



HAL
open science

Développement d'un solveur 3D massivement parallèle pour la prédiction d'écoulements granulaires réactifs en géométrie complexe

Yann Dufresne

► **To cite this version:**

Yann Dufresne. Développement d'un solveur 3D massivement parallèle pour la prédiction d'écoulements granulaires réactifs en géométrie complexe. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Normandie Université, 2019. Français. NNT : 2019NORMIR15 . tel-02924453

HAL Id: tel-02924453

<https://theses.hal.science/tel-02924453v1>

Submitted on 28 Aug 2020

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.



Normandie Université

THÈSE

Pour obtenir le diplôme de doctorat

Spécialité Mécanique des Fluides

Préparée à l'INSA Rouen Normandie

DÉVELOPPEMENT D'UN SOLVEUR 3D MASSIVEMENT PARALLÈLE POUR LA PRÉDICTION D'ÉCOULEMENTS GRANULAIRES RÉACTIFS EN GÉOMÉTRIE COMPLEXE

présentée et soutenue par

YANN DUFRESNE

**Thèse soutenue publiquement le 15 Octobre 2019
devant le jury composé de**

A. WACHS	Associate professor at UBC, Canada	Rapporteur
R. ANSART	Maître de conférence à l'Université de Toulouse, INPT	Rapporteur
J.A.M. KUIPERS	Full professor at EUT, The Netherlands	Examinateur
C. MARCHIOLI	Associate professor at UNIUD, Italy	Examinateur
K. TRUFFIN	Ingénieure de Recherche, IFP-EN	Examinateur
O. SIMONIN	Professeur à l'Université de Toulouse, INPT	Examinateur
M. BOUKHALFA	Professeur à l'INSA Rouen Normandie	Directeur de thèse
V. MOUREAU	Chargé de recherche CNRS, CORIA	Co-encadrant de thèse

■ Thèse dirigée par Mourad BOUKHALFA et Vincent MOUREAU, laboratoire CORIA (UMR 6614 CNRS)



Abstract : Development of a 3D massively parallel solver for the prediction of granular reactive flows in complex geometry

Particle-laden flows are ubiquitous in industry and feature multiple scales and physics. Their experimental study is made complex by the lack of visual access, thus limiting their understanding and predictability. The interest in numerical simulations to study such flows is growing, in particular in a context of computational power arising from parallel machines. Today, the most appropriate tools for their characterization are macro-scale models, where the solid phase is treated as a continuum, hence the need for *ad hoc* closures. The Discrete Element Method (DEM) is able to provide useful data to the design of such closures, as it necessitates lesser hypothesis, considering each particle individually. Coupled with a Large-Eddy Simulation (LES) framework, it enables to compute the momentum and energy balance on each particle, considering collisions and thermal exchanges, at the price of an increased computational time. In this context, the aim of this work is the development of a numerical tool allowing the study of realistic pilot scale systems involving complex geometries. Special care is given to the design of an algorithm for the treatment of spherical particles' collisions with arbitrarily complex walls compatible with unstructured meshes. Parallel performances are at the heart of the subject as well. In a parallel paradigm of double domain decomposition, the design of an algorithm enabling non-blocking exchanges of unique messages between processors is carried out, also involving the possibility to achieve dynamic load balancing during simulations. The implemented solver was successfully applied to several configurations, among which an hourglass to recreate the Janssen effect, a full-loop circulating fluidized bed featuring a transported bed and a cyclone, and a non-isothermal pseudo-2D fluidized bed investigating the cooling of glass beads. Finally, it also reproduced experimental findings on a reactive fluidized bed performing natural gas combustion, gathering fifty million particles and running on two thousand cores.

Keywords : LES - DEM - Unstructured grid - Massive parallelism - Complex geometries

Résumé : Développement d'un solveur 3D massivement parallèle pour la prédiction d'écoulements granulaires réactifs en géométrie complexe

Les écoulements granulaires sont omniprésents dans l'industrie et mettent en jeu une grande variété d'échelles et de phénomènes physiques. Leur étude expérimentale est rendue complexe par le manque d'accès visuel, ce qui limite leur compréhension et leur prédictabilité. L'intérêt suscité par les simulations numériques pour l'étude de tels écoulements est grandissant, notamment dans un contexte d'augmentation des performances de calcul des machines parallèles. Aujourd'hui, les outils les plus adaptés à leur caractérisation sont des modèles à l'échelle macroscopique, où la phase solide est considérée continue, ce qui nécessite de nombreuses fermetures *ad hoc*. La méthode aux éléments discrets est capable d'apporter des données utiles à l'écriture de telles fermetures, en ceci qu'elle utilise moins d'hypothèses, considérant chaque particule individuellement. Couplée à un formalisme aux grandes échelles pour la phase fluide, elle permet de réaliser des bilans de quantité de mouvement et d'énergie sur chaque particule, et ainsi de représenter les collisions et les échanges thermiques, au prix d'une augmentation non négligeable du coût de calcul. Dans ce contexte, l'objectif de ces travaux est le développement d'un outil numérique autorisant l'étude de systèmes de taille semi-industrielle et de géométrie complexe. Un soin particulier est attaché à la mise au point d'un algorithme de traitement des collisions entre les particules sphériques et les parois de complexité arbitraire compatible avec les maillages non-structurés. Les performances parallèles du solveur sont également au coeur du sujet. Dans un paradigme parallèle utilisant

la décomposition de domaine à deux niveaux, un algorithme permettant des échanges non-bloquants de messages uniques entre les processeurs est mis en place, comprenant également la possibilité d'effectuer une répartition dynamique de la charge de calcul durant la simulation. L'outil développé a été appliqué avec succès sur plusieurs configurations, parmi lesquelles un sablier témoignant de l'effet Janssen, un lit circulant avec boucle complète de recirculation comprenant un lit transporté et un cyclone, et un lit fluidisé anisotherme pseudo-2D figurant le refroidissement de billes de verre. Finalement, il a aussi permis de reproduire les observations expérimentales sur un lit fluidisé réactif réalisant la combustion de gaz naturel, comprenant cinquante millions de particules réparties sur deux mille processeurs.

Mots-clés : Simulation aux grandes échelles - Méthode aux éléments discrets - Grille non structurée
- Parallélisme massif - Géométries complexes

Remerciements

Ce manuscrit vient clotûrer un travail de longue haleine, puisqu'il date de l'apparition des premiers Hommes sur la Terre. C'est ici pour moi l'occasion de remercier l'ensemble des australopithèques ayant eu un rôle à jouer dans ce succès retentissant.

En premier lieu, je remercie Anthony Wachs et Renaud Ansart d'avoir accepté la charge de rapporteurs de cette thèse et l'ensemble des autres membres du jury pour avoir fait le déplacement jusqu'à Rouen à l'occasion de ma soutenance, afin de m'éclairer de leur questionnement et remarques.

Cette thèse s'est déroulée au laboratoire CORIA. Je remercie tout naturellement le directeur du laboratoire et également mon directeur de thèse, Mourad Boukhalfa, ainsi que tout le personnel technique et administratif pour leur service et leur sympathie tout au long de ces siècles. En particulier, je dois remercier Val' et Isabelle pour leur patience et leur bonne humeur lorsque ma phobie administrative me rendait parfois lent à la détente, l'A2DOC pour ses sorties grottesques, l'Atelier pour les BBQ.

Les acteurs du projet MORE4LESS ont aussi été fondamentaux dans mon attrait pour ce projet, au cours de réunions où les discussions étaient particulièrement formatrices, notamment Ainur Nigmatova, courageuse utilisatrice du code dès son sixième mois d'existence, et Manuel Bernard, qui m'a dédié une partie de son temps au début de ma thèse.

Un grand merci également à ceux sans qui je serais toujours un ingénieur en arts chimiques et technologiques, mon Alpha et mon Omega, j'ai nommé Vincent Moureau et Ghislain Lartigue, ainsi que Pierre Bénard mon encadrant de stage préféré. Ils m'ont toujours accordé leur confiance, tout en me fournissant toutes les armes pour mener à terme ce projet. Scientifiquement brillantes, humainement bonnes, ces personnes m'ont entièrement formé à la simulation numérique, ne comptant ni leur temps ni leur ressources, m'envoyant tantôt au Mexique, tantôt en Italie, tantôt à Stanford, mais aussi et surtout à Roscoff, prolongeant mon contrat à plusieurs reprises pour terminer ma thèse dans les meilleures conditions. Ces rencontres ont façonné mon stage de fin d'étude, et m'ont naturellement conduit à entamer une thèse, à laquelle je n'étais pourtant pas destiné. C'était un plaisir et un honneur immenses de travailler et partager avec vous, Messieurs. Y compris dans un caddy, y compris après un trou normand lors des BBQ d'équipe, y compris durant les "social events" et autres "team buildings", mais aussi dans les heures les plus sombres de la programmation.

Cette thèse était aussi l'occasion de rencontrer des personnes certes moins brillantes mais aussi importantes, qui ont fait de l'ambiance de travail (et pas que) un terreau fertile à la science. En essayant de n'oublier personne, je salue les premiers numériciens (ou pas) ; Melon, Léandro, Kerfourn, Lola, Jaouen, Lisa, Ben Farcy, Bastien, Guimch, puis les autres, Doddies, Loïc, Umut, Kikette, Geoffroy, Lancelot, Nath, Malbois, puis les prochains sur la liste, Hakimouche, Fifi, Alex, Andrea Seltz, Don Camillo, Fernando, Romano Čupanescu ... une pensée émue pour les membres de la guilde sacrée nommée KLYG, Keb, Loulou, et Gab, dont les exploits au lac de Pose et au Delirium raisonneront encore dans le cœur des Hommes pour des siècles et des siècles. Vous m'avez été d'un secours inestimable, et je sais que

vous ferez des thèses remarquables (surtout si je me ramène pour l'after). Mes anciens colocataires, s'étant partagés ma garde, méritent une reconnaissance d'ordre supérieur ; Ben (bwoawawaa) et Patoche (feynomenal), pour avoir supporté (et apprécié) ma nudité chronique et mon manque d'investissement dans le maintien de la salubrité du logis, sans oublier Heldonar Valnirius mon valeureux compagnon de route, dont je ferai ici un résumé non exhaustif du palmarès : docteur hororis causa en karaté serviette, dragée fuca d'or aux mondiaux du type 7, grand second lors de la foire à la marche arrière (c'est-à-dire en sandwich entre le 1er et le 3ème), découvreur de la particule élémentaire baptisée grignoton dans son accélérateur à testicules (dont la découverte ne lui a pas permis d'accéder à la popularité escomptée), membre mal membré des Mrs Onions and the Chipolatas, le gonzague des gonzagues, le flibustier de l'horreur, le gerrard des lumières, le Jean Valjean des profondeurs, le défragmenteur, le fessier. Longue vie aux apéros magic/vin/rhum/Rocky/Foxygen/ELO/baston si souvent salvateurs. Terminons par les plus insignifiants ; les nouveaux petits thésards de l'équipe, Benz, Froggy, Sergio, Iason, les meilleurs stagiaires : CS, Sir Jo la Pompe, Guillermo Saucisson Sec, Maxime, Margot (pour la bonne ambiance générale), Clément, Valogre, Francesca, Maxwell House... nous n'irons cependant pas jusqu'aux PIE, classés juste après les dames de la cantine. Petit clin d'oeil à Zouzou et Alex, partenaires officiels de la réussite scientifique de l'équipe, gestionnaires à temps partiel d'un vivier d'intellectuels nommé Makao. À leur manière, chacun de ces personnages a joué un rôle décisif (par exemple en imprimant mes trucs), et je suis forcé d'admettre que sans vous, rien n'aurait été pareil (et j'aurais dû installer les imprimantes).

Encore une minute pour remercier mes parents et mon frère pour leur soutien et leurs encouragements sans faille, mes amis parisiens, Rennais, bordelais, Caennais, venus assister à la déconfiture de la soutenance, dans l'english volupté et dans le chouchou.

À mes parents, à mon frère, et à la vôtre...

Table des matières

1	Contexte physique	20
1.1	Les milieux granulaires	21
1.1.1	Concepts généraux	21
1.1.2	Propriétés des milieux granulaires	21
1.1.3	Applications	23
1.2	Les lits fluidisés	25
1.2.1	Présentation des lits fluidisés	25
1.2.2	Lois fondamentales des lits fluidisés	31
1.2.3	Avantages et inconvénients des lits fluidisés	37
1.2.4	Étude des lits fluidisés	38
1.3	Différents niveaux de résolution	45
1.3.1	L'échelle micro	45
1.3.2	L'échelle macro	48
1.3.3	L'échelle meso	49
1.4	Objectifs de la thèse et plan du manuscrit	51
1.5	Valorisations	55
1.5.1	Publications dans des journaux scientifiques et proceedings de conférence	55
1.5.2	Conférences internationales	56
1.5.3	Conférences nationales	56
2	Modélisation des écoulements fluide-particules à l'échelle mesoscopique	58
2.1	Systèmes d'équations résolus	59
2.1.1	Évolution temporelle du fluide	59
2.1.2	Évolution temporelle des particules	61
2.1.3	Termes d'échange entre les phases	62
2.2	Modélisation des contacts particule-particule	62
2.2.1	Définition d'un système collisionnel	63
2.2.2	L'approche sphères molles	63
2.2.3	Autres types d'approche	71
2.3	Modélisation des contacts particule-paroi	73
2.3.1	Utilisation des régions de Voronoi	76
2.3.2	Résolution du contact	80
2.3.3	Sélection spatiale et détecteur de non-collision	81
2.3.4	Gestion du parallélisme	85
2.4	Modélisation des interactions fluide-particules	86

2.4.1	Interactions hydrodynamiques	86
2.4.2	Interactions thermiques	94
2.5	Opérateurs de couplage entre les phases	97
2.5.1	Interpolation des champs Eulériens vers les particules	97
2.5.2	Projection des grandeurs Lagrangiennes vers la grille	98
2.5.3	Opérateur de filtrage pour les maillages non-structurés	102
2.5.4	Commentaires	104
2.6	Schémas numériques pour l'avancement en temps	105
2.6.1	Avancement en temps des particules	105
2.6.2	Avancement en temps du fluide	113
2.7	Autres aspects de la modélisation	116
2.7.1	Pertes de charge en entrée	116
2.7.2	Parois périodiques	118
2.7.3	Rugosité de paroi	122
3	Optimisation du solveur granulaire de YALES2	128
3.1	Accélération du calcul des forces de collision interparticulaires	128
3.2	Parallélisation du code	132
3.2.1	Structures de données de YALES2	134
3.2.2	Identification du halo de cellules pour le parallélisme	136
3.2.3	Traitement des particules fantômes	142
3.3	Performances du code	149
3.3.1	Mesures sur le cas factice	149
3.3.2	Mesures sur le cas Birmingham	153
3.4	Répartition dynamique de charge	156
3.4.1	Le problème de la répartition de charge	156
3.4.2	Première écriture d'une fonction de coût pour le partitionnement	157
3.4.3	Seconde écriture d'une fonction de coût pour le partitionnement	160
3.4.4	Caractère dynamique de l'algorithme	162
3.4.5	Stabilité de l'algorithme	162
4	Vérifications	166
4.1	Cas secs	167
4.1.1	Comparaisons avec le modèle de sphères dures	167
4.1.2	Comparaisons expérimentales	170
4.2	Cas couplés isothermes	172
4.2.1	Perte de charge en lit fixe	172
4.2.2	Perte de charge en lit fluidisé	172
4.2.3	Sphère en rotation dans un gaz	174
4.3	Cas mixtes anisothermes	175
4.3.1	Cas couplé instationnaire sans convection	175
4.3.2	Cas stationnaire avec convection	184
4.3.3	Cas couplé instationnaire avec convection	186
4.4	Méthode de fast marching pour la création de halo	194
4.4.1	Analyse d'un cas particulier	196

4.4.2	Influence de la taille des listes	199
4.4.3	Influence du nombre de marqueurs	205
4.4.4	Conclusion de l'étude paramétrique.	209
5	Validations	212
5.1	Sablier	213
5.2	Lit fluidisé quasi-2D anisotherme	215
5.2.1	Configuration	215
5.2.2	Différents modes de transferts de chaleur	217
5.2.3	Résultats	223
5.3	Lit fluidisé circulant (CFB) isotherme	235
5.3.1	Configuration	235
5.3.2	Spécificités de la partie cyclone	237
5.3.2.1	Influence de la traînée	237
5.3.2.2	Influence des impacts particule-paroi	237
5.3.2.3	Mise en évidence d'une pseudo-rugosité de paroi	240
5.3.3	Résultats	242
5.4	Lit fluidisé isotherme de Birmingham	248
5.4.1	Configuration	248
5.4.2	Obtention de statistiques	251
5.4.3	Résultats	254
5.5	Lit fluidisé réactif du LGC	257
5.5.1	Configuration	257
5.5.2	Résolution du front de flamme	259
5.5.3	Influence du schéma cinétique	260
5.5.4	Test préliminaire à petite échelle	263
5.5.5	Résultats sur le lit à l'échelle	265
5.5.6	Conclusion	273
6	Conclusions et perspectives	276
6.1	Conclusions	276
6.1.1	Caractère multiphysique du code	277
6.1.2	Géométrie complexe et calcul massivement parallèle	278
6.2	Perspectives	279
6.2.1	Aspects numériques	279
6.2.2	Vers la simulation de systèmes de plus en plus réalistes	280
	Liste des figures	282
	Liste des tableaux	299
	Bibliographie	301

Nomenclature

Nombres adimensionnels

Symbole	Description
Ar	Nombre d'Archimède
Fo	Nombre de Fourier
Ma	Nombre de Mach
Nu	Nombre de Nusselt
Nu_p	Nombre de Nusselt particulaire
Pr, Pr_t	Nombre de Prandtl, nombre de Prandtl turbulent
Re	Nombre de Reynolds
Re_{mf}	Nombre de Reynolds au minimum de fluidisation
Re_p	Nombre de Reynolds particulaire
$Re_{r,p}$	Nombre de Reynolds de rotation
Re_R	Nombre de Reynolds de rotation dans un fluide au repos
Sc, Sc_t	Nombre de Schmidt, nombre de Schmidt turbulent
St	Nombre de Stokes

Lettres Latines

Symbole	Description	Unité
a_p	Densité d'interface fluide-solide	$[m^{-1}]$
\mathbf{a}_p	Accélération d'une particule	$[m.s^{-2}]$
A	Matrice carrée	$[-]$
B	Vecteur	$[-]$
c_{son}	Vitesse du son	$[m.s^{-1}]$
C	Compacité	$[-]$
C_D	Coefficient de traînée d'une particule	$[-]$
C_p	Chaleur massique à pression constante du fluide	$[J.K^{-1}.kg^{-1}]$
$C_{p,p}$	Chaleur massique des particules	$[J.K^{-1}.kg^{-1}]$
C_R	Coefficient de traînée de rotation	$[-]$

d	Distance	[m]
d_{exacte}, d_{FM}	Distance exacte et distance obtenue par fast marching	[m]
d_p	Diamètre des particules	[m]
D	Matrice diagonale ou diamètre de l'enceinte	[-] ou [m]
D_b	Diamètre des bulles de gaz	[m]
D_k	Coefficient de diffusion de l'espèce k	[m ² .s ⁻¹]
D_m	Coefficient de diffusion de la phase gazeuse	[m ² .s ⁻¹]
D_0	Diamètre d'orifice	[m]
\mathcal{E}	Facteur d'efficacité pour TFLES	[-]
e_n, e_t	Coefficient de restitution normal et tangentiel	[-]
$elem_weight$	Poids unitaire associé à un élément de maillage	[-]
E_p	Module d'Young d'une particule	[kg.m ⁻¹ .s ⁻²]
\mathcal{F}	Facteur d'épaississement pour TFLES	[-]
$\mathbf{F}_C, \mathbf{F}_D, \mathbf{F}_P$	Forces de collision, de traînée, et de gradient de pression	[kg.m.s ⁻²]
\mathbf{g}	Accélération de la pesanteur	[m.s ⁻²]
G	Noyau de filtrage	[-]
h, h_{bed}	Hauteur du lit de particule dans les conditions opératoires	[m]
h_m	Hauteur du lit fixe	[m]
h_{mf}	Hauteur du lit au minimum de fluidisation	[m]
h_{fp}	Coefficient de transfert de chaleur fluide-particule	[W.m ⁻² .K ⁻¹]
h_s	Enthalpie sensible	[J.kg ⁻¹]
h_w	Coefficient de transfert de chaleur fluide-paroi	[W.m ⁻² .K ⁻¹]
\mathcal{H}	Fonction de Heaviside	[-]
\mathcal{I}	Tenseur identité	[-]
I	Matrice identité	[-]
I_p	Moment d'inertie des particules	[kg.m ²]
$\mathbf{J}_{b \rightarrow a}$	Vecteur impulsion	[kg.m.s ⁻¹]
k	Facteur correcteur	[-]
k_n, k_t	Constante de raideur normale et tangentielle	[kg.s ⁻²]
K	Constante de Janssen	[-]
L	Hauteur ou longueur	[m]
m_p	Masse de particule	[kg]
M_{ab}	Masse réduite	[kg]
$\mathcal{M}_C, \mathcal{M}_D, \mathcal{M}_R$	Couples associés aux forces de collision, de traînée, et de résistance au roulement	[kg.m ² .s ⁻²]
$\mathbf{n}, \mathbf{n}_{ab}$	Vecteur normal de la base collisionnelle	[-]

\mathbf{n}_p	Vecteur normal sortant d'une particule	[-]
N_c	Nombre de cellules	[-]
\mathcal{N}_E	Nombre d'edges délimitant une face	[-]
NO_X	Dérivés azotés	[-]
N_p	Nombre de particules	[-]
N_p^{col}, N_w^{col}	Nombre de particules et de parois en collision	[-]
N_{procs}	Nombre de processeurs	[-]
pt_weight	Poids unitaire associé à une particule	[-]
P	Matrice de passage	[-]
P_G	Pression granulo-statique	[kg.m ⁻¹ .s ⁻²]
P_0	Pression thermodynamique	[kg.m ⁻¹ .s ⁻²]
Q_F	Flux thermique	[W]
r_p	Rayon d'une particule	[m]
R, r	Constante molaire et massique des gaz parfaits	[kg.m ⁻¹ .s ⁻²]
s	Variable dans l'espace de Laplace	[-]
S_L	Vitesse de flamme laminaire	[m.s ⁻¹]
S_p	Surface de particule	[m ²]
\mathcal{S}	Ensemble des espèces chimiques	[-]
t	Temps	[s]
$\mathbf{t}, \mathbf{t}_{ab}$	Vecteur tangentiel de la base collisionnelle	[-]
T	Température du fluide	[K]
T_{bed}	Température "moyenne" du lit	[K]
T_C	Temps de contact	[s]
T_{crit}	Température critique	[K]
T_{inlet}, T_{in}	Température d'entrée du fluide	[K]
T_p	Température de particule	[K]
T_∞	Température non-perturbée du fluide ou température à l'équilibre	[K]
\mathbf{u}^g	Vitesse de glissement au point de contact	[m.s ⁻¹]
\mathbf{u}_p	Vitesse de translation d'une particule	[m.s ⁻¹]
u_{max}	Magnitude maximale de la vitesse de fluide	[m.s ⁻¹]
\mathbf{U}_{in}	Vitesse d'injection du gaz	[m.s ⁻¹]
\mathbf{U}_{mf}	Vitesse d'injection du gaz au minimum de fluidisation	[m.s ⁻¹]
\mathbf{U}_t	Vitesse terminale de chute libre des particules	[m.s ⁻¹]
V_p	Volume de particule	[m ³]
$weight(ELGRP)$	Fonction de coût associée à un <i>ELGRP</i>	[-]
W	Débit massique de solide	[kg.s ⁻¹]

W_k	Masse molaire de l'espèce k	[-]
\mathbf{x}	Vecteur position	[-]
$\mathbf{x}_p, \dot{\mathbf{x}}_p, \ddot{\mathbf{x}}_p$	Vecteur position du centre d'une particule ses premières dérivées	[m],[m.s ⁻¹],[m.s ⁻²]
Y_k	Fraction massique de l'espèce k	[-]
z	Hauteur, altitude	[m]

Lettres grecques

Symbol	Description	Unité
α	Angle	[-]
γ	Angle virtuel	[-]
γ_n, γ_t	Coefficient d'amortissement normal et tangentiel	[kg.s ⁻¹]
Γ_p	Température réduite de solide	[-]
$\delta_{ab}, \dot{\delta}_{ab}, \ddot{\delta}_{ab}$	Distance de recouvrement et ses premières dérivées	[m],[m.s ⁻¹],[m.s ⁻²]
δ_{ab}^{max}	Valeur maximum de la distance de recouvrement	[m]
$\delta_t, \dot{\delta}_t$	Distance de recouvrement tangentielle et sa première dérivée	[m],[m.s ⁻¹]
Δ	Discriminant	[-]
ΔP	Perte de charge dynamique	[kg.m ⁻¹ .s ⁻²]
Δt	Pas de temps Eulérien	[s]
Δt_p	Pas de temps particulaire	[s]
ΔV_i	Volume de contrôle au noeud i	[m ³]
Δx	Taille de maille locale	[m]
ε	Fraction de fluide (de vide)	[-]
ε_i	Fraction de fluide (de vide) au noeud i	[-]
ε_{mf}	Fraction de fluide (de vide) au minimum de fluidisation	[-]
ε_p	Fraction de solide	[-]
η	Echelle de longueur de Kolmogorov	[m]
θ_f, θ_p	Constantes	[m ⁻¹]
λ	Conductivité thermique du fluide	[W.m ⁻¹ .K ⁻¹]
λ_{eff}	Conductivité thermique effective du fluide	[W.m ⁻¹ .K ⁻¹]
μ	Viscosité dynamique du fluide	[kg.m ⁻¹ .s ⁻¹]
μ_d	Coefficient de friction dynamique	[-]
μ_r	Coefficient de résistance au roulement	[m]
μ_s	Coefficient de friction statique	[-]
μ_t	Viscosité turbulente	[kg.m ⁻¹ .s ⁻¹]
ν	Viscosité cinématique du fluide	[m ² .s ⁻¹]

ρ	Masse volumique du fluide	[kg.m ⁻³]
ρ_{app}	Masse volumique apparente	[kg.m ⁻³]
ρ_p	Masse volumique des particules p	[kg.m ⁻³]
σ_p	Coefficient de Poisson d'une particule	[-]
$\boldsymbol{\tau}$	Tenseur des contraintes visqueuses	[kg.m ⁻¹ .s ⁻²]
$\tau, \tau_{p,heat}, \tau'_{p,heat}$	Temps caractéristique pour les échanges de chaleur	[s]
$\tau_{p,drag}$	Temps caractéristique pour la traînée	[s]
τ_{eq}	Temps caractéristique d'échange de chaleur équivalent	[s]
τ_i	Temps caractéristique pour les échanges de chaleur au noeud i	[s]
ϕ	Richesse du mélange	[-]
ϕ_i	Grandeur fluide au noeud i	[-]
$\phi_{f \rightarrow p}$	Grandeur échangée du fluide vers les particules	[-]
ϕ_n, ϕ_t	Composante normale et tangentielle du vecteur ϕ	[-]
$\phi_{p \rightarrow f}$	Grandeur échangée des particules vers le fluide	[-]
ϕ^-, ϕ^+	Grandeur pré et post-collisionnelle	[-]
$\phi_{@p}$	Grandeur fluide interpolée au centre de la particule p	[-]
$\phi_{@w}$	Grandeur fluide prise à la paroi	[-]
ω_0	Pulsation propre	[s ⁻¹]
$\dot{\omega}_k$	Terme source chimique de l'espèce k	[kg.m ⁻³ .s ⁻¹]
$\boldsymbol{\omega}_p$	Vitesse angulaire d'une particule	[s ⁻¹]
$\omega_{p,i}$	Poids d'interpolation de la particule p au noeud i	[-]
ω_r	Pulsation réduite	[s ⁻¹]
$\dot{\omega}_T$	Terme source chimique pour l'enthalpie sensible	[J.m ⁻³ .s ⁻¹]
Ω	Domaine global ou capteur de flamme	[m ³] ou [-]
Ω_f	Domaine occupé par le fluide	[m ³]

Opérateurs mathématiques

Symbole	Description
$\ \cdot\ $	Norme Euclidienne
\mathbf{A}^{-1}	Opérateur inverse
\mathbf{A}^T	Opérateur transposée
∇	Opérateur gradient
$\nabla \cdot$	Opérateur divergence
$\nabla \times$	Opérateur rotationnel
\wedge	Produit vectoriel
\cdot	Produit scalaire

$\bar{\phi}$	Moyenne spatiale
$\langle \phi \rangle_t$	Moyenne temporelle sur un temps t
$\tilde{\phi}$	Moyenne de Favre
\otimes	Produit tensoriel
$\mathcal{L}\{f\}, \mathcal{L}\{f^{-1}\}$	Transformée de Laplace de la fonction f , et son inverse

Abbreviations

Symbole	Description
BFG	Boundary Face Group
BSBFG	Bounding Sphere of Boundary Face Group
BSF	Bounding Sphere of Face
C	Cellule
CFB	Circulating Fluidized Bed
CFD	Computational Fluid Dynamics
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy
CLC	Chemical Looping Combustion
CPU	Central Processing Unit
DDD	Double Décomposition De Domaine
DEM	Discrete Element Method
DIA	Digital Image Analysis
DNS	Direct Numerical Simulation
DPCG	Deflated Preconditioned Conjugated Gradient
E	Edge, paire, arête
EE	Euler-Euler
EL	Euler-Lagrange
ELGRP	ELement GRoup
EOS	Equation Of State
EXTCOMM	EXTernal COMMunicator
F	Face
FCC	Fluid Catalytic Cracking
FM	Fast Marching
GJK	Gilbert, Johnson et Keerthi
INTCOMM	INTernal COMMunicator
I_0, I_1	Fonctions de Bessel modifiées d'ordre 0 et 1
KGTF	Kinetic Theory of Granular Flows
LES	Large-Eddy Simulation

MORE4LESS	MOdelling of REactive particulate flows for Low Energy Sustainable processeS
MPI	Message Passing Interface
NPG	Normalized Pressure Gradient
OpenMP	Open-Multi-Processing
PCM	Particle Centroid Method
PDF	Probability Density Function
PEPT	Positron Emission Particle Tracking
PET	Positron Emission Tomography
PGTS	Particle Group To Send
PIV	Particle Image Velocimetry
PROC	Processeur
PRS	Particle Resolved Simulation
PTEXTCOMM	Particles EXTernal COMMunicator
PTGRP	ParTicle GRouP
RCT	Reduced Computational Time
RMS	Root Mean Square
RK	Runge-Kutta
SC	Surrounding Cells
TFLES	Thickened Flame for Large-Eddy Simulation
TFM	Two-Fluid Model
V	Vertex, Noeud
VDS	Variable Density Solver
VV	Velocity Verlet
\mathcal{VR}	Voronoi Region
YALES2	Yet Another LES Solver : LES/DNS solver developed at CORIA laboratory

Chapitre 1

Contexte physique

Ce chapitre fait état du contexte physique des écoulements granulaires et plus particulièrement des lits fluidisés, en mettant en avant leur originalité, leur utilité, leur complexité, ainsi que leurs moyens d'étude classiques. Certaines règles empiriques de dimensionnement utilisées dans l'industrie sont présentées, ainsi que les principales techniques expérimentales développées. Il pointe le besoin de développer des outils de simulation numérique afin d'aider à la compréhension physique de ces systèmes complexes. À terme, ces outils pourraient devenir assez fiables pour assurer un caractère prédictif suffisant au dimensionnement d'unités de tailles industrielles, à un coup de calcul raisonnable.

Sommaire

1.1 Les milieux granulaires	21
1.1.1 Concepts généraux	21
1.1.2 Propriétés des milieux granulaires	21
1.1.3 Applications	23
1.2 Les lits fluidisés	25
1.2.1 Présentation des lits fluidisés	25
1.2.2 Lois fondamentales des lits fluidisés	31
1.2.3 Avantages et inconvénients des lits fluidisés	37
1.2.4 Étude des lits fluidisés	38
1.3 Différents niveaux de résolution	45
1.3.1 L'échelle micro	45
1.3.2 L'échelle macro	48
1.3.3 L'échelle meso	49
1.4 Objectifs de la thèse et plan du manuscrit	51
1.5 Valorisations	55
1.5.1 Publications dans des journaux scientifiques et proceedings de conférence	55
1.5.2 Conférences internationales	56
1.5.3 Conférences nationales	56

1.1 Les milieux granulaires

1.1.1 Concepts généraux

Les milieux granulaires sont des milieux dans lesquels un nombre significatif de particules solides appelés grains ou particules, est plongé dans un fluide, gaz ou liquide. Ces grains ne sont pas chimiquement liés entre eux mais interagissent notamment via des collisions lors desquelles ils échangent de la quantité de mouvement ou de l'énergie thermique. Les grains peuvent revêtir d'impressionnantes variétés de forme, allant de la forme sphérique (bille), à des formes allongées (grains de riz), et jusqu'à des aspects plus complexes (garnissage vrac en génie des procédés, voir figure 1.1). Ils arborent également des tailles variant de quelques microns (poudres), à plusieurs dizaines de mètres (astéroïdes). Ils sont en général polydisperses (par opposition à monodisperse) et sont décrits par des courbes de granulométrie exposant la distribution des tailles rencontrées dans un échantillon.

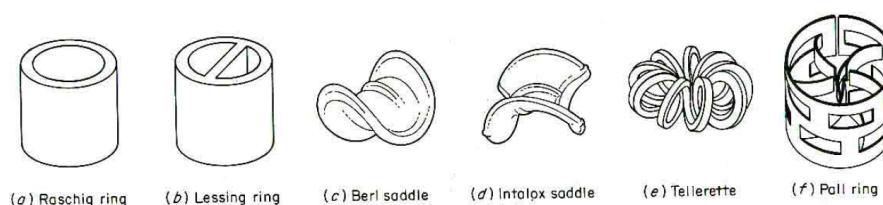


FIGURE 1.1: Exemple de garnissage vrac utilisé en génie des procédés dans les colonnes d'extraction ou d'absorption afin d'augmenter la quantité d'interface entre les phases désirées (source : <http://ingenieur-process.kazeo.com>).

Mis à part le milieu spatial, les interactions avec le fluide environnant sont également riches. Des échanges continuels de quantité de mouvement entre les deux phases font naître des comportements particuliers fortement multi-échelles allant de l'écoulement autour d'un grain unique (tributaire de sa forme, sa capacité à se déformer sous la contrainte, son inertie etc.) jusqu'à la formation de zones macroscopiques d'agglomération appelées clusters, ou de zones de vide appelées bulles. Des échanges thermiques, chimiques, voire de charges électriques, peuvent également être rencontrés entre la phase fluide et la phase solide, qui viennent modifier parfois de façon importante la dynamique de l'écoulement, de telle sorte que beaucoup de propriétés à grande échelle deviennent indépendantes des propriétés individuelles des particules.

1.1.2 Propriétés des milieux granulaires

Les écoulements granulaires sont très diversifiés, ainsi il convient d'en exposer quelques caractéristiques générales. Concernant la classification des régimes d'écoulements, on distingue deux grandes catégories : dans le régime dilué, ou collisionnel, les grains interagissent majoritairement de façon binaire et quasi-instantanée. La durée des chocs est ici très petite devant le libre parcours moyen des particules, et une fréquence de chocs peut alors être définie. Comme mis en évidence par Bagnold [18], un milieu granulaire dans ce régime et contraint par un gradient de vitesse voit son cisaillement devenir proportionnel au carré de ce gradient de vitesse, contrairement aux fluides classiques où le cisaillement est linéairement

lié au gradient. Des outils statistiques tels que la théorie cinétique des gaz denses permettent l'étude de ces milieux.

Lorsque la distance entre les particules se rapproche de leur diamètre, on parle de régime dense. Ces régimes se caractérisent notamment par une compacité notée C , qui se définit comme la quantité de solide dans un certain volume d'échantillon. Selon l'encombrement stérique dû à la taille et l'aspect des grains, cette compacité s'exprime par une valeur théoriquement contenue entre 0 (pas de solide) et 1 (pas de fluide). Pour des empilements de sphères monodisperses, les valeurs classiquement rencontrées sont de 0.524 (empilement cubique) et de 0.64 (empilement compact aléatoire). Dans un cristal hexagonal compact, la compacité pourrait atteindre 0.74, mais ce cas n'est habituellement jamais rencontré dans la pratique. On parle de vitesse superficielle de fluide, ou vitesse en fût vide, pour désigner la vitesse du gaz non perturbée par la présence des particules, et de vitesse interstitielle de fluide lorsque le fluide est contraint par ces dernières. Le régime dense favorise davantage les collisions multiples et les contacts continus. L'échantillon étudié peut alors exhiber des fluctuations de vitesses collectives et son comportement évoquer celui des liquides, par exemple dans le cas des lits fluidisés qui font l'objet de la section 1.2.

