 where Re_f corresponds to the aerodynamic (resp. hydrodynamic) droplet Reynolds number when f
 178 refers to the air (resp. water) and the superscript $*$ refers to the nondimensionalized variable.

179 In the range of interest, the flow is steady and axisymmetric (Oliver and Chung, 1985;
 180 Wham et al., 1997; Juncu, 1999) and the modeling can be reduced to a 2D-axisymmetric case. The
 181 droplet evaporation and condensation do not occur since it is assumed that the air is saturated with
 182 humidity and the droplet temperature is equal to the air temperature. The effects of internal
 183 circulation in the droplet, due to the surrounding airflow, have been taken into account in the
 184 simulation by imposing the shear-stress continuity at the droplet surface. A validation of the
 185 modeling procedure can be found in section 3.2.

186 2.2. Aerosol Lagrangian tracking

187 The discrete solid phase is composed of spherical airborne particles of aerodynamic
 188 diameter varying between 1 nm (sensitive to Brownian motion) and 100 μm (inertial particles). A
 189 Lagrangian point of view is considered to model each particle trajectory. Even if the airflow is
 190 axisymmetric, the trajectory of a single aerosol particle is fully 3D because of its Brownian motion.
 191 The trajectory of individual particles is integrated following the approach of Minier and Peirano
 192 (2001) corresponding to the set of Equation (5). This formulation accounts for the transport of
 193 particle by the flow through Stokesian drag and Brownian motion, since some of the considered
 194 particles are smaller than the mean free path of molecules in the air ($\lambda \approx 68 \text{ nm}$ in air saturated in
 195 humidity at fluid temperature $\theta_f = 298 \text{ K}$ and absolute pressure $P = 101325 \text{ Pa}$ (Jennings, 1988)).
 196 Thermophoresis, diffusiophoresis and electrical forces are disregarded, in conformity with the
 197 considered situation previously exposed. Collisions between particles are ignored because the
 198 collision frequency of aerosol particles due to Brownian motion is much lower than the drop
 199 collection kernel in the range of interest of this paper (Fig. 6). Indeed, according to Fuchs (Fuchs,
 200 1964), the maximum value of the collision kernel is $2.8 \cdot 10^{-15} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ for a particle diameter equal
 201 to 27 nm, which is at least 5 order of magnitude lower than the drop collection kernel.

$$\left\{ \begin{array}{l} d\mathbf{X}_p(t) = \mathbf{U}_p(t) dt , \\ d\mathbf{U}_p(t) = \frac{\mathbf{U}_{f@p}(t) - \mathbf{U}_p(t)}{\tau_p} dt + B d\mathbf{W}_t , \end{array} \right. \quad (5)$$

202 where $\mathbf{X}_p(t)$ (resp. $\mathbf{U}_p(t)$) is the particle position (resp. velocity) vector at time t , $\mathbf{U}_{f@p}(t)$ is the
 203 fluid velocity at $\mathbf{X}_p(t)$, τ_p is the particle aerodynamic relaxation time (Equation (6)), B is a
 204 coefficient relative to the diffusional properties of the particle due to Brownian motion (Equation

205 (7)), \mathbf{W}_t is the Wiener process used for the random process of the model and $d\mathbf{W}_t$ is its increment.
 206 The Wiener process is a stochastic process with continuous trajectories which is nowhere
 207 differentiable. This random walk process presents a Gaussian increment which is independent of its
 208 previous values. Further details can be found in (Oksendal, 2000) and (Minier and Peirano, 2001).

$$\tau_p = \frac{Cu \rho_p d_p^2}{18 \mu_f} , \quad (6)$$

$$B = \sqrt{\frac{12k_B \theta_f}{\pi d_p^3 \rho_p \tau_p}} , \quad (7)$$

209 where Cu represents the Stokes-Cunningham slip correction factor and k_B is the Boltzmann
 210 constant.

211 2.3. Capture detection

212 It is assumed that capture occurs once a particle touches the droplet surface (the retention
 213 efficiency equals one). According to Weber (1969), dust particles stick on the drop surface as soon
 214 as they collide with it, whether wettable or not. Once a particle is captured, the modeling of its
 215 movement is over.

216 3. Modeling of the flow field and particulate phase

217 3.1. Computational domains

218 Considering the 2D-axisymmetric nature of the flow in the considered cases, each modeling
 219 (continuous and discrete phase) is performed in a cylindrical domain aligned with the flow direction
 220 and encompassing the droplet. The droplet center is always placed at the origin of each used
 221 coordinates system.

222 3.1.1 Computational domain and grid for the continuous phase

223 The axisymmetric Navier-Stokes equation of the flow are solved on a 2D grid where (X, R)
 224 are the orthogonal axis with related units of length (e_X, e_R) , e_X being aligned with the flow direction
 225 (Fig. 1). The domain is chosen wide enough so as not to affect the results: it starts $9 d_d$ upstream of
 226 the droplet and ends $30 d_d$ downstream. The radius of the computational domain is $6 d_d$. The grid
 227 used for the discretization is unstructured and composed of quadrilateral cells whose size increase
 228 with the distance to the drop surface. The typical cell length Δx is given by Equation (8):

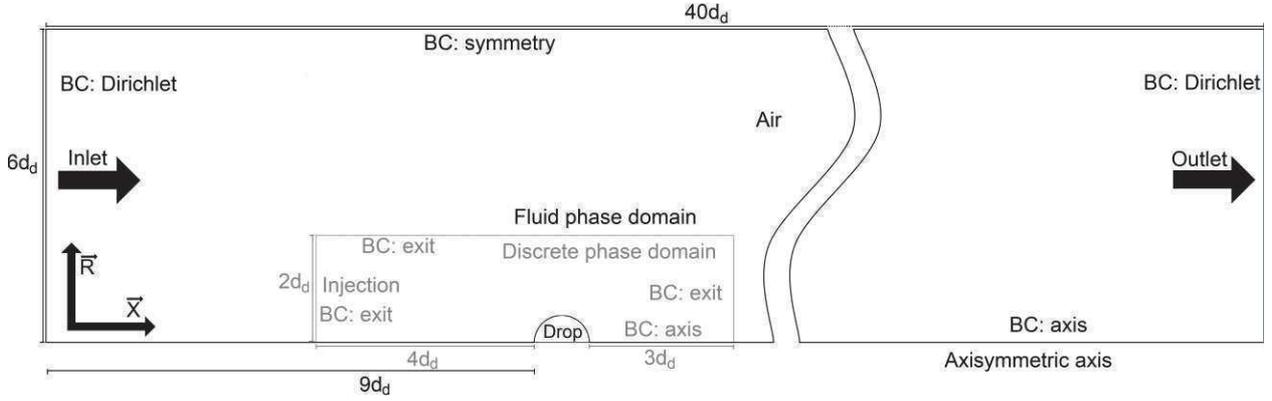
$$0.1 \leq \frac{\Delta x}{v_a} \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho_a}} \leq 3.75 , \quad (8)$$

229 where τ_w is the mean wall shear stress at the droplet surface. The minimum value given by
 230 Equation (8) is set at the droplet surface (cell size of $1.97 \cdot 10^{-2} d_d$) whereas the maximum value is
 231 found far away from the droplet (cell size of $3.83 \cdot 10^{-1} d_d$).

232 3.1.2 Computational domain for the discrete phase

233 Contrarily to the flow motion, the particle trajectories are fully 3D due to Brownian motion,
 234 hence particles trajectories are tracked in a 3D cylindrical domain. This computational domain for

235 the discrete phase is smaller than that of the continuous phase: it starts $4 d_d$ upstream of the drop
 236 and ends $3 d_d$ downstream of the drop, the radius of the domain being of $2 d_d$. It was found that
 237 using wider dimensions did not affect the results while unnecessarily increasing the computational
 238 cost. To integrate trajectories, the fluid flow velocity vector at the particles position is obtained
 239 from the continuous phase domain by means of a two-stage interpolation procedure which is
 240 detailed in section 3.3.



241
 242 Fig. 1. Boundary conditions (BC) and geometrical characteristics of the computational domain.
 243 Geometrical unit: droplet diameter d_d . Gray: aerosol particle phase mesh, black: flow phase mesh.

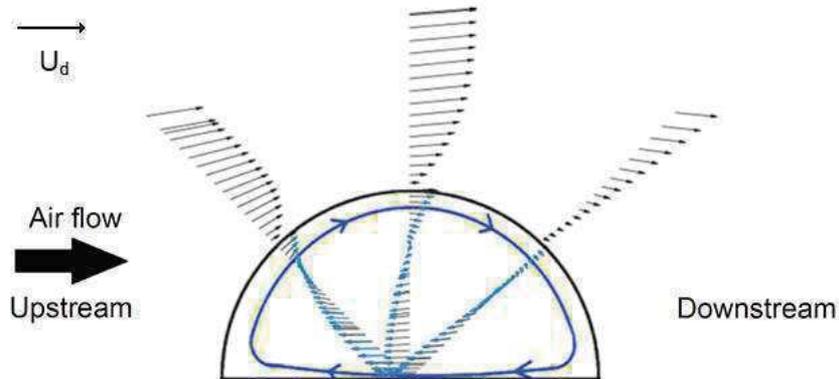
244 3.2. Continuous phases

245 3.2.1 Modeling of the shear-stress continuity at the droplet interface

246 The airflow around the droplet can induce a circulatory motion inside it and this water flow
 247 has an effect on the airflow. The shear-stress continuity at the droplet surface must be considered
 248 (Hadamard, 1911; Rivkind and Ryskin, 1976; Oliver and Chung, 1985; Feng and Michaelides,
 249 2001; Saboni et al., 2004) to take this phenomenon into account (Equation (9)):

$$\mu_l^* \rho_l \frac{\partial U_{t_l}^*}{\partial r_l^*} = \mu_a^* \rho_a \frac{\partial U_{t_a}^*}{\partial r_a^*} , \quad (9)$$

250 where U_{t_f} corresponds to the tangential velocity to the droplet interface on the fluid f side and r_f is
 251 the normal vector of the droplet surface. Figure 2 highlights the effect of the shear-stress continuity
 252 at the droplet surface on both air and water flows.