A contrario, son comportement peut se détacher de celui des fluides : si la loi de Torricelli gouverne la vidange d'un réservoir rempli de liquide en prédisant un débit de sortie variant comme la racine de la hauteur du réservoir (pour un orifice assez petit), la loi de Beverloo [34] pour les milieux granulaires appliquée à un silo ou un sablier montre que le débit massique de grains W à travers la réduction de section est indépendante de la hauteur du sable dans la partie haute du sablier :

$$W = C\rho_p\sqrt{g}(D_0 - kd_p)^{5/2}. \quad (1.1)$$

D_0 est ici le diamètre de la section de passage des grains, tandis que k est un facteur correcteur généralement ≥ 1.3 [34] ajouté afin de prendre en compte la réduction de D_0 due à son occupation par des grains. Il dépend notamment de la géométrie considérée [205]. A noter que cette loi n'est vérifiée que pour une certaine plage de rapport d_p/D_0 : un phénomène d'écrantage peut être observé pour les rapports trop petits [296], qui vient partiellement ou totalement empêcher le passage du sable (voir figure 1.2), provoquant une intermittence du débit. Dans le cas de particules fines ($\leq 400\mu\text{m}$), le débit à travers l'orifice se trouve fortement diminué en raison de l'interaction entre les particules et le gaz interstitiel [137], et la loi de Beverloo nécessite une correction prenant en compte le gradient de pression dans le gaz [71]. Certains auteurs ont tenté de généraliser la loi de Beverloo afin d'étendre son domaine de validité en terme de rapports d_p/D_0 et en limitant l'influence du facteur k [193].

Un autre comportement singulier des grains en silos, où plus généralement de tout milieu granulaire statique confiné par des parois, se manifeste par un effet dit de Janssen [150] (publication originale traduite par Sperl [278]). L'expérience est la suivante : on remplit peu à peu de grains un silo initialement vide en mesurant la masse supportée par sa base. Il apparaît alors que tout ajout de grains au-delà d'une certaine hauteur caractéristique dans le silo n'affecte pas cette mesure de la masse. Les particules ont tendance, par le biais du réseau de forces de contact, à s'appuyer sur les parois latérales du silo. La masse supportée par la base suit une loi exponentielle fonction de la hauteur de grains dans le silo z et tend vers une masse de saturation. Pour un silo cylindrique, la hauteur caractéristique intervenant dans l'exponentielle vaut environ la moitié du diamètre du silo. Exprimée en terme de pression dite granulostatique P_G , cette loi correspond à l'équivalent granulaire de la loi de l'hydrostatique des fluides, et peut s'écrire :

$$P_G(z) = \rho_{app}g\lambda_{silo}\left(1 - e^{-\frac{z}{\lambda_{silo}}}\right) \quad \text{avec} \quad \lambda_{silo} = \frac{D}{4K\mu_s}, \quad (1.2)$$

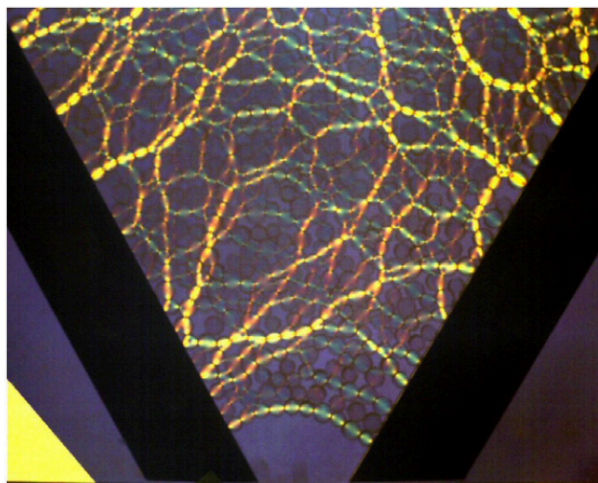


FIGURE 1.2: Trémie d'un silo quasi-2D rempli de particules photo-élastiques. Le réseau de forces de contact dites "en chaînes" entre les grains est colorisé. Une arche bouche l'ouverture en bas du silo. Issu de [26].

avec ρ_{app} la masse volumique apparente dans le silo, D le diamètre du silo, K la constante de Janssen prenant en compte les effets de non-isotropie de la pression dans ce type de milieux, et μ_s le coefficient de friction statique. On peut remarquer que pour les hauteurs z telles que $z \ll \lambda_{silo}$, un développement limité à l'ordre 1 de l'exponentielle donne $P_G(z) \rightarrow \rho_{app}gz$: la pression augmente linéairement avec la hauteur, on retrouve la loi de l'hydrostatique. Lors de la conception de dispositifs de stockage, il est donc fondamental de connaître la hauteur maximale de grains atteinte afin de prévoir un éventuel renforcement de ses parois latérales. L'ensemble des phénomènes présentés ici est particulièrement manifeste dans l'étude du stockage en silos et de leur vidange [137]. Les effets de voûte qui tendent à répartir le poids sur une surface plus grande peuvent au contraire être recherchés : c'est par exemple le cas pour le renforcement des rails de chemin de fer, fortement sollicités au passage d'un train. A cet effet, on emploie un matériau poreux appelé ballast qui améliore la répartition des efforts.

Les effets du cisaillement en régime dense peuvent également être observés directement sur la plage à marée basse lorsqu'on marche sur du sable mouillé : si la densité apparente du sable est supérieure à une valeur seuil, le cisaillement imprimé par le pas provoque une augmentation de la densité, le sable devient moins poreux et rejette une partie de l'eau qu'il contient (effet contractant). Dans le cas contraire le cisaillement fait diminuer la densité du sable et le volume occupé par le solide augmente (effet dilatant), ce qui accroît l'espace interstitiel laissé à l'eau. Le sable semble alors s'assécher [280].

1.1.3 Applications

On dénombre ainsi une grande quantité d'illustrations naturelles de ce type de milieux :

- les tempêtes de sable [335] dans lesquelles les effets triboélectriques peuvent donner naissance à des orages électriques [238],
- la formation des dunes dans le désert [287] et même sur des objets extraterrestres [151],
- le transport de sédiments dans un cours d'eau [228] ou de pollens dans l'atmosphère,
- la croissance des avalanches [111],
- les retombées provenant des éruptions volcaniques [251],
- les particules de glaces en suspension dans l'atmosphère, qui peuvent venir se déposer sur les

ailles des avions et poser de nombreux problèmes [31],

- la formation des planètes à partir de roches spatiales,
- les écoulements biologiques tels que le transport de globules rouges dans les capillaires sanguins, où les déformations des grains (ici les globules rouges) sont capitales [175].
- À l'échelle atomique, l'étude du mouvement des molécules dans sa conception corpusculaire peut elle aussi se rapporter à celle d'un milieu granulaire où les molécules interagissent sous l'effet de forces électrostatiques [267].

Les écoulements granulaires sont également profondément ancrés dans le domaine industriel, où ils sont notamment rencontrés dans :

- la métallurgie pour le décapage de surface par projection de sable,
- la préparation de médicaments [331],
- la fabrication de bétons,
- l'exploitation de gisements pour l'acheminement des roches, mais aussi le broyage, concassage, dynamitage, ou sablage [277].
- la papeterie pour le transport de fibre de cellulose [249],
- l'agroalimentaire pour le stockage en silo [143] et le traitement d'aliments [263],
- les carburants solides pour la propulsion spatiale [279],
- l'industrie pétrochimique pour le transport de pétrole brut en pipeline, qui sous certaines contraintes de température et de pression voit croître des hydrates solides qui viennent modifier sa rhéologie [223], et dont l'élimination est aussi complexe que coûteuse [244]. Également pour les procédés de raffinage tels que le crackage catalytique fluide (en anglais "Fluid Catalytic Cracking" (FCC)) ou la combustion chimique en boucle (en anglais "Chemical Looping Combustion" (CLC) (voir [6] pour un état de l'art complet dans ce domaine),
- l'industrie chimique et des procédés pour le séchage, l'enrobage, le garnissage des colonnes d'extraction ou la catalyse hétérogène. Dans ce dernier cas, un catalyseur chimique peut-être disposé de façon surfacique sur des grains solides, qui une fois plongés dans le fluide, serviront à améliorer le rendement chimique d'une réaction. On peut aussi citer la catalyse de monoxyde de carbone et d'hydrogène en vue de les convertir en hydrocarbure (procédé Fisher-Tropsch). Le procédé de dépôt chimique à partir d'une phase vapeur (en anglais "Chemical Vapor Deposition" (CVD)) effectué en lit fluidisé permet quant à lui la décoration de nanotubes de carbone [69].
- L'industrie énergétique pour la combustion de charbon, où les dépôts de particules de suie polluent les échanges de chaleur [133]. Également pour la combustion de biomasse (environ 80% de la production d'énergie dite renouvelable) par exemple dans les machines à cycle organique de Rankine (en anglais "Organic Rankine Cycle" (ORC)), qui utilisent la cogénération pour produire à la fois de l'eau chaude et de l'électricité (voir figure 1.3), ou à des fins de stockage d'énergie thermique dans les échangeurs de chaleur contemporains, comme les centrales photo-thermiques qui utilisent des particules à forte capacité thermique [15].

Quelques illustrations d'écoulements granulaires naturels ou industriels sont aussi visibles sur la figure 1.4. La figure 1.5 montre l'exemple d'un système industriel fréquemment rencontré, le cyclone, qui traite les écoulements gaz-particules. Cette liste non-exhaustive d'applications démontre le caractère crucial que revêt l'étude des écoulements granulaires. La revue de Fan & Zhu [100] référence un certain nombre d'applications industrielles mettant en oeuvre des fluidisations gazeuses denses. Sur l'année 1993 aux États-Unis, plus de 40% des sommes investies dans l'industrie chimique concernaient des technologies mettant en jeu des particules [94]. Dans le monde entier, il est estimé que l'industrie manipule

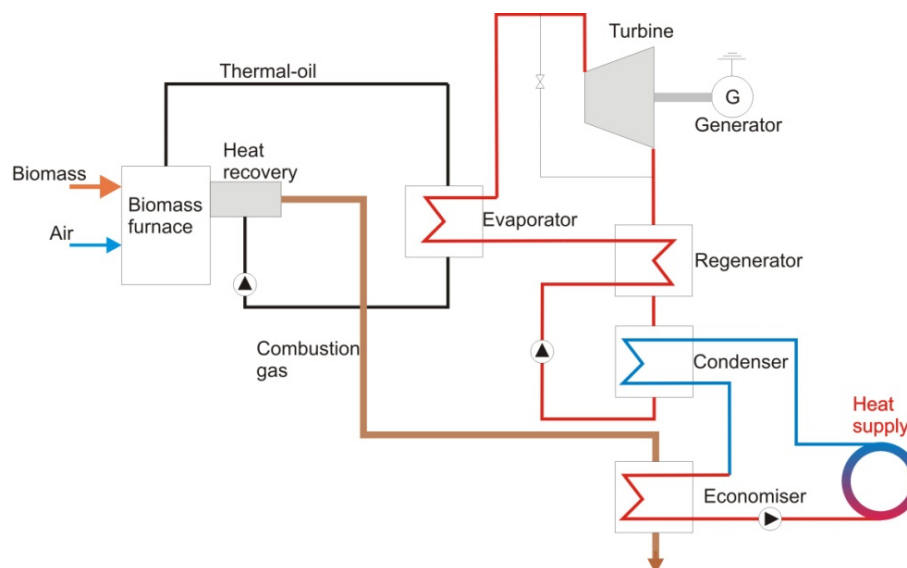


FIGURE 1.3: Schéma de principe d'une machine à cycle organique de Rankine (en anglais "Organic Rankine Cycle" (ORC)), qui utilise la cogénération pour produire à la fois de l'eau chaude et de l'électricité (source : <http://wiki.zero-emissions.at>).

de l'ordre de la dizaine de milliards de tonnes de matériaux granulaires chaque année. D'après l'Union Nationale des Producteurs de Granulats, la production de granulats en France atteint 7 tonnes par habitant et par an. Par ailleurs, les poudres et autres produits en grains représentent, en masse, 70% des matières premières de l'industrie mondiale, et 50% des produits finis (soit que ces produits soient eux-mêmes granulaires, soit qu'un matériau granulaire soit intervenu dans leur élaboration) [295]. Le traitement et le transport de ces matières correspond à 10% des dépenses énergétiques de la planète [89]. La seule vente de matériaux granulaires représente 1% du PIB de la France. On estime qu'il s'agit du deuxième matériau le plus utilisé par les activités humaines, après l'eau. La plupart du temps, les procédés associés aux matériaux granulaires sont rudimentaires, fondés sur l'expérience, et peu optimisés. Il s'agit donc d'un important levier économique [209].

1.2 Les lits fluidisés

1.2.1 Présentation des lits fluidisés

Les lits fluidisés sont parmi les manifestations industrielles les plus courantes d'écoulements granulaires, et mettent généralement en jeu des particules de tailles comprises entre 15 et $6000\mu\text{m}$. La fluidisation consiste à faire passer une phase fluide sous pression (très souvent un gaz) à travers un lit de particules supporté par une grille. Une force de traînée agit alors sur les particules, dont la direction moyenne est opposée à celle de la gravité. Pour une vitesse d'injection (en fût vide) notée U_{in} faible, la hauteur du lit, dit fixe dans ces conditions, dépend alors de la compacité, elle-même dépendante de la façon dont les particules ont été initialement placées dans le dispositif (valeur classique de 0.64 pour un empilement compact aléatoire). Lorsque la vitesse d'injection du gaz atteint une valeur seuil nommée vitesse minimum de fluidisation, notée U_{mf} , dépendante à la fois des caractéristiques de la phase porteuse et des particules solides, les effets de la traînée commencent à contrebalancer localement les effets gravitaires. Les particules commencent alors à se mouvoir en fonction des chemins empruntés par la

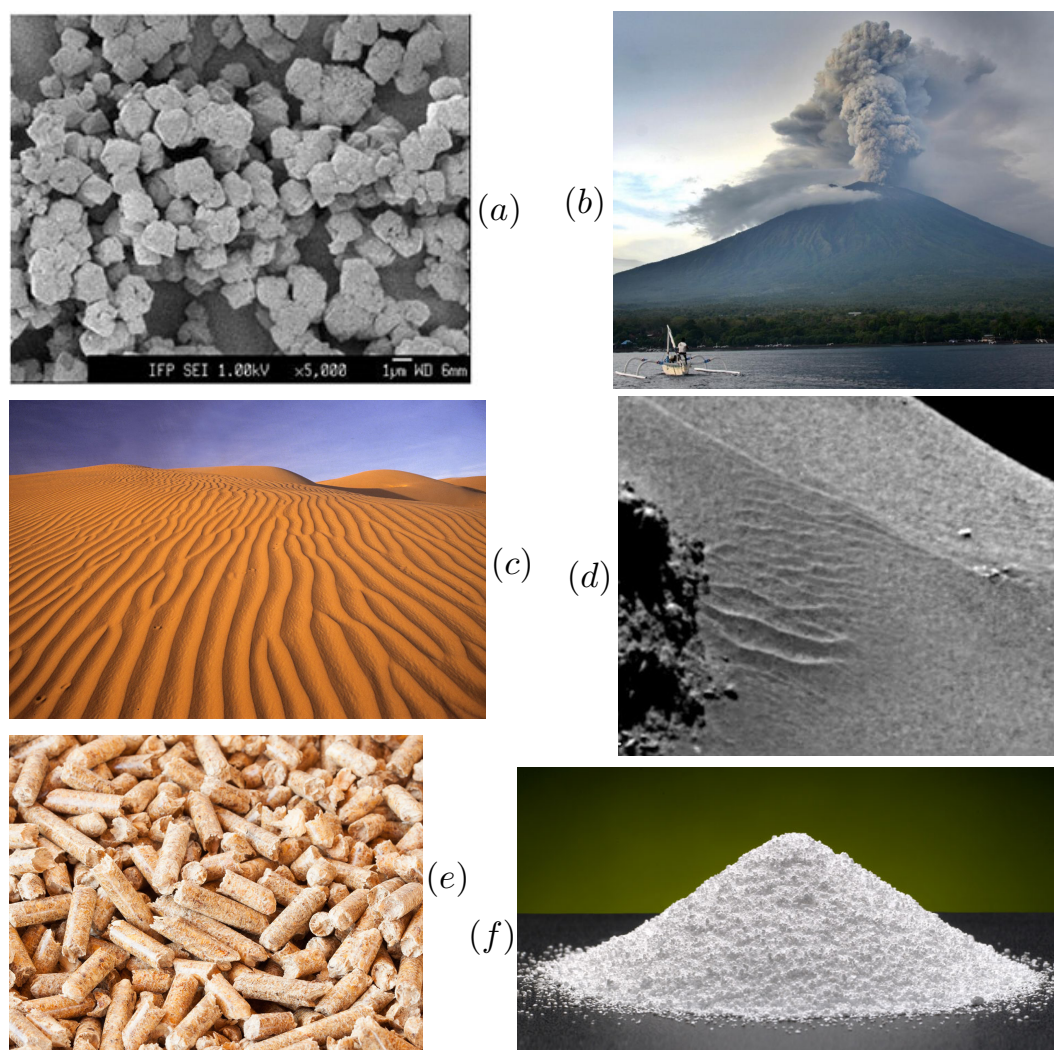


FIGURE 1.4: Illustration de la diversité des milieux granulaires : adsorption micrométrique (a) (source : IFPEN), Le mont Agung en éruption en Indonésie en 2017 (b) (source : Sciences et Avenir), rides sur des dunes de sable au Sud de la Mauritanie (c) (source : philippe-crochet.com), les dunes mouvantes de la comète Tchouri (d) (source : Sciences et Avenir), granulés de bois vendus dans le commerce (e) (source : biofarmer.hu), talus formé par de la poudre utilisée en pharmaceutique (f) (source : agcce.com).

phase gazeuse, et à former des zones plus ou moins concentrées en particules. La hauteur caractéristique du lit s'en trouve alors modifiée. Pour des vitesses d'injection supérieures à U_{mf} , le lit de particule se fluidise, c'est-à-dire que la suspension est amenée dans un état semblable à celui d'un liquide bouillonnant. En cas d'inclinaison du système, la surface de la suspension resterait plane, et si un objet est plongé dans un lit fluidisé, il ne rencontre pas de résistance particulière car les particules restent libres de leur mouvement [266]. De même, on rencontre dans les lits fluidisés des phénomènes de bulles, d'ondes, et des grandeurs effectives telles que la viscosité peuvent alors être définies. L'agitation résultant des interactions entre les phases permet un mixage important du mélange à l'origine de ses nombreux avantages, qui seront décrits dans la section 1.2.3. Différents régimes peuvent être distingués en fonction de l'écart de U_{in} à U_{mf} (voir figure 1.6). Si la vitesse du fluide injecté est augmentée au-delà de la vitesse terminale de chute libre des particules U_t , c'est-à-dire la vitesse pour laquelle les frottements visqueux avec

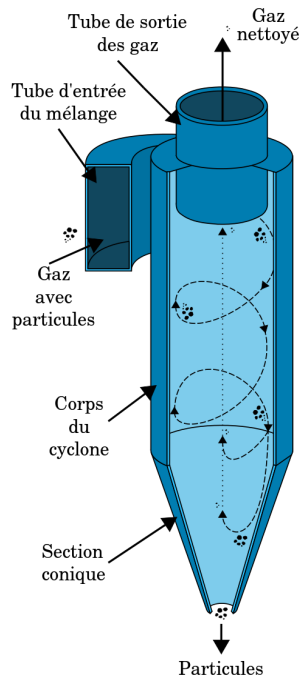


FIGURE 1.5: À gauche : schéma simplifié d'un cyclone, utilisant la force centrifuge pour effectuer une séparation mécanique des particules en suspension dans un gaz. Les particules sont entraînées vers la paroi, où elles perdent leur quantité de mouvement par friction, et finissent par chuter. Ce dispositif est fréquemment mis en oeuvre pour la décontamination de rejets gazeux dans l'atmosphère (source : wikipedia). À droite : cyclone implanté sur un site industriel (source : www.scheuch.com).

la phase porteuse équilibrent parfaitement la force de gravité appliquée à une particule isolée, celles-ci peuvent sortir du lit. On parle alors de lit transporté. Ce type de comportement peut-être souhaitable dans le cas où une séparation des particules selon leur taille (en cas de masse volumique identique pour les particules de l'échantillon), ou plus généralement de leur masse (voir figure 1.7), est envisagée. En effet la vitesse terminale de chute libre d'une particule sphérique est donnée par la relation :

$$U_t = \left(\frac{4gd_p(\rho_p - \rho)}{3\rho C_D} \right)^{1/2}. \quad (1.3)$$

Le coefficient de traînée de la particule C_D se calcule en fonction du nombre de Reynolds particulaire Re_p ici décrit pour une particule isolée :

$$Re_p = \frac{d_p \|\mathbf{U}_{in} - \mathbf{u}_p\| \rho}{\mu}, \quad (1.4)$$

et son expression est [266] :

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} & \text{si } Re_p < 0.4, \\ \frac{10}{\sqrt{Re_p}} & \text{si } 0.4 < Re_p < 500, \\ 0.43 & \text{si } 500 < Re_p < 200000. \end{cases} \quad (1.5)$$

Ainsi, la dépendance de U_t avec d_p peut s'écrire :

$$U_t \sim \begin{cases} d_p^{-0.5} & \text{si } Re_p < 0.4, \\ d_p^{-0.75} & \text{si } 0.4 < Re_p < 500, \\ d_p^{-1} & \text{si } 500 < Re_p < 200000. \end{cases} \quad (1.6)$$

Dans un échantillon possédant une distribution granulométrique binaire, il est donc théoriquement possible de trouver une vitesse d'injection de gaz pour laquelle les plus petites particules seront transportées tandis que les plus massives resteront fluidisées. Ces effets de ségrégation sont parfois non désirables et ont été portés à l'étude par le passé [298].

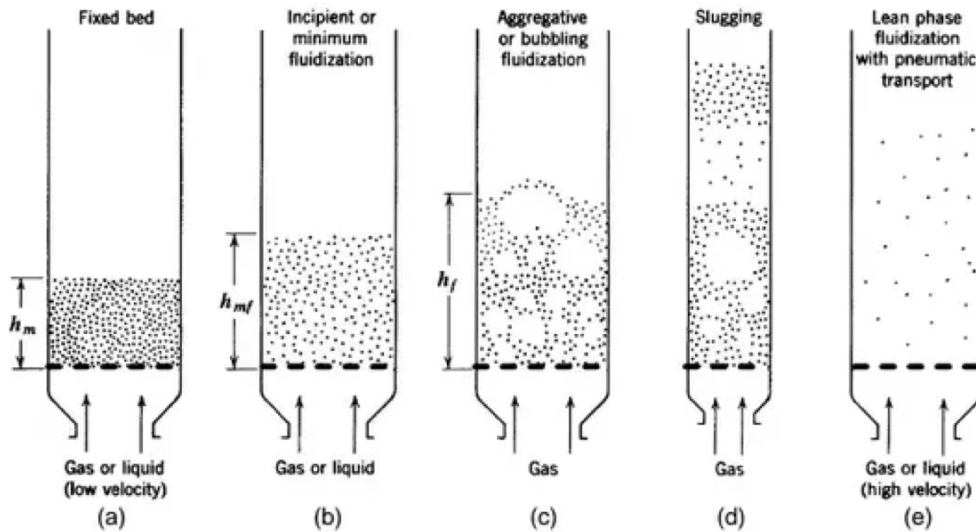


FIGURE 1.6: Illustration de différents régimes d'écoulement dans un lit de particules. De gauche à droite, la vitesse d'injection du fluide est augmentée. Pour une vitesse d'injection du fluide U_{in} faible, le lit est fixe et sa hauteur est notée h_m (a). Lorsque U_{in} est portée à la valeur de la vitesse minimum de fluidisation U_{mf} , les particules commencent à se mouvoir et la hauteur du lit, plus importante, est alors notée h_{mf} (b). Pour les valeurs de $U_{in} > U_{mf}$, on observe la formation de bulles conduisant à régime bouillonnant (régime de bullage, en anglais "bubbling") (c) où les bulles peuvent atteindre des tailles semblables au diamètre de l'enceinte, ce qui a pour effet de propulser de la matière solide à de hautes altitudes (écoulement en bouchons, en anglais "slugging") (d). Lorsque U_{in} dépasse la vitesse terminale des particules U_t , celles-ci peuvent quitter l'enceinte (e). On peut aussi observer des régimes de fluidisation dite turbulente lorsque $U_{in} \gg U_{mf}$ pour lesquelles les bulles de gaz laissent place à des structures lacunaires moins cohérentes. Adapté de [170].

Certaines installations extraient les particules du lit fluidisé durant son fonctionnement afin d'en tirer de l'énergie thermique dans un échangeur de chaleur externe, avant de les réinjecter dans l'enceinte du lit. C'est notamment le cas des fours à lit fluidisé circulant (en anglais "circulating fluidized bed furnaces" (CFB)). On trouve aussi des installations, notamment dans l'industrie chimique, où les particules solides sont enrobées de catalyseur à des fins d'amélioration de rendement de réactions, et doivent constamment être recyclées à l'extérieur du lit fluidisé afin d'être régénérées. Par exemple, l'essence extraite du pétrole brut dans les raffineries peut ne pas avoir un indice d'octane suffisant pour être commercialisable (40-60 au lieu de 85-95) et nécessite une opération de raffinage supplémentaire : le craquage catalytique en lit

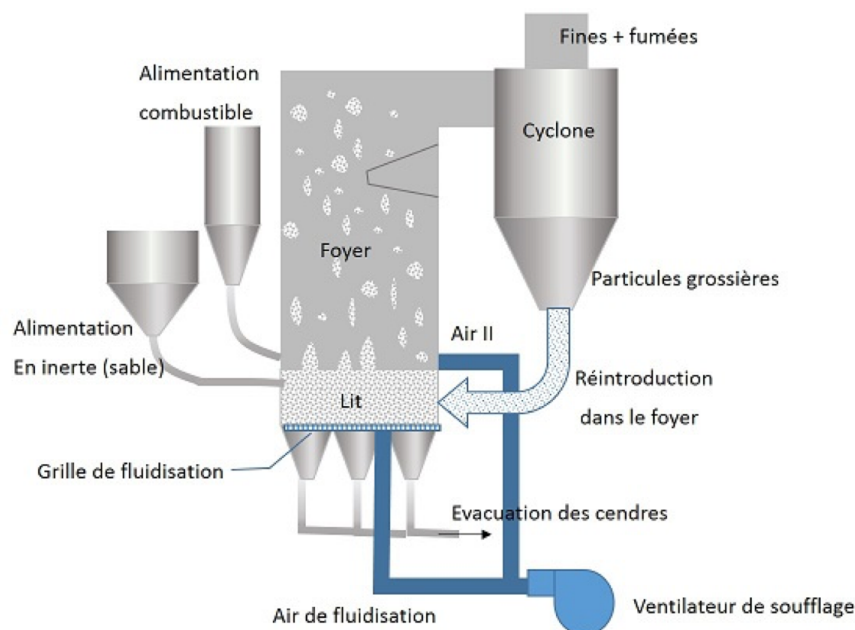


FIGURE 1.7: Exemple d'installation mettant en jeu un lit fluidisé couplé à un cyclone, association très fréquente sur les sites industriels (source : lemondeetnous.cafe-sciences.org).

fluidisé (en anglais "fluidized catalytic cracking reactors" (FCCR)) est l'un des procédés les plus utilisés pour réaliser ce type d'opération. Il s'agit d'effectuer la décomposition catalytique en phase gazeuse des coupes de pétrole possédant en leur sein une fraction importante de molécules lourdes à longues chaînes d'hydrocarbures en des molécules plus légères. Les paraffines à longue chaîne sont alors converties en oléfines. L'opération de craquage est endothermique et était anciennement effectuée sans l'aide de catalyseur (on parle alors de craquage thermique), nécessitant alors de travailler sous une atmosphère à haute pression et haute température. Grâce au craquage catalytique ces contraintes sont moins importantes. Par exemple pour le gazole sous vide, le craquage thermique impose une température de 600°C et une pression de 20atm pour les conditions opératoires, tandis qu'une température de 480°C et une pression de 1atm suffisent pour le craquage catalytique. La source externe de chaleur peut être du gaz naturel ou de l'électricité. Des dépôts de coke obtenus par excès de craquage viennent empoisonner le catalyseur solide, et constituent un problème technologique car ils imposent une régénération permanente de ce dernier (traditionnellement des silices-aluminés, par la suite améliorés par ajout de terres rares). La figure 1.8 montre un schéma de principe des unités de craquage catalytique et de régénération du catalyseur par combustion dans l'air. Cette dernière permet un fonctionnement continu du procédé [112] [153].

La capacité des lits à se fluidiser dépend grandement de la nature de la phase solide. La classification de Geldart [4] est un diagramme empirique proposé afin de classer les diverses particules selon leur aptitude à se fluidiser. Les solides y sont classés en quatre catégories (voir figure 1.9) :

- Catégorie C : poudres fines (diamètre moyen généralement inférieur à $30\mu\text{m}$) et cohésives difficiles à fluidiser. Dans un tube de petit diamètre, le lit s'élève en bloc alors que dans les réacteurs de plus grande taille le fluide a tendance à former un canal à travers le lit de poudre. Ce régime de fluidisation est appelé "channelling". Ces phénomènes compliquant la mise en pratique de la catégorie C sont dues aux interactions particules-particules de type électrostatique ou liées à l'humidité, qui deviennent prépondérantes devant les interactions fluide-particules à cause de la très petite tailles des particules.

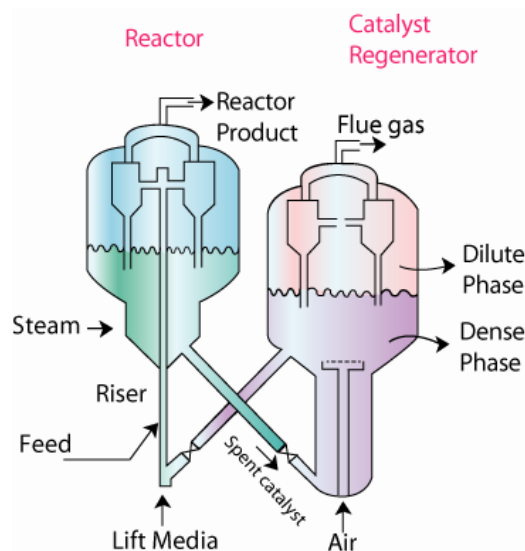


FIGURE 1.8: Schéma de principe des unités de craquage catalytique (reactor) et de régénération du catalyseur (catalyst regenerator). La réaction de craquage a lieu le long d'une colonne (riser) dans lequel le catalyseur s'élève. Le riser est associé à deux cyclones qui récoltent le produit fini (reactor product) et le catalyseur pollué par le coke (spent catalyst). Le catalyseur usagé est séparé des produits gazeux et envoyé vers l'unité de régénération où le coke à sa surface est brûlé dans un courant d'air, participant également à sa mise à haute température, avant d'être renvoyé vers le réacteur à lit fluidisé (source : nptel.ac.in).

- Catégorie A : particules fines relativement facile à fluidiser, dont le diamètre moyen est compris entre $30\mu\text{m}$ et $100\mu\text{m}$. La vitesse d'apparition des premières bulles, dite vitesse minimale de bullage, est supérieure à la vitesse minimale de fluidisation. Pour des vitesses d'injection élevées, l'écoulement en bouchons produit des bulles axisymétriques, puis aboutit à un régime turbulent.
- Catégorie B : particules à fluidisation facile (type sable) dont le diamètre moyen est compris entre $40\mu\text{m}$ et $600\mu\text{m}$ et la densité entre 1400 et $4000\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$. Les premières bulles apparaissent dès $U_{in} = U_{mf}$. Contrairement au groupe A, la taille des bulles est ici indépendante de la granulométrie de l'échantillon.
- Catégorie D : particules de tailles et/ou masses volumiques importantes nécessitant de fortes vitesses de fluide avec fluidisation irrégulière. La formation des bulles ne commence que quelques centimètres au-dessus de la grille d'injection.

Le diagramme de Reh [242] (voir figure 1.10) permet l'identification de plusieurs zones correspondant chacune à un régime de fluidisation spécifique en se basant sur le diamètre adimensionné des particules et la vitesse d'injection du gaz adimensionnée. La zone se rapportant à la fluidisation bouillonnante (la plus utilisée) y est représentée par une large bande occupant la diagonale du diagramme. Elle est délimitée dans sa partie inférieure par la courbe au minimum de fluidisation, et dans sa partie supérieure par la vitesse terminale de chute libre des particules. Les autres zones remarquables sont celles des lits fluidisés circulants et des lits transportés, pour lesquels la vitesse d'injection dépasse la vitesse terminale de chute libre. Un exemple d'utilisation de ces derniers dans les colonnes verticales (risers) du procédé de craquage catalytique du pétrole a été précédemment donné.

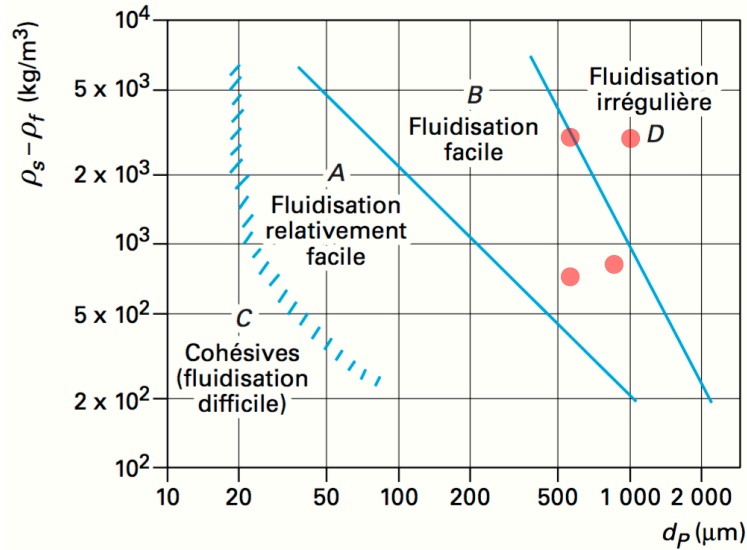


FIGURE 1.9: Le diagramme empirique de Geldart [4] permet de classer les particules par leur capacité à se fluidiser en se basant sur leur diamètre d_p et sur la différence de leur masse volumique (notée ici ρ_s) avec celle de la phase gaz (notée ici ρ_f). Les points rouges correspondent à des cas étudiés lors de ces travaux de thèse. Issu de [266].

1.2.2 Lois fondamentales des lits fluidisés

Malgré la complexité des phénomènes régissant le fonctionnement des lits fluidisés, ceux-ci possèdent certaines caractéristiques communes bien documentées. Comme décrit précédemment, en raison du rétrécissement de section effective engendré par la présence des particules, un fluide injecté à une vitesse U_{in} se voit accéléré à une vitesse dite interstitielle égale à U_{in}/ε , où ε désigne la porosité du milieu aussi appelée fraction volumique de fluide, telle que :

$$\varepsilon = \text{volume de la phase fluide/volume total} = 1 - C. \quad (1.7)$$

Cette augmentation de vitesse s'accompagne d'une augmentation de la pression dynamique du fluide. De plus, les frottements visqueux rencontrés à la surface des particules provoquent une perte de quantité de mouvement au sein de la phase fluide parfois appelée pression frictionnelle et produisant des forces de traînée sur les particules. Il en résulte une perte de charge ou saut de pression ΔP_T dans le lit de particules. Lorsque le lit est fixe, *i.e.* pour des vitesses d'injection $U_{in} < U_{mf}$, la pression décroît linéairement dans le lit. Lorsque U_{mf} est atteinte, les particules se soulèvent et s'agitent, le régime de fluidisation est atteint, et la pression frictionnelle cesse d'augmenter. Le saut de pression totale (entre le fond et la surface du lit) à travers le lit sur une hauteur L est alors équivalent au poids des particules et du fluide contenus, tel que :

$$\frac{\Delta P_T}{L} = (1 - \varepsilon)\rho_p g + \varepsilon \rho g. \quad (1.8)$$

Ce saut de pression est facilement mesurable de façon expérimentale et permet un suivi de la fluidisation ainsi qu'une estimation de la hauteur de lit dans le cas d'un système opaque. On peut également exprimer la différence de pression liée au poids apparent ou relatif du lit, c'est-à-dire à son poids amputé de la poussée d'Archimède qui s'exerce sur lui :

$$\frac{\Delta P}{L} = \frac{\Delta P_T}{L} - \rho g, \quad (1.9)$$

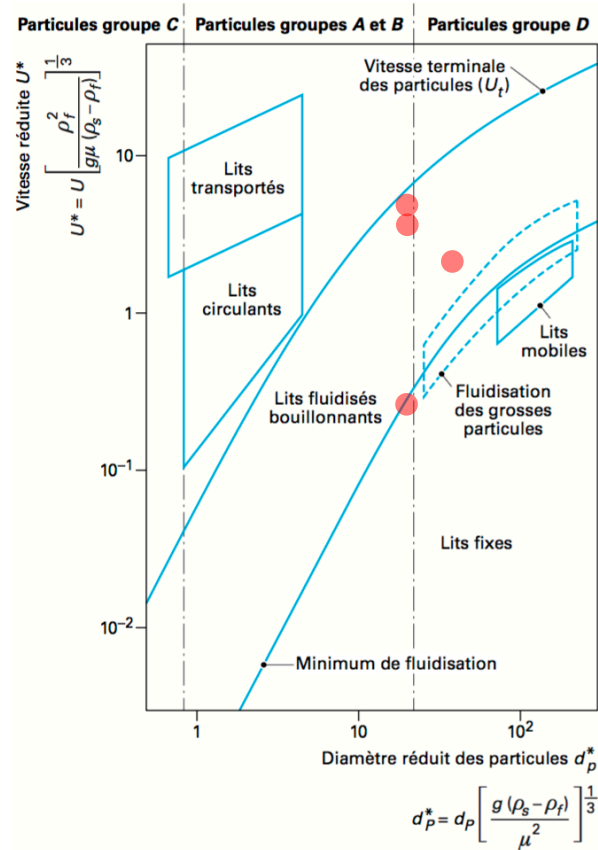


FIGURE 1.10: Le diagramme empirique de Reh [242] se base sur le diamètre des particules ainsi que la vitesse d'injection du gaz (tous deux adimensionnés) et permet d'identifier les régimes spécifiques de fluidisation des particules. Sont ici visibles en partie haute du diagramme les catégories A, B, C et D de la classification de Geldart [4] (voir figure 1.9). Les points rouges correspondent à des cas étudiés lors de ces travaux de thèse. Issu de [266].

d'où l'expression classique :

$$\frac{\Delta P}{L} = (1 - \varepsilon)(\rho_p - \rho)g. \quad (1.10)$$

Lorsque $U_{in} > U_t$, les particules sont transportées hors du lit et le saut de pression diminue en conséquence. Le diagramme 1.11 montre la variation du profil vertical du saut de pression à travers un lit de particules en fonction de la vitesse d'injection du gaz.

Ce diagramme montre un phénomène d'hystérésis propre aux systèmes comportant une distribution monodisperse de particules. En effet, selon le sens de variation progressive de la vitesse d'injection du gaz, le saut de pression sera différent, et ceci est particulièrement visible au moment de la fluidisation du lit [170]. Pour des vitesses croissantes, la pente de la perte de charge est légèrement plus élevée que dans le cas d'une vitesse décroissante, et un pic de pression est observé. Ces deux phénomènes sont liés à l'agencement des particules dans le lit : pour un lit qui a sédimenté sous l'effet des seules forces de gravité, la porosité est plus faible que dans le cas d'un lit ayant été fluidisé plus tôt dans l'expérience. Pour ce dernier, lorsque la vitesse d'injection diminue, les particules se réarrangent selon une configuration qui vient limiter la résistance au fluide. Le pic de pression se produisant au moment où $U_{in} = U_{mf}$ s'explique par la nécessité de "décompacter" le lit, ce qui résulte en une variation brusque de la valeur de

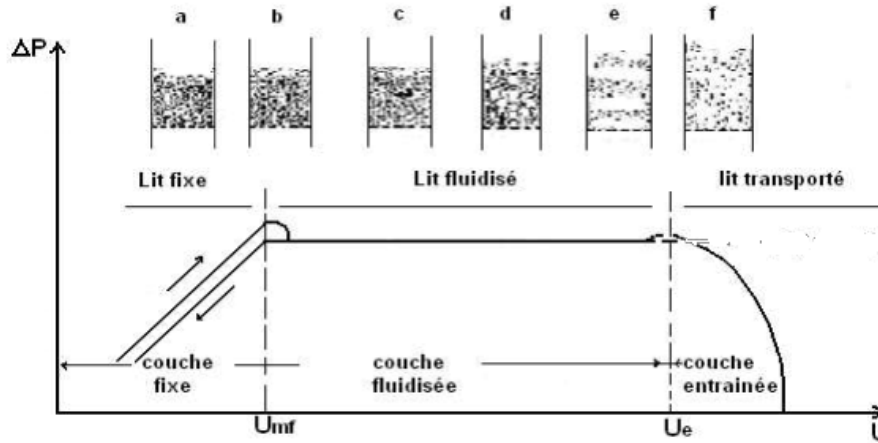


FIGURE 1.11: Profil vertical caractéristique du gradient de pression moyenné temporellement au travers d'un lit de particules identiques en fonction de la vitesse d'injection du gaz. La pression varie linéairement dans un lit fixe, puis garde une valeur constante pour $U_{in} < U_{mf} < U_t$. Passée U_t (ici notée U_e) le lit est transporté et le gradient de pression diminue.

la porosité [170]. Le fait que ce phénomène d'hystérésis n'existe pas pour des distributions polydisperses de particules s'explique par le fait que les particules les plus petites sont logées dans les interstices laissés par les particules de plus grandes tailles. Leur petite taille leur permet de se fluidiser plus rapidement et donc de se déplacer au sein des espaces laissés libres [256].

La caractérisation du profil vertical de pression moyenne dans un lit dense de particules en fonction de la vitesse d'injection, mais aussi de la porosité du milieu et des propriétés physico-chimiques des phases fluide et solide, est un point clé de l'étude des lits fluidisés. Aussi les écoulements à travers des milieux denses poreux furent étudiés en régime visqueux par Darcy dès 1856 pour la mise au point des fontaines publiques de la ville de Dijon [75]. Ergun proposa ensuite une expression généralisée du saut de pression à travers un lit fixe de particules [95]. Dans ses travaux, le saut de pression est considéré comme résultant de la dissipation d'énergie cinétique du fluide causée par des effets visqueux et des effets inertiels. En admettant que le saut de pression est dû aux interactions entre le fluide et les particules, telles que la force de traînée, et que cette dernière dépend pour une particule isolée linéairement de la vitesse du fluide en régime visqueux et de son carré en régime inertiel, on peut l'exprimer sous la forme suivante suggérée par Reynolds [245] :

$$\frac{\Delta P}{L} = aU + b\rho U^2. \quad (1.11)$$

où a et b sont des facteurs à déterminer. La théorie proposée par Kozeny [165] et modifiée par Blake [37] pour les faibles vitesses d'écoulement aboutit à l'équation connue sous le nom de Blake-Kozeny :

$$\frac{\Delta P}{L} = 150 \frac{(1 - \varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \frac{\mu U}{d_p^2}. \quad (1.12)$$

Pour les régimes d'écoulement à nombre de Reynolds plus élevés, Burke & Plummer [49] formulent d'autres hypothèses pour finalement se ramener à la relation suivante, connue sous le nom d'équation de Burke-Plummer :

$$\frac{\Delta P}{L} = 1.75 \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon^3} \frac{\rho U^2}{d_p}. \quad (1.13)$$

Les comportements asymptotiques à faibles et grands nombres de Reynolds des équations 1.12 et 1.13 respectivement permettent d'écrire une forme générale pour le saut de pression à la travers un lit de particules, où sont utilisés de nouveaux coefficients multiplicateurs a et b :

$$\frac{\Delta P}{L} = a \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \frac{\mu U}{d_p^2} + b \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \frac{\rho U^2}{d_p}. \quad (1.14)$$

Les valeurs de a et b peuvent être déterminées expérimentalement en réécrivant cette équation sous la forme :

$$y = a + bx, \quad (1.15)$$

avec :

$$y = \frac{\Delta P}{L} \frac{\varepsilon^3 d_p^2}{(1-\varepsilon)^2 \mu U} \quad \text{et} \quad x = \frac{\rho U d_p}{\mu(1-\varepsilon)} = \frac{Re_p}{1-\varepsilon} \quad (1.16)$$

Après 640 expériences réalisées avec différents paramètres, Ergun [95] valida les valeurs $a = 150$ et $b = 1.75$, complétant ainsi la célèbre corrélation d'Ergun :

$$\frac{\Delta P}{L} = 150 \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \frac{\mu U}{d_p^2} + 1.75 \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \frac{\rho U^2}{d_p}. \quad (1.17)$$

On peut noter que le nombre de particules n'intervient pas (explicitement) dans cette corrélation, qui ne dépend que des caractéristiques générales du lit. La figure 1.12 illustre graphiquement les résultats prédits par la corrélation semi-empirique d'Ergun [95] ainsi que les comportements asymptotiques des corrélations de Blake-Kozeny [37] pour les faibles Reynolds (régime visqueux), et de Burke-Plummer [49] pour les hauts Reynolds (régime inertiel).

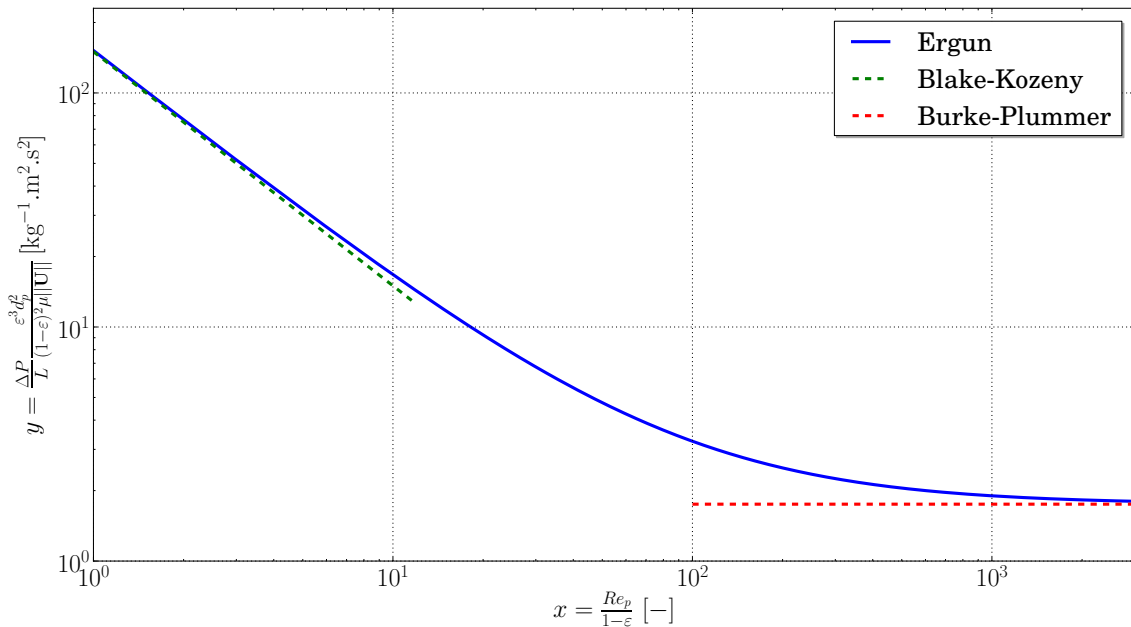


FIGURE 1.12: Représentation de la corrélation semi-empirique d'Ergun [95]. Les comportements asymptotiques des corrélations de Blake-Kozeny [37] pour les faibles Reynolds, et de Burke-Plummer [49] pour les hauts Reynolds, sont également visibles.

Lorsque les résultats de la corrélation semi-empirique d'Ergun [95] sont tracés en fonction de la hauteur L dans le lit de particules pour différentes valeurs de la fraction volumique de fluide ε , ceux-ci révèlent une très forte sensibilité à ce dernier paramètre, comme le montre la figure 1.13. Dans le cas représenté, on peut calculer qu'un écart d'environ 12% sur la valeur choisie pour ε (dans le cas d'une mesure expérimentale ou numérique imprécise par exemple) conduit à un écart de 40% sur la valeur prédite de la perte de charge. L'emploi de cette corrélation est donc sujet à caution.

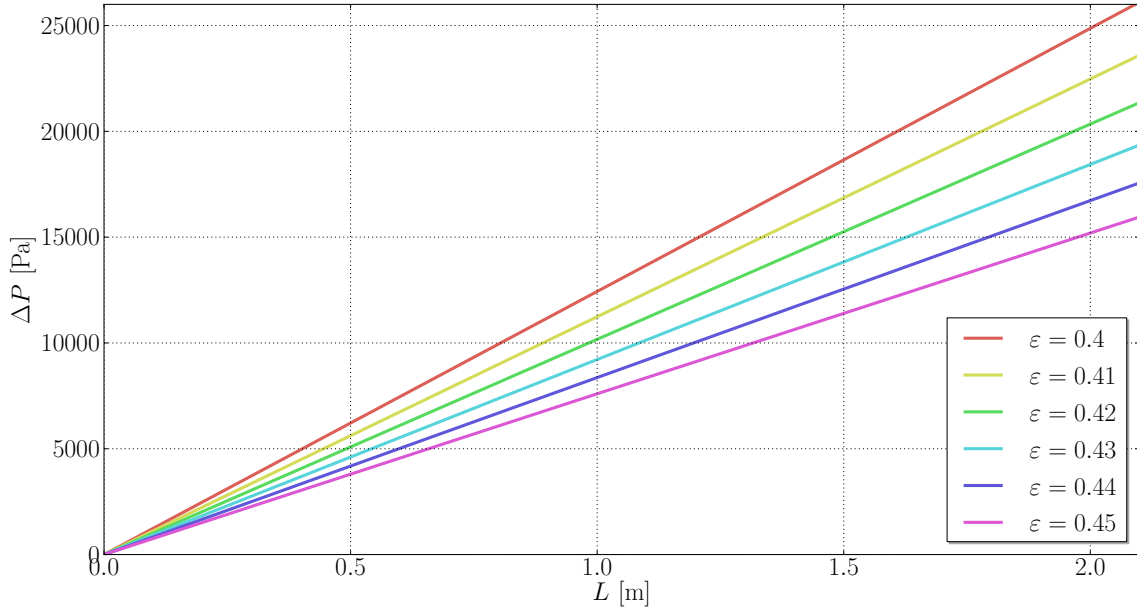


FIGURE 1.13: Représentation de la corrélation semi-empirique d'Ergun [95] en fonction de la hauteur dans le lit de particule pour différentes valeurs de fraction volumique de fluide.

Comme dit précédemment, le régime de fluidisation est atteint lorsque la vitesse d'injection du gaz est augmentée jusqu'à la vitesse minimum de fluidisation du lit : $U_{in} = U_{mf}$. Nous venons de voir que la moyenne temporelle de la perte de charge au travers du lit n'évolue plus une fois cette condition remplie. La valeur de cette vitesse U_{mf} peut donc être acquise *a posteriori* par observation du profil de perte de charge lors d'une augmentation croissante de la vitesse d'injection. Elle peut également être estimée *a priori* en combinant les équations 1.17 et 1.10 au minimum de fluidisation de la façon suivante, en désignant par ε_{mf} la valeur prise par ε à cet instant :

$$150 \frac{(1 - \varepsilon_{mf})^2}{\varepsilon_{mf}^3} \frac{\mu U_{mf}}{d_p^2} + 1.75 \frac{1 - \varepsilon_{mf}}{\varepsilon_{mf}^3} \frac{\rho U_{mf}^2}{d_p} = (1 - \varepsilon_{mf})(\rho_p - \rho)g. \quad (1.18)$$

Cette expression signifie qu'au minimum de fluidisation, la perte de charge à travers le lit est égale à son poids apparent. Une équation du second degré se dégage alors :

$$1.75 \rho d_p U_{mf}^2 + 150(1 - \varepsilon_{mf})\mu U_{mf} - \varepsilon_{mf}^3 d_p^2 (\rho_p - \rho)g = 0. \quad (1.19)$$

Soit Δ le discriminant de ce polynôme défini par :

$$\Delta = [150(1 - \varepsilon_{mf})\mu]^2 + 7\rho\varepsilon_{mf}^3 d_p^3 (\rho_p - \rho)g. \quad (1.20)$$

L'exclusion de la racine négative du polynôme conduit à la formule suivante permettant d'exprimer U_{mf} :

$$U_{mf} = \frac{-150(1 - \varepsilon_{mf})\mu + \sqrt{\Delta}}{3.5\rho d_p}. \quad (1.21)$$

Un tracé de la vitesse minimum de fluidisation est visible sur la figure 1.14. Dans le cas de faibles nombres de Reynolds ($Re_{mf} < 20$), le terme visqueux est prépondérant devant le terme inertiel dans la relation d'Ergun (voir équation 1.17), qui se ramène alors à l'expression de Blake-Kozeny (voir équation 1.12). La combinaison de cette dernière équation avec la relation 1.10 fournit alors une variante de l'équation 1.21 :

$$U_{mf} = \frac{d_p^2(\rho_p - \rho)g}{150\mu} \frac{\varepsilon_{mf}^3}{1 - \varepsilon_{mf}}. \quad (1.22)$$

Dans le cas de forts nombres de Reynolds ($Re_{mf} > 1000$), c'est le terme inertiel qui devient prépondérant devant le terme visqueux dans la relation d'Ergun (voir équation 1.17), qui se ramène alors à l'expression de Burke-Plummer (voir équation 1.13). La combinaison de cette dernière équation avec la relation 1.10 fournit alors une nouvelle variante de l'équation 1.21 :

$$U_{mf} = \sqrt{\frac{d_p(\rho_p - \rho)g\varepsilon_{mf}^3}{1.75\rho}}. \quad (1.23)$$

Les relations présentées précédemment ont été extraites de cas simples dans lesquels les particules sont sphériques et leur distribution monodisperse. Dans les cas pratiques, les particules mises en jeu dans les lits fluidisés sont rarement sphériques et peuvent même posséder des rapports de forme importants, comme les fibres de bois. De plus, leurs dimensions suivent généralement une loi gaussienne, ce qui entraîne des écarts de prévision. D'autres procédures sont disponibles dans la littérature pour prendre en compte les effets de non-sphéricité des particules [230]. La corrélation d'Ergun [95] peut également être adaptée pour prendre en compte le facteur de forme des particules ψ_p :

$$\frac{\Delta P}{L} = 150 \frac{(1 - \varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \frac{\mu U}{(\psi_p d_p)^2} + 1.75 \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon^3} \frac{\rho U^2}{\psi_p d_p}. \quad (1.24)$$

Concernant les effets liés à la polydispersité de l'échantillon solide, on a déjà vu que le phénomène d'hystérésis sur la perte de charge pouvait disparaître, notamment pour des distributions assez larges de tailles. Dans ce cas, le saut de pression total est égal à la somme des sauts de pression engendrés par chaque classe de particule, et pour une distribution symétrique type gaussienne le saut de pression peut être exprimé en fonction d'un diamètre moyen de particule \bar{d}_p dans la corrélation d'Ergun 1.17. Il est aussi commun de considérer des distributions bidisperses lorsque deux grandes classes de diamètres se dégagent. La classification de particules par densité et/ou taille à l'aide de fluidisation liquide-solide, plutôt que gaz-solide, est utilisée par l'industrie minière depuis le XVIème siècle [142]. Certains auteurs s'inspirèrent de la loi de Fick pour caractériser la ségrégation des particules de différentes classes [157], et de nombreuses études témoignent de l'intérêt porté à la polydispersité. Un phénomène remarquable étudié par Moritomi *et al.* [210] est celui de l'inversion des classes de particules : partant d'une distribution homogène de particules A plus légères et de particules B plus lourdes dans le système, il a été observé une migration particulière des particules A en haut du lit pour de faibles vitesses de fluidisation. L'augmentation de la vitesse d'injection du gaz jusqu'à une valeur seuil nommée vitesse d'inversion provoque une homogénéisation du milieu où les particules A et B sont uniformément réparties. Si l'on continue à augmenter U_{in} , le phénomène de ségrégation se poursuit et les particules B gagnent le haut du lit, tandis que les particules A restent au fond.

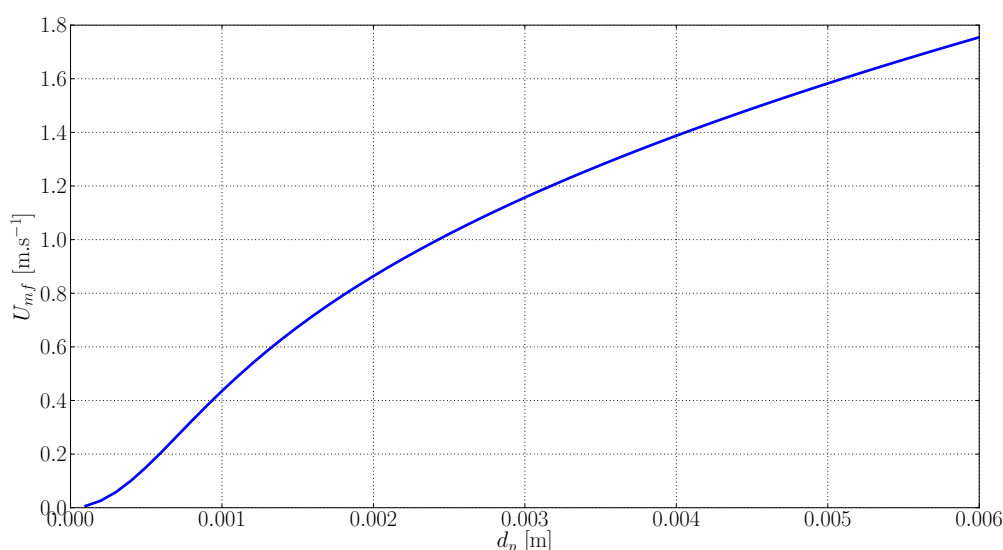


FIGURE 1.14: Vitesse minimum de fluidisation issue de la corrélation semi-empirique d'Ergun [95] en fonction du diamètre des particules. Les valeurs choisies pour les paramètres physiques correspondent au cas classique de la fluidisation de billes de verre ($\rho_p = 2500 \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$) par de l'air à température ambiante ($\rho = 1.18 \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$, $\mu = 1.8 \times 10^{-5} \text{Pa} \cdot \text{s}$) en empilement aléatoire compact ($\varepsilon_{mf} = 0.36$).

1.2.3 Avantages et inconvénients des lits fluidisés

La technologie des lits fluidisés est omniprésente dans l'industrie, qui voit en elle de nombreux avantages. Travailler en milieu diphasique permet de faciliter les étapes de séparation, ainsi que les opérations de stockage, manipulation, d'injection et de soutirage de solide, qui peuvent être effectuées en continu. Les lits utilisés pour la combustion de biomasse présentent l'avantage de ne pas comprendre de parties mobiles. Ils sont aussi d'excellents échangeurs de chaleur. Dépendant des propriétés physico-chimiques des phases fluide et solide, les mesures expérimentales révèlent que les coefficients d'échange entre la suspension et un réseau de tubes échangeurs sont généralement situés entre 200 et $600 \text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$, ce qui est nettement supérieur aux coefficients de l'ordre de $50 \text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$ rencontrés dans les échangeurs fluide-fluide. La raison d'une telle capacité se situe dans la mobilité des particules au sein du lit [266]. Chaque particule pompe localement de la chaleur et vient la libérer dans une zone plus froide du lit au gré de son déplacement, favorisant ainsi l'homogénéisation de la température même en présence de réactions fortement endothermiques ou exothermiques. Cette propriété due au brassage continu du milieu est utile pour la combustion de biomasse et conduit à une bonne homogénéisation des espèces chimiques, qui permet d'effectuer des réactions de combustion complète à des températures de lit relativement faibles ($< 850^\circ\text{C}$) conduisant à de faibles émissions de dérivés azotés (NO_x) et de dioxyde de carbone [107] [236]. Ce type d'installation présente également l'avantage d'être flexible au regard du taux d'humidité du combustible employé.

Des précautions sont à prendre lors de l'emploi de lits fluidisés. La qualité de la phase solide peut se dégrader au cours de son utilisation en raison des phénomènes de collisions et de frottements entre particules, ce qui peut entraîner une diminution progressive de leur dimension (abrasion, rupture). Certaines particules devenues trop petites peuvent alors sortir du réacteur par transport de la phase fluide. Si des poussières de particules se forment, la rhéologie du fluide peut s'en trouver modifiée. On parle alors

de fluides complexes (en anglais "slurry"). Il peut devenir coûteux de séparer un fluide s'il transporte des particules fines. De plus, des contraintes mécaniques fortes sont à l'oeuvre dans les dispositifs à lits fluidisés : les vibrations engendrées par leur bouillonnement peuvent provoquer des secousses importantes ainsi qu'une érosion du matériel. En cas de combustion, la formation d'agglomérats de matière brûlée doit faire l'objet d'une attention particulière. On peut également citer les difficultés liées à la manipulation, donc à l'éventuelle fuite, de produits dangereux (rejets dans l'atmosphère de particules fines ou produits chimiques), qui ne sont pas inhérentes aux lits fluidisés mais qui doivent être prises en compte. Certaines installations fonctionnent sous une pression légèrement plus faibles que la pression atmosphérique afin d'empêcher les fuites [266].

1.2.4 Étude des lits fluidisés

Le dimensionnement des lits fluidisés bouillonnants est complexe, et de nombreuses lois empiriques sont utilisées afin de garantir au mieux leur fonctionnement et celui de ses différents éléments constitutifs dans un contexte de fluidisation donné. On pourra par exemple citer les règles de dimensionnement de la grille de fluidisation, qui doit à la fois supporter le lit de particule et permettre l'injection du gaz. Cette grille peut être une plaque poreuse ou encore une simple plaque perforée, et peut poser des problèmes techniques tels que le colmatage des trous ou le passage de certaines particules par les pores d'injection. Elle doit également permettre une répartition horizontale de l'injection pour éviter une montée trop rapide des bulles vers la surface du lit et l'apparition de chemins préférentiels pour le fluide. Une perte de charge minimale équivalant à 1/3 du poids du lit à la vitesse opératoire du lit est alors nécessaire. La vitesse et la longueur des jets formés au niveau des orifices d'injection est aussi un critère à prendre en compte lors de la conception des grilles. En effet la vitesse de ces jets peut atteindre des valeurs très importantes qui sont souvent à l'origine de problèmes d'abrasion des pièces [266]. Les systèmes d'injection sont donc variés (aspect, espacement et direction des jets, type de tuyères etc.) en fonction des applications désirées et des contraintes associées (chimique, thermique etc.).

Le régime de bullage et son expansion doivent également être caractérisés afin d'obéir à certaines contraintes. Les bulles formées sont petites au niveau de l'injection, coalescent dans leur ascension dans le lit jusqu'à atteindre une taille maximale, puis éclatent à sa surface. Là encore de nombreuses corrélations sont présentes dans la littérature. Parmi les plus utilisées, on pourra citer l'estimation du nombre de Reynolds à la vitesse minimale de fluidisation Re_{mf} par l'équation de Wen & Yu [320] :

$$Re_{mf} = \frac{\rho U_{mf} d_p}{\mu} = (33.7^2 + 0.0408 Ar)^{0.5} - 33.7 \quad (1.25)$$

définie grâce au nombre d'Archimède dépendant des propriétés des deux phases :

$$Ar = \frac{d_p^3 \rho (\rho_p - \rho) g}{\mu^2}. \quad (1.26)$$

L'équation de Darton [76] permet quant à elle de lier le diamètre des bulles de gaz D_b à la hauteur z dans l'enceinte en fonction de la vitesse d'injection U_{in} et de la surface occupée par un jet s° :

$$D_b = 0.54 (U_{in} - U_{mf})^{0.4} (z + 4\sqrt{s^\circ})^{0.8} g^{-0.2}. \quad (1.27)$$

La vitesse d'ascension des bulles U_b peut alors être obtenue par l'équation de Davidson [77] :

$$U_b = 0.71 \sqrt{g D_b} + U_{in} - U_{mf} \quad (1.28)$$

Finalement, on peut accéder à la fraction volumique locale occupée par les bulles ε_b :

$$U_b \varepsilon_b = U_{in} - U_{mf}, \quad (1.29)$$

puis au besoin intégrer cette équation pour obtenir la valeur moyenne de ε_b dans tout le domaine [266]. La caractérisation du régime de bullage est primordiale car la plupart des applications mettant en jeu des lits fluidisés nécessitent de forts échanges de matière bulles/suspension. Dans le domaine du séchage par exemple, la suspension contient la matière et de l'humidité, et c'est l'air sec véhiculé par les bulles qui en permet l'évacuation. En catalyse hétérogène, la réaction chimique se produit à la surface des particules, tandis que la majeure partie du réactif est convectée dans les bulles. La définition suivante du coefficient de transfert de matière bulles/suspension a été validée par [269] :

$$k_g = \frac{U_{mf}}{3} + \left(\frac{4D_m \varepsilon_{mf} U_b}{\pi D_b} \right)^{1/2}, \quad (1.30)$$

et s'écrit comme la somme d'un terme convectif prédominant pour les suspensions de grosses particules et d'un terme représentant l'effet de la diffusion moléculaire autour de la bulle prédominant pour les particules de faible diamètre.

Comme il a été mentionné, certains dispositifs, tels que les cyclones ou les filtres, doivent récupérer les particules sortant des lits transportés en vue d'un traitement ultérieur. Ces dispositifs sont parfois placés à l'intérieur de l'enceinte du lit. Il s'agit alors de les positionner de façon à optimiser le flux de particules qu'ils reçoivent. Placer un cyclone à une hauteur trop faible pourrait conduire à leur engorgement, et à l'inverse, les placer trop haut les rendrait inutiles. Prévoir la hauteur de désengagement (en anglais "transport disengaging height" (TDH)) d'un lit de particules est donc fondamental pour assurer un fonctionnement efficace et pérenne du système dans sa globalité. Le phénomène d'envol des particules à la surface du lit est un des plus complexes du domaine de la fluidisation. On ne détaillera ici aucune des nombreuses corrélations existant pour estimer le débit et la granulométrie des particules transportées au-dessus des lits. Beaucoup sont imprécises dans les conditions de fonctionnement industriel [266].

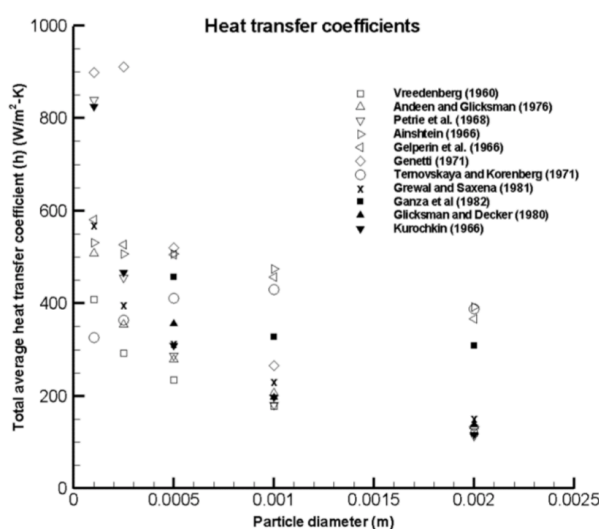


FIGURE 1.15: Différentes valeurs de coefficients de transfert de chaleur fournies par des corrélations pour un lit fluidisé de particules de polypropylène muni d'un tube horizontal. Issu de [14].

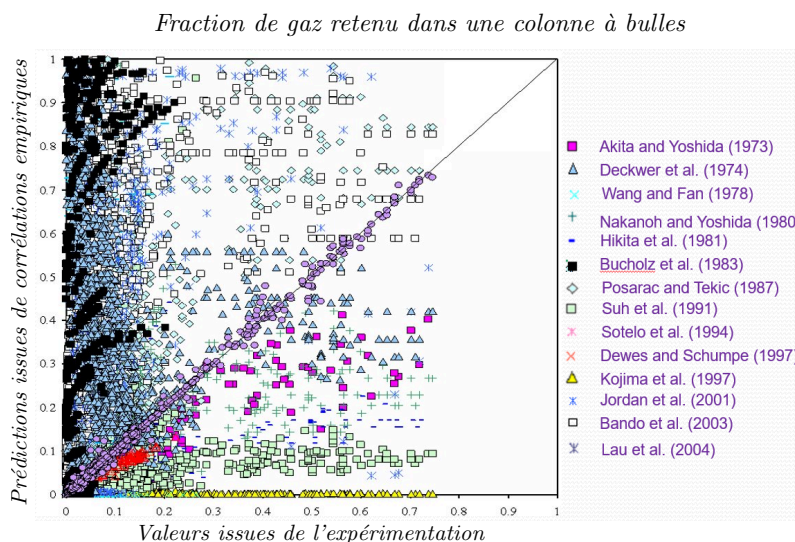


FIGURE 1.16: Différentes valeurs pour la prédiction de la rétention de gaz dans une colonne à bulles. Issu de [333].

Malgré l'abondance de la littérature sur le sujet, la mise en place de lits fluidisés, notamment dans les cas anisothermes, n'est pas sans risque. L'accident qui s'est produit aux États-Unis le 21 Janvier 1997 dans une raffinerie de pétrole, tuant un opérateur et blessant quarante-six employés, a eu pour cause la rupture d'une tuyauterie sous l'effet d'une température excessive ($> 760^{\circ}\text{C}$) des gaz en provenance d'un lit fluidisé catalytique. La dérive en température du réacteur a démarré par l'apparition d'un point chaud dans le dispositif probablement dû à un mauvais écoulement et à une mauvaise répartition de chaleur dans le lit [2]. En 1982 à Ponts-de-buis-les-quimerch en France, 100kg de poudre de chasse se décomposent violemment dans un séchoir en lit fluidisé. Un séchage prolongé de la poudre à 115°C lors de la remise en service de l'unité est à l'origine de son auto-inflammation, dont le souffle détruit l'atelier [1]. Plus récemment, en 2013, sur un site sidérurgique à Florange en France, une émission anormale de gouttelettes acides en sortie d'une cheminée est causée lors du redémarrage d'une unité de traitement par pyrohydrolyse en lit fluidisé à 850°C [3]. Ces accidents et incidents rappellent que ces types de technologies sont complexes à mettre en oeuvre. Alors qu'il semble apparaître une certaine connaissance empirique du régime de fonctionnement permanent de ces réacteurs, nombres de malfunctions se produisent lors de redémarrages des installations après une maintenance, ce qui témoigne de la méconnaissance des différents mécanismes transitoires qui régissent le fonctionnement des lits fluidisés.

Comme peuvent l'illustrer les figures 1.15 et 1.16, les corrélations empiriques ne permettent pas systématiquement de rendre compte des phénomènes caractérisant les lits fluidisés. Certaines techniques optiques initialement développées dans le milieu de la recherche sont aujourd'hui en passe de permettre un accès à une meilleure compréhension des différents phénomènes mis en jeu dans les réacteurs à lit fluidisés. La méthode classiquement utilisée dans d'autres ramifications de la mécanique des fluides de vélocimétrie laser à effet Doppler (VLD) a trouvé une application dans ce domaine. Elle consiste en l'analyse de deux faisceaux lasers s'intersectant dans une zone contenant des particules, que ces dernières réfléchissent, et permet un calcul de leur vitesse locale instantanée (voir figure 1.17).

Bien qu'elle possède l'avantage d'être non-intrusive, le principal inconvénient de cette méthode se situe dans son incapacité à explorer les zones denses en particules de l'écoulement. Par conséquent elle

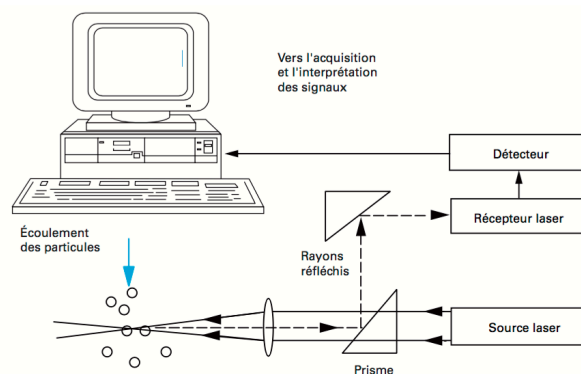


FIGURE 1.17: Schéma simplifié du système de mesure de vitesse de particules par vélocimétrie laser à effet Doppler. Issu de [266].

ne peut être utilisée que dans les zones diluées, telles que la zone d'envol des particules au-dessus d'un lit fluidisé. Les mesures, cette fois intrusive, par des sondes équipées de fibres optiques permettent non seulement de mesurer la vitesse des particules, mais aussi de mesurer leur concentration locale [252]. Son principal inconvénient réside dans son caractère intrusif susceptible d'influencer l'écoulement et de perturber les mesures. À noter qu'une étude numérique récente s'est intéressée à la quantification de l'impact de la présence de fibres optiques dans un riser, conduisant à une optimisation de leur design [64]. D'autres techniques non-intrusives sont utilisées pour obtenir des champs de vecteurs bi voire tridimensionnels afin de visualiser les trajectoires des particules, même en zones denses, telles que la vélocimétrie d'image de particule (en anglais "Particle Image Velocimetry" ou PIV). Utilisée dans un fluide dans lequel sont préalablement ajoutées des particules traceurs inertes comme de la poudre de zirconium, elle permet de visualiser les lignes de courant d'un écoulement. Son fonctionnement consiste à corrélérer les positions de particules entre deux images instantanées capturées par une caméra rapide. Une variante de cette méthode est également utilisée dans les milieux granulaires, d'où son nom de "granular PIV", pour laquelle l'illumination créée par la surface même des grains par un laser permet de détecter leur mouvement. Il n'y a donc pas nécessairement de traceurs à ajouter au milieu étudié. La vélocimétrie d'image de particule est particulièrement utilisée pour l'étude de lits dits "pseudo 2D" (une dimension du système à l'étude est très faible devant les deux autres) et permet d'accéder à des champs de vitesse particulaires, ainsi que des fractions volumiques de solide et des distributions spatiales de flux massiques de solide, lorsqu'elle est combinée à des techniques d'analyse d'image digitale (en anglais "Digital Image Analysis" ou DIA) [305]. Alors que les premières recherches associées à la capture des phénomènes thermiques dans les lits fluidisés utilisaient généralement des thermocouples placés sur ou à l'intérieur des parois [307], des mesures de rayonnement infrarouge en vue d'études thermographiques ont été réalisées [47] pour donner un accès à des champs de température solide (voir figure 1.18). Leur couplage avec une technique de PIV a déjà été proposée [301], puis récemment encore améliorée par l'ajout de DIA. Corréler les différents signaux obtenus donne alors accès à des flux d'enthalpie solide [226]. De surcroît, certains travaux témoignent de la capacité des mesures infrarouges à fournir des informations sur la concentration de CO_2 dans les bulles de gaz [73].