253
 254 Fig. 2. Velocity vectors in and outside a droplet for $Re_d = 30$. Inside vectors are scaled $\times 20$.

255 The shear-stress continuity equation is one of the four boundary conditions used in the
 256 modeling of the continuous phase dynamics. Figure 1 describes the other boundary conditions i.e. a
 257 Dirichlet boundary condition corresponding to the droplet terminal velocity is used at the inlet and
 258 outlet of the domain, an axis type boundary condition is used at the axis X which is along the
 259 airflow direction and finally a symmetry boundary condition is implemented at the opposite
 260 boundary.

261 3.2.2 Verification and performance for the gas-liquid simulation

262 Any numerical inaccuracies in the fluid phase modeling are transmitted to the discrete phase
 263 calculation. In this respect, having low quality results about the fluid phase increases the error in the
 264 particle dynamic modeling. The fluid phase convergence is verified by monitoring both mass
 265 conservation and residuals of the fluid velocity and mass flow by means of the software Ansys
 266 Fluent® 15.

267 Furthermore, the validation of the modeling is achieved by means of comparisons of the
 268 velocity, pressure and vorticity at the droplet interface with literature data (LeClair et al., 1972).
 269 From these data, the pressure and the vorticity deviate by less than 5% and the velocity by less than
 270 2%. These results are presented in supplementary material.

271 In addition, the droplet drag coefficient C_d is also compared with two well-known literature
 272 correlations (Rivkind and Ryskin, 1976; Saboni et al., 2004). These comparisons show a good
 273 agreement between the presented simulations and the literature. The computed C_d deviates from
 274 Rivkind and Ryskin (1976) values by a maximum of 3% for $Re_d = 100$ and from Saboni et al.
 275 (2004) values by 5%. These deviations are lower than the prediction error given by Rivkind and
 276 Ryskin (1976) and Saboni et al. (2004) for their correlation. Results of these comparisons can be
 277 found in supplementary material.

278 3.3. Aerosol phase

279 3.3.1 Modeling of the aerosol phase by a Lagrangian Stochastic Differential Equation

280 Aerosol particles are injected into the computational domain at the injection boundary face
 281 representing a disc of injection centered on the X axis. Each particle is assigned an initial position
 282 according to a uniform statistical distribution. The injection process is optimized by sizing the disc
 283 of injection according to the particle Stokes number. The injection disc for aerosol particle with
 284 small Knudsen number that are sensitive to Brownian motion (d_B in Fig. 3) is sized by means of
 285 Equation (10) (Einstein, 1956) which gives the root mean square displacement of a particle in a still
 286 flow due to Brownian motion:

$$\sqrt{\overline{X_p^2}} = \sqrt{3 B^2 \tau_p^2 t_0} \quad , \quad (10)$$

287 where t_0 equals the time spent by the particle to go from the injection disc to the droplet.

288 The diameter of the injection disc for intermediate inertia particles which act like tracers (d_n
 289 in Fig. 3) is sized thanks to the upstream offset of the grazing streamlines around the droplet. The
 290 diameter of the injection disc for inertial particles (d_l in Fig. 3) is equal to the sum of the particle
 291 and droplet diameter. The validity of the injection disc is assessed in the next subsection.

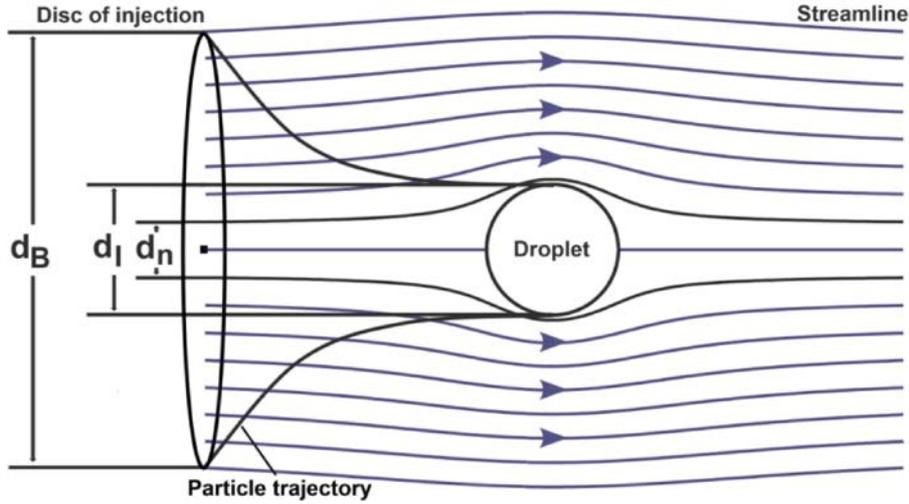


Fig. 3. Particle Stokes number related disc of injection. Scheme not scaled.

Every particle movement is obtained by continually updating its position using the analytic Lagrangian integration scheme proposed by (Mohaupt et al., 2011) and summarized by Equation (11):

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \mathbf{X}_p(t + \Delta t) = \mathbf{X}_p(t) + \mathbf{U}_p(t)\tau_p \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}}\right) + \mathbf{U}_{f@p}(t) \left[\Delta t - \tau_p \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}}\right) \right] + \\
 + B \tau_p \sqrt{\Delta t - \frac{2\tau_p \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}}\right)}{\left(1 + e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}}\right)}} \xi_x + B \frac{\tau_p^2 \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}}\right)^2}{\sqrt{2\tau_p \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}}\right)}} \xi_v , \\
 \\
 \mathbf{U}_p(t + \Delta t) = \mathbf{U}_p(t) e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}} + \mathbf{U}_{f@p}(t) \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}}\right) + B \sqrt{\frac{\tau_p}{2} \left(1 - e^{-\frac{2\Delta t}{\tau_p}}\right)} \xi_v ,
 \end{array} \right. \quad (11)$$

where (ξ_x, ξ_v) are two random variables with standard normal distribution $\mathcal{N}(0,1)$ generated by a Box-Muller method (Box and Muller, 1958). To obtain Equation (11), the Langevin equation describing the motion of a particle undergoing drag force and Brownian motion was discretized by means of the stochastic integration method given by Itô (Itô and McKean, 1965). The resulting integration scheme is based on the work of (Peirano et al., 2006). It allows using large time steps Δt following the condition $\Delta t < 10^3 \tau_p$, thanks to its capability to predict the motion of particles in both inertial and diffusive regime, the random aspect of the diffusive regime (Wiener process) being modeled with the random variables ξ_x and ξ_v . The size of the time step Δt depends also on the spatial resolution Δx of the structured grid used to track particles: Δt is set up so that the Courant number $Co = U_p \Delta t / \Delta x$ is smaller than 1. During the computations, with d_p varying between 1 nm and 100 μm , Δt varies from $10^3 \tau_p$ to $10^{-3} \tau_p$, which fits within the range of time steps applicable to the scheme of Mohaupt et al. (2011). In Equation (11), the fluid velocity vector at the position of the particle $\mathbf{U}_{f@p}(t)$ is obtained by means of a two stages interpolation procedure. First, the 2D axisymmetric fluid flow variables computed beforehand are interpolated on a finer and totally

311 structured 2D grid covering the discrete phase domain, with a constant size $\Delta x = 8 \cdot 10^{-4} d_d$. A
 312 cubic interpolation is used at this stage. Second, during particles trajectories computations, the
 313 (x,y,z) coordinates of particles are converted into their (x,r) axisymmetric counterparts which
 314 allows locating easily the cell of the fine structured grid in which they lie. $\mathbf{U}_{f@p}(t)$ is finally
 315 obtained by linear interpolation from this structured grid to the position of the particles, after proper
 316 basis conversion from cylindrical to Cartesian coordinate system. It should be emphasized that the
 317 spatial discretization effectively used to integrate particles trajectory is much finer than the one used
 318 for the flow variables. This is conditioned by the thickness of the boundary layer for aerosol
 319 concentration which scales with $Sc^{-1/3}$, where Sc is the Brownian Schmidt number (Equation
 320 (12)). The 2D finer structured grid used to track particles was refined until the simulation results did
 321 not evolve with further refinement (grid independence verification).

$$Sc = \frac{2\mu_f}{\rho_f B^2 \tau_p^2} , \quad (12)$$

322 The initial particle velocity vector $\mathbf{U}_p(0)$ is set to $\mathbf{U}_{f@p}(0)$. The computation of each
 323 particle displacement is achieved until the particle leaves the domain or until it is captured by the
 324 droplet.

325 The capture of a particle by the droplet occurs when the distance between the particle and
 326 the droplet centers is lower than the sum of their two radii. It can happen either during or at the end
 327 of a time step. When it happens at the end of a time step, it is simply described by Equation (13):

$$\sum_{i=1}^2 (X_p^i - X_d^i)^2 \leq \frac{1}{4} (d_d + d_p)^2 , \quad (13)$$

328 where X_p^i (resp. X_d^i) is the position of the particle center (resp. droplet center) on the i axis referring
 329 to X or R . When it happens during a time step, that is between two successively computed position,
 330 it is due to the Brownian motion of the particle and it is described by Equation (14) based on the
 331 Brownian bridge theory (Henry et al., 2014):

$$\frac{e^{\left(\frac{(d_d+d_p)(a+b-0.5(d_d+d_p))}{B^2\tau_p^2\Delta t}\right)}}{e^{\left(\frac{2ab}{B^2\tau_p^2\Delta t}\right)} - 1} \geq \Lambda , \quad (14)$$

332 where a (resp. b) is the distance between the particle and the droplet centers at the beginning (resp.
 333 end) of the time step and Λ is a random value obtained from a uniform distribution (Press et al.,
 334 1992).