Une paroi transparente au passage du rayonnement (laser, infrarouge ou visuel) est nécessaire pour l'emploi des techniques de PIV ou infrarouge. Celle-ci doit respecter certaines contraintes d'absorption vis-à-vis du type de rayonnement employé afin de perturber le moins possible les mesures effectuées. Elle peut par exemple être en verre saphir, qui possède une haute transmittance pour le rayonnement

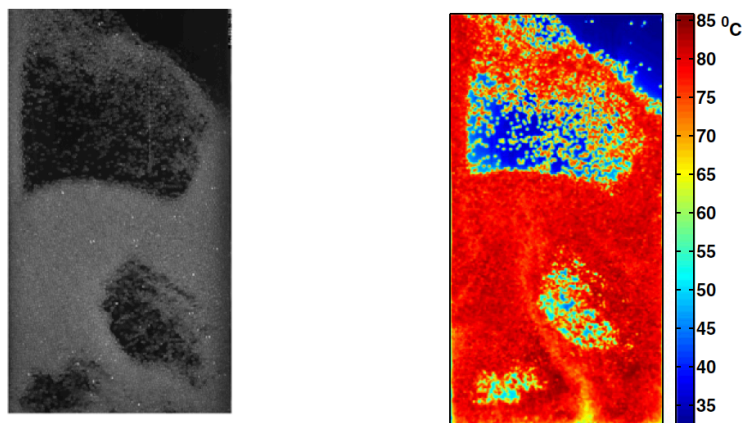


FIGURE 1.18: Images instantanées d'un lit fluidisé quasi 2D anisotherme. A gauche : image donnée par une caméra rapide visuelle où le fond du système est noir et les particules grises. A droite : image infrarouge. Issu de [226].

infrarouge. Des technologies non-intrusives plus poussées permettent l'étude de systèmes 3D sans accès visuel direct. Parmi elles, la méthode de suivi de particules par émission de positrons (en anglais "Positron Emission Particle Tracking" ou PEPT) développée au Positron Imaging Centre de l'Université de Birmingham dans les années 90 permet de suivre la trajectoire d'une, ou récemment [148], plusieurs particules traceurs dans un écoulement dense afin d'en tirer des champs de vitesse de particules. Parmi les premiers travaux effectués à l'aide de cette technique, on trouve l'étude d'un tambour rotatif [224]. Par la suite son application a pu s'étendre à l'étude d'un lit fluidisé dense isotherme contenant environ 10M de particules [102]. Son principe est le suivant : certains radioisotopes se désintègrent en émettant un positron, antiparticule de l'électron (désintégration β^+). Sur une distance très courte, ce positron s'annihile avec un électron libre pour émettre deux photons gammas dans des directions opposées, qui peuvent ensuite être détectés par les capteurs idoines. La haute pénétrabilité des rayons gamma leur permet même de passer à travers des parois en acier. En pratique, pour l'étude des lits fluidisés, une ou plusieurs particules du milieu sont préalablement prélevées et enduites de radioisotopes dont l'activité est connue avant d'être réintégrées au lit. Le domaine médical est le premier à avoir expérimenté cette technique initialement baptisée tomographie par émission de positron (en anglais "Positron Emission Tomography" ou PET) pour l'imagerie. Pour cet outil de diagnostic les radioisotopes sont directement injectés dans l'écoulement.

L'imagerie par résonance magnétique nucléaire (en anglais "Nuclear Magnetic Resonance" (NMR) "Imaging" (MRI)) est une autre forme de technique de mesure non-intrusive, elle aussi initialement destinée à l'étude des fluides. Son avantage de pouvoir fournir des mesures dans un milieu multiphasique optiquement opaque en a fait une méthode privilégiée pour l'étude des milieux granulaires [190] [216]. De plus elle ne fait intervenir aucune forme de radioactivité, mais des protons (en général ceux des atomes d'hydrogène), qui sont les particules les plus aptes à être utilisés pour la MRI, à la fois grâce à leur haute sensibilité et à leur abondance dans la nature. Un spectromètre muni d'un puissant aimant ($1 \sim 20\text{T}$ contre $40 - 60\mu\text{T}$ pour le champ magnétique terrestre) est utilisé afin de permettre la résonance des protons à une fréquence définie, dépendant du champ magnétique employé ainsi que de facteurs moléculaires. La MRI est capable de fournir des mesures de concentration, de coefficients de diffusion moléculaire, et des champs de vitesses en 2D et 3D [330]. Malgré tout, les signaux NMR sont

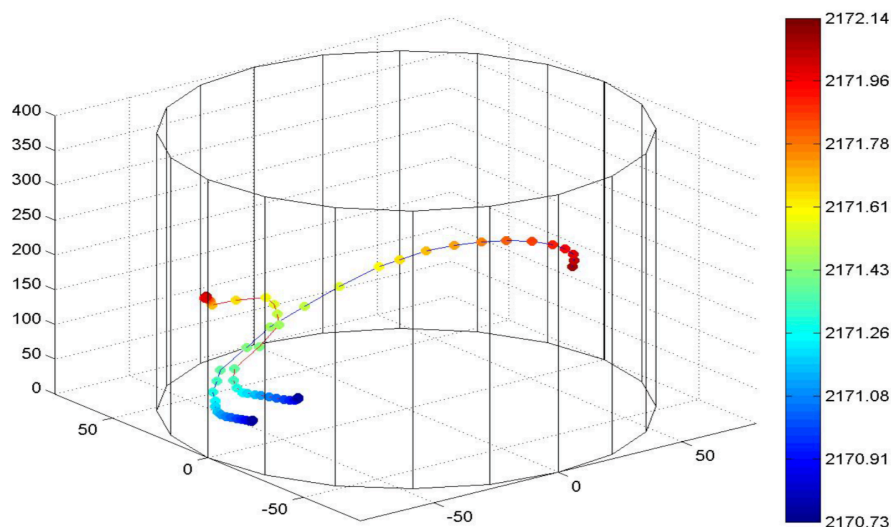


FIGURE 1.19: Trajectoires de deux traceurs (particules de polyéthylène de $600\mu\text{m}$) suivies par la méthode de suivi de particules par émission de positrons (en anglais "Positron Emission Particle Tracking" ou PEPT) dans un réacteur de 15cm de diamètre. La colorisation indique le temps de séjour. Issu de [148].

difficiles à obtenir sur des échantillons purement solides : les travaux de Nakagawa *et al.* [216] mettaient par exemple en jeu des graines de moutarde contenant de l'huile. C'est cette dernière qui permettait la résonance. En utilisant aussi des graines, de coquelicot cette fois, Harms *et al.* [131] ont démontré l'efficacité de la MRI pour l'étude d'un lit fluidisé 3D (voir figure 1.20). La méthode MRI n'est donc pas universellement applicable aux milieux granulaires [330].

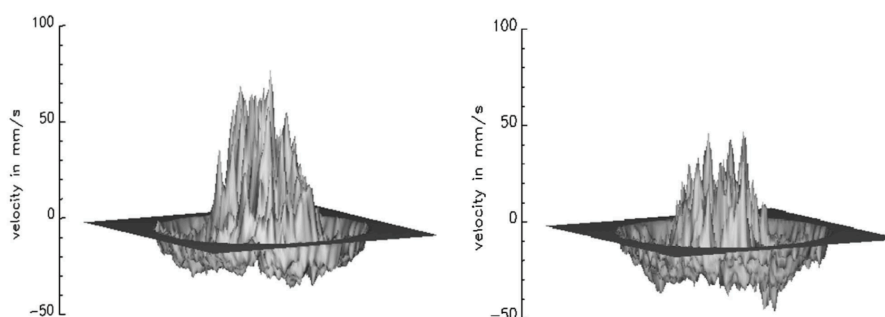


FIGURE 1.20: Tracé de surfaces 3D de vitesses de particules obtenues par résonance magnétique nucléaire du proton dans un lit fluidisé de graines de coquelicot. À gauche, partie haute du lit, à droite, partie basse du lit. Une zone de recirculation annulaire est mise en évidence par les vitesses de particules ascensionnelles positives au centre du réacteur et négatives près des parois. Issu de [131].

La microscopie électronique à balayage (en anglais "Scanning Electron Microscopy" ou SEM) utilise le principe des interactions électrons-matière afin de produire des images 3D en haute résolution de la surface d'un échantillon, qui peuvent par exemple servir à caractériser finement des échantillons de particules, comme le montre la figure 1.21.

Dans les cas 2D, les matériaux granulaires offrent une opportunité particulière pour l'observation expérimentale, notamment si les particules sont faites d'un matériau photoélastique, c'est-à-dire devenant biréfringent (la lumière s'y propage de façon anisotrope) sous l'effet d'une contrainte extérieure de pres-

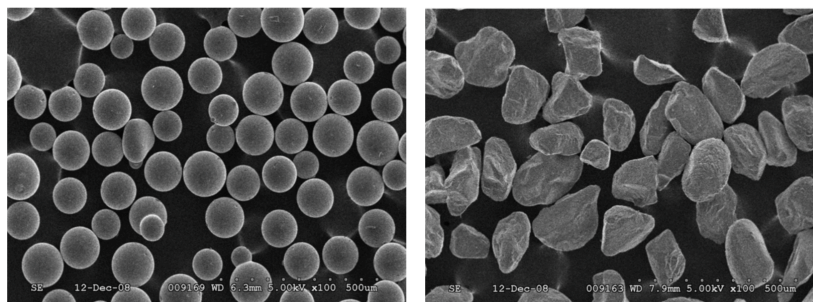


FIGURE 1.21: Images obtenues à partir de microscopie électronique à balayage (en anglais "Scanning Electron Microscopy" ou SEM). A gauche : billes de verre. A droite : grains de sable. La taille caractéristique des solides est ici de quelques dizaines à quelques centaines de microns. Issu de [327].

sion. La photoélasticimétrie est une méthode optique permettant d'utiliser les propriétés photoélastiques des matériaux. Elle consiste en l'analyse de la façon dont la polarisation de la lumière est transformée après le passage à travers le matériau. Ce changement de polarisation s'explique par le fait que les deux composantes de polarisation du champ électrique subissent un retard l'une par rapport à l'autre. Ce retard est directement relié aux contraintes présentes dans le matériau. On peut donc mesurer les contraintes grâce à cette modification de la polarisation. Le retard entre les deux composantes de l'onde correspond à un déphasage qui dépend de la longueur d'onde, c'est-à-dire de la couleur. C'est pourquoi les images obtenues avec de la lumière blanche présentent des irisations colorées. Lorsque les particules sont placées entre des polariseurs, elles exhibent des bandes plus ou moins sombres selon la contrainte qu'elles subissent. Les premières investigations expérimentales à l'aide de cette méthode datent de 1950 [314], qui a été améliorée depuis pour fournir un nombre croissant d'informations quantitatives locales dans les milieux compacts [74][26]. Les études obtenues montrent que pour ce type de systèmes soumis à une contrainte, il existe des réseaux de grains parfois appelés chaînes, qui peuvent être isotropes ou anisotropes, qui supportent la majorité des forces de contact du système. Des exemples de chaînes de forces sont illustrés sur la figure 1.22.

Finalement, une connaissance détaillée des écoulements granulaires est cruciale pour la conception, le dimensionnement, l'optimisation, mais aussi le diagnostic des procédés qui les mettent en jeu. Malgré l'impressionnante quantité de publications liées à des investigations expérimentales sur le sujet des phénomènes de transport dans les lits fluidisés, on peut remarquer que les configurations réalistes restent globalement hors de portée de notre observation. Les dispositifs étudiés sont souvent des lits quasi-2D pour permettre l'utilisation de techniques optiques, alors que les sondes placées *in situ* modifient, du moins localement, l'écoulement qu'elles cherchent à mesurer.

Grâce à l'augmentation des moyens de calcul (performances des processeurs, apparition des machines parallèles etc.) les années 90 ont vu l'émergence d'analyses par simulation numérique pour la dynamique des fluides (en anglais "Computational Fluid Dynamics" ou CFD), notamment en milieu granulaire, qui depuis ont suscité une attention considérable. La demande en outils de simulations toujours plus efficaces et rapides de la part de l'industrie a également grandement contribué à leur développement. La modélisation numérique apparaît comme un outil alternatif pour l'étude fondamentale de différents aspects des écoulements multiphasiques, mais aussi pour réaliser des analyses de sensibilité aux différents paramètres et tester différentes configurations et conditions opératoires à moindre coût comparé aux méthodes expérimentales, sous condition que celle-ci possède une capacité prédictive suffisante.

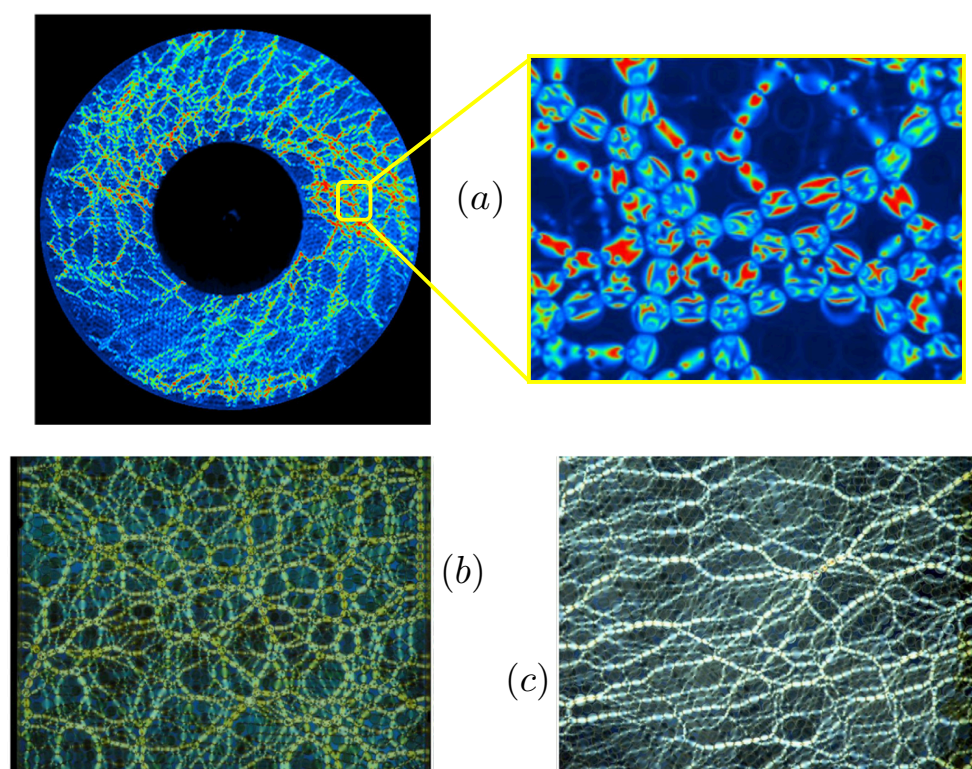


FIGURE 1.22: Images 2D obtenues par photoélasticimétrie. Réponse de grains photoélastiques à un cisaillement de Couette avec un zoom (a). L'image est colorisée, si bien que les contraintes les plus fortes sont subies par les grains rouge brillant tandis que les grains bleu sombre supportent des forces plus faibles. Disques photoélastiques compressés de façon isotrope montrant un réseau de forces à chaînes courtes entrelacées (c) et anisotrope exhibant cette fois de longues chaînes de force (d). Issu de [26].

1.3 Différents niveaux de résolution

Malgré ces avantages, la construction de modèles prédictifs fiables pour l'étude de système à grande échelle reste sérieusement entravée par le manque de compréhension des fondamentaux des écoulements granulaires denses, et l'expérimentation reste le seul moyen d'étude envisageable dans bien des configurations. La difficulté majeure réside dans la variété d'échelles mises en jeu (voir figure 1.23) : les structures hydrodynamiques les plus grandes ont le même ordre de grandeur de taille que le système dans lequel elles évoluent, donc sont de l'ordre du mètre ou la dizaine de mètres. Il peut s'agir de bulles de gaz remontant à la surface d'un lit fluidisé, de boucles de recirculation, ou d'agglomérats de particules solidaires (en anglais "clusters"). Cependant l'apparition de ces structures ainsi que leur dynamique sont directement influencées par les détails des interactions particules-particules et gaz-particule, qui interviennent à des échelles de l'ordre du millimètre, voire du micromètre.

1.3.1 L'échelle micro

Pour décrire la dynamique des phases fluide et solide, différents types d'approches pour la modélisation numérique ont été développées, chacune plus ou moins dédiée à une échelle particulière de résolution. L'échelle de résolution la plus fine est appelée échelle micro. Les équations de Navier-Stokes sont ici résolues de façon directe pour la phase fluide (en anglais "Direct Numerical simulation" ou DNS),

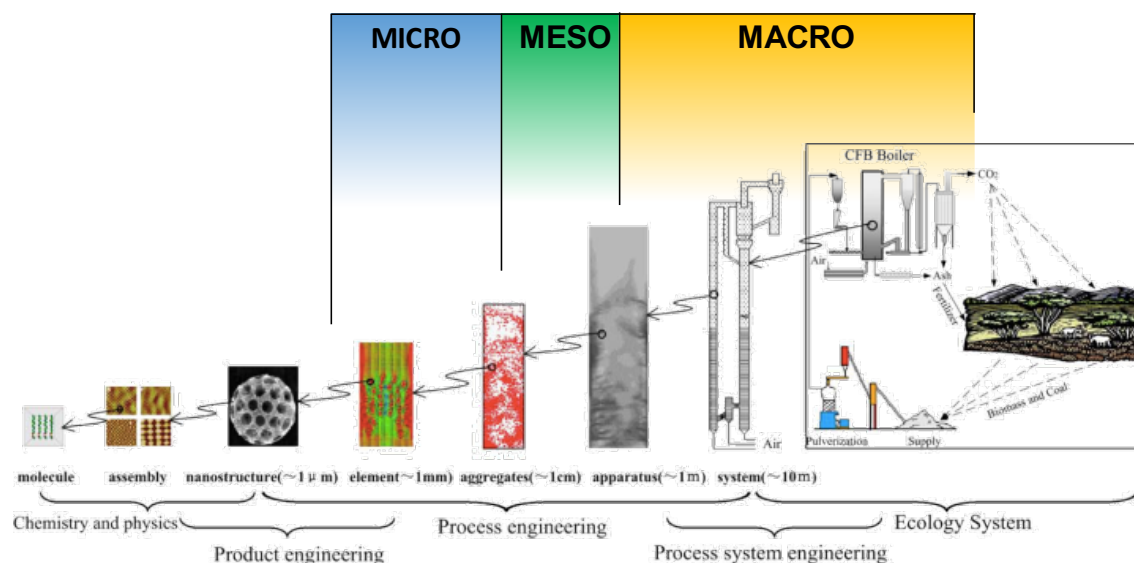


FIGURE 1.23: Décomposition des trois grands types d'échelles pour la modélisation des milieux granulaires ; micro, méso et macro, rapportées à la gamme d'échelles physiques rencontrées. Adapté de [176].

tandis que les trajectoires des particules sont calculées individuellement de façon lagrangienne grâce aux lois de Newton. Cette approche locale est qualifiée de simulation de particules résolues (en anglais "Particle Resolved Simulation" ou PRS). Ce niveau de description impose que le maillage pour la phase gazeuse soit plus fin que la plus petite échelle spatiale caractéristique de l'écoulement. Les particules ont donc systématiquement une taille plus importante que celles des mailles (voir figure 1.24), et plusieurs types de méthodes permettent de prendre en compte leur présence au sein du fluide via l'imposition de condition de non-glissement sur leur surface. On pourra citer les maillages qui suivent explicitement les contours des particules (en anglais "body fitted"), tel que le montre la figure 1.25. Cette technique nécessite, dans le cas d'objets mobiles, un remaillage constant du domaine, avec des contraintes qui peuvent s'avérer fortes dans le cas des lits fluidisés denses, où le fluide peut s'écouler dans des interstices très étroits, ce qui peut représenter un coût de calcul important. L'emploi de maillages non-structurés est nécessaire pour épouser au mieux les contours géométriques des objets. Voir les travaux de Maury [196].

A l'inverse, des méthodes fonctionnant avec un maillage fixe permettent de s'affranchir des contraintes précédentes, y compris pour des particules se déplaçant. Ces méthodes sont également appelées méthode de domaine fictif (en anglais "Fictitious Domain" ou FD) car ici le maillage occupe le volume entier du domaine, y compris celui occupé par les particules. Par voie de conséquence, les équations de Navier-Stokes sont résolues dans l'ensemble du domaine. Les grandeurs fluides définies aux noeuds situés dans le volume d'une particule sont alors fictives ou rapportées à celles de la particule, selon le type de méthode employée. Des maillages structurés (ou cartésiens) qui facilitent l'implémentation des schémas numériques peuvent être utilisés. L'utilisation de cette technique requiert l'implémentation d'une méthodologie spécifique afin de réaliser les échanges, par exemple de quantité de mouvement, entre les deux phases. On peut alors utiliser, afin de contraindre la vitesse du fluide aux noeuds situés dans les volumes des particules, entre autres :

- Les méthodes de frontières immergées (en anglais "Immersed Boundary Method" ou IBM), dans lesquelles un terme de forçage est ajouté dans l'écriture des équations de Navier-Stokes pour le

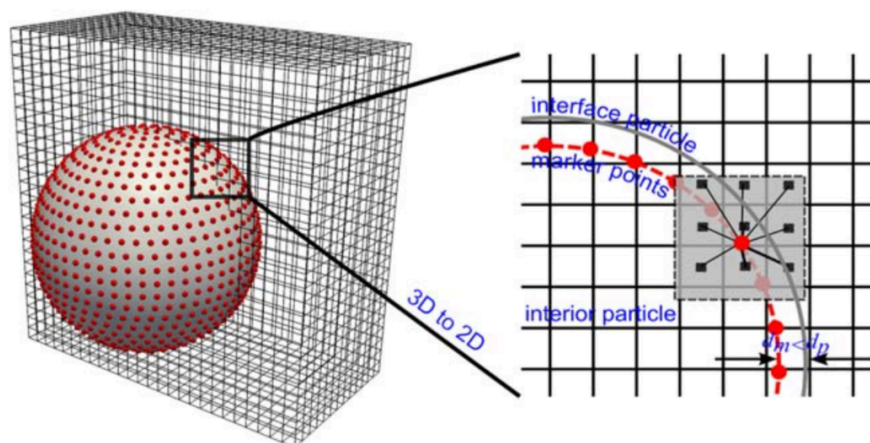


FIGURE 1.24: Schéma explicatif des méthodes IBM : représentation d'une particule immergée dans une grille Cartésienne grâce à un ensemble de marqueurs disposés à sa surface (à gauche), interpolation et extrapolation de quantités entre un marqueur et les noeuds de la grille (à droite). Issu de [293]

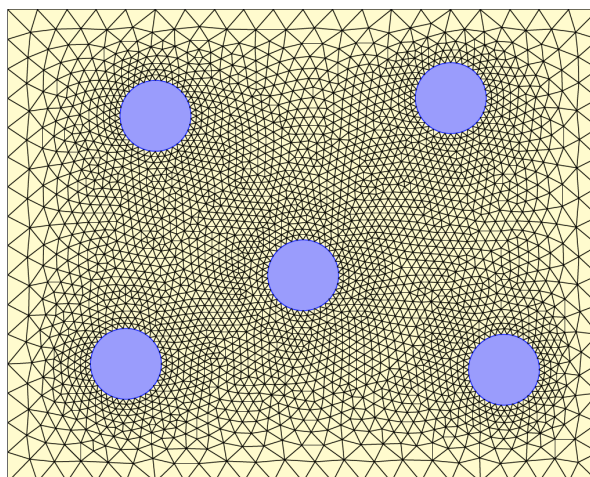


FIGURE 1.25: Maillage non-structuré 2D pour le fluide s'adaptant autour de la surface de particules. Issu de [43].

fluide aux voisinages des interfaces avant leur discrétisation. Cette idée a été largement reprise et aujourd'hui nombreuses sont ses variantes. Son utilisation pour des écoulements contenant des particules de taille finie entraîne des erreurs telles que des fuites numériques de fluide à travers les interfaces [328] causées par la violation locale de la condition de divergence nulle [231].

- Les méthodes de pénalisation, qui sont basées sur une reformulation du tenseur des contraintes visqueuses permettant d'annuler le taux de déformation dans le volume occupé par les particules. La viscosité du fluide est localement fortement augmentée pour contraindre le mouvement du fluide. Des contributions de compression, cisaillement, rotation et élongation peuvent être introduites [50].
- Les méthodes de multiplicateurs de Lagrange distribués (en anglais "Distributed Lagrange Multiplier/Fictitious Domain" ou DLM-FD), qui consistent à imposer la condition de corps rigide

au sein de la particule en imposant la condition d'égalité des vitesses fluide et solide à l'aide de multiplicateurs de Lagrange [118]. Il n'est donc pas nécessaire d'ajouter directement de termes de forçage dans les équations de Navier-Stokes. L'inconvénient des fuites fluides est ici limité, notamment par le fait que la contrainte est répartie sur un nombre plus important de noeuds.

- Les méthodes de Boltzmann sur réseau (en anglais "Lattice Boltzmann Method" ou LBM), qui sont basées sur la dérivation des équations de Navier-Stokes à partir de l'équation de Boltzmann, qui décrit la cinétique des gaz. Les grandeurs fluides sont décrites via des fonctions de distribution et la présence des particules est modélisée à l'aide d'une méthode de réflexion (en anglais "Bounce Back"), dans laquelle la fonction de distribution se propageant vers un noeud appartenant à une particule est réfléchi vers le noeud d'origine [174]. Pour employer cette technique en particulier, on utilise fréquemment le modèle de Bhatnagar-Gross-Krook ou BGK, qui fournit un équivalent des lois de conservation de la masse et de transport de la quantité de mouvement [306].

Les tailles de mailles caractéristiques requises par le formalisme microscopique des simulations PRS en font un outil de précision : aucune loi de fermeture n'est nécessaire puisque les conditions de non-glissement, de température et de concentration sont localement imposées au fluide à la surface des particules. Les simulations PRS sont un point clé dans les approches multi-échelles, car elles permettent de mesurer les échanges, de quantité de mouvement notamment, entre les deux phases. Elles peuvent donc être utiles à la création ou la validation de modèles destinés aux approches à plus grandes échelles lorsque les solutions analytiques manquent, tels que les modèles de lois de traînée ou d'échange de chaleur. Néanmoins son application se limite en général à la simulation d'écoulements comprenant au plus quelques milliers de particules en raison de son coût de calcul important.

1.3.2 L'échelle macro

A l'opposé de la modélisation microscopique associée à la résolution directe de l'écoulement autour de particules discrètes, la modélisation à l'échelle macro consiste en une approche purement eulérienne des deux phases. Les phases sont alors considérées comme continues et s'interpénètrent [116]. Cette approche à deux fluides est dite Euler-Euler (ou EE) ou Approche à Deux Fluides (en anglais "Two-Fluid Model ou TFM). Bien que les méthodes de modélisation numérique de fluides monophasiques soient déjà connues en CFD, dégager un modèle fiable pour décrire un solide dispersé à la manière d'un fluide nécessite un développement théorique plus important. Les définitions de viscosité et de tenseur des contraintes, qui contient une représentation des interactions particule-particule, posent notamment un certain nombre de questions pour la phase solide. Parmi les approches retenues on pourra citer :

- la reprise du concept de turbulence de la phase gaz (modèle $k-\epsilon$) où k représente la température granulaire (liée aux fluctuations de vitesses de particules solides), et ϵ une grandeur dissipative [91].
- le développement d'une théorie cinétique des écoulements granulaires (en anglais "kinetic theory of granular flows" ou KGTF), se basant sur l'équation de Boltzmann pour le transport de la fonction de distribution des vitesses de particules. Cette équation peut être intégrée afin d'obtenir les équations de transport de chaque moment de la fonction de distribution ; le moment d'ordre 0 correspondant à la densité du nombre de particules, le moment d'ordre 1 à leur vitesse moyenne, celui d'ordre 2 à leur agitation etc. Elle propose une généralisation des équations de Navier-Stokes pour la phase solide, où la viscosité et le tenseur des contraintes pour les particules sont obtenues en résolvant conjointement une équation de transport de l'agitation des particules appelée température granulaire [83].

L'approche Euler-Euler montre tout son potentiel lorsqu'elle est appliquée aux cas pratiques industriels, car c'est la moins coûteuse. En effet elle repose sur une description statistique de la phase solide dispersée, et son coût s'estime en fonction de la quantité d'éléments du maillage plutôt que sur la quantité de particules représentée, qui ne possède pas réellement de limite. Les schémas numériques pour l'avancement en temps de chaque phase sont donc analogues. L'inconvénient majeur lors de l'emploi de ce type d'approche macroscopique est précisément lié au fait que l'existence individuelle des particules est effacée par un procédé de moyenne. Ces dernières apparaissent dans les équations moyennées à travers des termes qu'il faut fermer. Ce formalisme repose sur l'hypothèse sous-jacente d'existence d'une séparation d'échelle - typiquement ; la taille de maille est beaucoup plus grande que les particules, mais aussi beaucoup plus petite que la taille caractéristique des structures hydrodynamiques macroscopiques de l'écoulement. Les maillages employés doivent ainsi respecter des contraintes, qui par exemple peuvent être fonctions des tailles caractéristiques des inhomogénéités présentes dans l'écoulement (clusters de particules etc.) comparées aux inhomogénéités permises par le modèle [306]. La figure 1.26 présente des images de fractions volumiques de solide issues d'une simulation utilisant le formalisme du TFM en utilisant une grille de plus en plus raffinée. En raffinant le maillage, des structures de plus en plus fines sont résolues, et certaines quantités statistiques obtenues par intégration sur tout le domaine, telles que la vitesse de glissement entre les deux phases, ne montrent une convergence en maillage que pour des tailles de mailles de l'ordre de quelques (≈ 10) diamètres de particules [147], ce qui illustre une difficulté inhérente à l'utilisation du TFM. Un autre inconvénient de cette famille d'approches est la sensibilité du pas de temps employé au coefficient normal de restitution des particules, qui requiert des méthodes numériques alternatives pour être pallié [306].

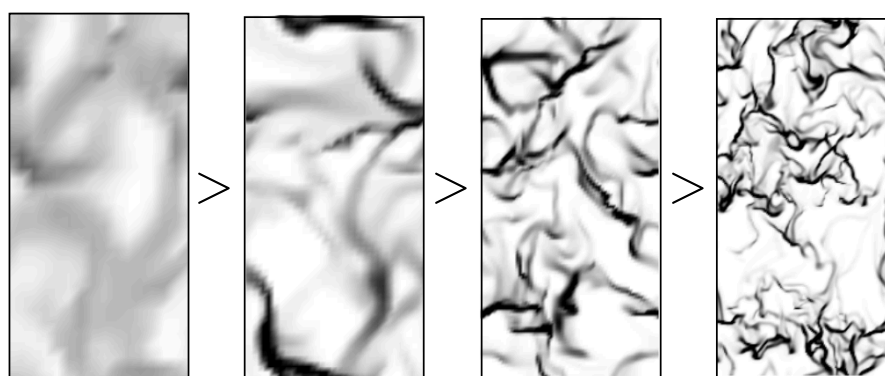


FIGURE 1.26: Simulation transitoire d'une suspension de particules réalisée à l'aide du logiciel MFIX [123] dans le formalisme TFM montrant de nombreuses hétérogénéités de fraction volumique de solide. Les zones sombres sont les plus denses en particules. De gauche à droite, on raffine le maillage. Des structures de plus en plus fines sont exhibées. Issu de [147].

1.3.3 L'échelle meso

Les simulations à l'échelle mésoscopique se placent à un niveau de modélisation intermédiaire entre les simulation PRS et les simulations EE, comme l'illustre la figure 1.27, et trouvent leur origine dans les méthodes de dynamique moléculaire (en anglais "Molecular Dynamics" ou MD) développées dans les années 50 par Alder & Wainwright [11]. Elles consistent en une modélisation Eulérienne de la phase fluide et une modélisation Lagrangienne de la phase solide, c'est pourquoi ce formalisme est aussi pré-

sent dans la littérature sous le nom Euler-Lagrange ou EL, ou encore Méthode aux éléments discrets (en anglais "Discrete Element Method" ou DEM-CFD). Les systèmes granulaires tels que les lits fluidisés étant hautement instationnaires, la phase fluide est classiquement modélisée dans le cadre de la LES (Large-Eddy Simulation), tout comme dans le TFM. Au sein de cette phase continue, une équation de conservation de la masse et de transport de la quantité de mouvement, qui prennent toutes deux en compte la présence des particules via un terme localement moyenné de fraction volumique de fluide, sont résolues. L'étape de prise de moyenne spatiale implique que les grandeurs fluides soient définies sur une grille dont les éléments sont plus grands que les particules, typiquement d'un facteur $\mathcal{O}(10)$. L'effet des particules sur le fluide est considéré comme un terme source dans le transport de la quantité de mouvement, tandis que l'effet du fluide sur les particules est modélisé par des forces hydrodynamiques. Ces forces hydrodynamiques prennent place dans le bilan de quantité de mouvement appliqué individuellement à chaque particule afin de calculer leur trajectoire au cours du temps. C'est naturellement dans le cadre de la LES que les travaux présentés prennent place.

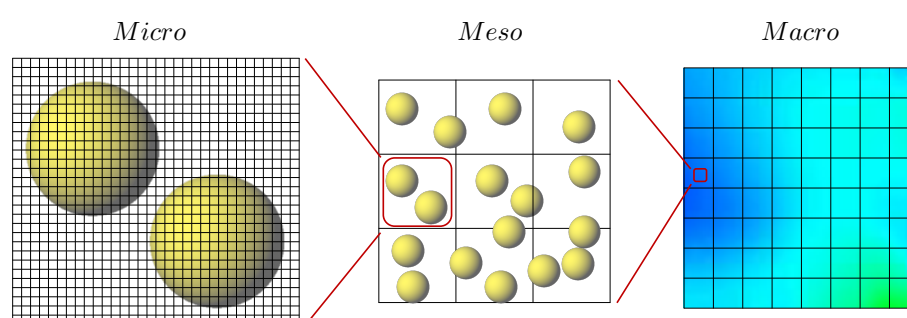


FIGURE 1.27: Échelles de modélisation fréquemment rencontrées pour la simulation des écoulements granulaires.

Le formalisme Euler-Lagrange offre différentes possibilités de couplage entre les phases fluide et solide illustrées par la figure 1.28, adaptables selon le type de régime rencontré :

- le "one-way coupling" consiste à considérer seulement les forces que le fluide applique sur les particules. Cela induit que les particules n'influencent pas le fluide, ni ne s'influencent entre elles. Ce type de modélisation est adapté pour les écoulements dilués où le libre parcours moyen des particules est grand devant leur taille.
- Le "two-way coupling" consiste à considérer à la fois l'influence du fluide sur les particules, mais aussi celles des particules sur le fluide. Dans ce régime, que l'on peut toujours qualifier de dilué, la présence des particules peut modifier de façon notable le spectre d'énergie turbulente du fluide : pour un même volume de solide dans le système, dans les cas où le temps de réponse des particules est plus faible que le temps de retournement des tourbillons, les modes à faibles longueurs d'onde du spectre d'énergie turbulente sont modifiés dû à l'augmentation du taux de dissipation de l'énergie [93]. Au contraire, dans les cas où le temps de réponse des particules est plus grand que le temps de retournement des tourbillons, des phénomènes d'induction de tourbillons par les particules viennent injecter de l'énergie dans le spectre [92].
- Pour l'étude d'écoulements fluide-particules denses, tels que les lits fluidisés, un couplage fort est recommandable, dit "four-way coupling". En plus de la rétroaction des particules vers le fluide, les collisions inter-particulaires sont ici prises en compte. Les phénomènes d'agglomération ou de répulsion de particules, parmi d'autres, peuvent alors être observés. C'est donc le cadre du four-way coupling que se situent les travaux présentés.

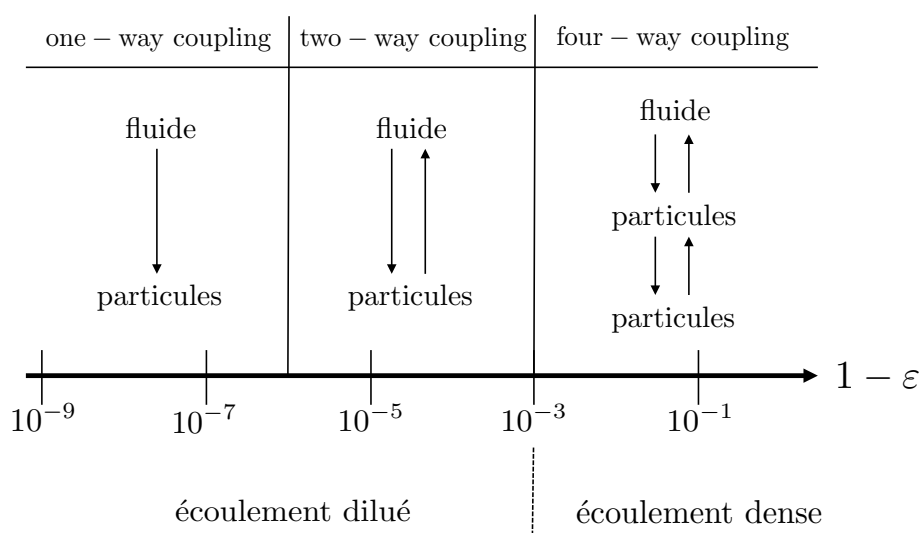


FIGURE 1.28: Différents degrés de couplage illustrés en fonction de la fraction volumique de solide. Plus cette dernière est importante, plus le libre parcours moyen des particules se rapproche de leur diamètre. Basé sur [92].

1.4 Objectifs de la thèse et plan du manuscrit

La prédiction du comportement des lits fluidisés, notamment réactifs, nécessaire au design des unités rencontrées dans l'industrie, repose en grande partie sur la caractérisation des bulles en ascension dans le lit [170]. Ces bulles pilotent en effet l'hydrodynamique dans le milieu, mais aussi les transferts de chaleur et de masse dans les systèmes en nécessitant l'intervention. Il est alors nécessaire de prédire leur taille, leur nombre, leur fréquence, leur vitesse etc. Les interactions entre les différents phénomènes physiques mis en jeu rendent cette prédiction complexe et difficilement généralisable. Le "Bubble Model Assemblage" proposé par Kato & Wen [156], lui-même une amélioration du "Bubbling bed model" de Kunii & Levenspiel [170], compte en tout huit hypothèses fondamentales, plus une sur la taille des particules utilisées. Dans les cas réactifs, les modèles hydrodynamiques doivent également être couplés à des modèles cinétiques pour prédire les réactions chimiques, allant du mécanisme à deux étapes [235], jusqu'à plusieurs milliers [240]. Des modèles différents sont même parfois utilisés conjointement afin de décrire un même système lorsque celui-ci est composé de zones assez distinctes où les phénomènes majoritaires diffèrent. C'est parfois le cas par exemple dans les systèmes fluidisés à combustion, où plusieurs régimes de combustion peuvent coexister. Un modèle peut alors être adapté pour l'étude de la zone dense en particules, tandis qu'un autre peut l'être pour caractériser la zone d'envol plus diluée [85][84]. Les travaux fondateurs de Baskakov & Makhorin [21] ont ainsi mis en lumière une température critique au-dessus de laquelle la conversion totale d'un mélange air-gaz naturel est possible au sein d'un lit fluidisé. Ils ont montré expérimentalement qu'en-dessous de cette température, les bulles formées dans le lit et chargées en combustible éclatent en atteignant sa surface, où les réactions de combustion ont majoritairement lieu, conduisant à des profils de température fortement non-uniformes et une diminution de l'efficacité de la conversion. L'éclatement de ces bulles peut même se révéler dangereuse [85]. Quelques années plus tard, Dennis *et al.* [79] ont montré la dépendance de la conversion avec la vitesse de fluide, la richesse du mélange, la hauteur de lit, mais aussi avec les caractéristiques du système d'injection du carburant en étudiant la combustion du propane. Ils ont conclu que la combustion n'apparaît pas au sein du lit car

les espèces chimiques radicalaires sont inhibées par la phase solide. Celle-ci, néanmoins, reste possible dans les bulles de tailles importantes ($\gtrsim 30\text{mm}$), où la formation des radicaux peut excéder leur taux de disparition. Des travaux plus récents dans ce domaine montrent encore qu'en-dessous de la température critique, un lit fluidisé exhibe un fort bruit acoustique [340], des pics de production de NO [20], et des fluctuations de pression bien supérieures à la fréquence caractéristique de bullage [235]. Les premières observations ont été plusieurs fois réitérées au cours d'études paramétriques expérimentales [85] [84]. Pour les applications comportant des catalyseurs hétérogènes, il peut néanmoins être nécessaire de travailler en-dessous de la température provoquant leur désactivation, qui se situe en-deçà de la température critique. La grande majorité des études citées porte sur des configurations prémélangées. On pourra néanmoins citer des travaux traitant de cas non-prémélangés, démontrant de nombreux avantages pour la combustion en lit fluidisé, tels ceux de Wang *et al.* [317]. Lors d'une opération de dimensionnement d'une unité telle qu'un lit fluidisé commercial, qui passe généralement par des phases de test sur des systèmes à plus petite échelle, de nombreuses hypothèses sont formulées sur la façon dont certaines variables réagissent à un changement d'échelle. Ces lois d'échelles sont clairement non-triviales, en particulier pour les systèmes multiphysiques, ce qui peut provoquer des surcoûts, des rendements bien plus faibles qu'escompté, voire des incidents lors de leur mise en service [250]. Aujourd'hui encore, les mécanismes en jeu dans de tels systèmes sont mal connus à l'échelle du laboratoire, voire quasi inconnus dans les systèmes de taille industrielle [202].

L'apport de la simulation numérique dans le domaine des écoulements granulaires industriels, y compris en conditions non-isothermes, réactives ou avec changement de phase, n'est plus à démontrer. On pourra citer parmi la littérature des travaux sur l'injection liquide dans un lit fluidisé anisotherme [222], la production d'uranium hexafluoride dans un lit fluidisé [161], l'étude d'un réacteur horizontal agité (pièces mobiles) [30], celle d'une unité de CLC de 120kW [130], ou encore celle de la polymérisation de l'éthylène [119]. La plupart de ces travaux utilisent avec succès le formalisme Euler-Euler, dans lequel la phase solide est modélisée à la manière d'une phase fluide, ce qui permet des temps de retour abordables. Cette économie se fait au prix de l'ajout de nombreux modèles de fermeture, les particules n'étant pas discrétisées spatialement. Le formalisme Euler-Lagrange permet au contraire cette discrétisation, et donc de rendre compte de façon explicite des contacts particules-particules et particules-paroi, ce qui engendre des coûts de calcul plus élevés. L'attention reçue par cette méthode de modélisation des écoulements granulaires a cependant été grandissant au cours des dernières décennies, comme le montre la figure 1.29, ce qui a permis l'amélioration des codes de calcul au travers de nombreuses avancées tant sur le plan de la complexité que celui des performances [60].

Il est aujourd'hui difficile d'entrevoir un futur proche où le formalisme Euler-Lagrange pourrait devenir l'outil fondamental pour l'étude de systèmes industriels. Les efforts vers l'amélioration de cette approche devraient néanmoins être maintenus parallèlement à ceux tournés vers les modèles à plus grande échelle telle que les modèles Euler-Euler. Il s'agit de pouvoir comparer les différents outils existants sur des configurations identiques afin de vérifier les hypothèses nécessairement formulées par les modèles à plus grande échelle, pour parvenir à leur amélioration, ou simplement à renforcer la confiance qui leur est accordée. Durant les travaux de thèse présentés dans ce manuscrit, un solveur granulaire de type Euler-Lagrange a été implémenté dans le code YALES2 développé au laboratoire CORIA (Complexe de Recherche Interprofessionnel en Aérothermochimie). Ces travaux ont été effectués dans le cadre du projet MORE4LESS (Modelling of reactive particulate flows for low energy sustainable processes) [7] coordonné par l'IFP-EN (France) et financé par l'ANR (Agence Nationale pour la Recherche). Ce projet est une collaboration entre les laboratoires de l'IFP-EN, chargé d'effectuer des comparaisons aux

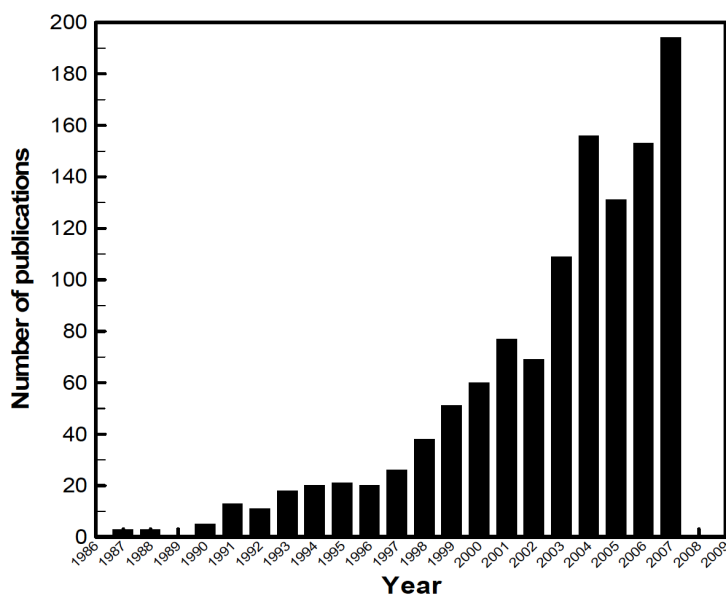


FIGURE 1.29: Nombre de publications liées à la simulation de particules discrètes entre 1987 et 2007 calculé par l’outil Web of Science avec les mots clés suivants : discrete element method/model, distinct element method/model, discrete particle simulation/method/model, et granular dynamic simulation. Issu de [339].

échelles micro et méso dans un code maison, du CORIA chargé du développement d’un outil méso présenté dans ce manuscrit, et de l’IMFT opérant des comparaisons entre le code méso précédent et un code macro. YALES2 est un code volumes finis de LES-DNS basé sur des maillages non-structurés [211]. Il permet la résolution des équations de Navier-Stokes à bas nombre de Mach pour la simulation d’écoulements turbulents réactifs et utilise une méthode de projection à pas fractionnés pour les écoulements à densité variable [233]. YALES2 est spécifiquement dédié à la résolution de ces équations sur des machines massivement parallèles sur des maillages comprenant de l’ordre du milliard de cellules grâce à un solveur linéaire optimisé [191].

La littérature fait d’ores-et-déjà état de plusieurs solveurs DEM/CFD commerciaux ou open-source capables de simuler des systèmes de type lits fluidisés anisothermes, ou des systèmes plus complexes encore. Parmi eux, on pourra citer les codes parallèles NGA [81], MFIX-DEM [123], ou Peligriff [313], tous trois capables de simuler des écoulements réactifs sur des maillages cartésiens. D’autres solveurs fonctionnant sur des maillages non-structurés sont construits sur la base d’un couplage entre un solveur spécifiquement dédié à la phase fluide et un autre dédié à la phase solide, tels que OpenFoam®+LIGGGHTS® [121] et Fluent®+EDEM CFD® [67]. La plateforme Barracuda VR® [225] utilise un formalisme proche de la discrétisation individuelle de la DEM, mais à l’échelle de nuages de particules, appelé MP-PIC [273]. L’utilisation de ce formalisme requiert l’utilisation de modèles de fermeture proches de ceux utilisés dans les modèles Euler-Euler pour représenter les interactions entre particules au sein des nuages. Les codes cités ont permis de simuler des systèmes de lits fluidisés, majoritairement dans des configurations 2D [325][219][184][248][337][169][114]. Les études de Li *et al.* [177] sur trois lits fluidisés circulants (isothermes) ont clairement démontré que les simulations 2D ne pouvaient être utilisées de façon prédictives, contrairement aux simulations 3D. À la connaissance de l’auteur cependant, la littérature ne montrent que peu d’exemples 3D de lits fluidisés anisothermes réactifs. Mohseni

& Peters [208] ont utilisé OpenFoam® pour étudier la conversion de quelques particules de biomasse. Goyal *et al.* [124] et Capecelatro *et al.* [57] ont utilisé NGA [81] pour étudier l'influence des clusters dans un riser présentant des réactions chimiques hétérogènes en négligeant les transferts thermiques. Li *et al.* [178] ont simulé un lit fluidisé présentant une adsorption exothermique de CO_2 , néanmoins les espèces chimiques ne semblent pas explicitement transportées par le modèle. Limtrakul *et al.* [181] ont simulé un lit fluidisé catalytique 3D comprenant 40000 particules en exploitant l'axisymétrie du domaine pour se ramener à un cas 2D. Tabib *et al.* [292] imaginent une méthodologie permettant d'étudier un lit 3D statique pour la CLC, consistant à ne simuler que deux segments représentatifs de l'ensemble du système. Les simulations menées ne font cependant pas explicitement apparaître de réactions chimiques. Banerjee & Agarwal [19] utilisent Ansys Fluent et réalisent dans une simulation 3D des réactions hétérogènes isothermes entre un catalyseur métallique et du méthane gazeux. Bellan *et al.* [28] ont étudié un lit fluidisé de 5kW récupérant l'énergie solaire pour la gazéification, sans réaction chimique.

Les maillages non-structurés sont moins présents dans la littérature, pourtant ils permettent davantage de maîtrise de la taille de maille locale, et également une description plus souple des parois du domaine de calcul (maillages body-fitted) pour traiter les contacts particules-paroi de façon explicite, sans avoir recours à des méthodes de type cut-cell [56]. Ce calcul explicite permet de retourner une valeur exacte de la longueur de pénétration d'une particule dans la paroi de complexité arbitraire, conformément au formalisme sphères molles discuté dans le prochain chapitre. De plus, les publications présentant les modèles physiques les plus élaborés citées ici mettent en jeu des nombres de particules relatifs à des systèmes de taille modeste. Les performances étant au coeur de la problématique des écoulements granulaires à grande échelle, un code CFD/DEM se doit d'incorporer un algorithme efficace pour les communications parallèles. Ce point est rarement mis en avant dans les publications, et nécessite un traitement spécifique sur les maillages non-structurés. Au regard des performances encore une fois, on préférera un code multiphysique unique au couplage de plusieurs codes spécifiques, ce qui possède également des avantages pragmatiques comme l'homogénéisation des pratiques et la simplicité de la prise en main. Dans ce contexte, l'objectif de cette thèse est de développer au sein du code YALES2 développé au CORIA un solveur 3D massivement parallèle pour la simulation d'écoulements granulaires réactifs en géométrie complexe à méso-échelle. Un modèle sphères molles est choisi pour la modélisation de la phase solide, étant plus adapté à l'étude de systèmes denses, tandis que la phase fluide est modélisée dans le cadre de la LES. Ces travaux se bornent à l'étude de systèmes monodisperses constitués de particules sphériques de type A ou D dans la classification de Geldart (voir figure 1.9), chimiquement inertes, avec seulement présence d'éventuelles réactions dans la phase homogène. À l'échelle des particules, on néglige les possibles effets d'attrition, de rupture ou d'agglomération. Les particules ne sont pas cohésives et ne sont soumises à aucune interaction à distance. Le déroulement des chapitres est le suivant :

Chapitre 1

Le présent chapitre fait état du contexte physique des écoulements granulaires et plus particulièrement des lits fluidisés, en mettant en avant leur originalité, leur utilité, leur complexité, ainsi que leurs moyens d'étude classiques. Certaines règles empiriques de dimensionnement utilisées dans l'industrie sont présentées, ainsi que les principales techniques expérimentales développées. Il pointe le besoin de développer des outils de simulations numériques afin d'aider à la compréhension physique de ces systèmes complexes. À terme, ces outils pourraient devenir assez fiables et performants pour assurer un caractère prédictif suffisant au dimensionnement d'unités de tailles industrielles.

Chapitre 2

Ce second chapitre introduit les principaux modèles implémentés dans le code YALES2 pour l'étude à l'échelle mesoscopique des interactions fluide-particules et particules-particules. On met l'accent sur la prise en compte explicite des contacts particules-paroi et la description d'opérateurs adaptés aux maillages non-structurés. Des développements secondaires incorporés dans le code sont également présentés.

Chapitre 3

La troisième partie se consacre spécifiquement à l'accélération des performances du code dans un paradigme de décomposition de domaine de type MPI. La parallélisation du code met en jeu des communications non-bloquantes avec packing et unpacking des données, ainsi qu'un algorithme de load balancing dynamique pour répartir au mieux la charge de calcul entre les processeurs.

Chapitre 4

Ce chapitre décrit différentes vérifications utilisées pour valider l'implémentation du code, au travers l'étude de cas simples fictifs secs, puis avec une phase fluide (cas dits couplés), dans des configurations isothermes et anisothermes. La méthode de fast marching utilisée pour la création de halos de cellules autour des processeurs est également étudiée.

Chapitre 5

Ce chapitre vise à confronter le code avec différents cas réels issus de la littérature, pour la plupart accompagnés de données expérimentales. L'ensemble des développements réalisés est mis à profit au travers de ces cas parfois anisothermes, mettant en jeu des parois complexes sur plusieurs centaines ou milliers de processeurs. La dernière configuration modélisée constitue un pas vers la simulation d'un lit fluidisé réactif contenant plus de 50 millions de particules mettant en jeu la combustion de gaz naturel.

Chapitre 6

Enfin, le dernier chapitre conclut sur l'apport global des travaux effectués durant cette thèse et offre une série de perspectives.

1.5 Valorisations

1.5.1 Publications dans des journaux scientifiques et proceedings de conférence

- Y. Dufresne, V. Moureau, E. Masi, O. Simonin, J. Horwitz, *Simulation of a reactive fluidized bed reactor using CFD/DEM*, Proceedings of the Summer Program of the Center for Turbulence Research 2016, USA (2016)
- Y. Dufresne, V. Moureau, G. Lartigue, E. Masi, O. Simonin, *High Performance CFD/DEM Approach in Complex Geometries on Unstructured Meshes*, Proceedings of the International ERCOFTAC Workshop on Direct and Large-Eddy Simulation XI, Italie (2017).
- Z. Hamidouche, Y. Dufresne, J.-L. Pierson, R. Brahem, G. Lartigue and V. Moureau, *DEM/CFD simulations of a pseudo-2D fluidized bed : comparison with experiments.*, accepté par la revue Fluids (2018).
- A. Nigmatova, Y. Dufresne, E. Masi, V. Moureau, O. Simonin, *Soft-sphere DEM simulation of coarse particles transported by a fully developed turbulent gas vertical channel flow*, soumis

aux Proceedings of the 5th International Conference on Turbulence and Interactions TI2018, Martinique (2018).

1.5.2 Conférences internationales

- Y. Dufresne, G. Lartigue, V. Moureau, *Simulation of a reactive fluidized bed reactor using coupled CFD/DEM*, BIRS-CMO Workshop : New Frontiers in Multiphase CFD for the 21st Century Energy Mix, Mexique (2018).
url : <http://www.birs.ca/events/2018/5-day-workshops/18w5139/videos/watch/201808231528-Dufresne.html>

1.5.3 Conférences nationales

- Y. Dufresne, V. Moureau, E. Masi, G. Lartigue, O. Simonin, *Simulation of a reactive fluidized bed reactor using coupled CFD/DEM*, Dispersed Two-Phase Flows 2018, France (2018).
- Y. Dufresne, V. Moureau, G. Lartigue, E. Masi, O. Simonin, *Development of a parallel CFD/DEM approach for the simulation of reactive fluidized bed reactors*, Workshop Particles & Fluids : from individual particle dynamics to collective effects and fluidized beds, France (2017).
- A. Nigmatova, Y. Dufresne, E. Masi, V. Moureau, P. Fede, O. Simonin, *Three-dimensional numerical simulation of a lab-scale pressurized fluidized bed using a LES-DEM approach*, Workshop Particles & Fluids : from individual particle dynamics to collective effects and fluidized beds, France (2017).
- Y. Dufresne, V. Moureau, G. Lartigue, E. Masi, O. Simonin, *Développement d'une méthode DEM/CFD pour la simulation des lits fluidisés réactifs en géométrie complexe*, Centre de Recherche en Combustion Turbulente (CRCT), France, 2017.

Chapitre 2

Modélisation des écoulements fluide-particules à l'échelle mesoscopique

Ce second chapitre introduit les principaux modèles implémentés dans le code YALES2 pour l'étude à l'échelle mesoscopique des interactions fluide-particules et particules-particules. On met l'accent sur la prise en compte explicite des contacts particules-paroi et la description d'opérateurs adaptés aux maillages non-structurés. Des développements secondaires incorporés dans le code sont également présentés.

Sommaire

2.1	Systèmes d'équations résolus	59
2.1.1	Évolution temporelle du fluide	59
2.1.2	Évolution temporelle des particules	61
2.1.3	Termes d'échange entre les phases	62
2.2	Modélisation des contacts particule-particule	62
2.2.1	Définition d'un système collisionnel	63
2.2.2	L'approche sphères molles	63
2.2.3	Autres types d'approche	71
2.3	Modélisation des contacts particule-paroi	73
2.3.1	Utilisation des régions de Voronoi	76
2.3.2	Résolution du contact	80
2.3.3	Sélection spatiale et détecteur de non-collision	81
2.3.4	Gestion du parallélisme	85
2.4	Modélisation des interactions fluide-particules	86
2.4.1	Interactions hydrodynamiques	86
2.4.2	Interactions thermiques	94
2.5	Opérateurs de couplage entre les phases	97
2.5.1	Interpolation des champs Eulériens vers les particules	97
2.5.2	Projection des grandeurs Lagrangiennes vers la grille	98
2.5.3	Opérateur de filtrage pour les maillages non-structurés	102
2.5.4	Commentaires	104
2.6	Schémas numériques pour l'avancement en temps	105
2.6.1	Avancement en temps des particules	105
2.6.2	Avancement en temps du fluide	113

2.7	Autres aspects de la modélisation	116
2.7.1	Pertes de charge en entrée	116
2.7.2	Parois périodiques	118
2.7.3	Rugosité de paroi	122

2.1 Systèmes d'équations résolus

Cette section présente les équations à résoudre dans les phases gazeuse et solide dans le cadre d'une étude à l'échelle mésoscopique de l'écoulement, pour une approche de type four-way coupling.

2.1.1 Évolution temporelle du fluide

Dans le contexte mésoscopique du formalisme Euler-Lagrange, où la méthode DEM est couplée avec un solveur LES pour la partie fluide, on reporte ici les équations de Navier-Stokes à faibles nombres de Mach $Ma = \frac{u_{max}}{c_{son}} < 0.3$, u_{max} étant la vitesse maximale rencontrée dans l'écoulement, c_{son} la vitesse des ondes acoustiques dans les mêmes conditions. Sous ces hypothèses, le transport acoustique peut être découplé du transport entropique, et la masse volumique est indépendante des variations de pression. Elle reste cependant locale et liée à la température et aux espèces chimiques présentes via une loi d'état, d'où la dénomination de solveur à densité variable. Dans le but de représenter l'effet des particules solides de taille finie sans toutefois résoudre les équations de la phase fluide à l'échelle de leur surface, ces équations peuvent faire l'objet d'une séparation d'échelles : d'un côté, les phénomènes microscopiques ; c'est-à-dire ceux mettant en jeu des échelles spatiales typiquement plus petites que la taille des particules, et les phénomènes méso ou macroscopiques prenant place aux échelles plus importantes. Anderson & Jackson [16] détaillent cette description adaptée aux écoulements granulaires en appliquant un opérateur de filtrage volumique sur les équations de Navier-Stokes, remplaçant les variables ponctuelles telles que la vitesse, la pression, etc. par des champs localement filtrés.

Soit G un noyau de filtrage avec une taille caractéristique δ_f , tel que $G(r) > 0$ décroît de façon monotone pour r croissant, et normalisé afin que son intégrale prise sur le domaine entier soit 1. La fraction volumique de fluide locale $\varepsilon(\mathbf{x}, t)$ est définie par :

$$\varepsilon(\mathbf{x}, t) = \int_{\Omega_f(t)} G(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) d\mathbf{y}, \quad (2.1)$$

où $\Omega_f(t)$ est le domaine occupé par le fluide au temps t , tandis que :

$$\int_{\Omega} G(r) d\mathbf{x} = 1, \quad (2.2)$$

en notant Ω le domaine de calcul dans son ensemble, supposé constant. Bien que ε est une fonction de l'espace et du temps, pour la suite de l'exposé on l'écrira simplement ε dans sa version locale. En définissant $\Phi(\mathbf{x}, t)$ comme une propriété quelconque du fluide, le champ filtré volumique $\bar{\Phi}(\mathbf{x}, t)$ se réfère à sa moyenne spatiale conditionnée au fluide, et est calculée en prenant le produit de convolution par le noyau G , ce qui donne :

$$\varepsilon \bar{\Phi}(\mathbf{x}, t) = \int_{\Omega_f(t)} \Phi(\mathbf{y}, t) G(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) d\mathbf{y}. \quad (2.3)$$

Le terme $\tilde{\Phi}(\mathbf{x}, t)$ désigne la moyenne de Favre, écrite comme suit :

$$\tilde{\Phi}(\mathbf{x}, t) = \frac{\overline{\varepsilon \rho(\mathbf{x}, t) \Phi(\mathbf{x}, t)}}{\overline{\varepsilon \rho(\mathbf{x}, t)}}. \quad (2.4)$$

Des détails supplémentaires concernant les opérations de filtrage volumique pour la dérivation des équations de Navier-Stokes en milieu granulaire peuvent être trouvées dans [56]. Finalement, les équations 3D instationnaires gouvernant la conservation de la masse, le transport de la quantité de mouvement, le transport de l'enthalpie sensible et celui des espèces chimiques dans le cadre de la LES (Large-Eddy Simulation) s'écrivent :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon \bar{\rho}) + \nabla \cdot (\varepsilon \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) = 0, \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) + \nabla \cdot (\varepsilon \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \otimes \tilde{\mathbf{u}}) = -\nabla \bar{P} + \nabla \cdot (\varepsilon \bar{\tau}) + \varepsilon \bar{\rho} \mathbf{g} + \bar{\mathbf{F}}_{p \rightarrow f}, \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon \bar{\rho} \tilde{h}_s) + \nabla \cdot (\varepsilon \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{h}_s) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{Pr_t} \nabla \tilde{h}_s \right) + \frac{dP_0}{dt} + \nabla \cdot (\varepsilon \lambda_{eff} \nabla \tilde{T}) + \varepsilon \bar{\omega}_T + \bar{Q}_{p \rightarrow f}, \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon \bar{\rho} \tilde{Y}_k) + \nabla \cdot (\varepsilon \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_k) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{Sc_{k,t}} \nabla \tilde{Y}_k \right) + \nabla \cdot (\varepsilon \bar{\rho} D_k \nabla \tilde{Y}_k) + \varepsilon \bar{\omega}_k. \quad (2.8)$$

\mathbf{u} , ρ , P , h_s , P_0 , T et Y_k sont respectivement la vitesse, la masse volumique, la pression dynamique, l'enthalpie sensible, la pression thermodynamique, la température du fluide, et la fraction massique des espèces chimiques. La conductivité thermique effective λ_{eff} est donnée par la relation de Syamlal & Gidaspow [291]. Sauf mention contraire, dans ces travaux, la valeur de λ_{eff} est simplement prise égale à λ , la conductivité thermique du fluide. Cette dernière est obtenue via la loi de mélange de Brokaw [46] et Mathur *et al.* [195]. Les coefficients de diffusion D_k de l'espèce k sont calculés grâce à l'approximation de Hirschfelder & Curtiss [138]. $\bar{\omega}_k$ est le terme source chimique de l'espèce k et $\bar{\omega}_T$ le terme source d'enthalpie. Les variables turbulentes μ_t , Pr_t and $Sc_{k,t}$ sont la viscosité turbulente, le nombre de Prandtl turbulent et le nombre de Schmidt turbulent de l'espèce k . Le tenseur des contraintes visqueuses $\bar{\tau}$ s'obtient de la façon suivante :

$$\bar{\tau} = (\mu + \mu_t) \left[\nabla \tilde{\mathbf{u}} + \nabla \tilde{\mathbf{u}}^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}) \mathcal{I} \right]. \quad (2.9)$$

μ est la viscosité dynamique du fluide, obtenue par la loi de mélange connue comme la formule de Wilke [36] et \mathcal{I} est le tenseur identité. Bien que différentes approches existent, seule celle de Boussinesq [40] a été utilisée au cours de ces travaux. C'est une approche phénoménologique postulant que les effets des plus petites échelles non résolues sont similaires à l'ajout d'une viscosité additionnelle μ_t . L'enjeu réside dans le calcul de cette viscosité turbulente. Parmi les modèles implémentés dans le code YALES2 pour le calcul de μ_t , on trouve entre autres le modèle classique de Smagorinsky [270], basé sur l'hypothèse d'équilibre entre la production et la dissipation d'énergie cinétique au niveau de l'échelle de filtrage. La turbulence est ici considérée uniquement comme un phénomène dissipatif. On trouve également la version dynamique de modèle, proposée par Germano [115] et corrigée par Lilly [180]. $\bar{\mathbf{F}}_{p \rightarrow f}$ et $\bar{Q}_{p \rightarrow f}$ sont respectivement les termes sources de quantité de mouvement et d'enthalpie issus du couplage avec les particules. On rappelle que dans ces travaux aucun couplage chimique entre les phases fluide et solide n'est pris en compte.

Ces équations sont supplées par une loi d'état telle que la loi des gaz parfaits :

$$P_0 = \bar{\rho} \tilde{r} \tilde{T} \quad \text{avec} \quad \tilde{r} = \sum_{k \in \mathbb{S}} \frac{R \tilde{Y}_k}{W_k}, \quad (2.10)$$

R étant la constante des gaz parfaits, r sa valeur massique, W_k la masse molaire de l'espèce k , et \mathbb{S} étant l'ensemble des espèces chimiques présentes.

Par souci de clarté, les grandeurs filtrées de la phase fluide $\tilde{\mathbf{u}}$, $\tilde{\rho}$, \tilde{P} , \tilde{h}_s , \tilde{T} , \tilde{Y}_k , $\tilde{\tau}$, \tilde{r} , $\tilde{\mathbf{F}}_{p \rightarrow f}$ et $\tilde{Q}_{p \rightarrow f}$ seront écrites \mathbf{u} , ρ , P , h_s , T , Y_k , τ , r , $\mathbf{F}_{p \rightarrow f}$ et $Q_{p \rightarrow f}$ dans la suite de l'étude.

2.1.2 Évolution temporelle des particules

L'évolution temporelle de la trajectoire du centre de gravité d'une particule est décrit par le système suivant obtenu par application de la seconde loi de Newton, en formulant l'hypothèse de particules parfaitement sphériques de masses constantes, et de masse volumique grande devant celle du milieu fluide environnant :

$$\begin{cases} m_p \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \mathbf{F}_C + \mathbf{F}_D + \mathbf{F}_P + m_p \mathbf{g}, \\ \frac{d\mathbf{x}_p}{dt} = \mathbf{u}_p, \end{cases} \quad (2.11)$$

où m_p , \mathbf{u}_p , \mathbf{x}_p sont respectivement la masse, la vitesse de translation, et la position du centre de la particule. \mathbf{F}_C est la force de contact totale appliquée à la particule, \mathbf{F}_D est la force de traînée, \mathbf{F}_P est la force associée au gradient de pression, et \mathbf{g} est l'accélération de la pesanteur.

Le mouvement de rotation d'une particule autour de son centre de gravité est décrit par l'équation suivante, en formulant l'hypothèse de particules de masse volumique homogène :

$$I_p \frac{d\boldsymbol{\omega}_p}{dt} = \mathcal{M}_C + \mathcal{M}_R + \mathcal{M}_D, \quad (2.12)$$

où I_p et $\boldsymbol{\omega}_p$ sont respectivement le moment d'inertie et le vecteur rotation angulaire de la particule. \mathcal{M}_C est le moment associé aux forces de contact, \mathcal{M}_R est le couple de résistance au roulement, et \mathcal{M}_D est le moment des forces hydrodynamiques de traînée. À noter que d'autres contributions à la rotation des particules sont parfois prises en compte dans la littérature [8], qui ne seront pas discutées ici.

L'évolution temporelle de la température d'une particule de capacité thermique massique $C_{p,p}$ constante est donnée par la relation suivante :

$$m_p C_{p,p} \frac{dT_p}{dt} = Q_F, \quad (2.13)$$

où Q_F est le flux thermique convectif en provenance de la phase fluide. Les flux de chaleur échangés lors des contacts particule-particule et particule-paroi ne sont pas pris en considération dans ces travaux. L'hypothèse sous-jacente à l'écriture de l'équation 2.13 est que la température varie uniformément à l'intérieur d'une particule, ce qui induit que la conduction interne soit grande devant les transferts thermiques externes. Cette situation correspond aux faibles nombres de Biot.

La section 2.2 détaille d'abord le calcul de \mathbf{F}_C et \mathcal{M}_C pour des contacts particule-particule. Les contacts particule-paroi sont détaillés dans la section 2.3. Ensuite, la modélisation des termes \mathbf{F}_D , \mathbf{F}_P et \mathcal{M}_D est adressée dans la section 2.4.1. Enfin, Q_F est décrit dans la section 2.4.2.

2.1.3 Termes d'échange entre les phases

Globalement, la force de traînée totale exercée par le fluide sur une particule unique de surface S_p , intervenant dans l'équation 2.11, s'écrit comme la somme de deux termes correspondant respectivement à la traînée visqueuse \mathbf{F}_D et la traînée de forme \mathbf{F}_P :

$$\mathbf{F}_D + \mathbf{F}_P = \int_{S_p} \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n}_p dS_p - \int_{S_p} P \mathbf{n}_p dS_p, \quad (2.14)$$

où \mathbf{n}_p est le vecteur unitaire normal à S_p , orienté vers l'extérieur de la particule. Le moment issu des forces hydrodynamiques \mathcal{M}_D , intervenant dans l'équation 2.12, s'écrit quant à lui :

$$\mathcal{M}_D = r_p \int_{S_p} \mathbf{n}_p \wedge (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n}_p) dS_p, \quad (2.15)$$

De même, le flux de chaleur échangé par une particule avec son environnement, intervenant dans l'équation 2.13, est défini comme l'intégrale de la densité de flux thermique sur la surface de la particule :

$$Q_F = \int_{S_p} \lambda \nabla T \cdot \mathbf{n}_p dS_p. \quad (2.16)$$

Le calcul de ces intégrales est hors de portée dans le formalisme DEM-CFD, car les échelles de l'écoulement auxquelles elles font référence sont microscopiques, donc non-résolues. La section 2.4 détaille la façon dont elles sont modélisées, afin de fermer les équations à résoudre. Dans le cadre du four-way coupling, un couplage fort existe entre les phases. Le terme retour de quantité de mouvement vers le fluide, apparaissant dans l'équation 2.6, s'écrit :

$$\mathbf{F}_{p \rightarrow f} = -\frac{1}{\Delta V} \sum_p [\mathbf{F}_D + \mathbf{F}_P + f(\mathcal{M}_D)], \quad (2.17)$$

où ΔV est la notation globale pour un volume de contrôle. Ici l'opérateur de sommation \sum_p porte sur les particules influant sur ΔV . La section 2.5 traite en détail la description de cet opérateur. Le terme $f(\mathcal{M}_D)$ trahit le fait que les particules devraient pouvoir mettre le fluide en rotation au travers l'équation de transport de la quantité de mouvement 2.6. Le terme d'échange thermique, apparaissant dans l'équation 2.7, s'écrit :

$$Q_{p \rightarrow f} = -\frac{1}{\Delta V} \sum_p Q_F. \quad (2.18)$$

La fraction volumique de fluide ε est obtenue par :

$$\varepsilon = 1 - \frac{1}{\Delta V} \sum_p V_p. \quad (2.19)$$

2.2 Modélisation des contacts particule-particule

Un des points clés de la simulation d'écoulements granulaires est la modélisation des contacts particules-particules et particules-paroi. Une approche dite "sphères molles" (en anglais "soft-spheres"), calculant les collisions de façon explicite, a été implémentée dans le code YALES2 dans le cadre de ces travaux. On cherche alors à modéliser le terme \mathbf{F}_C de l'équation 2.11 et le terme \mathcal{M}_C de l'équation 2.12.