335 The collision between a particle and a droplet is a stochastic process. Thus, the capture
 336 efficiency E_c for a situation (Equation (15)) is obtained by means of a Monte Carlo method i.e. by
 337 averaging efficiencies of capture corresponding to successive realizations. A realization involves
 338 the initialization of the particles positions and the computation of their trajectories.

$$E_c = \frac{1}{j_m} \sum_{i=1}^{j_m} E_{c_i}(d_d, d_p) , \quad (15)$$

339 where j_m is the number of realizations used to obtain the capture efficiency E_c and E_{c_i} is the capture
 340 efficiency obtained through the i^{th} modeling thanks to Equation (16).

$$E_{c_i} = \frac{j_{p_c}}{\frac{\pi}{4}(d_d + d_p)^2 N_{p_{inj}}} , \quad (16)$$

341 where j_{p_c} is the number of captured particles and $N_{p_{inj}}$ is the surface numerical concentration of
 342 particles on the injection disc.

343 3.3.2 Verification and performance for the particle Lagrangian Stochastic Differential Equation

344 Similarly to the fluid phase modeling, the aerosol phase convergence must be assessed and
 345 verified. First, comparison of the Brownian motion of particles with theory is realized. Second, the
 346 mesh convergence is verified. Then, the influence of the diameter of the injection disc on the
 347 calculated capture efficiency is studied. Finally, verifications of the Monte Carlo method are
 348 achieved by monitoring the evolution of the mean capture efficiency E_c as a function of the number
 349 of Monte Carlo realizations and number of particles injected in the domain.

350 To ensure that the particle Brownian motion is correctly computed, the Brownian motion of
 351 particles in a flow at rest was modelled and the RMS of the displacement of particles was compared
 352 to theory. Results show that, for particles of aerodynamic diameter between $[1 \text{ nm}; 100 \text{ }\mu\text{m}]$ in
 353 ambient air, the RMS displacement differs from theory by 1% for a simulation time comparable to
 354 the maximum transition time of particles past the drop and for a particle time step of $1000 \tau_p$.

355 In a second step, to verify that the results are independent from the chosen resolution of the
 356 discrete phase mesh, the mesh convergence was verified. The discrete phase mesh was refined until
 357 the computed capture efficiency did not vary, meaning that the concentration boundary layer for the
 358 discrete phase was sufficiently resolved. The final discrete phase mesh corresponds to the one
 359 described in 3.1.

360 The purpose of the third verification case is to ensure that the diameter d_{inj} of the disc of
 361 injection is optimal i.e. gives a precise value for the capture efficiency with a minimal
 362 computational time. For example, the optimal injection disc of aerosol particles of diameter
 363 $d_p = 1 \text{ }\mu\text{m}$ captured by a droplet of diameter $d_d = 600 \text{ }\mu\text{m}$ is a disc of diameter around $0.4 d_d$.
 364 Thanks to this injection disc, the present relative mean efficiency is equal to E_c and the duration of
 365 the Monte Carlo computation is 3 fold lower than if the diameter of the injection size is equal to
 366 $d_d + d_p$. More information can be found in supplementary material.

367 A last verification case consists of controlling the statistical convergence of the computed
 368 capture efficiency. The capture efficiencies E_c are obtained by means of several realizations
 369 concerning a large number of injected particles. It was verified that the obtained efficiencies are
 370 distributed normally thanks to a Shapiro-Wilk test (Shapiro and Wilk, 1965) with a significance
 371 level of 0.95. Hence, the confidence interval on E_c can be estimated thanks to a Student-t
 372 distribution test. In case of particles trajectories that are non-sensitive to Brownian motion, 1000
 373 successive realizations of 100 particles allow computing E_c with a confidence interval smaller than
 374 1%. In case of small particles sensitive to Brownian motion (small Knudsen number), more than
 375 100 particles must be injected i.e. when $d_p = 2 \text{ nm}$ and $Re_d = 100$, 100 successive realizations

376 of 10 000 particles are necessary. Results of this verification are condensed in supplementary
 377 material. The efficiencies proposed in this paper are then based on these numbers of trajectories and
 378 successive realizations.

379 3.4. Validation case for the three-phase model

380 The purpose of the validation case is to verify the overall modeling of the scavenging
 381 process by comparing the collection kernels obtained by the presented simulations (Equation (1))
 382 for two boundary cases: pure Brownian scavenging and pure inertial scavenging. For pure
 383 Brownian scavenging, results are compared to the theoretical formula given by Wang et al. (1978)
 384 (Equation (17)):

$$K_B = \frac{\pi}{2} d_d B^2 \tau_p^2 Sh \quad , \quad (17)$$

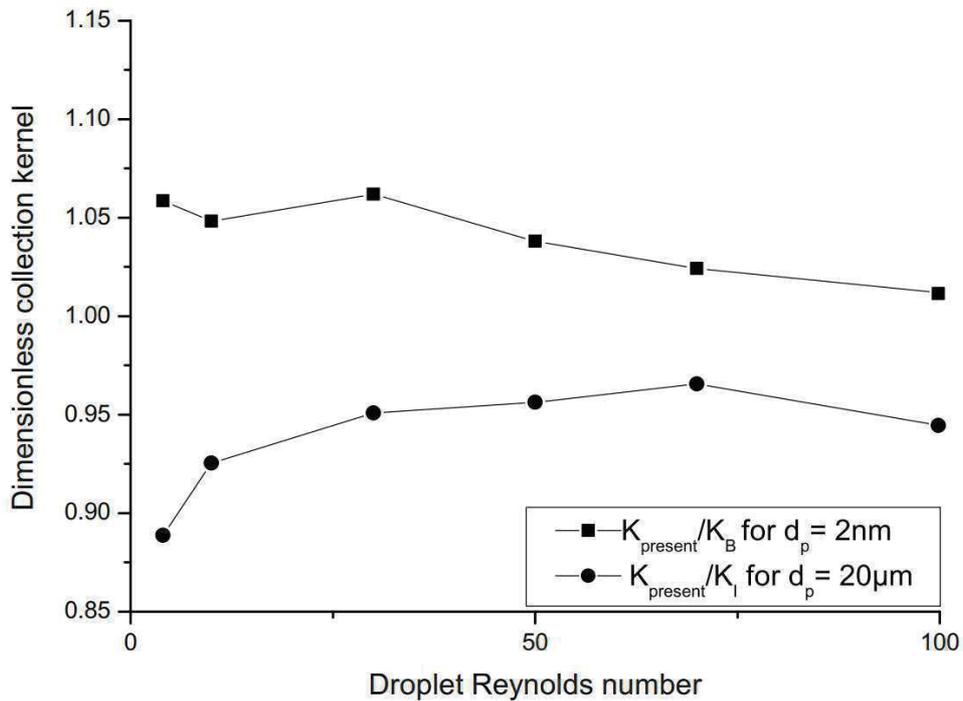
$$\begin{cases} Sh = 1.56 + 0.616 Re_d^{1/2} Sc^{1/3} & \text{when } Re_d^{1/2} Sc^{1/3} > 1.4 \quad , \\ Sh = 2 + 0.216 Re_d Sc^{2/3} & \text{when } Re_d^{1/2} Sc^{1/3} \leq 1.4 \quad , \end{cases} \quad (18)$$

385 where Sh is the Sherwood number (Equation (18)) corresponding to the ratio of the convective
 386 mass transfer to the rate of diffusive mass transport (Beard and Pruppacher, 1971).

387 For pure inertial scavenging, results are compared to the correlation proposed by Mohebbi et
 388 al. (2003), from experimental data (Equation (19)):

$$K_I = \frac{\pi}{4} (d_d + d_p)^2 U_d \left(\frac{St_p}{1 + St_p} \right)^{0.759 St_p^{-0.245}} \quad . \quad (19)$$

389 The results of these comparisons for the boundary cases are shown in Fig. 4. This figure
 390 presents, for the boundary cases, the ratio of the collection kernel obtained by current simulations
 391 over reference collection kernels. Thus this ratio corresponds to $K_{present}/K_B$ for small particle
 392 sensitive to Brownian motion only (application for particles of diameter 2 nm) and to $K_{present}/K_I$
 393 for purely inertial particles insensitive to Brownian motion (application for particles of diameter
 394 20 μm). The comparison is performed as a function of the droplet Reynolds number.



395

396

397

Fig. 4. Ratio of obtained collection kernel over reference collection kernels for boundary cases as a function of the droplet Reynolds number ($\theta_f = 298\text{ K}, P = 101325\text{ Pa}$).

398

399

400

401

402

403

404

405

406

407

408

409

410

411

412

413

414

415

In case of pure Brownian capture, the modeling results differ by a maximum of 5% from Equation (16). In case of pure inertial capture, modeling results differ from (Mohebbi et al., 2003) correlation by 5 to 13 % depending on the considered Reynolds number. These differences are acceptable considering the accuracy of the reference correlations used and of the measurements upon which they are based. Present results appear closer to literature results for increasing droplet Reynolds number, but this observation cannot lead to conclusions regarding the dependency of the accuracy of our modeling results with respect to the droplet Reynolds number. Indeed, the accuracy of literature results is also Reynolds dependent and generally rather high. Thus, the accuracy of K_B is limited by that of the correlation for the Sherwood number proposed by Wang et al. (1978), which was established on the experimental work of (Beard and Pruppacher, 1971), for $Re_d > 2.5$ and for water vapor at small Schmidt number ($Sc = 0.71$) and not for aerosol particles at high Schmidt numbers ($Sc > 10$ in all present cases). The authors indicate an uncertainty of their correlation that could be as high as 4% for the smallest tested Reynolds number. Similarly, the uncertainty on K_I is even higher since this correlation is fitted from the experimental data of (Walton and Woolcock, 1960) obtained for $Re_d > 65$, which present a scattering of about 20% with respect to the correlation and to other experimental results. Hence, it can be verified from Fig. 4 that for boundary cases, our modeling results follow the trend observed in previous work, within the uncertainty range.