2.2.1 Définition d'un système collisionnel

On décrit les modalités de la collision de deux particules a et b formant un système collisionnel. On s'intéresse en premier lieu à la force de collision subie par la particule a , celle subie par la particule b étant simplement donnée par le principe de réciprocité énoncé par Newton. Les notations qui seront conservées dans toute la section sont respectivement pour leur masse m_a et m_b , leur moment d'inertie I_a et I_b , leur vitesse de translation \mathbf{u}_a et \mathbf{u}_b , leur vitesse de rotation $\boldsymbol{\omega}_a$ et $\boldsymbol{\omega}_b$, leur diamètre d_a et d_b , leur rayon r_a et r_b , leur module d'Young E_a et E_b , leur coefficient de Poisson σ_a et σ_b , et les coordonnées de leur centre \mathbf{x}_a et \mathbf{x}_b . La base propre à ce système collisionnel binaire (voir figure 2.1) est formée par les vecteurs unitaires normal \mathbf{n}_{ab} et tangentiel \mathbf{t}_{ab} , et permet de réduire la dimension du problème à celle d'un problème 2D. \mathbf{n}_{ab} est défini de la façon suivante :

$$\mathbf{n}_{ab} = \frac{\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a}{\|\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a\|}. \quad (2.20)$$

Ensuite, on définit la vitesse relative des particules \mathbf{u}_{ab} par :

$$\mathbf{u}_{ab} = (\mathbf{u}_a - \mathbf{u}_b) + (r_a \boldsymbol{\omega}_a + r_b \boldsymbol{\omega}_b) \wedge \mathbf{n}_{ab}, \quad (2.21)$$

dont la composante normale vaut, après prise du produit scalaire de l'équation précédente avec \mathbf{n}_{ab} :

$$\mathbf{u}_{ab,n} = (\mathbf{u}_{ab} \cdot \mathbf{n}_{ab}) \mathbf{n}_{ab}. \quad (2.22)$$

La vitesse relative du point de contact entre les particules \mathbf{u}_{ab}^g , également appelée vitesse de glissement, est finalement obtenue via :

$$\mathbf{u}_{ab}^g = \mathbf{u}_{ab} - \mathbf{u}_{ab,n}. \quad (2.23)$$

Finalement, \mathbf{t}_{ab} est défini de la façon suivante :

$$\mathbf{t}_{ab} = \begin{cases} \frac{\mathbf{u}_{ab}^g}{\|\mathbf{u}_{ab}^g\|} & \text{si } \|\mathbf{u}_{ab}^g\| > 0, \\ \mathbf{0} & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.24)$$

\mathbf{n}_{ab} et \mathbf{t}_{ab} forment donc une base orthonormée dès lors que $\|\mathbf{u}_{ab}^g\| > 0$, susceptible de se déplacer au cours du mouvement. Pour la suite, on décrit également les vitesses normales des particules a et b respectivement par $\mathbf{u}_{a,n}$ et $\mathbf{u}_{b,n}$. L'exposant t indique que la valeur est prise au temps t . Exemple : $\mathbf{u}_{ab,n}^0$ correspond à $\mathbf{u}_{ab,n}(t = 0)$. Les contacts décrits ici sont arbitrairement choisis comme commençant au temps $t = 0$. Par convention et en l'absence de mention contraire, les grandeurs prises à $t = 0$ correspondent à un état pré-collisionnel, non encore perturbé par le contact. $\mathbf{u}_{ab,n}^0$ est donc la notation désignant la vitesse normale relative avant impact des particules a et b . De même, par convention, le temps $t = T_C$ désigne le tout dernier instant du contact. $\mathbf{u}_{ab,n}^{T_C}$ est donc la vitesse normale relative post-collisionnel. Enfin, la norme d'une vitesse \mathbf{u} est simplement notée u , et la norme d'une force \mathbf{f} est notée f .

2.2.2 L'approche sphères molles

L'approche dite "sphères molles" (en anglais "soft-spheres") est classiquement utilisée lorsque les trajectoires des particules doivent être obtenues par intégration numérique des équations Newtoniennes du mouvement. En effet, il n'existe pas de solution analytique pour représenter la collision simultanée

de plus de deux objets. Ce sont donc les collisions multiples simultanées, qui sont susceptibles de se produire dans les zones denses, qui justifient le choix de cette approche. Elle rend également la prise en compte des interactions à courtes ou longues distances assez simple. Cette méthode trouve son origine dans les travaux de Cundall & Strack [72] pour la simulation d'écoulements granulaires, et a été utilisée pour la première fois pour simuler un lit fluidisé (2D) par Tsuji *et al.* [302]. Cette technique autorise les particules à se recouvrir légèrement sur une période appelée temps de contact (voir figure 2.1), dont on fera apparaître l'expression dans cette section.

La force de collision totale subie par a est ainsi calculée comme étant la somme de toutes les forces de collisions engendrées par tous les objets b - particule(s) et/ou paroi(s) - en contact avec a à un instant donné. Ces forces de collisions binaires appliquées par une entité b sur une particule a seront notées $\mathbf{f}_{b \rightarrow a}^{col}$ dans toute cette partie. Soit N_p^{col} le nombre de particules et N_w^{col} le nombre de parois en contact avec a :

$$\mathbf{F}_C = \sum_{b=1}^{N_p^{col} + N_w^{col}} \mathbf{f}_{b \rightarrow a}^{col}. \quad (2.25)$$

Les spécificités des contacts particule-paroi sont abordées dans la section 2.3. Les forces de contact exercées par la particule b sur la particule a sont généralement décrites par une composante normale (indice n) et une composante tangentielle (indice t) telles que :

$$\mathbf{f}_{b \rightarrow a}^{col} = f_{b \rightarrow a, n}^{col} \mathbf{n}_{ab} + f_{b \rightarrow a, t}^{col} \mathbf{t}_{ab}. \quad (2.26)$$

Il convient alors de modéliser $\mathbf{f}_{b \rightarrow a, n}^{col}$ et $\mathbf{f}_{b \rightarrow a, t}^{col}$. L'approche sphères molles se base sur l'hypothèse de déformabilité élastique des grains, accompagnée d'un amortissement afin de représenter la perte d'énergie cinétique lors du choc. Physiquement, cette perte d'énergie cinétique, se manifestant par une diminution de la vitesse après impact, est majoritairement due à une conversion partielle de l'énergie cinétique en d'autres formes d'énergie lors du contact. Les mécanismes suivis par cette transformation sont généralement imputés à la déformation plastique et à la viscoélasticité du matériau, mais aussi à la formation de vibrations (conduisant au bruit de l'impact). Un critère indiquant le type de mécanisme privilégié lors de la dissipation d'énergie a été décrit par Johnson [152].

La mécanique du contact entre deux objets est un problème complexe, en particulier lorsqu'on cherche à la décrire de façon générale [152]. Citons les travaux fondateurs de Mindlin & Deresiewicz [206], qui dès 1949 ont étudié la compression de deux sphères élastiques l'une contre l'autre en décrivant un modèle quantitatif prenant en compte une redistribution locale de la friction sur l'aire en contact, discrétisée en anneaux concentriques : des micro-zones d'adhérence ou de glissement sont mises en évidence pour décrire la friction avec précision. Ces travaux ont depuis été largement repris et étendus, notamment par Maw *et al.* [197] qui en appliquent les concepts de façon dynamique pour étudier l'impact oblique de deux sphères élastiques, puis récemment encore afin d'être confrontés aux dernières découvertes dans ce domaine [98].

Il est clair que de tels niveaux de description microscopique restent inatteignables lorsqu'il s'agit de modéliser un grand nombre de collisions, parfois simultanées, c'est pourquoi une quantité importante de modèles plus ou moins simplifiés, dont le coût de calcul et les aptitudes diffèrent, a été développé pour la simulation numérique. L'approche sphères molles autorisant les particules à s'interpénétrer lors d'un choc, les forces de contact répulsives sont calculées de façon explicite en fonction de la distance de recouvrement entre la particule et l'objet la heurtant (en anglais "overlap"), en utilisant divers schémas

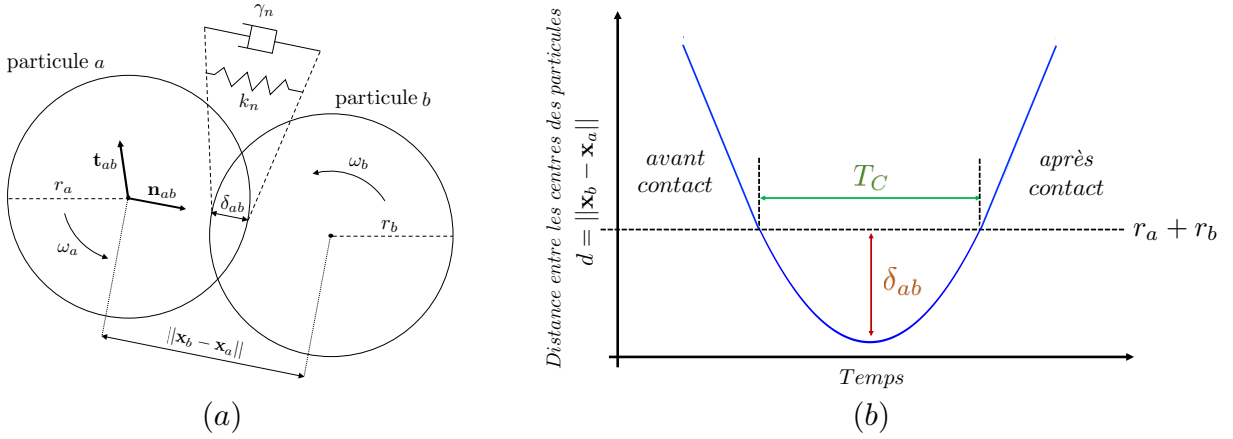


FIGURE 2.1: (a) Schéma représentatif de deux particules a et b en cours de collision dans le formalisme des sphères molles. La distance de recouvrement est notée δ_{ab} . Les vecteurs unitaires de la base sont indiqués par \mathbf{n}_{ab} et \mathbf{t}_{ab} . L'influence de la partie purement élastique de la force de contact normale et de son facteur d'amortissement sont respectivement signalées par k_n (ressort) et γ_n (amortisseur). (b) Évolution temporelle qualitative de la distance entre les particules a et b sous l'effet des forces de contact répulsives, en action durant le temps de contact, noté T_C .

spécifiques. Une revue des schémas les plus populaires pour l'écriture des forces répulsives de contact ont été reportées par Schäfer *et al.* [258] et Dziugys & Peters [90], dont nous nous proposons de faire un résumé succinct ici.

Une force de contact normale $\mathbf{f}_{b \rightarrow a, n}^{col}$ étant répulsive et possédant un certain degré de dissipation d'énergie, sa plus simple expression peut être donnée par la force associée à un oscillateur harmonique amorti :

$$\mathbf{f}_{b \rightarrow a, n}^{col} = \begin{cases} -k_n \delta_{ab} \mathbf{n}_{ab} - 2\gamma_n M_{ab} \mathbf{u}_{ab, n} & \text{si } \delta_{ab} > 0, \\ \mathbf{0} & \text{sinon,} \end{cases} \quad (2.27)$$

pour laquelle k_n est une constante de raideur, et γ_n est une constante d'amortissement. Cette expression est composée d'un terme purement élastique $-k_n \delta_{ab}$ illustrant la loi de Hooke, puis d'un terme d'amortissement linéaire $-2\gamma_n M_{ab} \mathbf{u}_{ab, n}$. On définit δ_{ab} comme la distance de recouvrement, ou distance de pénétration des objets a et b par :

$$\delta_{ab} = r_a + r_b - \|\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a\|. \quad (2.28)$$

En cas de contact, on a donc $\delta_{ab} > 0$ par définition. M_{ab} correspond à la masse réduite ou effective du système formé par les deux particules et est égale à la moitié de la moyenne harmonique de leur masse respective :

$$M_{ab} = \frac{1}{\frac{1}{m_a} + \frac{1}{m_b}}. \quad (2.29)$$

Pour deux particules de masses identiques, cette expression devient :

$$M_{ab} = \frac{m_a}{2} = \frac{m_b}{2}, \quad (2.30)$$

ce qui revient à positionner le barycentre du système au milieu du segment liant le centre des deux particules.

Ce modèle est parfois appelé *linear spring-dashpot* dans la littérature et est schématisé sur la figure 2.1. La force qu'il décrit est équivalente à celle subie par une certaine masse attachée par un ressort fixé en un point, dont l'élongation par rapport à la longueur à l'équilibre serait δ_{ab} , qui correspond ici la longueur de pénétration de la particule au travers de son obstacle - une autre particule ou un élément géométrique. Outre sa simplicité, cette expression de la force de contact dans la direction normale (équation 2.27) permet d'écrire une équation différentielle simple dictant l'évolution temporelle de la distance de recouvrement δ_{ab} au cours du temps pour une collision normale binaire. En l'absence de toute autre force que celle de collision, la seconde loi de Newton s'écrit pour une particule a subissant une force normale de collision $\mathbf{f}_{b \rightarrow a, n}^{col}$, et une particule b subissant une force de collision $\mathbf{f}_{a \rightarrow b, n}^{col}$:

$$\frac{1}{m_a} \mathbf{f}_{b \rightarrow a, n}^{col} = \ddot{\mathbf{x}}_a \quad \text{et} \quad \frac{1}{m_b} \mathbf{f}_{a \rightarrow b, n}^{col} = \ddot{\mathbf{x}}_b. \quad (2.31)$$

Le principe de réciprocité (3ème loi de Newton) permet d'écrire que $\mathbf{f}_{b \rightarrow a, n}^{col} = -\mathbf{f}_{a \rightarrow b, n}^{col} = \mathbf{f}_n^{col}$, ce qui nous permet d'obtenir après soustraction :

$$\left(\frac{1}{m_a} + \frac{1}{m_b} \right) \mathbf{f}_n^{col} = \ddot{\mathbf{x}}_a - \ddot{\mathbf{x}}_b. \quad (2.32)$$

En écrivant que $(\ddot{\mathbf{x}}_a - \ddot{\mathbf{x}}_b) \cdot \mathbf{n}_{ab} = \ddot{\delta}_{ab}$ et $\mathbf{f}_n^{col} \cdot \mathbf{n}_{ab} = f_n^{col}$, on obtient :

$$M_{ab} \ddot{\delta}_{ab} = f_n^{col}, \quad (2.33)$$

soit en utilisant l'équation 2.27 :

$$M_{ab} \ddot{\delta}_{ab} + k_n \delta_{ab} + 2\gamma_n M_{ab} \dot{\delta}_{ab} = 0. \quad (2.34)$$

Finalement, on retiendra l'expression suivante :

$$\ddot{\delta}_{ab} + 2\gamma_n \dot{\delta}_{ab} + \omega_0^2 \delta_{ab} = 0. \quad (2.35)$$

Cette expression fait apparaître la pulsation propre ω_0 du système oscillatoire :

$$\omega_0^2 = \frac{k_n}{M_{ab}}. \quad (2.36)$$

De façon supplémentaire, on définit la pseudo-pulsation ω_r du système, valant ω_0 en cas d'absence d'amortissement ($\gamma_n = 0$), telle que :

$$\omega_r = \sqrt{\omega_0^2 - \gamma_n^2}. \quad (2.37)$$

En considérant les conditions initiales suivantes :

$$\begin{cases} \delta_{ab}(t=0) = 0, \\ \dot{\delta}_{ab}(t=0) = u_{ab, n}^0, \end{cases} \quad (2.38)$$

la solution de l'équation 2.35 décrivant l'évolution de la distance de recouvrement de deux particules en fonction du temps s'écrit :

$$\delta_{ab}(t) = \frac{u_{ab, n}^0}{\omega_r} e^{-\gamma_n t} \sin(\omega_r t). \quad (2.39)$$

L'évolution temporelle de la vitesse relative $\dot{\delta}_{ab}$ s'obtient par dérivation de la solution précédente par rapport au temps et vaut :

$$\dot{\delta}_{ab}(t) = \frac{u_{ab, n}^0}{\omega_r} e^{-\gamma_n t} [-\gamma_n \sin(\omega_r t) + \omega_r \cos(\omega_r t)]. \quad (2.40)$$

La durée d'un choc ou temps de contact T_C peut elle aussi être définie pour une paire d'entités en collision, et correspond à une demi-période du régime oscillant. Cette dernière est capitale car elle sera utilisée pour définir le pas de temps employé pour l'avancement en temps des particules. En cherchant la solution de l'équation $\delta_{ab}(t = T_C) = 0$, on obtient l'expression suivante :

$$T_C = \frac{\pi}{\omega_r}. \quad (2.41)$$

En l'absence d'amortissement, l'expression de T_C se simplifie de la façon suivante :

$$T_C = \frac{\pi}{\omega_o} = \pi \sqrt{\frac{M_{ab}}{k_n}} \quad (2.42)$$

La valeur maximale atteinte par δ_{ab} au cours du contact notée δ_{ab}^{max} est obtenue par la résolution de $\dot{\delta}_{ab}(t) = 0$, de telle sorte que [306] :

$$\delta_{ab}^{max} = \frac{u_{ab,n}^0}{\omega_o} \exp \left[-\frac{\gamma_n}{\omega_r} \arcsin \left(\frac{\omega_r}{\omega_o} \right) \right]. \quad (2.43)$$

Cette valeur est atteinte pour $t = T_C/2$ dans le cas où il n'y a pas d'amortissement. Son expression se ramène dans ce cas à :

$$\delta_{ab}^{max} = \frac{u_{ab,n}^0 T_C}{\pi}. \quad (2.44)$$

A titre indicatif, on donne ici les expressions adimensionnalisées (signalées par un exposant \star) par leur valeur maximum de δ_{ab} et $\dot{\delta}_{ab} = u_{ab,n}$:

$$\delta_{ab}^{\star}(t) = \frac{\delta_{ab}(t)}{\delta_{ab}^{max}} = \frac{\omega_o}{\omega_r} \exp \left(\gamma_n \left[\frac{1}{\omega_r} \arcsin \left(\frac{\omega_r}{\omega_o} \right) - t \right] \right) \sin(\omega_r t), \quad (2.45)$$

$$u_{ab,n}^{\star}(t) = \frac{u_{ab,n}(t)}{u_{ab,n}^0} = \frac{1}{\omega_r} e^{-\gamma_n t} [-\gamma_n \sin(\omega_r t) + \omega_r \cos(\omega_r t)]. \quad (2.46)$$

Une expression de k_n pour ce modèle est obtenue en fonction des propriétés mécaniques des matériaux composant les particules en contact. Dans le cas général, k_n est donné par :

$$k_n = \frac{4}{3} R_{ab} E_{ab}, \quad (2.47)$$

où le rayon effectif du système $a - b$ est donné par :

$$R_{ab} = \frac{1}{\frac{1}{r_a} + \frac{1}{r_b}}, \quad (2.48)$$

et son module d'Young effectif par la combinaison :

$$E_{ab} = \frac{1}{\frac{1 - \sigma_a^2}{E_a} + \frac{1 - \sigma_b^2}{E_b}}. \quad (2.49)$$

Pour deux particules sphériques de même rayon r_p et composées du même matériaux, on obtient [90] :

$$k_n = \frac{E r_p}{3(1 - \sigma^2)}, \quad (2.50)$$

Où E et σ sont respectivement le module d'Young et le coefficient de Poisson du matériau. Le coefficient de Poisson des matériaux usuels valant environ $1/3$ (le verre par exemple), l'expression de k_n peut encore être simplifiée de la façon suivante :

$$k_n \approx 0.375Er_p. \quad (2.51)$$

Le coefficient de dissipation dans la direction normale γ_n est classiquement calculé à partir du coefficient de restitution normale e_n , dont la définition phénoménologique est la suivante :

$$e_n = \left| \frac{u_{ab,n}^{TC}}{u_{ab,n}^0} \right| = e^{-\gamma_n T_C} \quad \text{avec} \quad 0 < e_n \leq 1, \quad (2.52)$$

e_n correspond donc au rapport de la vitesse relative normale après impact $u_{ab,n}^{TC}$ et avant impact $u_{ab,n}^0$. Cette expression permet d'exprimer explicitement γ_n :

$$\gamma_n = -\frac{\omega_0 \ln e_n}{\sqrt{\pi^2 + (\ln e_n)^2}}. \quad (2.53)$$

Cette expression permet de paramétrer les simulations numériques avec e_n , dont le sens physique est plus tangible, et qui fait généralement partie des données expérimentales les plus accessibles. Notons que pour ce modèle, une valeur approchée de δ_{ab}^{max} est donnée par :

$$\delta_{ab}^{max} \approx \frac{1}{2}(1 + e_n) \frac{u_{ab,n}^0 T_C}{\pi}, \quad (2.54)$$

pour les cas où $e_n > 0.5$ [318].

Une autre expression pour la force de contact normale $\mathbf{f}_{b \rightarrow a,n}^{col}$ issue de la théorie des contacts élastiques de Hertz [134] [152] est régulièrement rencontrée :

$$\mathbf{f}_{b \rightarrow a,n}^{col} = \begin{cases} -\tilde{k}_n \delta_{ab}^{3/2} \mathbf{n}_{ab} & \text{si } \delta_{ab} > 0, \\ \mathbf{0} & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.55)$$

\tilde{k}_n est ici une raideur non linéaire donnée par la relation :

$$\tilde{k}_n = \frac{4}{3} \sqrt{R_{ab}} E_{ab}. \quad (2.56)$$

Pour ce modèle, le temps de contact vaut alors environ [318] :

$$T_C \approx 3.21 \left(\frac{M_{ab}}{\tilde{k}_n} \right)^{2/5} (u_{ab,n}^0)^{-1/5}. \quad (2.57)$$

Il est donc dépendant de la vitesse d'impact $u_{ab,n}^0$. Afin d'obtenir une version dissipative de cette force, certains auteurs y ont ajouté une contribution visqueuse de façon *ad hoc* [247], tel que :

$$\mathbf{f}_{b \rightarrow a,n}^{col} = \begin{cases} -\tilde{k}_n \delta_{ab}^{3/2} \mathbf{n}_{ab} - 2\gamma_n M_{ab} \mathbf{u}_{ab,n} & \text{si } \delta_{ab} > 0, \\ \mathbf{0} & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.58)$$

Une analyse quantitative approfondie de ce modèle a été réalisée par Ray *et al.* [241]. Le modèle linéaire et celui de Hertz peinent à représenter la dépendance du coefficient de restitution normal e_n avec la

vitesse d'impact $u_{ab,n}^0$, fait pourtant observable expérimentalement [120]. Le modèle linear-spring dash-pot utilise même une expression de e_n indépendante de $u_{ab,n}^0$ (voir équation 2.52). Afin de retrouver le comportement attendu de la part de e_n , Kuwabara & Kono [172] utilise l'expression suivante :

$$\mathbf{f}_{b \rightarrow a, n}^{col} = \begin{cases} -\tilde{k}_n \delta_{ab}^{3/2} \mathbf{n}_{ab} - 2\tilde{\gamma}_n M_{ab} \delta_{ab}^{1/2} \mathbf{u}_{ab, n} & \text{si } \delta_{ab} > 0, \\ \mathbf{0} & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.59)$$

Le modèle à deux coefficients de Walton & Braun [316] (modèle avec hystérésis), qui utilise un coefficient de restitution dans la phase d'approche des particules différent de la phase d'éloignement, est également classiquement rencontré. Les échelles de longueur et de temps microscopiques précédemment définies, à savoir la distance de recouvrement δ_{ab} et la durée d'une collision T_C , doivent rester inférieures aux échelles macroscopiques (libre parcours moyen et temps moyen entre deux collisions) [173].

Lorsque $\|\mathbf{u}_{ab}^g\| \neq 0$ au moment de l'impact, une composante tangentielle $\mathbf{f}_{b \rightarrow a, t}^{col}$ à la force de contact nécessite d'être ajoutée. Là encore, de nombreux modèles sont présents dans la littérature. En règle générale, cette composante tangentielle est liée à la composante normale par la loi de Coulomb :

$$\|\mathbf{f}_{b \rightarrow a, t}^{col}\| \begin{cases} \leq \mu_s \|\mathbf{f}_{b \rightarrow a, n}^{col}\| & \text{en cas de friction statique } (\|\mathbf{u}_{ab}^g\| = 0), \\ = \mu_d \|\mathbf{f}_{b \rightarrow a, n}^{col}\| & \text{en cas de friction dynamique } (\|\mathbf{u}_{ab}^g\| \neq 0). \end{cases} \quad (2.60)$$

En cas de friction statique, $\mathbf{f}_{b \rightarrow a, t}^{col}$ compense parfaitement la contrainte tangentielle (inconnue), ce qui maintient $\|\mathbf{u}_{ab}^g\|$ à une valeur nulle. Si cette contrainte dépasse $\mu_s \mathbf{f}_{b \rightarrow a, n}^{col}$, on parle de friction dynamique. Ainsi, pour des contraintes tangentielles "faibles", une condition d'adhérence (pas de glissement) s'applique, tandis que pour des contraintes tangentielles plus importantes, un glissement doit être pris en compte à l'endroit du contact. À noter que les contraintes appliquées ne sont pas identiques sur l'intégralité de l'aire de contact, d'où la nécessité de discrétiser spatialement cette aire pour les modèles les plus complexes. Le modèle le plus élémentaire consiste simplement à considérer la friction dynamique coulombienne :

$$\mathbf{f}_{b \rightarrow a, t}^{col} = -\mu_d \|\mathbf{f}_{b \rightarrow a, n}^{col}\| \mathbf{t}_{ab}. \quad (2.61)$$

Bien que cette expression ne permette pas de rendre compte du phénomène d'inversion de la vitesse tangentielle lors de la collision et qu'elle induise une discontinuité lorsque $\|\mathbf{u}_{ab}^g\| = 0$ (discontinuité sans effet sur les vitesses post-collision [258]), elle est régulièrement utilisée [259][56]. Le problème de la discontinuité peut être contourné par l'ajout d'un terme d'amortissement tangentiel :

$$\mathbf{f}_{b \rightarrow a, t}^{col} = -\min\left(\|\gamma_s \mathbf{u}_{ab}^g\|, \mu_d \|\mathbf{f}_{b \rightarrow a, n}^{col}\|\right) \mathbf{t}_{ab}. \quad (2.62)$$

Ce modèle est parfois appelé modèle de Haff & Werner [128]. Une analyse précautionneuse en a été proposée par Becker *et al.* [23]. Sa simplicité de mise en oeuvre a été mise à profit dans certains codes de calcul [313]. Le paramètre γ_s ne possède pas de réelle interprétation physique. L'analyse de Schäfer *et al.* [258] suggère de n'employer ce modèle que pour de hautes valeurs de γ_s . Cette analyse révèle encore que le modèle de simple friction dynamique et celui de Haff & Werner peuvent exhiber des problèmes d'instabilité dans les cas statiques, où les contacts sont maintenus. Afin de rendre compte de l'élasticité tangentielle lors du contact, le modèle proposé par Cundall & Strack [72] peut être utilisé :

$$\mathbf{f}_{b \rightarrow a, t}^{col} = \begin{cases} -k_t \delta_t & \text{si } \|\mathbf{f}_{b \rightarrow a, t}^{col}\| \leq \mu_d \|\mathbf{f}_{b \rightarrow a, n}^{col}\|, \\ -\mu_d \|\mathbf{f}_{b \rightarrow a, n}^{col}\| \mathbf{t}_{ab} & \text{si } \|\mathbf{f}_{b \rightarrow a, t}^{col}\| > \mu_d \|\mathbf{f}_{b \rightarrow a, n}^{col}\|, \end{cases} \quad (2.63)$$

que l'on peut également trouver dans la littérature avec un terme d'amortissement [306] tel que :

$$\mathbf{f}_{b \rightarrow a, t}^{col} = \begin{cases} -k_t \boldsymbol{\delta}_t - \gamma_t \mathbf{u}_{ab}^g & \text{si } \|\mathbf{f}_{b \rightarrow a, t}^{col}\| \leq \mu_d \|\mathbf{f}_{b \rightarrow a, n}^{col}\|, \\ -\mu_d \|\mathbf{f}_{b \rightarrow a, n}^{col}\| \mathbf{t}_{ab} & \text{si } \|\mathbf{f}_{b \rightarrow a, t}^{col}\| > \mu_d \|\mathbf{f}_{b \rightarrow a, n}^{col}\|. \end{cases} \quad (2.64)$$

k_t , $\boldsymbol{\delta}_t$ et γ_t sont respectivement le coefficient de raideur tangentielle, le recouvrement tangentiel (quantité vectorielle), et le coefficient d'amortissement tangentiel. Lors de simulations 2D, le recouvrement tangentiel peut être calculé de la façon suivante :

$$\boldsymbol{\delta}_t = \boldsymbol{\delta}_t^0 + \int_0^{T_C} \mathbf{u}_{ab}^g(t') dt'. \quad (2.65)$$

Néanmoins, dans les simulations 3D, comme révélé par Van Der Hoef *et al.* [306], la situation se complexifie en raison du mouvement du vecteur \mathbf{n}_{ab} au cours du contact, et donc du plan défini par la zone de contact. Afin de prendre en compte ces changements d'orientation, $\boldsymbol{\delta}_t$ doit être calculé de la façon suivante :

$$\boldsymbol{\delta}_t = \boldsymbol{\delta}_t^0 \cdot \mathbf{H} + \int_0^{T_C} \mathbf{u}_{ab}^g(t') dt', \quad (2.66)$$

où \mathbf{H} est une matrice de rotation dépendant notamment de l'orientation du vecteur \mathbf{n}_{ab} lors du premier instant détecté du contact. Le modèle de Cundall & Strack prend donc en compte l'histoire du contact, identifiée comme nécessaire pour une modélisation précise [206]. Cependant, encore une fois, des problèmes peuvent apparaître lors des cas statiques, le déplacement tangentiel pouvant atteindre de hautes valeurs. Brendel & Dippel [44] recommandent alors une correction supplémentaire sur le calcul de $\boldsymbol{\delta}_t$. De plus, l'implémentation de ce modèle dans un code de calcul est non triviale.

En ce qui concerne le degré de liberté de rotation, sous les hypothèses formulées, l'expression du moment d'inertie d'une particule a ne dépend que de sa masse et son diamètre :

$$I_a = \frac{m_a d_a^2}{10}. \quad (2.67)$$

De la même façon que précédemment, le moment total \mathcal{M}_C appliqué à une particule a s'écrit comme la somme des moments issus des collisions binaires subies par a , tel que :

$$\mathcal{M}_C = r_a \sum_{b=1}^{N_p^{col} + N_w^{col}} \mathbf{n}_{ab} \wedge \mathbf{f}_{b \rightarrow a, t}^{col}. \quad (2.68)$$

l'expression de \mathcal{M}_C repose donc sur le calcul des forces tangentielles $\mathbf{f}_{b \rightarrow a, t}^{col}$. Le couple de résistance au roulement \mathcal{M}_R permet de rendre compte de la non-punctualité de la zone de contact lors d'une collision. En effet, si on considère une particule parfaitement sphérique roulant sans glissement sur un plan, celle-ci possède un point de contact unique correspond au projeté orthogonal du centre de la particule sur le plan, et les forces de collision ne permettent pas d'expliquer que celle-ci s'arrête de rouler [24]. Dans la réalité, la particule n'est pas parfaitement sphérique, et la zone de contact n'est pas parfaitement ponctuelle car la particule se déforme (et dans un moindre mesure la paroi). Ce sont ces irrégularités qui permettent d'expliquer qu'une roue ne peut rouler indéfiniment sur une surface. \mathcal{M}_R peut s'écrire de la façon suivante [24] :

$$\mathcal{M}_R = -\mu_r \mathbf{f}_{b \rightarrow a, n}^{col} \frac{\boldsymbol{\omega}_a}{\|\boldsymbol{\omega}_a\|}, \quad (2.69)$$

où μ_r est un coefficient dimensionné de résistance au roulement.

Finalement, afin de quantifier les différences de comportement entre plusieurs modèles de friction, Di Renzo & Di Maio [82] étudient une configuration d'impact oblique sur une paroi plane à l'aide de comparaisons expérimentales et d'une solution approchée analytique [197]. Les modèles comparés sont i) une combinaison du modèle linear spring-dashpot pour la partie normale (voir équation 2.27) sans terme d'amortissement et du modèle de Cundall & Strack (voir équation 2.63) pour la partie tangentielle, ii) un modèle issu de l'analyse complète de Hertz (voir équation 2.55) pour la partie normale et de Mindlin & Deresiewicz [206] pour la partie tangentielle, iii) une simplification de ii) telle qu'utilisée par Tsuji *et al.* [302]. Ces travaux révèlent, dans le contexte étudié, que la vitesse post-collision est bien décrite par le modèle linéaire, le plus simple. De plus, pour des paramètres précisément évalués, le modèle linéaire est capable de décrire avec plus de précision que le modèle ii) l'évolution des forces, de la vitesse, et du déplacement tangential au cours du contact. Ces travaux témoignent de la difficulté de juger de la qualité d'un modèle de façon générale.

Finalement, les modèles implémentés dans YALES2 correspondent pour la partie normale au linear-spring dashpot (voir équation 2.27), et pour la partie tangentielle au modèle de friction dynamique coulombienne avec amortissement (voir équation 2.62). Dans ce dernier cas, l'amortissement tangential peut être activé ou non, pour se ramener au modèle coulombien classique (voir équation 2.61).

2.2.3 Autres types d'approche

Dans l'approche explicite dite "sphères dures" (en anglais "hard-spheres"), la trajectoire en vol libre des particules peut être déterminée par l'équation 2.11 sans prendre en compte le terme de collision. Ce dernier ne peut cette fois être calculé que pour des collisions binaires, est comptabilisé seulement au moment de traiter une collision. L'hypothèse de binarité permet de résoudre le contact de façon analytique, sans passer par une intégration numérique. Les collisions sont donc instantanées. Une formulation sous forme de vecteurs impulsion $\mathbf{J}_{b \rightarrow a}$, homogènes à une quantité de mouvement, est utilisée pour déterminer les nouvelles valeurs de vitesses à partir des anciennes lors d'un contact :

$$\begin{cases} m_a (\mathbf{u}_a^{TC} - \mathbf{u}_a^0) = \mathbf{J}_{b \rightarrow a} \\ I_a (\boldsymbol{\omega}_a^{TC} - \boldsymbol{\omega}_a^0) = r_a \mathbf{n}_{ab} \wedge \mathbf{J}_{b \rightarrow a} \end{cases} \quad (2.70)$$

$\mathbf{J}_{b \rightarrow a}$ est défini par :

$$\mathbf{J}_{b \rightarrow a} = J_{b \rightarrow a, n} \mathbf{n}_{ab} + J_{b \rightarrow a, t} \mathbf{t}_{ab} \quad (2.71)$$

Les vecteurs \mathbf{n}_{ab} et \mathbf{t}_{ab} sont définis de la même façon que pour le modèle sphères molles. Des valeurs pour $J_{b \rightarrow a, n}$ et $J_{b \rightarrow a, t}$ peuvent être trouvées dans les travaux de Sakiz [254]. Cette méthode est dite collisionnelle (en anglais "event driven") en ceci que ce sont les chocs qui gèrent le processus de simulation : le pas de temps employé est inversement proportionnel à la fréquence de collision. Cette famille de méthodes permet un gain de temps considérable par rapport à l'approche sphères molles dans le cas d'écoulements modérément denses [306]. Cependant, pour de hautes densités de particules ou dans le cas de contacts assez dissipatifs, les collisions peuvent mener à une décroissance dramatique de l'énergie cinétique donnant lieu à des instabilités, la fréquence de collision finissant par diverger. Ce régime particulier est appelé catastrophe inélastique (en anglais "inelastic collapse") [199]. La première

simulation utilisant cette approche pour étudier un écoulement granulaire a été reportée par Campbell & Brennen [53], donnant lieu à de nombreux autres travaux par la suite. À noter que certains auteurs ont étudié l'interaction entre trois particules en se basant sur une approche hard-sphere [140].

Le principal avantage des méthodes sphères molles comparées aux méthodes sphères dures est leur capacité à représenter des contacts simultanés entre plus de deux entités. Elles sont cependant plus coûteuses car le contact est résolu dans le temps, ce qui impose une discrétisation temporelle plus fine. Une approche hybride a donc été imaginée par Buist *et al.* [48]. Partant du constat surprenant qu'à partir d'une certaine vitesse d'injection (typiquement $2 - 3U_{mf}$), les contacts entre particules dans un lit fluidisé sont en grande majorité binaires, ces derniers sont traités par un algorithme sphères dures. Un algorithme sphères molles prend le relai pour traiter les collisions restantes, entre plus de deux objets. Les auteurs reportent une meilleure conservation d'énergie lorsque l'approche hybride est utilisée, ainsi qu'un gain de temps de calcul d'environ un ordre de grandeur comparé à la méthode sphères molles. Cette hybridation n'est, semble-t-il, seulement rendue possible par le fait qu'aucune interaction longue distance entre les particules ne soit prise en compte dans cette étude [48]. En effet, l'intégration de tels mécanismes dans un algorithme sphères dures est non triviale [326], et fait partie des inconvénients de l'emploi d'une telle méthode.

Enfin, il convient de noter que les collisions peuvent également être traitées de façon stochastique plutôt qu'explicite : la méthode de Monte Carlo (en anglais "Direct Simulation Monte Carlo" ou DSMC) a été proposée par Bird [35] pour la simulation de gaz raréfié, pour être adaptée plus tard aux milieux granulaires [212][213]. L'une des hypothèses à l'origine de la DSMC est que le mouvement et les interactions des particules peuvent être découplés. À chaque pas de temps, les particules sont premièrement avancées en temps suivant la seconde loi de Newton, sans prendre en compte les interactions avec les autres particules. Ensuite, les interactions particules-particules sont résolues. Dans l'approche DSMC, la localisation et les instants précis des collisions ne sont pas calculés : un algorithme stochastique est appliqué en leur lieu et place. Les particules sont réparties dans des cellules telles que seules les particules contenues dans une même cellule peuvent interagir. Dans chaque cellule, on définit pour des paires de particules arbitrairement choisies une probabilité de collision proportionnelle à la vitesse relative des particules. Puisque les collisions sont réalisées sans prendre en compte la position des particules dans la cellule, un paramètre d'impact doit être défini afin de calculer les vitesses post-collision. L'hypothèse de chaos moléculaire est ici retenue et ce paramètre d'impact est tiré d'une distribution uniforme. L'approche DSMC présente l'avantage d'autoriser des temps de retour relativement faibles même pour des simulations mettant en jeu des centaines de millions de particules. Afin de maintenir l'erreur due à la modélisation stochastique de la partie collisionnelle à des valeurs assez faibles, le système étudié devrait se maintenir dans un régime collisionnel où le libre parcours moyen des particules reste grand devant les tailles de cellules employées pour la partie stochastique, et le temps moyen entre deux collisions grand devant le pas de temps utilisé. Ces limitations restreignant la validité de l'approche DSMC à des valeurs de densité particulaire relativement faibles, de nombreuses variantes de la DSMC ont été proposées afin de généraliser son domaine d'application [213] [154].

Il existe également un formalisme proche de la discrétisation individuelle de la DEM, mais à l'échelle de nuages de particules, appelé MP-PIC [273]. L'utilisation de ce formalisme requiert l'utilisation de modèles de fermeture proches de ceux utilisés dans les modèles Euler-Euler pour représenter les interactions

entre particules au sein des nuages.

2.3 Modélisation des contacts particule-paroi

On discute ici des spécificités de la résolution explicite des contacts particules-paroi dans l'approche sphères molles implémentée dans le cadre de ces travaux. On cherche alors à modéliser la contribution aux termes \mathbf{F}_C de l'équation 2.11 et \mathcal{M}_C de l'équation 2.12 due à la présence des parois.

Les résultats de la section précédente sont à la fois valables pour des collisions particule-particule et particule-paroi, à la différence près que dans ce dernier cas la paroi est considérée comme une particule de masse et de moment d'inertie infinis, et de vitesse et rayon nuls. Pour une collision particule-paroi plane (particule indiquée a , paroi indiquée b), la définition des vecteurs formant la base du système est réadaptée. \mathbf{n}_{ab} se réfère maintenant au vecteur normal unitaire à la paroi et orienté vers l'extérieur, et \mathbf{t}_{ab} est défini par rapport à la vitesse du point de contact, ne dépendant cette fois que de la particule, telle que :

$$\mathbf{u}_{ab}^g = \mathbf{u}_a + r_a \boldsymbol{\omega}_a \wedge \mathbf{n}_{ab}. \quad (2.72)$$

\mathbf{x}_b se rapportant aux coordonnées du centre de la paroi (ou d'un point quelconque situé sur la paroi), la distance de recouvrement particule-paroi plane est obtenue via

$$\delta_{ab} = r_a - |(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a) \cdot \mathbf{n}_{ab}| \quad (2.73)$$

Il s'agit de la distance entre le centre de la particule et son projeté orthogonal sur la paroi. De la même façon que précédemment, l'équation 2.35 peut être intégrée de façon analytique pour une collision binaire, en prenant en considération les expressions suivantes pour la masse effective du système, simplement réduite à celle de la particule :

$$M_{ab} = m_a. \quad (2.74)$$

Il en va de même pour les calculs du rayon et du module d'Young effectif. La pulsation propre du système ne dépend donc plus que de la masse de la particule :

$$\omega_0^2 = \frac{k_n}{m_a}. \quad (2.75)$$

Le code YALES2 permet de définir des paramètres de collision k_n , e_n et μ_d spécifiques aux parois, afin de prendre en compte des différences dans la nature des matériaux mis en jeu. La prise en compte d'une paroi plane ne représente pas de difficulté spécifique d'implémentation, car la définition de son vecteur normal \mathbf{n}_{ab} est unique et obtenue trivialement. La projection du centre de la particule sur le plan de la paroi est également suffisante pour calculer la distance de recouvrement δ_{ab} . L'algorithme de traitement des parois planes est donc extrêmement simple et rapide. Il a été intégré au code, et peut être activé lorsque la géométrie étudiée le permet.

Néanmoins, les systèmes industriels mettant fréquemment en jeu des parois non-planes, comme des parties cylindriques, coniques, ou plus complexes encore comme des jonctions de tuyaux ou des obstacles, un traitement spécifique est alors requis pour traiter les contacts particule-parois. Plusieurs options ont été proposées par divers auteurs pour résoudre ce problème. Parmi eux, la méthode la plus élémentaire est celle des "particules engluées" (en anglais "glued particles") utilisées pour approximer les surfaces géométriques, et donc traiter les interactions particules-parois au travers d'interactions particules-particules. Cette méthode est très utilisée pour modéliser de façon simplifiée des particules de formes

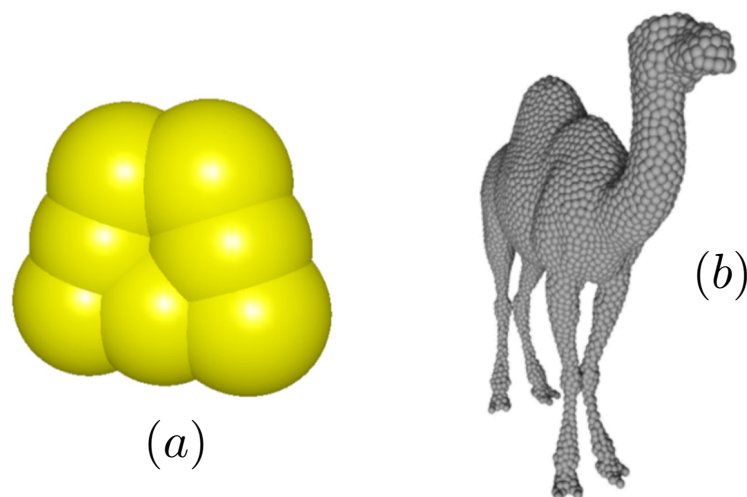


FIGURE 2.2: Exemples de surfaces complexes approximées à l'aide de "sphères engluées". Un grain de maïs [243] (a) et un chameau [27] (b).

diverses, comme des pilules pharmaceutiques [38] ou des aliments [243]. Néanmoins, cette approche souffre d'un manque de précision, en ce qu'elle ne décrit pas parfaitement la géométrie, notamment au voisinage des zones convexes. Pour obtenir une meilleure précision, il est possible d'utiliser davantage de particules engluées, donnant lieu à des contacts simultanés plus fréquents, qui doivent bénéficier d'un traitement particulier [159]. Cette approche peut aussi conduire à des effets semblables à de la rugosité de paroi non-maîtrisés et à des surcoûts de temps de calcul dû à la présence de particules supplémentaires [218]. Enfin, il peut également être nécessaire de faire appel à un outil supplémentaire capable de générer les particules aux localisations idoines [27]. La figure 2.2 illustre deux exemples de surfaces complexes approximées à l'aide de "sphères engluées".

L'algorithme de *Discrete Function Representation* proposé par Williams & O'Connor [323] permet le traitement de nombreux types de formes mais peut impliquer qu'un grand nombre de points soit utilisé pour discrétiser les zones géométriquement complexes. La *finite wall method* étudiée par Kremmer & Favier [168] semble réunir un certain nombre de critères intéressants, mais sous l'hypothèse que la surface des parois peut être discrétisée en éléments triangulaires, dont la position et les dimensions sont contrôlables, ce qui n'est vraisemblablement pas généralement le cas lors de simulations CFD. De plus, cette méthode requiert la définition d'un paramètre empirique appelé "shrink factor". Bien que certains contacts peuvent être élégamment résolus de façon analytique pour certaines formes particulières [58], il apparaît que cette option offre peu de perspectives pour des applications générales 3D. D'autres travaux ont tenté de dépasser ces limitations en proposant des méthodes plus précises et plus robustes, sans toutefois aborder de façon explicite l'obstacle du parallélisme [283]. Wolff & Bucher ont proposé une méthode basée sur des champs de distance de type Level-set pour le traitement des parois complexes [324]. L'utilisation de méthode de type Level-set peut être nécessaire pour le traitement des parois complexes par l'intermédiaire de frontières immergées (méthodes cut-cell), ce qui réclame également l'utilisation de particules miroirs [56]. Une revue intéressante de différentes méthodologies a été entreprise par Lin & Gottschalk [183].

Il est intéressant de noter que la plupart des algorithmes les plus aboutis pour traiter le problème des collisions entre objets complexes est originellement destinée aux domaines de la robotique, de l'animation visuelle ou de la réalité virtuelle. Gilbert, Johnson & Keerthi ont été parmi les premiers à décrire un algorithme itératif pour le calcul de distance entre deux objets quelconques fréquemment appelé *GJK* [117], qui a déjà été implémenté dans des codes de CFD pour la modélisation de particules de formes complexes [313]. Contrairement aux algorithmes précédemment cités, les formes y sont traitées comme des enveloppes convexes formées d'ensemble de points, les opérations géométriques étant réalisées sur des sous-ensembles de points (algorithme dit "simplex-based"). Mirtich [207] dénombre plusieurs améliorations du *GJK*, dont la version proposée par Cameron [52] semble être la plus remarquable. D'autres algorithmes dits "feature-based" [207] ont vu le jour, traitant cette fois-ci les polyèdres comme des ensembles de points, de segments et de faces. Les représentants les plus populaires ont sans doute été proposés par Lin & Canny (algorithme de Lin-Canny) [182], implémenté dans le package de détection de collision I-Collide [66], puis son dérivé amélioré par Mirtich (algorithme Voronoi-clip [207]), ces deux méthodes étant destinées aux collisions de polyèdres 3D quelconques. Ces méthodes sont basées sur l'existence de régions de Voronoi permettant de décomposer géométriquement les zones proches de la paroi. Boon *et al.* [39] ont également proposé une méthode (itérative) légèrement différente pour identifier le point de contact entre deux polyèdres, implémentée dans le code YADE-DEM [166].

L'algorithme implémenté dans le code YALES2 pour détecter l'interaction entre une particule sphérique et une surface de complexité géométrique arbitraire maillée de façon quelconque dans le cadre de la DEM est présenté dans cette section. Il ne requiert aucun paramètre d'entrée et est adapté au parallélisme de type MPI. Ce dernier point revêt une importance particulière : à ce jour et à la connaissance de l'auteur, le problème de parallélisme dans le traitement des parois complexes n'a jamais été explicitement abordé dans la littérature. De plus, il n'utilise aucune hypothèse de type *a priori* car il se base uniquement sur l'état présent de la configuration (schéma dit "exhaustif" [323]), ne nécessite aucun pré-traitement, et ne requiert aucun processus itératif. Il s'appuie sur le fait qu'une particule peut entrer en collision avec seulement trois types d'entités géométriques différentes ; un noeud (ou Vertex, noté V), une paire de noeuds (ou Edge, notée E), ou une Face (notée F), ou encore une combinaison quelconque simultanée de ces trois contacts. Il diffère principalement de l'algorithme de Lin-Canny en raison de sa robustesse et sa capacité à retourner une mesure de la distance de pénétration, nécessaire au calcul des forces de contact, et de l'algorithme Voronoi-clip en ceci qu'elle est spécifiquement destinée au calcul des collisions entre une sphère et un polyèdre, ce qui permet quelques simplifications. Il appartient également à la classe des algorithmes "feature-based".

Comme pour la plupart des méthodes citées ci-dessus, plusieurs phases composent la méthode développée. Chronologiquement, au cours d'une simulation, une première phase de tri spatial est mise en place afin d'éviter de traiter les particules situées à une certaine distance de la paroi, ce qui permet d'emblée de limiter le nombre de contacteurs potentiels. Puis, pour chaque particule proche de la paroi, on cherche à éliminer le plus rapidement possible les éléments géométriques qui en sont éloignés. Cette étape sera décrite dans la section 2.3.3. L'étape suivante est consacrée à l'utilisation de régions de Voronoi afin d'identifier le (ou les) point(s) de la paroi le(s) plus proche(s) de la particule (section 2.3.1). Pour finir, les contacts avérés sont résolus de façon explicite dans la section 2.3.2. Tous les tests présentés dans cette section ont été effectués sur le supercalculateur Curie du CEA (France). Sauf mention contraire, les statistiques ont été collectées sur 1s de temps physique, sur le lit fluidisé de Birmingham

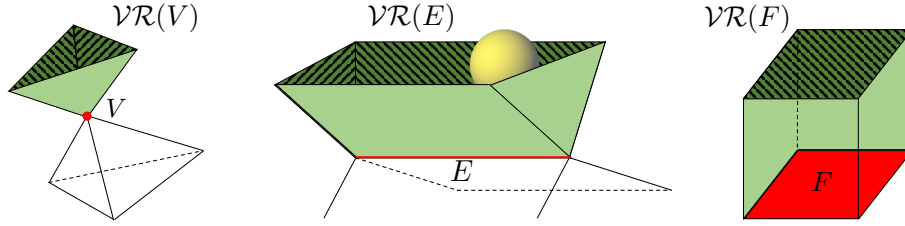


FIGURE 2.3: Régions de Voronoi d'un noeud (vertex) convexe ($\mathcal{VR}(V)$), d'une paire (edge) convexe ($\mathcal{VR}(E)$), et d'une face ($\mathcal{VR}(F)$).

ayant été initialisé durant 2.5s (cf. section 5.4).

Dans cette section, l'interaction d'une unique particule avec une paroi est traitée. Ainsi, l'indice p désigne de nouveau les grandeurs particulaires. La géométrie étant décrite à l'aide de Vertices, d'Edges et de Faces, les grandeurs relatives aux couples particule-vertex sont indicées pV , aux couples particule-edge pE , et aux couples particule-face pF . Par exemple, d_{pV} est la distance séparant la particule d'un vertex.

2.3.1 Utilisation des régions de Voronoi

Les régions de Voronoi sont utilisées pour leur capacité à fournir les éléments géométriques d'une paroi les plus proches d'une particule, afin d'en tirer la plus courte distance particule-paroi. On donne ici la définition d'une région de Voronoi : pour une entité $X \in [F, E, V]$ (pour "Face", "Edge", "Vertex") d'un polyèdre, la région de Voronoi notée $\mathcal{VR}(X)$ est l'ensemble des points de l'espace dont X est l'élément de ce polyèdre le plus proche. L'ensemble des régions de Voronoi de ce polyèdre couvre l'intégralité de l'espace en dehors du polyèdre. Des exemples de \mathcal{VR} sont illustrés sur la figure 2.3.

Il découle de la construction des \mathcal{VR} de chaque élément $X \in [F, E, V]$ des parois du domaine de calcul que :

- Le nombre de plans délimitant les $\mathcal{VR}(F)$ correspond au nombre de paires de noeuds délimitant F ; trois pour un triangle, quatre pour un rectangle etc. Les vecteurs normaux à chacun de ces plans sont donnés par les normales à chaque paire contenues dans le plan défini par F .
- Le nombre de plans délimitant les $\mathcal{VR}(V)$ est égal au nombre de paires connectées à V , et les normales à chacun de ces plans sont simplement égales aux vecteurs directeurs portés par ces paires. Ce nombre ne possède *a priori* pas de limite sur les maillages non-structurés.
- Les $\mathcal{VR}(E)$ sont limités par quatre plans. Les normales à deux de ces plans sont données par les normales à E contenues dans les plans définis par chaque face connectée à E . Les deux autres sont obtenues en prenant le vecteur directeur de E ainsi que son opposé.

Il apparaît que la connaissance des normales aux \mathcal{VR} décrites ci-dessus doit être suffisante pour identifier les éléments d'une paroi les plus proches d'une particule dans les parties convexes, et finalement, toutes les normales des $\mathcal{VR}(E)$ et $\mathcal{VR}(V)$ sont construites et stockées en début de simulation. Nous verrons plus loin que les $\mathcal{VR}(F)$ ne nécessitent pas de stockage. Le calcul est réalisé de telle façon que les normales des \mathcal{VR} pour les éléments communs à plusieurs processeurs sont entièrement connus par chacun de ces processeurs. Pour parvenir à l'identification du point de la paroi le plus proche d'une particule, la méthodologie suivante est retenue. On prend ici l'exemple d'une particule p de rayon r_p de centre P s'approchant d'une paroi maillée avec des triangles.

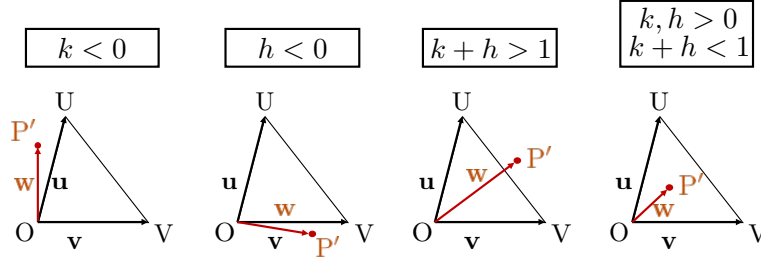


FIGURE 2.4: Les coordonnées du projeté P' , \mathbf{w} , sont exprimées dans le système de coordonnées barycentriques de la face F composée des points O , U et V en utilisant $\mathbf{w} = h\mathbf{u} + k\mathbf{v}$. \mathbf{u} et \mathbf{v} sont les vecteurs de la base, respectivement dirigés de O à U et de O à V . Quatre cas sont représentés. Tout à droite, le cas pour lequel $P' \in \mathcal{VR}(F)$.

1. Projection du point P sur le plan défini par une face F de la paroi. On obtient le projeté nommé P' .
2. Calcul de la distance d_{pF} entre P et P' .
3. En cas de recouvrement ($d_{pF} < r_p$), déterminer si $P' \in F$. Pour le savoir, les coordonnées de P' sont exprimées dans le repère barycentrique de la face. Définissons F comme un triangle borné par les points O , U , et V , et deux vecteurs \mathbf{u} et \mathbf{v} , tel que dessiné sur la figure 2.4.

Les coordonnées de P' dans la base formée par \mathbf{u} et \mathbf{v} sont notés \mathbf{w} et sont donnés par :

$$\mathbf{w} = h\mathbf{u} + k\mathbf{v}, \quad (2.76)$$

où h et $k \in \mathbb{R}$. P' est alors considéré à l'intérieur de $\mathcal{VR}(F)$ si les conditions suivantes sont réunies :

$$P \in \mathcal{VR}(F) \text{ si } \begin{cases} h \geq 0 & \text{et} \\ k \geq 0 & \text{et} \\ h + k \leq 1. \end{cases} \quad (2.77)$$

En prenant le produit scalaire de l'équation 2.76 par \mathbf{v} puis par \mathbf{u} , on peut écrire :

$$h(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}) + k(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}) = \mathbf{v} \cdot \mathbf{w}, \quad (2.78)$$

et

$$h(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}) + k(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}) = \mathbf{u} \cdot \mathbf{w}. \quad (2.79)$$

En multipliant ensuite l'équation 2.78 par $(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u})$ et l'équation 2.79 par $(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})$ et soustrayant les résultats, on obtient :

$$k [(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v})(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}) - (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})^2] = \mathbf{w} \cdot [(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u})\mathbf{v} - (\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})\mathbf{u}]. \quad (2.80)$$

En remarquant que :

$$\det = (\mathbf{v} \cdot \mathbf{v})(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}) - (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})^2 \geq 0, \quad (2.81)$$

il suit finalement que h et k peuvent être calculés, et que :

$$\text{sgn}(k) = \text{sgn}\{\mathbf{w} \cdot [(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u})\mathbf{v} - (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})\mathbf{u}]\}, \quad (2.82)$$

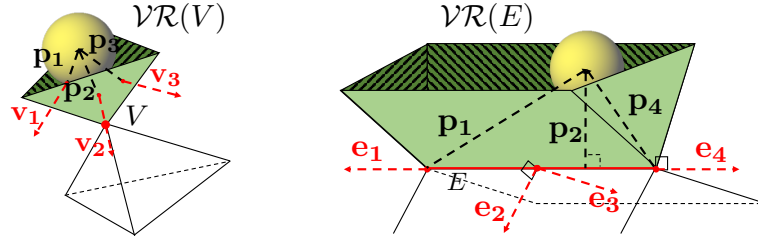


FIGURE 2.5: Sur la gauche, les normales à $\mathcal{VR}(V)$, nommées \mathbf{v}_1 , \mathbf{v}_2 et \mathbf{v}_3 sont tracées avec les vecteurs associés à la particule en approche \mathbf{p}_1 , \mathbf{p}_2 et \mathbf{p}_3 , servant au calcul des produits scalaires. Sur la droite, les normales à $\mathcal{VR}(E)$, nommées \mathbf{e}_1 , \mathbf{e}_2 , \mathbf{e}_3 et \mathbf{e}_4 sont tracées avec les vecteurs associés à la particule en approche \mathbf{p}_1 , \mathbf{p}_2 et \mathbf{p}_4 . \mathbf{p}_3 est identique à \mathbf{p}_2 .

donne le signe de k , tandis que le signe de h est donné par :

$$\text{sgn}(h) = \text{sgn}\{\mathbf{w} \cdot [(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v})\mathbf{u} - (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})\mathbf{v}]\}. \quad (2.83)$$

Comme \mathbf{u} , \mathbf{v} , $(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u})$, $(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v})$, $(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})$ et \det peuvent être stockés au moment de l'initialisation du solveur, seuls \mathbf{w} , $(\mathbf{w} \cdot \mathbf{u})$, $(\mathbf{w} \cdot \mathbf{v})$ nécessitent d'être calculés au cours de la simulation. Pour accélérer ces opérations, on fait en premier lieu l'hypothèse que $P' \in \mathcal{VR}(F)$, puis chaque condition introduite dans l'équation 2.77 est testée consécutivement. Dès qu'une condition n'est pas rencontrée, le test prend fin car on peut conclure que $P' \notin \mathcal{VR}(F)$. Notons que pour traiter les faces quadrangulaires planes, il suffit de les découper en deux triangles sur chacun desquels est réalisé ce test.

4. Si $P' \in F$, alors la particule est actuellement en contact avec F , sa distance à la paroi est d_{pF} et le traitement du contact peut alors être appliqué. L'algorithme passe ensuite au traitement de la face suivante de la paroi. En effet, par définition des régions de Voronoi, $P' \in F$ impose que $P \in \mathcal{VR}(F)$, donc $P \notin \mathcal{VR}(E)$, $\notin \mathcal{VR}(V)$ pour les E et V de F . Si $P' \notin \mathcal{VR}(F)$, le contact entre P et les $E \in F$ doit être testé à son tour.
5. Pour tester un contact particule-edge, la distance d_{pE} entre la particule et la droite définie par le vecteur directeur de E est d'abord calculée.
6. En cas de recouvrement ($d_{pE} < r_p$), l'appartenance de P à $\mathcal{VR}(E)$ est testée en réalisant des produits scalaires entre chaque normale à $\mathcal{VR}(E)$ et le vecteur approprié associé à P , comme représenté sur la figure 2.5, de la façon suivante :

$$P \in \mathcal{VR}(E) \text{ si } \forall i \in \llbracket 1; 4 \rrbracket, \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{e}_i < 0. \quad (2.84)$$

En référence à la figure 2.5, remarquons que pour un edge, \mathbf{p}_3 est égal à \mathbf{p}_2 . Là encore, pour accélérer le processus, on suppose d'abord que $P \in \mathcal{VR}(E)$, puis chaque produit scalaire est consécutivement calculé. Le test prend fin dès qu'un résultat positif vient invalider cette hypothèse.

7. Si $P \in \mathcal{VR}(E)$, la particule collisionne actuellement E , sa distance la plus courte à la paroi est donnée par d_{pE} , et le calcul des forces de contact peut être effectué. L'algorithme passe alors au traitement de la prochaine face, puisque les $\mathcal{VR}(V)$ n'ont pas besoin d'être testés. Dans le cas contraire, le contact entre P et chaque $V \in F$ est testé.
8. Pour vérifier un contact particule-vertex, la distance d_{pV} entre la particule et V est d'abord calculée.

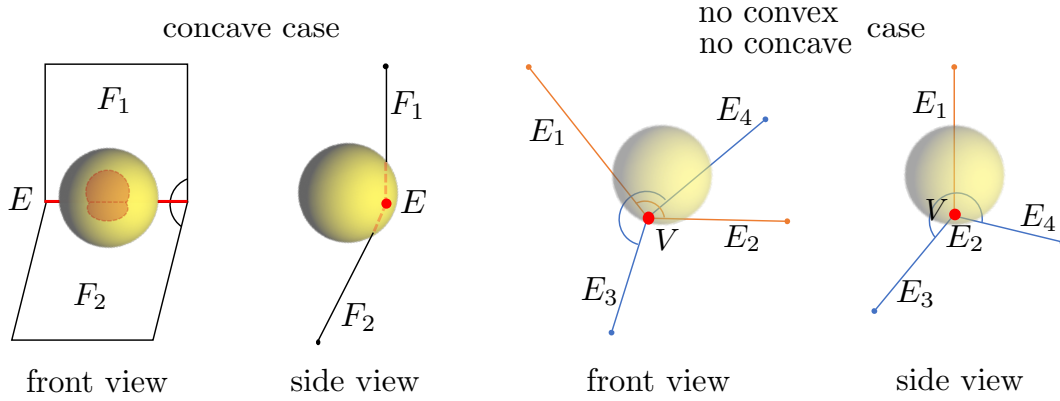


FIGURE 2.6: À gauche : cas classique concave. La particule recouvre les faces F_1 , F_2 et l'edge E dans les zones en rouge pâle. L'algorithme implémenté détectera que $P \in \mathcal{VR}(F_1)$, $P \in \mathcal{VR}(F_2)$ mais $P \notin \mathcal{VR}(E)$. Ainsi, les forces de répulsion ne seront calculées qu'à partir de F_1 et F_2 bien que la particule recouvre également E . À droite, cas indéfini présentant des zones convexes et concaves, mettant en jeu un angle $> 180^\circ$ (—) et un angle $< 180^\circ$ (—). La particule recouvre tous les edges ainsi que le vertex V . L'algorithme détectera que $P \in \mathcal{VR}(E_1)$, $P \in \mathcal{VR}(E_2)$ mais $P \notin \mathcal{VR}(V)$, $P \notin \mathcal{VR}(E_3)$ et $P \notin \mathcal{VR}(E_4)$. Ainsi, les forces de répulsion sur la particule seront seulement calculées pour E_1 et E_2 .

9. En cas de recouvrement, *i.e.* $d_{pV} < r_p$, on cherche à savoir si $P \in \mathcal{VR}(V)$. Pour ce faire, on vient calculer les produits scalaires entre chaque normale à $\mathcal{VR}(V)$ et le vecteur approprié associé à P , comme représenté sur la figure 2.5, de la façon suivante :

$$P \in \mathcal{VR}(V) \text{ si } \forall i \in \llbracket 1; \text{nombre d'edges connectés à } V \rrbracket, \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{e}_i < 0. \quad (2.85)$$

De la même façon que précédemment, ces étapes sont accélérées en faisant d'abord l'hypothèse que $P \in \mathcal{VR}(V)$, invalidée dès qu'un produit scalaire est trouvé supérieur à 0.

10. Si $P \in \mathcal{VR}(V)$, alors la particule est actuellement en contact avec V , sa plus courte distance à la paroi est d_{pV} , et le calcul des forces de contact associées peut être entrepris. Dans ce cas, L'algorithme passe au traitement de la face suivante. En effet, les contacts multiples doivent être envisagés.

Cette méthodologie permet de traiter plusieurs contacts simultanés entre une particule et de quelques entités géométriques dans les parties convexes. De plus, dans les régions concaves telle que celle dessinée sur la figure 2.6, l'orientation des vecteurs empêche de façon systématique que la particule prenne l'élément E (concave ici) en considération, tandis qu'elle pourra contacter de façon simultanée les deux faces liées à E . La figure 2.6 révèle aussi un bon comportement de l'algorithme dans des cas plus complexes pouvant se produire lorsqu'un vertex possède des connexions avec plus de trois edges. À l'aide de conditions de sorties adaptées, l'algorithme présenté empêche également une particule de détecter des contacts avec plusieurs entités appartenant à une même face. En effet, si une particule appartient à $\mathcal{VR}(F)$, alors les E et $V \in F$ ne requièrent aucun test, par unicité des \mathcal{VR} . De plus, dès qu'une particule est trouvée en contact avec un $E \in F$, les E et V restants sont ignorés, et l'algorithme passe au traitement de la face suivante. De même lorsqu'une particule est trouvée dans une $\mathcal{VR}(V)$, les vertices suivants appartenant à la même face sont rejetés.

2.3.2 Résolution du contact

À ce stade de l'avancement, le ou les différent(s) type(s) de contact(s) à traiter pour chaque particule est(sont) connu(s). L'étape finale de l'algorithme de traitement des parois complexes consiste à calculer la quantité de mouvement due aux forces répulsives et le couple exercés sur la particule par la paroi. Comme explicité plus haut, la force de collision totale exercée sur une particule en contact avec une paroi est prise comme la somme des forces exercées par chaque élément de la paroi en contact avec cette particule. Ces interactions particules-paroi sont décomposées en une composante normale et une composante tangentielle de la même façon que les interactions particule-particule.

Pour décrire la force répulsive exercée par un élément d'une paroi sur une particule, un vecteur normal unitaire ainsi qu'une mesure de la distance de pénétration entre les deux objets doivent être fournis. Comme dans la majorité des travaux traitant de ce problème dans le cadre de la DEM, les contacts sont traités en considérant un unique point d'impact, malgré le fait que les volumes recouverts peuvent révéler diverses formes. En se référant aux différents cas schématisés sur la figure 2.7, le traitement des contacts particule-face est trivial et consiste en la construction d'un vecteur unitaire \mathbf{n}_{pF} normal au plan contenant la face, et d'une distance de recouvrement notée δ_{pF} . Introduisons \mathcal{N}_E comme le nombre d'edges délimitant une face, \mathbf{n}_{pF} et δ_{pF} sont obtenus par :

$$\mathbf{n}_{pF} = \frac{\mathbf{n}_{pF}^*}{\|\mathbf{n}_{pF}^*\|} \quad \text{avec} \quad \mathbf{n}_{pF}^* = \frac{1}{\mathcal{N}_E} \sum_{i \in \mathcal{N}_E} \mathbf{e}_i \wedge \mathbf{e}_{i+1}, \quad (2.86)$$

$$\delta_{pF} = r_p - (\mathbf{x}_F - \mathbf{x}_p) \cdot \mathbf{n}_{pF}, \quad (2.87)$$

où \mathbf{e}_i est le vecteur directeur de l'edge E_i , orienté de façon à ce que $\mathbf{e}_i \wedge \mathbf{e}_{i+1}$ soit un vecteur orienté vers l'extérieur du domaine, et \mathbf{x}_F est le vecteur coordonnée du centre de la face.

Le traitement des contacts particule-edge consiste à construire un vecteur unitaire \mathbf{n}_{pE} normal à l'edge orienté du centre de la particule vers l'edge, ainsi qu'une distance de recouvrement δ_{pE} . Notons E_i cet edge, composé des points A et B :

$$\mathbf{n}_{pE} = \frac{\mathbf{n}_{pE}^*}{\|\mathbf{n}_{pE}^*\|} \quad \text{avec} \quad \mathbf{n}_{pE}^* = [(\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_A) \cdot \mathbf{e}_i] \mathbf{e}_i - (\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_A), \quad (2.88)$$

$$\delta_{pE} = r_p - [((\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_A) \cdot \mathbf{e}_i) \mathbf{e}_i - (\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_A)] \cdot \mathbf{n}_{pE}, \quad (2.89)$$

où $\mathbf{e}_i = \mathbf{x}_B - \mathbf{x}_A$ est le vecteur directeur de E_i .

Enfin, le traitement des contacts particule-vertex consiste à construire un vecteur unitaire \mathbf{n}_{pV} orienté depuis le centre de la particule vers le noeud, et une distance de recouvrement δ_{pV} tel que :

$$\mathbf{n}_{pV} = \frac{\mathbf{n}_{pV}^*}{\|\mathbf{n}_{pV}^*\|} \quad \text{avec} \quad \mathbf{n}_{pV}^* = \mathbf{x}_V - \mathbf{x}_p, \quad (2.90)$$

$$\delta_{pV} = r_p - (\mathbf{x}_V - \mathbf{x}_p) \cdot \mathbf{n}_{pV}, \quad (2.91)$$

où \mathbf{x}_V est le vecteur coordonnée du vertex. Dans ce formalisme, on peut remarquer que la résolution d'un contact particule-edge est équivalent à celui d'un contact avec une face dont le plan est orthogonal à \mathbf{n}_{pE} . De la même façon, la résolution d'un contact particule-vertex est équivalent à un contact avec une face dont le plan est orthogonal à \mathbf{n}_{pV} . Ceci constitue une hypothèse forte à la base de nombreuses méthodes de calcul de collisions, dont la méthode présentée dans ces travaux. L'évolution temporelle de la distance de recouvrement entre une particule et une face, puis un edge et enfin un vertex est représentée sur la

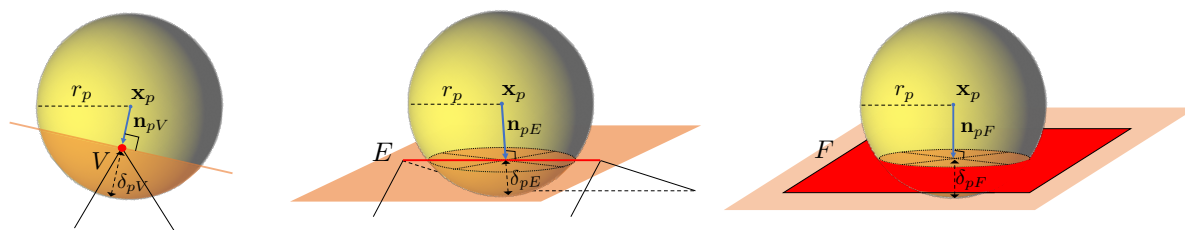


FIGURE 2.7: Une particule de rayon r_p dont le centre a pour coordonnées \mathbf{x}_p est représentée en contact (ici de façon exagérée) avec un vertex (à gauche), un edge (au centre) et une face (à droite). Les vecteurs normaux unitaires considérés pour le calcul des forces de collision sont respectivement indiqués par \mathbf{n}_{pV} , \mathbf{n}_{pE} et \mathbf{n}_{pF} . Les distances de recouvrement sont respectivement indiquées par δ_{pV} , δ_{pE} et δ_{pF} . Pour ces trois éléments géométriques, la méthode utilisée considère le contact de la même façon qu'avec les plans en rouge pale, orthogonaux aux vecteurs normaux représentés et contenant ces éléments.

figure 2.8. Les résultats obtenus sont comparés aux solutions analytiques adimensionnées 2.45 et 2.46, et exhibent les comportements identiques attendus. L'algorithme ne permettant pas de savoir quels objets ont déjà été traités pour une particule, il apparaît que pour les contacts particule-vertex et particule-edge, chaque face connectée va détecter le même contact. Ceci résultera dans une force de répulsion trop importante puisque calculée plusieurs fois. Pour faire face à cette limitation, toutes les forces exercées par des edges sont divisées par deux, et celles exercées par des vertices sont divisées par le nombre de faces y étant connectées. Les comportements identiques observés sur la figure 2.8 montrent que ces multiplicités sont bien comptabilisées.

2.3.3 Sélection spatiale et détecteur de non-collision

De nombreux travaux étudiant les collisions dans un contexte de géométries complexes reportent des coûts élevés, et il apparaît que la construction d'une liste d'objets potentiellement contactants relève de la plus haute importance pour éviter une vaste majorité d'opérations inutiles. Le surcoût engendré est particulièrement visible dans le cas des schémas dits "exhaustifs" précédemment introduits. En guise d'exemple, le cas du lit fluidisé de Birmingham révèle que :

- plus de 99.9% du temps CPU total est dédié au traitement des parois pour une approche brute, où chaque particule doit vérifier son contact avec chaque face de chaque paroi.
- En moyenne, seulement 1% des particules sont en réalité en train de collisionner un élément géométrique quelconque à un instant donné.
- Une particule effectivement en contact avec la paroi collisionne rarement plus d'un élément géométrique à un instant donné, soit une infime fraction de l'ensemble des composants de la paroi.

Ces faits dévoilent ainsi d'impressionnantes perspectives d'améliorations si une sélection spatiale antérieure permet d'ignorer les particules assez distantes des parois. Dans un second temps, une partie de l'algorithme appelée le détecteur de non-collision est chargée d'éliminer rapidement les éléments géométriques les plus lointains d'une particule ayant passée l'étape de sélection spatiale. On décrit d'abord le détecteur de non-collision.