416

4. Results and discussion

417

4.1. Preferential capture zone

418

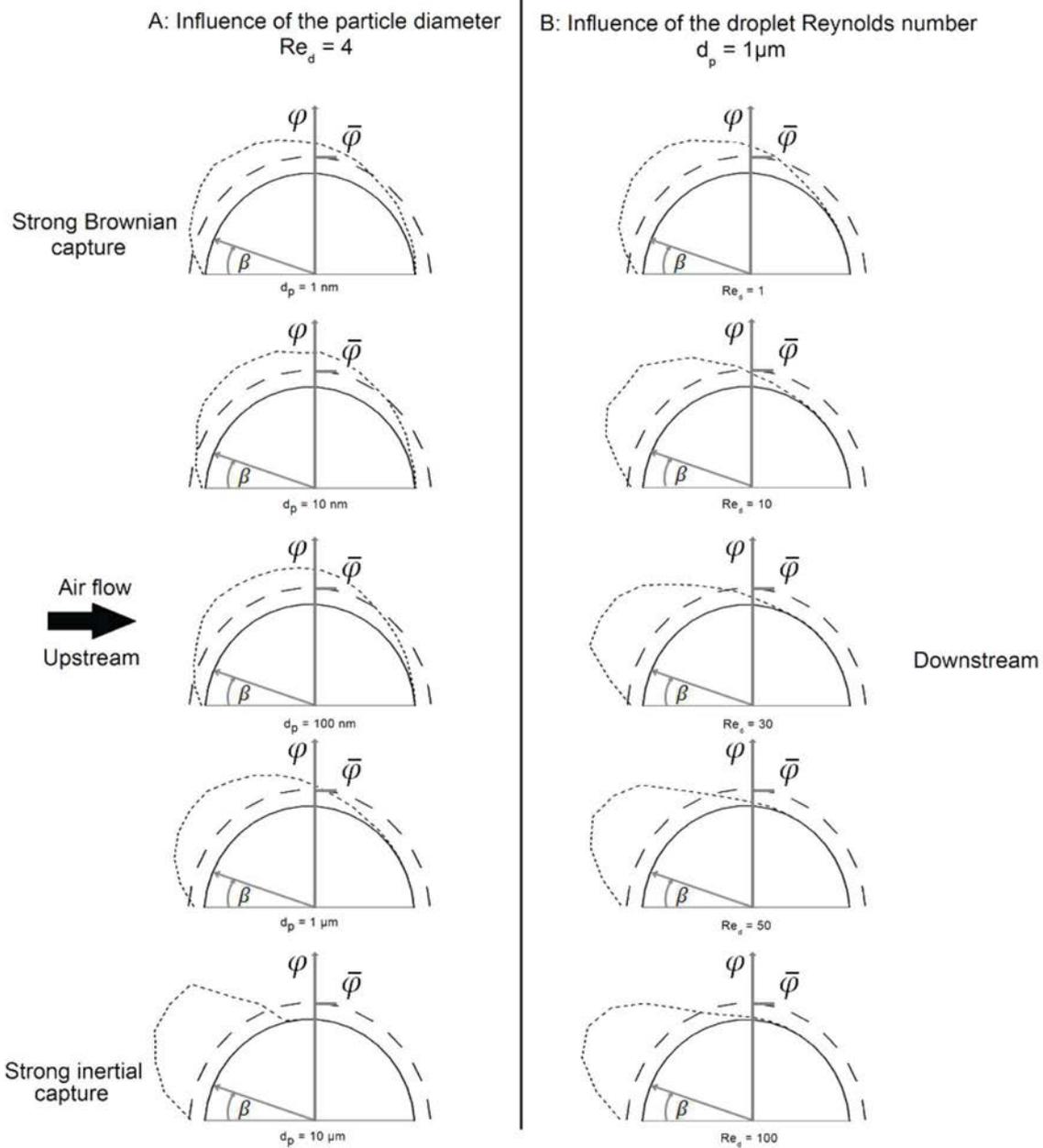
419

420

The particle final positions on the droplet surface give information about the preferential capture zones. Figure 5 shows the flux of collected particles φ as a function of the angular position β on the drop. This flux represents the number of particles per unit time and surface that are

421 collected on a spherical segment of the surface of the drop, for a concentration of aerosol particle
422 upstream equal to unity. This spherical segment is localized by its angular position with respect to
423 the front stagnation point of the drop and to the drop center. On figure 5, this flux φ is normalized
424 by $\bar{\varphi}$, the average flux of deposited particles, defined as the total number of collected particles per
425 unit time divided by the drop surface. To compute φ , the drop surface is discretized into spherical
426 segments of equal angles and the collected particles are binned into these segments according to
427 their impact position.

428 The preferential capture zones are identified depending on the aerosol particle diameter (Fig.
429 5 A) and the droplet Reynolds number (Fig. 5 B). When the particle diameter increases, preferential
430 capture zone migrate to the front side of the drop because of the increasing predominance of inertial
431 capture over Brownian capture. Even in case of strong inertial capture, few particles are captured
432 near the stagnation point in front of the droplet because of the local null axial flow velocity and the
433 strong radial flow which deviates easily the particle from its trajectory. For small droplet Reynolds
434 number ($Re_d < 50$) and at constant particle diameter ($d_p = 1 \mu m$), the more the droplet Reynolds
435 number increases, the more the particle Stokes number increases. As a consequence, the particles do
436 not follow the streamlines and are captured near the stagnation point of the droplet by impaction or
437 interception. When the droplet Reynolds number exceeds about 20, there exists a standing
438 circulating eddy on the downstream side of the droplet (this phenomenon is also pointed out in
439 (Wang et al., 1978)) where only small particles can migrate by Brownian diffusion. Thus, upstream
440 streamlines do not reach the back side of the droplet and particles are not captured on this zone of
441 the droplet and the preferential capture site migrates to the upstream side.



442

443 Fig. 5. Flux of collected particles φ (dot line) and angular drop-averaged flux $\bar{\varphi}$ (dashed line) as a
 444 function of the particle aerodynamic diameter ($Re_d = 4$ (A)) and as a function of the droplet
 445 Reynolds number ($d_p = 1 \text{ }\mu\text{m}$ (B)). Computations are based on 50 segments and β refers to the
 446 angular position.

447 4.2. Collection kernel

448 The values of the collection kernel obtained through the present modeling can be compared
 449 with literature data. Figure 6 plots the results of the present modeling, values of Grover's trajectory
 450 model (Grover et al., 1977), Slinn's collection kernel K_S (Slinn, 1977), Wang's collection kernel
 451 K_W (Wang et al., 1978) and Mohebbi's collection kernel K_I (Mohebbi et al., 2003). In their
 452 trajectory model, (Grover et al., 1977) do not take into account Brownian motion and results are

453 available for particles with $d_p \geq 0.5 \mu\text{m}$. The theoretical model of (Wang et al., 1978) takes
 454 Brownian, phoretic and electrostatic forces into account but not inertia, according to Equation (20):

$$K_w = \frac{C_w}{\frac{2 C_w}{e^{\pi Sh d_d B^2 \tau_p^2} - 1}}, \quad (20)$$

$$\text{with } C_w = \frac{4HCu}{3d_p\mu_f}, \quad (21)$$

455 where H is a function modeling the contribution of the diffusiophoretic (H_{df} , Equation (22)),
 456 thermophoretic (H_{th} , Equation (23)) and electrostatic forces (H_e , Equation (24)) such as $H =$
 457 $H_{df} + H_{th} + H_e$.

$$H_{df} = -0.55\pi \mu_f D_{vap} Sh d_d d_p \frac{(X^\infty - X^S)}{Cu(1 - X^\infty)}, \quad (22)$$

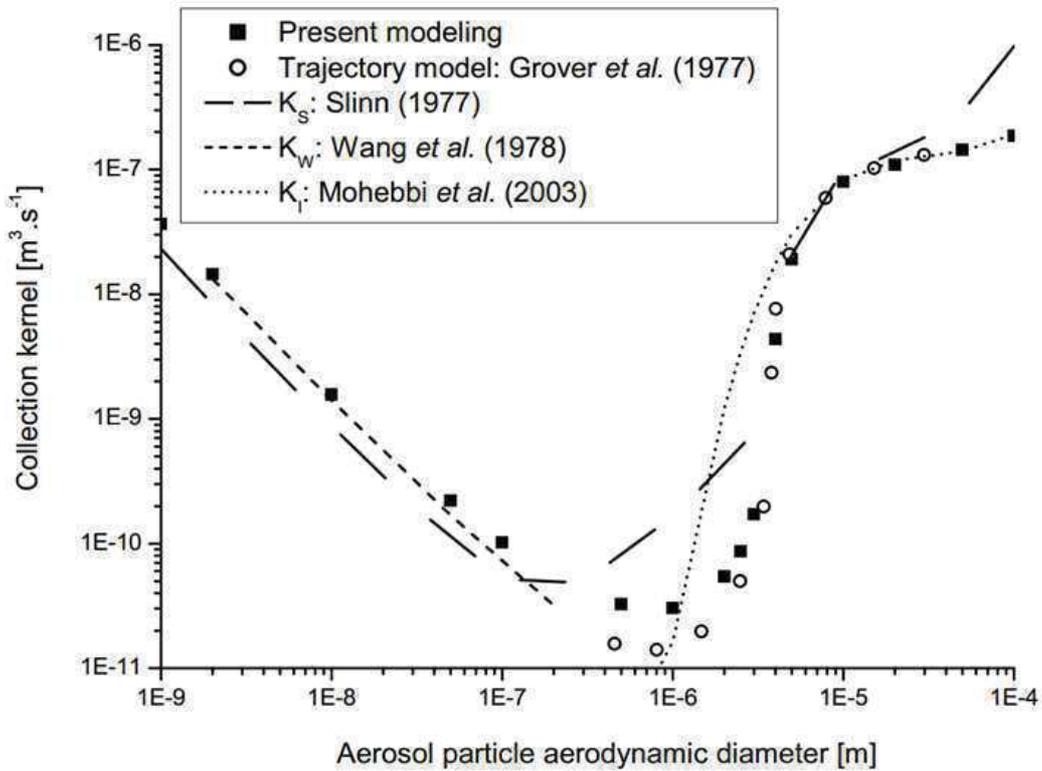
458 where D_{vap} is the water vapor diffusivity in air, X is the water vapor molar fraction in the air, the
 459 superscript S refers to the droplet surface and the superscript ∞ refers to the fluid away from the
 460 drop.

$$H_{th} = -0.3\pi \mu_f Sh d_d d_p \frac{\lambda_f \left(\frac{\lambda_f}{\lambda_p} + 2.5Kn \right) (T^\infty - T^S)}{(1 + 3Kn) \left(1 + 2 \frac{\lambda_f}{\lambda_p} + 5Kn \right) P}, \quad (23)$$

461 where λ_f is the thermal conductivity of the fluid f , λ_p is the thermal conductivity of the particle and
 462 Kn is the aerosol particle Knudsen number.

$$H_e = \frac{Q_d Q_p}{4\pi\epsilon_0}, \quad (24)$$

463 where Q is the electric charge and ε_0 is the vacuum permittivity. When phoretic and electric forces
 464 are inexistent, such as in present modeling for non-evaporating droplet in air saturated with
 465 humidity, Wang's collection kernel K_w (Equation (20)) reduces to the pure Brownian collection
 466 kernel K_B (Equation (17)) i.e. $\lim_{H \rightarrow 0} K_w = \frac{\pi}{2} d_d B^2 \tau_p^2 S h$.



467
 468 Fig. 6. Collection kernel values at $Re_d = 30$ and $H = 0$ as a function of the particle aerodynamic
 469 diameter. Here $K_w = K_B$ because of the null value of H .

470 As can be seen in the top left part of Fig. 6, the results of the modeling presented are close
 471 to Wang's collection kernel values for non-inertial particles (Wang et al., 1978). Moreover,
 472 Mohebbi's data (Mohebbi et al., 2003) and the present results for inertial particles are similar to
 473 each other (top right part of Fig. 6). What is more, Grover's data (Grover and Beard, 1975) and the
 474 present results are alike, except concerning particles with diameters corresponding to the Greenfield
 475 gap i.e. the minimum found in present results is less deep than Grover's (bottom center). This is
 476 explained by the fact that Grover and colleagues neglected Brownian motion in their work (Grover
 477 et al., 1977). Slinn's collection kernel values (Slinn, 1977) and results of the present modeling are
 478 not comparable. In the literature, Slinn's correlation has been shown as inaccurate (Volken and
 479 Schumann, 1993; Laakso et al., 2003). However, the discrepancy between present results and
 480 Slinn's correlation might also be explained by the macrophysical phenomenon taken into account in
 481 Slinn's correlation and not in the microphysical modeling (advection, particle transport at meso
 482 scale,...).

483 4.3. Data compression and correlation

484 A correlation for a collection kernel is derived from the present modeling in order to use the
 485 present results of collection kernels in future computational fluid dynamics (CFD) studies. It is
 486 based on the collection kernel K_w proposed by Wang et al. (1978) (Equation (20)). The approach

487 used to obtain the correlation consists in introducing a new correlation for the Sherwood number to
 488 integrate the effect of the particle inertia on the mass transfer rate so as to improve K_w by allowing
 489 it to take also the inertial capture into account. Hence, a correlation has been set up for Sh which
 490 adds the dependency on Re_d and St_p to introduce the effects of inertial capture. Its mean coefficient
 491 of determination is $R^2 = 0.975$. The proposed correlation for the Sherwood number reads
 492 (Equation (25)):

$$Sh'(Re_d, St_p, Sc) = Sh(Re_d, Sc) * F(St_p) + G(Re_d, St_p) , \quad (25)$$

493 where:

$$F(St_p) = \left(\frac{1 + 2 St_p^{0.43}}{1 + St_p^{0.43}} \right)^{12} , \quad (26)$$

$$G(Re_d, St_p) = Sh'^{inf} \left(\frac{7.39 St_p^{0.87}}{1 + 7.39 St_p^{0.87}} \right)^{12 - 2 \log_{10}(Re_d)} , \quad (27)$$

494 and:

$$Sh'^{inf} = \frac{(d_d + d_p)^2 \mu_f Re_d}{2 d_d^2 B^2 \tau_p^2 \rho_f} , \quad (28)$$

495 where Sh'^{inf} corresponds to the case of pure ballistic capture (Equation (28)). Replacing Sh by Sh'
 496 into the collection kernel of (Wang et al., 1978) enables predicting effectively the scavenging
 497 phenomenon including Brownian and inertial capture (Equation (29)):

$$K_{w_c} = \frac{C_w}{\frac{2C_w}{e^{\pi Sh' d_d B^2 \tau_p^2} - 1}} . \quad (29)$$

498 Since the collection kernel of (Wang et al., 1978) takes phoretic and electrostatic captures
 499 into account, K_{w_c} must also be able to predict these two types of capture. This is shown in Fig. 7
 500 where K_{w_c} values for $Re_d = 30$ and air relative humidity $H_r \in [50; 100]\%$ are compared with
 501 Wang's collection kernel K_w (Wang et al., 1978) and Grover's trajectory model (Grover et al.,
 502 1977). Figure 7 shows that the dependency of the collection kernel with respect to the relative
 503 humidity found by Wang et al. (1978) and Grover et al. (1977) is described by the proposed
 504 correlation for K_{w_c} .

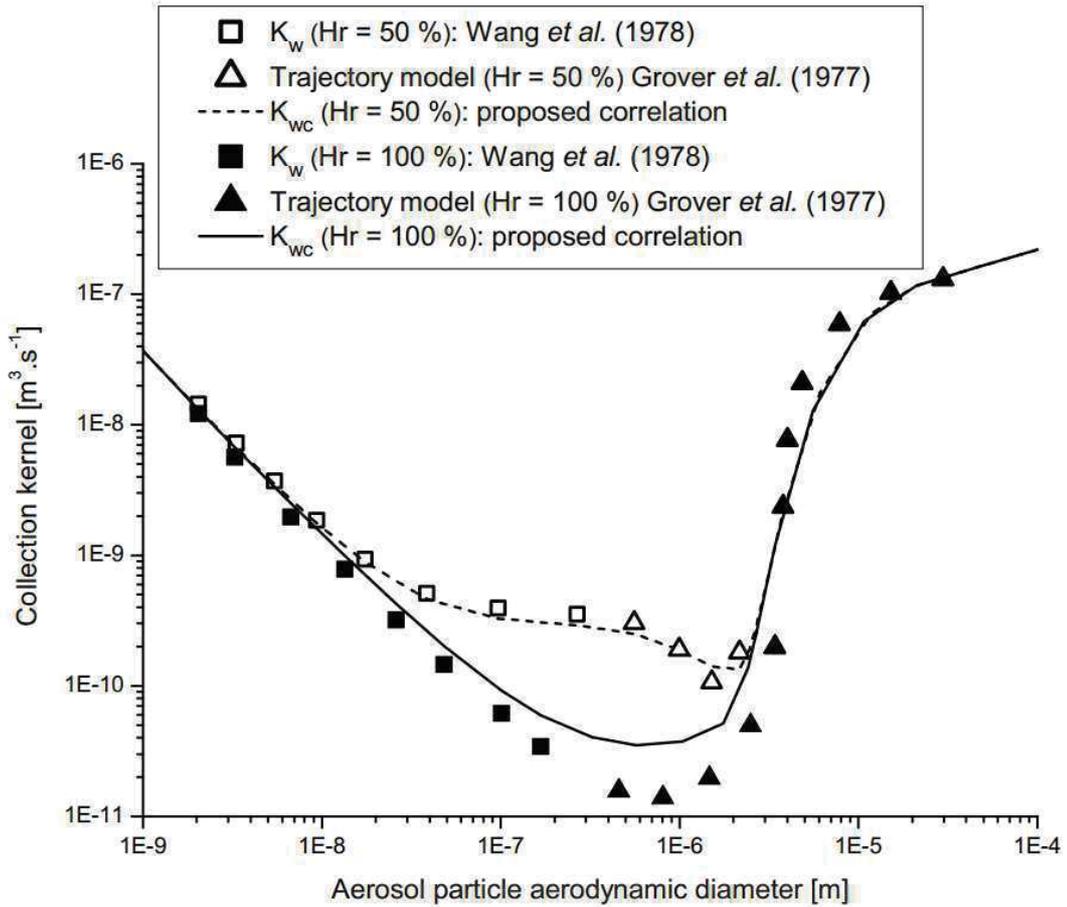


Fig. 7. Collection kernel values at $Re_d = 30$ and $H_r \in [50; 100]\%$ as a function of the particle aerodynamic diameter.

5. Conclusion

The aim of this paper was first to use microphysical modeling of aerosol scavenging by drops to collect more accurate data than available around the Greenfield gap (Greenfield, 1957), and second to compress these data as a correlation.

A model is developed, based on Eulerian modeling of the air and liquid phase and Lagrangian modeling of the collected particles' trajectory and diffusion thanks to a stochastic differential equation. The droplet is constrained to remain spherical but shear stress is continuous at the interface leading to accurate drag prediction and henceforth both the flow fields inside and outside the droplet are assumed accurate.

This three-phases coupled modeling enables computing the efficiency with which a falling droplet at constant velocity and moderate Reynolds number $Re_d \leq 100$ scavenges aerosol particles, by means of inertial and Brownian scavenging. The model was first numerically verified and then validated using available reference data. Simulations were performed to obtain aerosol particles collection efficiencies for $d_p \in [1 \text{ nm}; 100 \text{ }\mu\text{m}]$ and $Re_d \in [1; 100]$ with a numerical error lower than 1%. The obtained data were then compressed by a correlation which extends the field of use of the theoretical model of (Wang et al., 1978) by taking inertial capture into account. The proposed

524 correlation appears suitable to estimate the aerosol scavenging efficiency for a non-deforming drop
525 with $Re_d \leq 100$, and particle Stokes number $St_p \in [0; +\infty]$.

526 In case of evaporating or condensing droplets, the effect of thermophoresis and
527 diffusiohoresis are indirectly taken into account through the formulation proposed by Wang et al.
528 (1978). This new formulation seems to be accurate on the tested case with thermophoresis. This
529 correlation can be used straightforwardly; for instance in CFD models. This would help modeling
530 air depollution processes based on water capture by means of computational fluid dynamics (CFD).

531 **Acknowledgments**

532 This study was supported by the French National Institute for Research and Safety (INRS,
533 www.inrs.fr). The authors also acknowledge partial support from COST action MP1305 “Flowing
534 Matter” supported by COST “European Cooperation in Science and Technology”.

535 **References**

- 536 Ardon-Dryer, K., Huang, Y.-W., Cziczo, D.J., 2015. Laboratory studies of collection efficiency of sub-micrometer aerosol particles
537 by cloud droplets on a single-droplet basis. *Atmos. Chem. Phys.* 15, 9159–9171.
- 538 Beard, K., 1974. Experimental and Numerical Collision Efficiencies for Submicron Particles Scavenged by Small Raindrops. *J.*
539 *Atmos. Sci.* 31.
- 540 Beard, K. V, Grover, S.N., 1974. Numerical Collision Efficiencies for Small Raindrops Colliding with Micron Size Particles. *J. Air*
541 *Pollut. Control Assoc.* 31.
- 542 Beard, K. V, Pruppacher, H.R., 1971. A Wind Tunnel Investigation of the Rate of Evaporation of Small Water Drops Falling at
543 Terminal Velocity in Air. *J. Atmos. Sci.* 28, 1455–1464.
- 544 Berg, T.G.O., Gaukler, T.A., Vaughan, U., 1970. Collisions in washout. *J. Atmos. Sci.* 27, 435–442.
- 545 Box, G.E.P., Muller, E., 1958. A Note On The Generation Of Random Normal Deviates. *Ann. Math. Stat.* 610–611.
- 546 Cherrier, G., Belut, E., Taniere, A., Rimbart, N., Gerardin, F., 2016. Modelling the removal rate of airborne dust by sprays:
547 importance of a realistic scavenging kernel, in: 4th Workplace and Indoor Aerosols Conference.
- 548 Einstein, A., 1956. investigation on the theory of the Brownian movement. Dover, New York 1–18.
- 549 Elghobashi, S., 1994. On predicting particle-laden turbulent flows. *Appl. Sci. Res.* 52, 309–329.
- 550 Feng, Z., Michaelides, E.E., 2001. Drag Coefficients of Viscous Spheres at Intermediate and High Reynolds Numbers. *J. Fluids Eng.*
551 123, 841–849.
- 552 Fuchs, N.A., 1964. *The Mechanics of Aerosols*, Pergamon Press, Oxford.
- 553 Greenfield, S.M., 1957. Rain scavenging of radioactive particulate matter from the atmosphere. *J. Meteorol.* 14, 115–125.
- 554 Grover, S.N., Beard, K. V, 1975. A Numerical Determination of the Efficiency with which Electrically Charged Cloud Drops and
555 Small Raindrops Collide with Electrically Charged Spherical Particles of Various Densities. *J. Atmos. Sci.* 32.
- 556 Grover, S.N., Pruppacher, H.R., Hamielec, A.E., 1977. A numerical determination of the efficiency with which spherical aerosol
557 particles collide with spherical water drops due to inertial impaction, and phoretic and electrical forces. *J. Atmos. Sci.* 34,

558 1655–1663.

559 Hadamard, J.S., 1911. Mouvement permanent lent d'une sphere liquide et visqueuse dans un liquide visqueux. *CR Acad. Sci.* 1735.

560 Henry, C., Minier, J.-P., Mohaupt, M., Profeta, C., Pozorski, J., Tanière, A., 2014. A stochastic approach for the simulation of
561 collisions between colloidal particles at large time steps. *Int. J. Multiph. Flow* 61, 94–107.

562 Itô, K., McKean, H.P., 1965. *Diffusion Processes and Their Sample Paths.* Grundlehren der Math. Wissenschaften 125.

563 Jennings, S.G., 1988. The mean free path in air. *J. Aerosol Sci.* 19, 159–166.

564 Juncu, G., 1999. A numerical study of steady viscous flow past a fluid sphere. *Int. J. Heat Fluid Flow* 20, 414–421.

565 Laakso, L., Gr, T., Rannik, U., Kosmale, M., Kulmala, M., Fiedler, V., Vehkam, H., 2003. Ultrafine particle scavenging coefficients
566 calculated from 6 years field measurements. *Atmos. Environ.* 37, 3605–3613.

567 Ladino, L., Stetzer, O., Hattendorf, B., Günther, D., Croft, B., Lohmann, U., 2011. Experimental Study of Collection Efficiencies
568 between Submicron Aerosols and Cloud Droplets. *J. Atmos. Sci.* 68, 1853–1864.

569 Lai, K.-Y., Dayan, N., Kerker, M., 1978. Scavenging of Aerosol Particles by a Falling Water Drop. *J. Atmos. Sci.*

570 LeClair, B.P., Hamielec, A.E., Pruppacher, H.R., Hall, W.D., 1972. A Theoretical and Experimental Study of the Internal Circulation
571 in Water Drops Falling at Terminal Velocity in Air. *J. Atmos. Sci.* 29, 728–740.

572 Leong, K.H., Beard, K. V., Ochs, H.T., 1982. Laboratory Measurements of Particle Capture by Evaporating Cloud Drops. *J. Atmos.*
573 *Sci.* 39, 1130–1140.

574 Minier, J.-P., Peirano, E., 2001. The pdf approach to turbulent polydispersed two-phase flows. *Phys. Rep.* 352, 1–214.

575 Mohaupt, M., Minier, J.-P., Tanière, A., 2011. A new approach for the detection of particle interactions for large-inertia and colloidal
576 particles in a turbulent flow. *Int. J. Multiph. Flow* 37, 746–755.

577 Mohebbi, A., Taheri, M., Fathikaljahi, J., Talaie, M.R., 2003. Simulation of an orifice scrubber performance based on
578 Eulerian/Lagrangian method. *J. Hazard. Mater.* 100, 13–25.

579 Oksendal, B., 2000. *Stochastic Differential Equations,* Springer-V. ed.

580 Oliver, D.L.R., Chung, J.N., 1985. Steady flows inside and around a fluid sphere at low Reynolds numbers. *J. Fluid Mech.* 154, 215–
581 230.

582 Peirano, E., Chibbaro, S., Pozorski, J., Minier, J.P., 2006. Mean-field/PDF numerical approach for polydispersed turbulent two-phase
583 flows. *Prog. Energy Combust. Sci.* 32, 315–371.

584 Press, W.H., Flannery, B.P., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T., 1992. *Numerical recipes in C: The Art of Scientific Computing.*

585 Pruppacher, H.R., Beard, K. V., 1970. A wind tunnel investigation of the internal circulation and shape of water drops falling at
586 terminal velocity in air. *Quarterly J. R. Meteorol. Soc.* 96, 247–256.

587 Pruppacher, H.R., Klett, J.D., 2010. *Microphysics of Clouds and Precipitation.*

588 Quérel, A., Lemaitre, P., Monier, M., Porcheron, E., Flossmann, A.I., Hervo, M., 2014. An experiment to measure raindrop
589 collection efficiencies : influence of rear capture. *Atmos. Meas. Tech. Discuss.* 7, 509–539.

590 Rimbert, N., Hajjar, A., Castrillon-Escobar, S., Meignen, R., Gradeck, M., 2014. A New Look at the Droplet Deformation and
591 Breakup Model, in: ILASS.

592 Rivkind, V.Y., Ryskin, G.M., 1976. Flow structure in motion of a spherical drop in a fluid medium at intermediate Reynolds
593 numbers. *Fluid Dyn.* 11, 5–12.

594 Saboni, A., Alexandrova, S., Gourdon, C., 2004. Détermination de la traînée engendrée par une sphère fluide en translation. *Chem.*
595 *Eng. J.* 98, 175–182.

596 Shapiro, S.S., Wilk, M.B., 1965. An analysis of variance test for normality (complete samples). *Biometrika* 52, 591–611.

597 Slinn, W.G.N., 1977. Some approximations for the wet and dry removal of particles and gases from the atmosphere. *Water. Air. Soil*
598 *Pollut.* 7, 513–543.

599 Sow, M., Lemaitre, P., 2015. Influence of electric charges on the washout efficiency of atmospheric aerosols by raindrops. *Ann.*
600 *Nucl. Energy* 93, 107–113.

601 Starr, J.R., Mason, B.J., 1966. The capture of airborne particles by water drops and simulated snow crystals. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*
602 92, 490–499.

603 Volken, M., Schumann, T., 1993. A critical review of below-cloud aerosol scavenging results on mt. Rigi. *Water. Air. Soil Pollut.* 68,
604 15–28.

605 Walcek, C., Wang, P.K., Topalian, J.H., Mitra, S.K., Pruppacher, H.R., 1981. An experimental test of a theoretical model to
606 determine the rate of which freely falling water drops scavenge SO₂ in air. *Am. Meteorological Soc.*

607 Walton, W.M., Woolcock, A., 1960. The suppression of airborne dust by water sprays. *Int. J. Air Pollut.* 3, 129–153.

608 Wang, A., Song, Q., Yao, Q., 2015. Study on inertial capture of particles by a droplet in a wide Reynolds number range. *J. Aerosol*
609 *Sci.* 93, 1–15.

610 Wang, P.K., Grover, S.N., Pruppacher, H.R., 1978. On the Effect of Electric Charges on the Scavenging of Aerosol Particles by
611 Clouds and Small Raindrops. *J. Atmos. Sci.* 35, 1735–1743.

612 Wang, P.K., Pruppacher, H.R., 1977a. Acceleration to terminal velocity of cloud and raindrops. *J. Appl. Meteorol.* 16.

613 Wang, P.K., Pruppacher, H.R., 1977b. An Experimental Determination of the Efficiency with Which Aerosol Particles are Collected
614 by Water Drops in Subsaturated Air. *J. Atmos. Sci.* 34, 1664–1669.

615 Wang, P.K., Pruppacher, H.R., 1980. The effect of an external electric field on the scavenging of aerosol particles by cloud drops and
616 small rain drops. *J. Colloid Interface Sci.* 75, 286–297.

617 Weber, E., 1969. Stand und Ziel der Grundlagenforschung bei der Nassentstaubung. *Staub-Reinhalt Luft* 29, 272–277.

618 Wellek, R.M., Agrawal, A.K., Skelland, A.H.P., 1966. Shape of Liquid Drops Moving in Liquid Media. *AIChE* 854–862.

619 Wham, R.M., Basaran, O. a., Byers, C.H., 1997. Wall effects on flow past fluid spheres at finite Reynolds number: wake structure
620 and drag correlations. *Chem. Eng. Sci.* 52, 3345–3367.

621

Aerosol particles scavenging by a droplet: microphysical modeling in the Greenfield gap

Gaël Cherrier^{a,b,c}, Emmanuel Belut^{a*}, Fabien Gerardin^a, Anne Tanière^{b,c} and Nicolas Rimbert^{b,c}

^a Département Ingénierie des Procédés, Institut National de Recherche et de Sécurité, Rue du Morvan CS 60027, 54519, Vandoeuvre Cedex, France

^b LEMTA, CNRS, UMR 7563, 2 Avenue de la Forêt de Haye BP 90161, 54505, Vandoeuvre Cedex, France

^c Université de Lorraine, 34 Cours Léopold, 54000, Nancy, France

* Corresponding author: E-mail address: Emmanuel.belut@inrs.fr (E. Belut).

Supplementary Material

1. Comparison of simulation results for the continuous phase with data from LeClair et al. (1972)

Figures A.1, A.2 and A.3 show respectively the deviation of the velocity, pressure and vorticity on the droplet interface with respect to data of (LeClair et al., 1972). It can be noticed that the deviation does not exceed 5%.

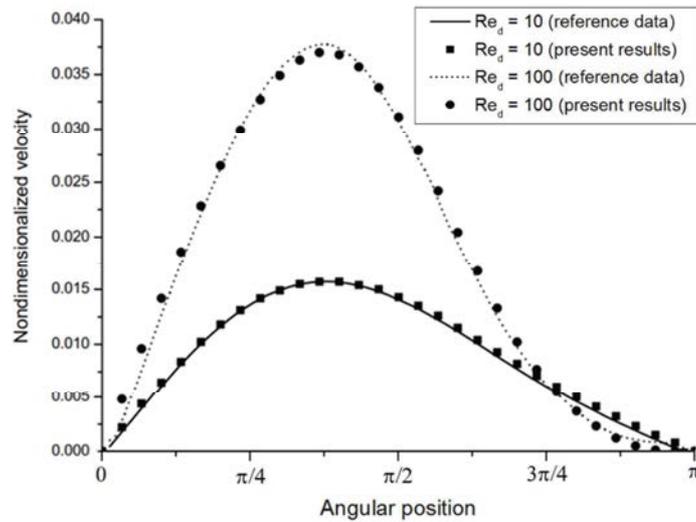
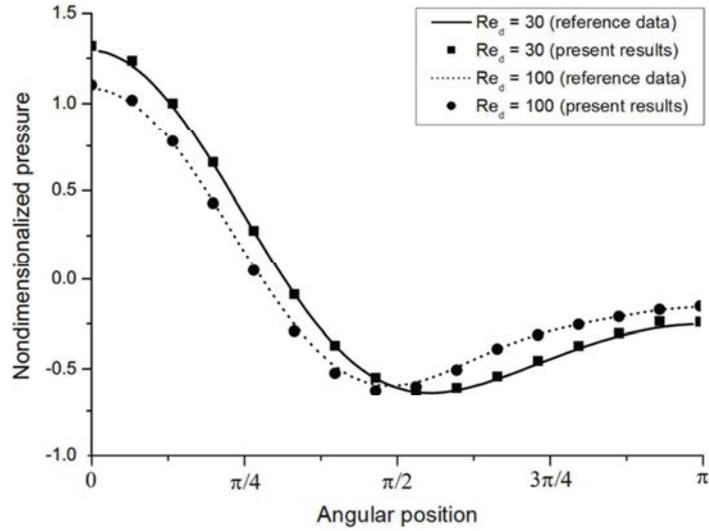


Fig. A.1. Nondimensionalized velocity at the interface of the droplet (angular clockwise position is chosen so that it equals 0 upstream).

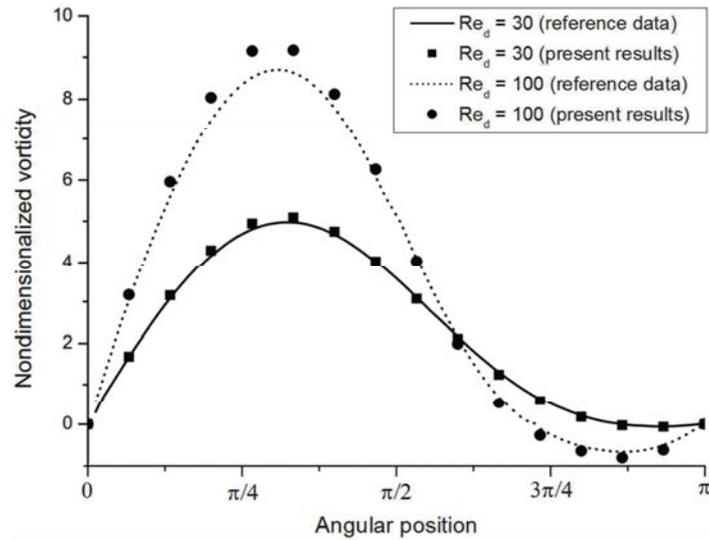


18

19

20

Fig. A.2. Nondimensionalized pressure at the interface of the droplet (angular clockwise position is chosen so that it equals 0 upstream).



21

22

23

Fig. A.3. Nondimensionalized vorticity at the interface of the droplet (angular clockwise position is chosen so that it equals 0 upstream).

24

2. Comparison of computed drag coefficients for the droplet with literature data

25

26

27

28

The comparison of the droplet drag coefficient with the correlation of (Saboni et al., 2004) when $Re_d \leq 2$ and the one of (Rivkind and Ryskin, 1976) elsewhere is plotted in Fig. B.1. The related deviation is lower than 5%, which is lower than the prediction error given by Saboni et al. (2004) and Rivkind and Ryskin (1976) for their correlation.

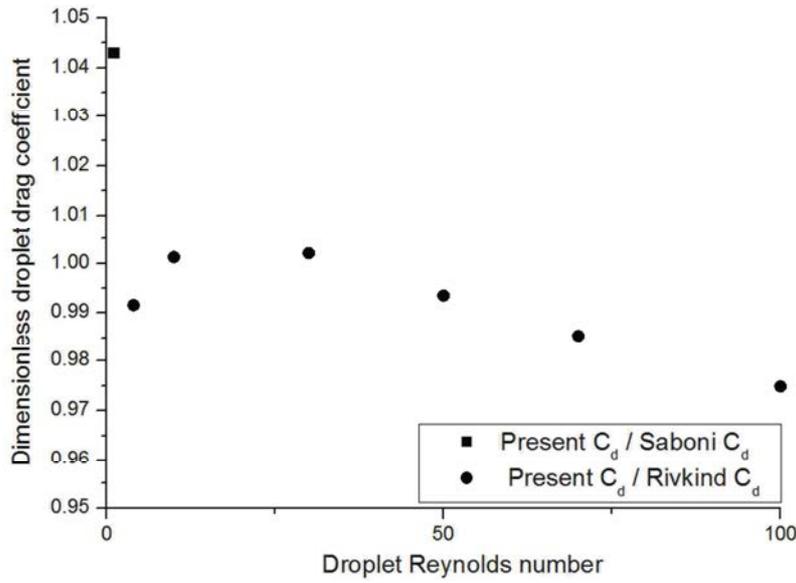


Fig. B.1. Ratio of the modeling-determined droplet drag coefficient over the literature drag coefficient as a function of the droplet Reynolds number.

3. Assessment of the Brownian motion modeling for the aerosol phase

Table C.1 presents the comparisons of the Brownian root mean square displacement of particles in a flow at rest with respect to theory (Equation (10)). The deviation about the Brownian motion of particles in a flow at rest is lower than 1.1 %, regardless of the particle diameter and the calculation time duration.

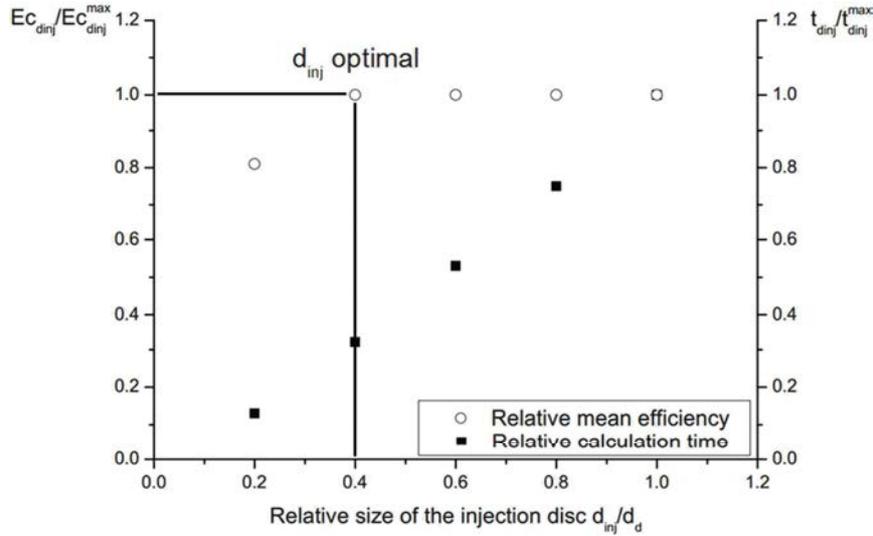
Table C.1

Comparison of the root mean square displacement of particles due to Brownian motion ($\theta_f = 290K, P = 101325 Pa$). The number of time step is constant (10^3) but the calculation time is not.

d_p [μm]	$\frac{\Delta t}{\tau_p}$	Total duration [s]	$\sqrt{X_p^2}$ [μm]		Deviation [%]
			Modeling	Theory	
10^{-3}	1	$7.55 \cdot 10^{-7}$	5.08	5.11	0.6
	10^3	$7.55 \cdot 10^{-4}$	$1.62 \cdot 10^2$	$1.62 \cdot 10^2$	0.4
10^{-2}	1	$7.71 \cdot 10^{-6}$	1.64	1.65	0.8
	10^3	$7.71 \cdot 10^{-3}$	$5.23 \cdot 10^1$	$5.22 \cdot 10^1$	0.1
10^{-1}	1	$9.70 \cdot 10^{-5}$	$6.51 \cdot 10^{-1}$	$6.57 \cdot 10^{-1}$	0.1
	10^3	$9.70 \cdot 10^{-2}$	$2.09 \cdot 10^1$	$2.08 \cdot 10^1$	0.7
1	1	$3.71 \cdot 10^{-3}$	$8.00 \cdot 10^{-1}$	$7.95 \cdot 10^{-1}$	0.7
	10^3	3.71	$2.52 \cdot 10^1$	$2.51 \cdot 10^1$	0.4
10^1	1	$3.20 \cdot 10^{-1}$	2.18	2.16	0.8
	10^3	$3.20 \cdot 10^2$	$6.83 \cdot 10^1$	$6.84 \cdot 10^1$	0.2
10^2	1	$3.14 \cdot 10^1$	6.76	6.73	0.4
	10^3	$3.14 \cdot 10^4$	$2.11 \cdot 10^2$	$2.13 \cdot 10^2$	1.1

40 **4. Influence of the size of the injection disk on the quality and efficiency of the computation**
 41 **of the capture efficiency**

42 The influence of the size of the injection disk on the calculation time and on the error of
 43 prediction for the capture efficiency is shown in Fig. D.1. In case of particles of diameter $d_p =$
 44 $1\mu m$ captured at $Re_d = 100$, the injection disc diameter can be lowered to $0.4d_d$. The related
 45 calculation time is 3 fold lower than in case of non-optimization of the injection disc. The subscript
 46 d_{inj} refers to the injection disc diameter and the superscript max refers to the maximum value of
 47 the variable.



48
 49 **Fig. D.1.** Relative mean capture efficiency and calculation time as a function of the size of the
 50 injection disc. $d_p = 1\mu m$ and $Re_d = 100$.

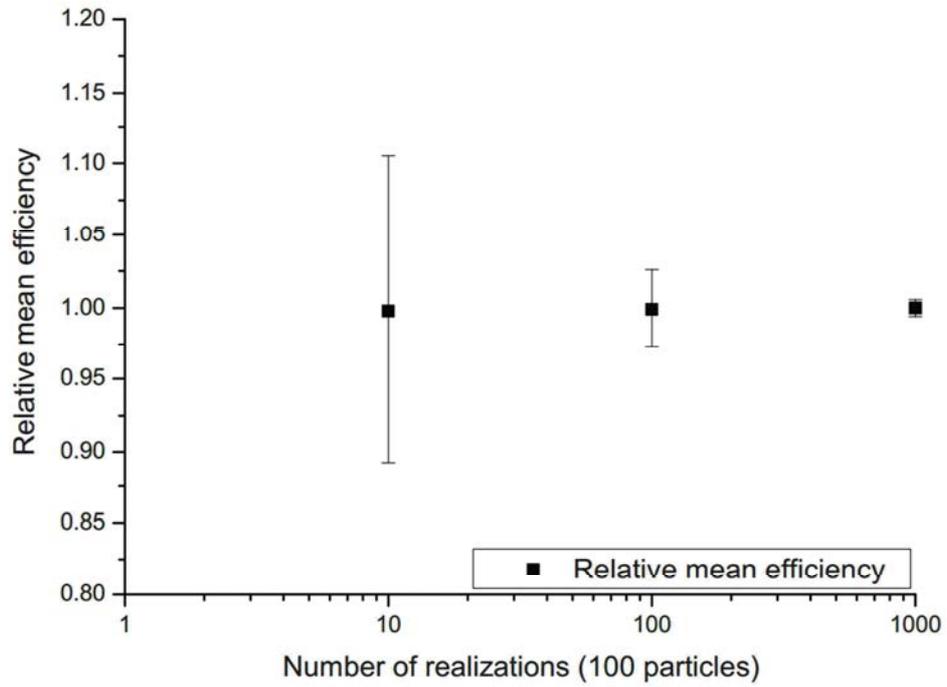
51 **5. Statistical convergence of the computation of the capture efficiency**

52 Table E.1 and Fig. E.1 show that the statistical convergence of the efficiency of capture is
 53 influenced by the number of injected particles and number of realizations. In case of particles of
 54 diameter $d_p = 5\mu m$ captured at $Re_d = 100$, the relative mean efficiency equals 1 and the
 55 confidence interval is lower than 1% if, at least, 1000 realizations of 100 particles are achieved or
 56 100 realizations of 1000 particles are computed.

57 **Table E.1.**

58 Confidence interval of the mean capture efficiency for $d_p = 5\mu m$, $Re_d = 100$. The relative mean
 59 efficiency is calculated by dividing E_c by the mean efficiency obtained through the corresponding
 60 number of realizations.
 61

Number of particles	Number of realizations	Relative mean efficiency	Confidence interval [%]
100	10	0.998	10.72
	100	0.999	2.70
	1000	1	0.59
1000	10	0.987	4.11
	100	0.999	0.77
	1000	1	0.24



62

63

64

65

66

Fig. E.1. Relative mean capture efficiency as a function of the number of realizations for $d_p = 5 \mu\text{m}$, $Re_d = 100$. 100 particles are injected at each realization. The relative mean efficiency is obtained by dividing E_c by the mean efficiency obtained through 1000 realizations.

67 **References**

68 LeClair, B. P., Hamielec, A. E., Pruppacher, H. R., & Hall, W. D. (1972). A Theoretical and Experimental Study of the Internal

69 Circulation in Water Drops Falling at Terminal Velocity in Air. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 29, 728-740.

70 Rivkind, V. Y., & Ryskin, G. M. (1976). Flow structure in motion of a spherical drop in a fluid medium at intermediate Reynolds

71 numbers. *Fluid Dynamics*, 11(1), 5-12.

72 Saboni, A., Alexandrova, S., & Gourdon, C. (2004). Détermination de la traînée engendrée par une sphère fluide en translation.

73 *Chemical Engineering Journal*, 98, 175-182.

74

Résumé : Modélisation numérique de l'abattage humide comme procédé d'assainissement de l'air :

Ce doctorat est consacré à la modélisation de l'abattage humide comme procédé d'assainissement de l'air. Les situations d'abattage humide étudiées concernent des particules d'aérosol de diamètre aérodynamique variant entre 1 nm et 100 μm capturées dans l'air par des gouttes d'eau de diamètre compris entre 80 μm et 600 μm (nombre de Reynolds de goutte dans la gamme [1 ; 100]). La modélisation de l'assainissement de l'air par abattage humide nécessite deux phases complémentaires. La première étape consiste à définir un noyau de capture calculant le débit d'aérosols capturés par une goutte dans une situation qui peut être complexe de par la grande variété de collectes différentes (brownienne, phorétique, électrostatique et inertielle). La deuxième étape repose sur la définition d'une approche de simulation numérique des phénomènes prenant place dans l'abattage humide. A cet effet, l'approche de simulation de l'abattage humide proposée comporte une modélisation RANS pour simuler l'écoulement de l'air, une approche lagrangienne donnant la trajectoire des gouttes d'eau et une méthode eulérienne permettant de suivre l'évolution du champ de concentration en particules d'aérosol. Ainsi, la capture de particules d'aérosol par des gouttes d'eau est modélisée via l'implémentation du noyau de capture précédemment défini dans un terme puits au sein du modèle Diffusion-Inertia de Zaichik et al., (2004).

Mots-clefs : goutte, particule d'aérosol, abattage humide, dépollution, noyau de collecte, modélisation microphysique, simulation multiphasique, mécanique des fluides numérique.

Abstract : Numerical modeling of aerosol particles scavenging by drops as a process of air depollution:

This PhD-Thesis is dedicated to the numerical modeling of aerosol particles scavenging by drops. Investigated situations are about aerosol particles of aerodynamic diameter ranging from 1 nm to 100 μm captured in the air by water drops of diameter varying between 80 μm and 600 μm , with corresponding droplet Reynolds number ranging between 1 and 100. This air depollution modeling is achieved in two steps. The first step consists in obtaining a scavenging kernel predicting the flow rate of aerosol particles captured by a drop in a situation where several collection mechanisms may take place (Brownian, phoretic, electrostatic and inertial scavenging). The aim of the second step is to propose a numerical simulation modeling the scavenging phenomenon. To do so, the scavenging simulation includes a RANS modeling for the air flow, a Lagrangian approach for the drops and an Eulerian approach for the aerosol particles. Thus, aerosol scavenging by drops is modeled by implementing the collection kernel defined previously into a sink term in the Diffusion-Inertia model of Zaichik et al., (2004).

Keywords: drop, aerosol particle, scavenging, air depollution, scavenging kernel, microphysical modeling, multiphase simulation, computational fluid dynamics.