A priori, les tests d'appartenance aux \mathcal{VR} introduits dans la section 2.3.1 pour chaque particule doivent être effectués pour chaque V , E et F de chaque paroi. Afin de minimiser le coût de ces re-

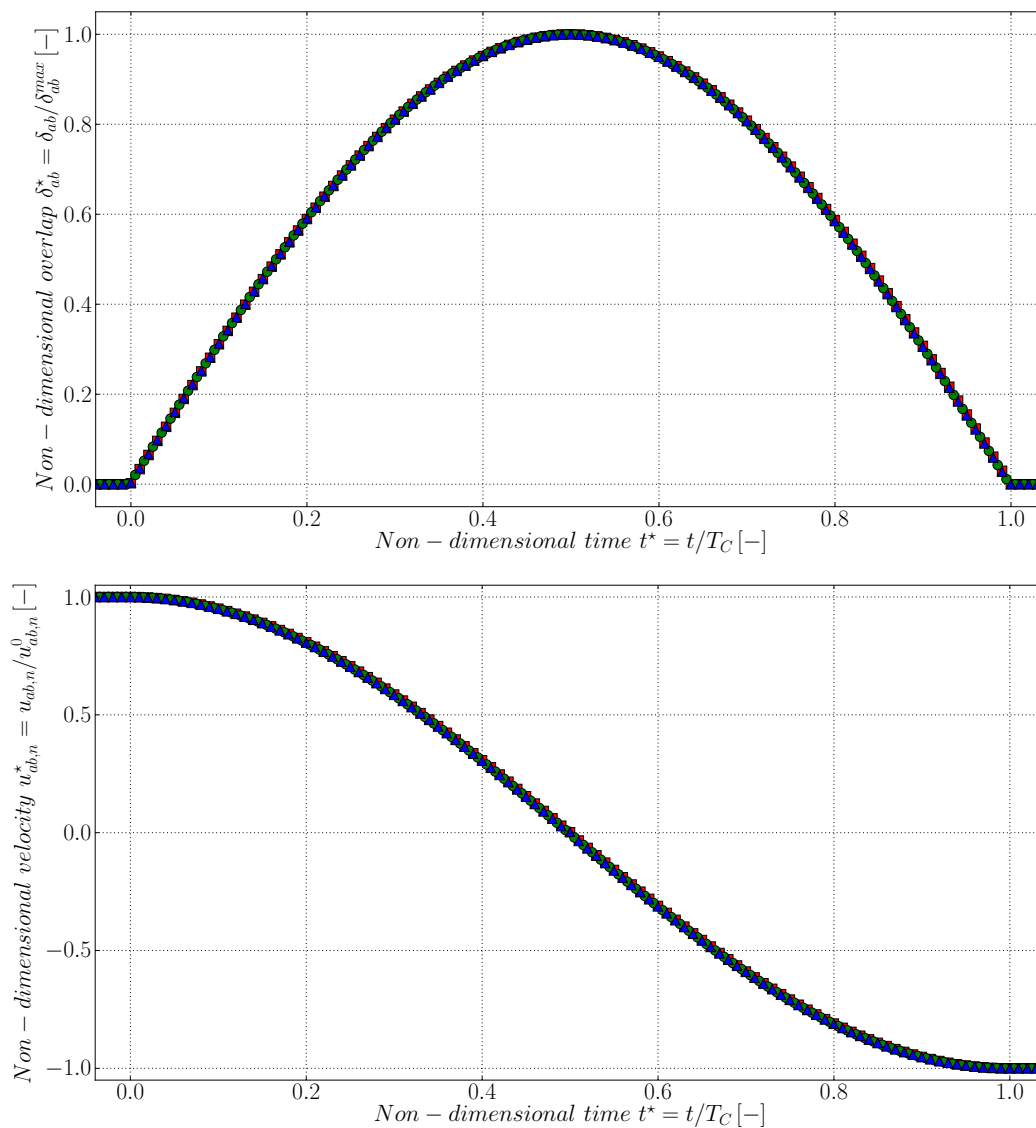


FIGURE 2.8: Distance de recouvrement (en haut) et vitesse normale (en bas) adimensionnalisées en fonction d'un temps adimensionnalisé au cours d'un contact non-amorti particule-face (\blacktriangle), particule-edge (\blacksquare) et particule-vertex (\bullet). L'intégration temporelle est réalisée à l'aide d'un schéma numérique RK2 avec $\Delta t_p = T_C/100$. Comparaison avec les résultats analytiques (—).

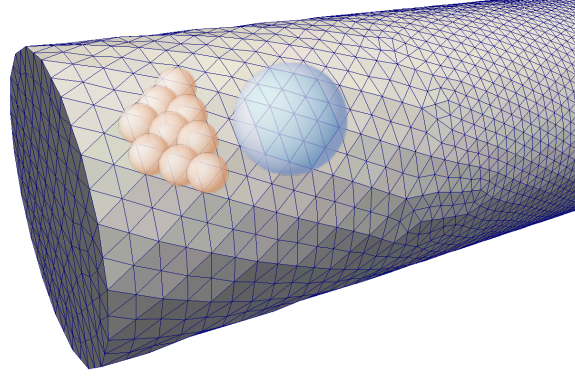


FIGURE 2.9: Domaine cylindrique maillé avec des tétraèdres. Un Boundary Face Group (BFG) et sa Bounding Sphere (BSBFG) sont représentés avec des couleurs bleutées. Des Bounding Sphere of Faces (BSF) sont visibles en couleur orangée.

cherches, une nouvelle structure de données est créée au sein du code, à partir de groupes de faces adjacentes appartenant à une même paroi. Ces structures sont nommées "Boundary Face Groups" ou simplement BFG (voir figure 2.9). Ces BFGs contiennent l'ensemble des métriques et connectivités nécessaires, ainsi que les normales aux \mathcal{VR} définies précédemment. Ils renferment également d'autres données géométriques utilisées pour estimer des distances :

- le centre et le rayon de la sphère englobante de chaque BFG, appelée "Bounding Sphere of BFG" (BSBFG), sont respectivement calculés en utilisant le barycentre de l'ensemble des vertices contenus dans le BFG ainsi que la distance entre ce centre et le vertex du BFG le plus lointain, puis stockés. Ils sont respectivement notés \mathbf{x}_{BSBFG} et r_{BSBFG} .
- De la même façon, le centre et le rayon des sphères englobantes de chaque face d'un BFG, appelées "Bounding Sphere of Face" (BSF), sont également calculés et stockés. Ils sont respectivement notés \mathbf{x}_{BSF} et r_{BSF} .

Ces opérations préalables trouvent leur justification dans le fait que vérifier l'intersection de deux sphères est une opération à la fois simple, et parmi les plus rapides. Dans la littérature, on retrouve ce type de technique sous l'appellation "sphere-tree" [145]. Elle consiste à hiérarchiser les tests en utilisant des sphères qui décrivent la paroi de plus en plus finement. Selon les applications, le nombre de niveaux de hiérarchisation peut varier. Dans ces travaux, une hiérarchie à deux niveaux est adoptée : le premier niveau correspond aux BSBFGs "parents", et chaque BSBFG renferme des BSF "filles", qui constituent le second niveau. Dans la même optique, d'autres méthodes de sélection spatiale, telle que la "grid method", la "body-based cells" ou encore la méthode "octree" ont été développées [323].

La procédure permettant la mise en oeuvre de cette hiérarchie est donc simplement :

1. Une particule p boucle sur chaque BFG connu du processeur auquel elle appartient. Les BFGs sont écartés si :

$$\|\mathbf{x}_{BSBFG} - \mathbf{x}_p\|^2 > (r_{BSBFG} + r_p)^2, \quad (2.92)$$

et sélectionnés dans le cas contraire.

2. Pour chaque BFG sélectionné, p boucle ensuite sur chaque BSF "fille". Les BSFs sont écartées si :

$$\|\mathbf{x}_{BSF} - \mathbf{x}_p\|^2 > (r_{BSF} + r_p)^2. \quad (2.93)$$

et sélectionnées dans le cas contraire.

3. Finalement, seules les faces dont la sphère englobante intersecte p sont traitées par l'algorithme présenté dans la section 2.3.1.

Les grandeurs \mathbf{x}_{BSBFG} , r_{BSBFG} , \mathbf{x}_{BSF} et r_{BSF} sont calculées et stockées une fois durant l'initialisation du solveur, si bien que seuls les carrés ont besoin d'être calculés. Ceci évite le calcul coûteux des racines carrées. On passe maintenant à la description de l'étape de sélection spatiale.

L'étape de sélection spatiale est la toute première, en terme de chronologie, pour le traitement des parois complexes. Elle est utilisée pour empêcher les tests inutiles pour les particules éloignées des parois. En effet, il est clair qu'une sélection spatiale optimale est capable d'écarter toutes les particules dont la distance à la paroi excède leur rayon. Cette toute première étape s'intéresse donc à l'identification des cellules de maillage recouvrant la surface des parois, de façon à ce que seules les particules localisées dans ces cellules soient traitées par le détecteur de non-collision précédent. Ce problème ressemble à celui qui sera traité pour le parallélisme, abordé dans le Chapitre 3. Ce problème se formule dans les mêmes termes : l'identification des cellules proches de la paroi peut être facilement réalisée sur des maillages réguliers, cependant l'opération requiert plus d'efforts sur des maillages non-structurés, puisque des hétérogénéités locales des tailles de mailles peuvent être rencontrées. La première option consiste à marquer des couches de cellules successives jusqu'à ce que l'on juge l'épaisseur du halo suffisante pour ne manquer aucun contact. Sur des maillages non-structurés, en l'absence d'une véritable prescription sur la distance, cette technique ne permet pas d'assurer que la taille du halo est suffisante pour détecter tous les contacts. De plus, elle peut conduire à une réduction des performances, en ceci qu'elle peut identifier un nombre important de cellules non désirées. Au contraire, l'approche implémentée dans ces travaux s'en tient à un calcul local exact de la distance, permettant ainsi l'identification de davantage d'éléments dans les zones raffinées, et moins dans les zones grossières. L'objectif est de calculer la distance exacte entre un noeud intérieur du maillage et la paroi, afin de savoir si les éléments de maillage qui lui sont associés doivent être identifiés.

La technique consiste simplement à appliquer l'ensemble de la méthode dédiée aux traitement des contacts particule-paroi, *i.e.* le détecteur de non-collision (section 2.3.3), les régions de Voronoi \mathcal{VR} (section 2.3.1) et la résolution du contact (section 2.3.2), pour l'adapter à ce problème d'évaluation de la distance noeud-paroi. Notons $d_{min} = r_p$ la distance minimale exacte de la paroi à laquelle on doit identifier les cellules. Le processus suivant décrit les opérations effectuées :

1. Marquer les noeuds appartenant à la paroi (formant les noeuds de niveau 0) et chaque élément de maillage contenant au moins un noeud de niveau 0 (formant les éléments de niveau 0).
2. Les noeuds non-marqués des éléments de niveau 0 sont désormais marqués 1 (formant les noeuds de niveau 1).
3. Les noeuds de niveau 1 passent par le détecteur de non-collision afin d'identifier les faces de la paroi les plus proches.
4. Les noeuds de niveau 1 réalisent les tests d'appartenance aux $\mathcal{VR}(F)$, $\mathcal{VR}(E)$ et $\mathcal{VR}(V)$ (voir section 2.3.1).
5. Les noeuds de niveau 1 passent l'algorithme de résolution du contact (section 2.3.2) afin de déterminer leur distance exacte à la paroi d , sans toutefois nécessiter le calcul de forces de collision. Si $d \leq d_{min}$, les éléments de maillages contenant le noeud sont marqués 1. Les noeuds non-marqués de ces éléments sont marqués 2.

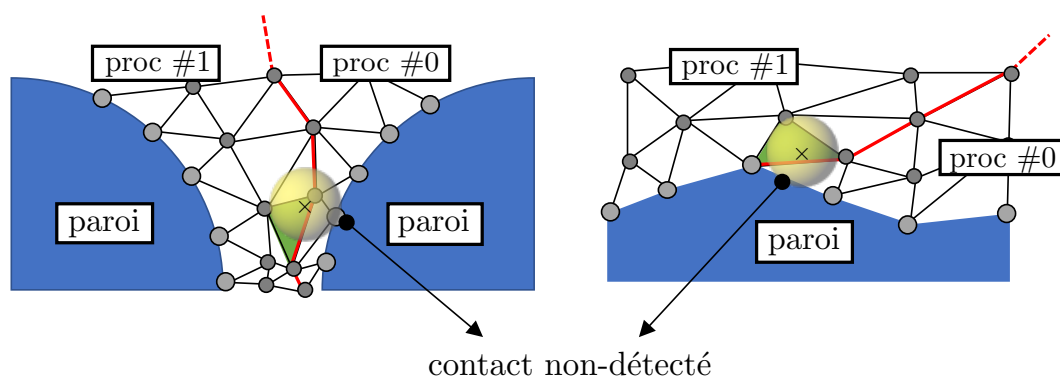


FIGURE 2.10: Illustration de deux cas de contacts non-déTECTABLES sans traitement parallèle spécifique, ici exagérés pour l'exemple. Le centre de la particule réside dans la cellule verte contenue dans le domaine de calcul du processeur #1. À gauche, à cause d'un rétrécissement local de la géométrie, les mailles sont déformées, et atteignent localement une taille plus petite que celle de la particule. Celle-ci est en train de collisionner la paroi de droite, localisée sur le processeur #0. À droite, un cas beaucoup plus courant car indépendant du maillage employé : au niveau de l'interface de deux processeurs et de la paroi, le point de contact entre la particule et la paroi est située sur un autre processeur.

6. On répète ensuite l'étape 3 en incrémentant le niveau des noeuds et des éléments jusqu'à ce qu'il n'y ait plus de noeuds non-marqués à une distance $d \leq d_{min}$ de la paroi.

En cas de maillage statique, ce procédé n'est réalisé qu'une fois par simulation. Le cas de Birmingham montre qu'en moyenne plus de 91% des particules sont éliminées par le processus de sélection spatiale. Ensuite, le passage par le détecteur de non-collision donne une moyenne de 2.5 BSF intersectées par particule proche de la paroi. Ceci permet de réduire grandement le nombre de tests à réaliser sur les \mathcal{VR} . Finalement, toujours sur les mêmes simulations, ces différents gains en sélectivité et en affinement de domaine de recherche permettent au processeur le plus lent de passer moins de 4% de son temps de calcul sur le traitement des contacts particule-paroi complexe.

2.3.4 Gestion du parallélisme

En raison des infinies possibilités de configurations de géométrie et de maillage, un objet peut se trouver très proche d'une paroi sans pour autant qu'ils soient localisés sur le même processeur. Deux cas présentant ce problème sont représentés sur la figure 2.10.

Pour pallier ce problème, on peut procéder de manière brutale et répartir l'ensemble des BFGs sur l'intégralité des processeurs, afin de garantir la détection de tous les contacts. En effet, comme il a déjà été précisé, les BFGs sont construits de façon à ce qu'ils contiennent l'intégralité de l'information géométrique nécessaire au traitement des contacts. L'implémentation d'une telle méthode risque cependant de conduire à de très nombreux tests inutiles, d'autant plus que la majorité des particules réside dans la partie basse des systèmes à lit fluidisé. L'option qui a été préférée est de se reposer sur la liste des communicateurs externes pour les particules (PTEXTCOMMs), dont la création est discutée dans la section 3.2.2. Il s'agit d'une structure propre à chaque processeur, qui renferme notamment la liste de ses plus proches voisins, basée sur un critère de distance. En utilisant une méthode proche de celle explorée dans les paragraphes précédents, il est possible d'identifier les BFGs des processeurs les plus proches. Des copies de ces BFGs sont ensuite envoyées vers les processeurs les plus proches, afin de constituer

des BFGs fantômes (ghost BFGs). Finalement, les ghost BFGs sont traités par chaque processeur comme leurs BFGs locaux lors du passage au travers du détecteur de non-collision (section 2.3.3).

De plus, au sujet de la construction des régions de Voronoi, on précise que le calcul est réalisé de telle façon que les normales des \mathcal{VR} pour les éléments communs à plusieurs processeurs sont entièrement connues par chacun de ces processeurs. Les multiplicités utilisées pour calculer les forces exercées par des éléments géométriques partagés sont elles aussi calculées de façon parallèle en début de simulation. Finalement, durant le traitement des parois complexes au cours de la simulation, et contrairement aux contacts particules-particules, aucune étape ne nécessite d'appel parallèle.

La méthode définitive rassemblant chacune des étapes décrites dans la section 2.3 pour le traitement des contacts particule-paroi complexe, *i.e.* la sélection spatiale et le détecteur de non-collision (section 2.3.3), les régions de Voronoi \mathcal{VR} (section 2.3.1) et la résolution du contact (section 2.3.2), est visible sur le diagramme de la figure 2.11.

2.4 Modélisation des interactions fluide-particules

2.4.1 Interactions hydrodynamiques

La description précise du mouvement des particules solides dans les milieux visqueux est d'une importance fondamentale pour la modélisation des écoulements particulaires. Elle nécessite une bonne connaissance des différentes forces exercées sur une inclusion par le milieu environnant. Cependant, l'intégrale présente dans les équations 2.14 et 2.15 n'est pas calculable directement dans le formalisme DEM-CFD, par manque de résolution. On recourt alors à des modèles de fermeture, qui sont détaillés dans cette section.

Le mouvement de particules sphériques rigides dans un écoulement turbulent est un sujet de recherche ancien. La première approche théorique s'appliquant à une particule ponctuelle ($d_p \rightarrow 0$) immergée dans un fluide visqueux avec une faible vitesse relative a d'abord été effectuée par Stokes [281] dès 1851. Dans ce cadre d'étude il dérivait une expression pour décrire les forces visqueuses agissant sur la particule :

$$m_p \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = 3\pi d_p \nu \rho (\mathbf{u}_{@p} - \mathbf{u}_p). \quad (2.94)$$

$\mathbf{u}_{@p}$ correspond à la notation compacte de $\mathbf{u}(\mathbf{x}_p, t)$; la vitesse de fluide à la position de la particule. Pour cette section ainsi que la totalité du reste de l'exposé, cette notation est adoptée pour tout champ eulérien pris à l'endroit de la particule. L'opérateur d'interpolation nécessaire à son calcul est détaillé dans la section suivante. Cette force est connue sous le nom de force de Stokes et correspond à la plus simple expression pour décrire le mouvement d'une particule dans un fluide visqueux. On peut alors déduire l'expression du nombre de Stokes adimensionnel, qui compare les échelles temporelles les plus rapides d'un écoulement turbulent τ_η avec le temps de réponse d'une particule τ_p , tels que :

$$\tau_\eta = \sqrt{\nu/\epsilon} = \eta^2/\nu \quad \text{et} \quad \tau_p = \frac{\rho_p}{\rho} \frac{d_p^2}{18\nu}, \quad (2.95)$$

où ϵ et η sont respectivement le taux de dissipation de l'énergie et l'échelle de Kolmogorov. L'expression

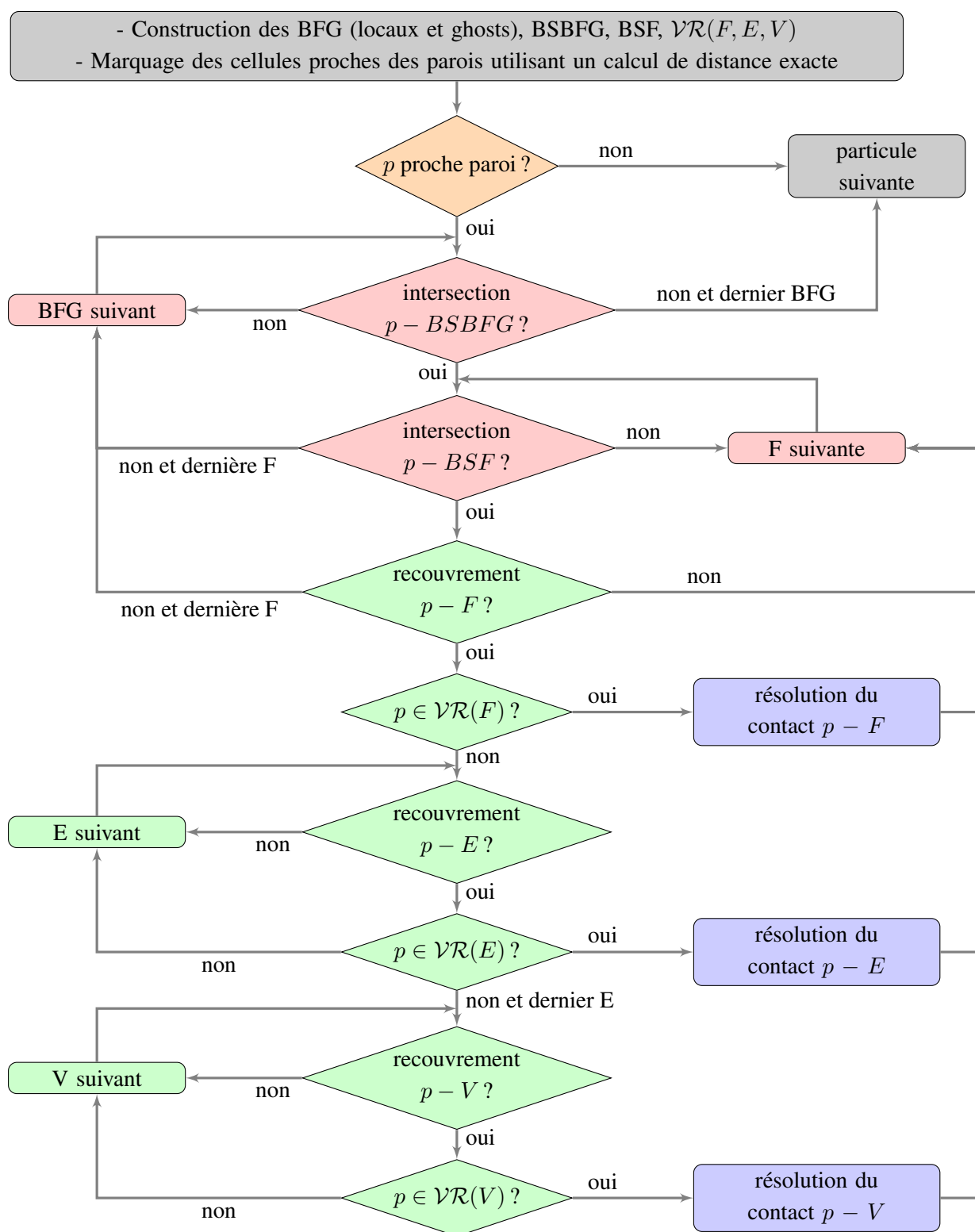


FIGURE 2.11: Diagramme définitif de la procédure suivie par une particule p pour traiter les contacts avec les parois complexes. ■ : initialisation et sortie. ■ : sélection spatiale. ■ : détecteur de non-collision. ■ : tests des \mathcal{VR} . ■ : résolution du contact.

du nombre de Stokes St est alors donnée par :

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_\eta} = \frac{1}{18} \frac{\rho_p}{\rho} \left(\frac{d_p}{\eta} \right)^2. \quad (2.96)$$

Les comportements asymptotiques exhibés par le nombre de Stokes sont :

- Pour $St \ll 1$: le temps de réponse de la particule est beaucoup plus petit que celui associé aux plus petites échelles de longueur de l'écoulement turbulent. La particule peut être considérée comme un traceur, elle suit parfaitement la dynamique de l'écoulement.
- Pour $St \gg 1$: le temps de réponse de la particule est grand devant celui de l'écoulement, ainsi la particule ne suit pas la dynamique de ce dernier et adopte un comportement différent.

Le nombre de Stokes pourrait *a priori* capturer les effets liés à la taille et à la densité sur le mouvement d'une particule. Cependant il convient de noter que le terme d_p présent dans l'équation 2.96 ne représente qu'un "diamètre virtuel" de particule puisque les particules sont toujours supposées ponctuelles. En particulier, un nombre de Stokes spécifique peut être reproduit par plusieurs combinaisons de rapport de densité particule/fluide et de taille de particules, et bien que l'équation 2.96 suggère que les particules présentant les mêmes nombres de Stokes réagissent de la même manière, il n'en est rien [158]. Les particules, fussent-elles ponctuelles, réagissent différemment aux contraintes fluides, et plus de paramètres doivent être pris en compte afin d'expliquer leur comportement. Après les premières études de Stokes [281], d'autres ont suivi, telles que celles de Basset [22], Boussinesq [41], et Oseen [221] sur le mouvement rectiligne et instationnaire d'une sphère rigide dans un fluide incompressible au repos. Tchen [294] développa ensuite une équation pour décrire le mouvement d'une sphère rigide se déplaçant dans un écoulement non uniforme instationnaire, qui sera plus tard corrigée par Corrsin & Lumley [70]. L'équation qui sert en général de base dans les travaux récents est celle obtenue simultanément par Maxey & Riley [198] et Gatignol [113] en 1983 pour une sphère ponctuelle, théoriquement obtenue pour de faibles nombres de Reynolds :

$$m_p \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = (m_p - m)\mathbf{g} + m \frac{D\mathbf{u}_{@p}}{Dt} + 3\pi d_p \nu \rho (\mathbf{u}_{@p} - \mathbf{u}_p) + \frac{1}{2} m \left(\frac{D\mathbf{u}_{@p}}{Dt} - \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} \right) + \frac{3}{2} d_p^2 \rho \sqrt{\pi \nu} \int_0^t \left[\frac{d(\mathbf{u}_{@p} - \mathbf{u}_p)}{d\tau} \right] \frac{d\tau}{\sqrt{t-\tau}}, \quad (2.97)$$

où m est la masse de fluide déplacée. Le premier terme de droite dans l'équation contient la contribution gravitationnelle et celle de la poussée d'Archimède (dans sa version statique). Le second représente l'accélération de l'élément fluide à la position de la particule. Le troisième est la force de Stokes déjà discutée. Le quatrième est le terme de masse ajoutée, qui prend en compte le déplacement d'une certaine quantité de fluide quand la particule se déplace relativement par rapport à ce dernier. Le dernier terme est appelée la force d'histoire de Basset-Boussinesq. Cette force de "mémoire" dépend essentiellement de la diffusion de la vorticité dans le fluide environnant et traduit l'effet des perturbations de l'écoulement, causées par l'accélération de la particule. Une revue historique reprenant de façon plus précises les concepts abordés ici est disponible dans les travaux de Michaelides [203] ou d'Abbad [5]. La prise en compte de la force d'histoire dans les simulations numériques est problématique. En effet, dans ce cas, l'équation régissant le mouvement d'une particule devient une équation intégro-différentielle implicite vis-à-vis de la vitesse de la particule, qui nécessite l'emploi de transformations (Laplace, Fourier), ou bien d'une méthode itérative pour estimer une solution numérique. Il en résulte un surcoût qui conduit

généralement à l'oubli de cette force dans les codes de calcul [203]. La poussée d'Archimède étant la manifestation statique de la force associée au gradient de pression dans le fluide \mathbf{F}_P , celle-ci est incorporée dans le bilan de quantité de mouvement sur les particules (voir équation 2.11). \mathbf{F}_P s'écrit alors :

$$\mathbf{F}_P = -V_p \nabla P_{@p}, \quad (2.98)$$

où $\nabla P_{@p}$ est le gradient de pression local interpolé au centre de la particule. Comme dans la plupart des travaux semblables, on fait l'hypothèse que les hauts ratios de densité particule/fluide rendent négligeables les forces de masse ajoutée, d'accélération de l'élément fluide, aussi bien que celle d'histoire. L'expression actuelle de la force de traînée (force de Stokes) nécessite quelques ajustements présentés ici avant d'être ajoutée à l'équation 2.11.

Plusieurs études dont celle de Volk *et al.* [310] ont montré que les particules de taille finie ne pouvaient être décrites comme ponctuelles. La modélisation de la dynamique de telles particules, prenant en compte le fait que les forces provenant du fluide sont exercées sur son volume entier, est néanmoins encore moins aisée. Les corrections apportées par Faxén [101] à l'expression de Stokes consistent à remplacer $\mathbf{u}_{@p}$ par l'intégrale de la vitesse non-perturbée de l'écoulement prise sur la surface de la particule, ce qui permet la prise en compte de la non-uniformité de l'écoulement. Il a été montré de façon numérique et expérimentale que ces corrections peuvent en effet améliorer les prédictions [51]. Le calcul de $\mathbf{u}_{@p}$ est obtenu par interpolation de la vitesse du fluide aux noeuds voisins vers le centre de la particule (voir section 2.5), et ne relève pas directement de ces corrections, mais prend indirectement en considération la non-uniformité de l'écoulement. Ce dernier est malgré tout perturbé par la présence de la particule.

D'autres travaux ont eu pour objectif d'étendre le domaine de validité de modèles existant afin de prendre en compte de plus grands nombres de Reynolds. Dans le cas général, la force de traînée sur une particule p isolée peut s'exprimer :

$$\mathbf{F}_{D,particule\ isolée} = \frac{\pi}{8} d_p \mu_{@p} C_D Re_p (\mathbf{u}_{@p} - \mathbf{u}_p). \quad (2.99)$$

La grandeur $\mu_{@p}$ témoigne du fait que dans un contexte d'écoulements réactifs, la viscosité (entre autres) peut varier spatialement. Le nombre de Reynolds est ici basé sur le diamètre des particules :

$$Re_p = \frac{d_p \|\mathbf{u}_{@p} - \mathbf{u}_p\| \rho_{@p}}{\mu_{@p}} \quad (2.100)$$

Le calcul du coefficient de traînée C_D nécessite une fermeture pour laquelle les modèles proposés dans la littérature sont pléthoriques. En effet, le coefficient de traînée C_D varie fortement en fonction du nombre de Reynolds, pour une configuration donnée, comme l'illustre la figure 2.12. Pour une sphère lisse, la valeur de C_D décroît pour une augmentation du Reynolds jusqu'à environ 10^3 , puis reste plutôt stable jusqu'à environ 2×10^5 . Au-delà de cette valeur, une chute brutale est observée. Ces variations trouvent leur origine dans la modification de la couche limite fluide ou la modification de l'écoulement derrière la sphère (recirculations etc.). Dans certains cas, comme celui des balles de golf, des aspérités sont disposées sur la surface de la sphère afin de diminuer C_D et ainsi de favoriser la pénétration dans l'air.

Pour des Reynolds toujours proches de 1, un développement asymptotique peut être utilisé afin de modéliser les variations de C_D en fonction de Re_p . Pour des Reynolds plus grands, parmi les modèles

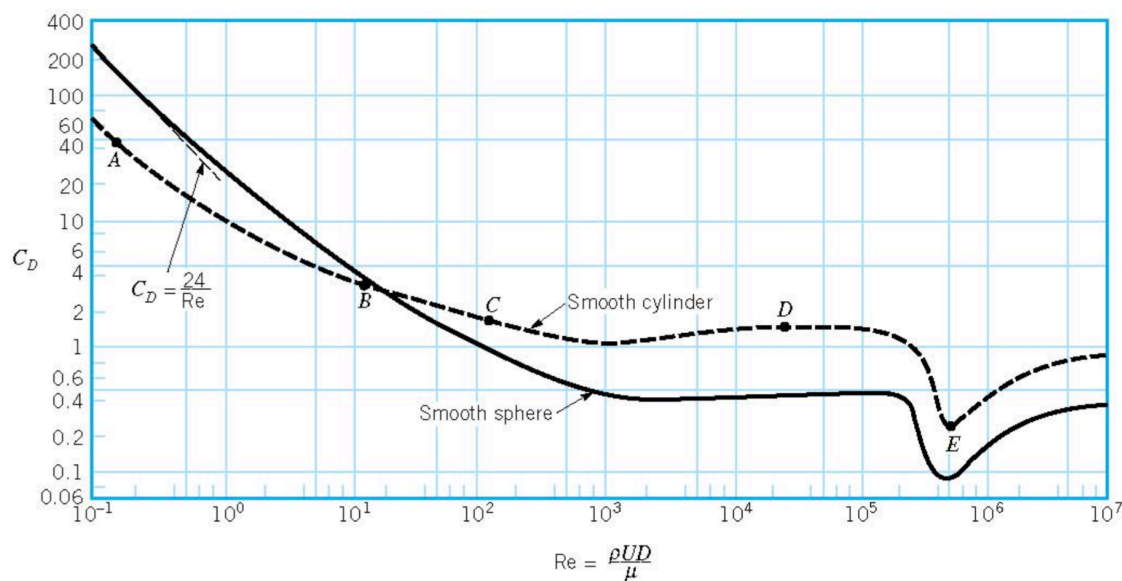


FIGURE 2.12: Illustration de la valeur du coefficient de traînée C_D pour un cylindre et une sphère lisses en fonction du nombre de Reynolds. Issu de [215].

les plus utilisés, on pourra citer la corrélation de Schiller & Naumann [261] suivante :

$$C_{D,S\&N} = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15Re_p^{0.687}) & \text{pour } Re_p < 1000, \\ 0.44 & \text{pour } Re_p > 1000. \end{cases} \quad (2.101)$$

ou celle de White [322] :

$$C_{D,W} = \frac{24}{Re_p} + \frac{6}{1 + \sqrt{Re_p}} + 0.4. \quad (2.102)$$

À noter que la plupart des corrélations utilisées dans la modélisation des lits fluidisés ont été extraites pour des sphères lisses, bien que peu de configurations réelles mettent en jeu de telles particules. Des comparaisons entre les différents modèles ont été proposées, leur domaine de validité ou le type de données dont ils sont extraits étant souvent ignorés par leurs utilisateurs [88][188][96].

Enfin, les suspensions industrielles, telles que les lits fluidisés, sont le plus souvent des suspensions concentrées, dont le mouvement ne peut se résumer à une simple juxtaposition des mouvements de chaque particule prise individuellement. Une description rigoureuse du mouvement dans de telles configurations est extrêmement complexe. L'approche la plus élémentaire consiste à utiliser la notion de fraction volumique de solide, afin de prendre en compte la perturbation locale de l'écoulement par les autres particules. Les interactions fluide-particules sont alors entièrement décrites au travers de ce paramètre. L'influence de la fraction volumique locale de solide peut par exemple s'illustrer par l'étude de la vitesse terminale de chute. La littérature regorge d'études expérimentales montrant que cette vitesse est généralement plus faible lorsqu'une particule est entourée par d'autres, par rapport au cas d'une particule unique en sédimentation dans un fluide au repos, du fait de l'augmentation de sa traînée "apparente". La loi la plus fréquemment utilisée pour prédire la vitesse terminale de chute libre d'une particule entourée d'autres particules $U_{t,\varepsilon}$ à partir de la vitesse terminale de chute libre pour une particule isolée U_t est

donnée par Richardson & Zaki [246] :

$$\frac{U_{t,\varepsilon}}{U_t} = \varepsilon^n, \quad (2.103)$$

n étant un indice supérieur à 1 variant en fonction du nombre de Reynolds. ε étant la fraction volumique de fluide environnant, sa valeur est inférieure à 1 dans le cas d'un groupe de particule en sédimentation. Pour la prise en compte de l'environnement d'une particule sur la force de traînée, on emploie généralement l'expression suivante :

$$\mathbf{F}_D = \frac{\pi}{8} d_p \mu_{@p} C_D \varepsilon_{@p} Re_p (\mathbf{u}_{@p} - \mathbf{u}_p). \quad (2.104)$$

De nouvelles corrélations empiriques sont alors utilisées pour le calcul de C_D , telle que celle généralement attribuée à Wen & Yu [321], qui dérive de l'expression de Schiller & Naumann [261] :

$$C_{D,W\&Y} = \begin{cases} \frac{24}{\varepsilon_{@p} Re_p} [1 + 0.15(\varepsilon_{@p} Re_p)^{0.687}] \varepsilon_{@p}^{-2.7} & \text{pour } \varepsilon_{@p} Re_p < 1000, \\ 0.44 \varepsilon_{@p}^{-2.7} & \text{pour } \varepsilon_{@p} Re_p > 1000. \end{cases} \quad (2.105)$$

Cette loi empirique est souvent utilisée dans le cas d'écoulements modérément denses où $\varepsilon_{@p} > 0.8$. Dans le cas d'écoulements plus denses, on trouve généralement le coefficient issu de la loi d'Ergun (équation 1.17). En effet, en considérant qu'au moment de la fluidisation, la perte de charge dynamique au travers du lit donnée par la relation d'Ergun équilibre son poids, une expression pour C_D peut être obtenue, s'écrivant :

$$C_{D,ER} = \left(\frac{7}{3} + 200 \frac{1 - \varepsilon_{@p}}{\varepsilon_{@p} Re_p} \right) \varepsilon_{@p}^{-1} \quad (2.106)$$

Notons que la relation d'Ergun 1.17 a été extraite d'expérimentations menées sur des lits fixes de particules pour des valeurs de fraction volumique de fluide situées entre 0.43 et 0.54, bien qu'aujourd'hui elle soit beaucoup utilisée pour l'étude de lits fluidisés denses. On trouve dans la littérature de nombreux exemples où ces deux modèles sont conjointement utilisés pour couvrir toute la gamme théorique de valeur de fraction volumique de fluide, dont la valeur permettant le passage d'un modèle à l'autre varie généralement entre $\varepsilon_{@p} = 0.7$ et $\varepsilon_{@p} = 0.8$. La magnitude de la discontinuité entre ces deux modèles à la valeur charnière augmentant avec le nombre de Reynolds, Huilin & Gidaspow [146] ont utilisé une fonction de lissage ϕ_{gs} afin d'assurer une transition continue :

$$\phi_{gs} = \frac{1}{\pi} \arctan(150 \times 1.75(0.2 - (1 - \varepsilon_{@p}))) + 0.5, \quad (2.107)$$

De telle façon que :

$$C_{D,H\&G} = \phi_{gs} C_{D,W\&Y} + (1 - \phi_{gs}) C_{D,ER}. \quad (2.108)$$

L'unique argument en faveur de cette méthode est purement numérique. La figure 2.13 illustre les valeurs de $C_{D,ER}$, $C_{D,W\&Y}$, $C_{D,H\&G}$ et $C_{D,S\&N}$. Dans le code YALES2, la force de traînée \mathbf{F}_D est calculée selon l'équation 2.104. Le modèle de fermeture utilisée pour C_D correspond à l'association des modèles d'Ergun et Wen & Yu, respectivement décrits par les équations 2.106 et 2.105, avec une valeur charnière à $\varepsilon_{@p} = 0.8$. La fonction de lissage de Huilin & Gidaspow de l'équation 2.108 peut être activée.

Bien d'autres corrélations sont disponibles dans la littérature, partageant l'approche consistant à prendre en compte la fraction volumique de fluide environnant pour estimer le coefficient de traînée d'une particule. L'hypothèse sous-jacente pour l'emploi de cette approche est que ce paramètre est suffisant pour rendre compte des infinies possibilités de distributions de positions des particules. En effet,

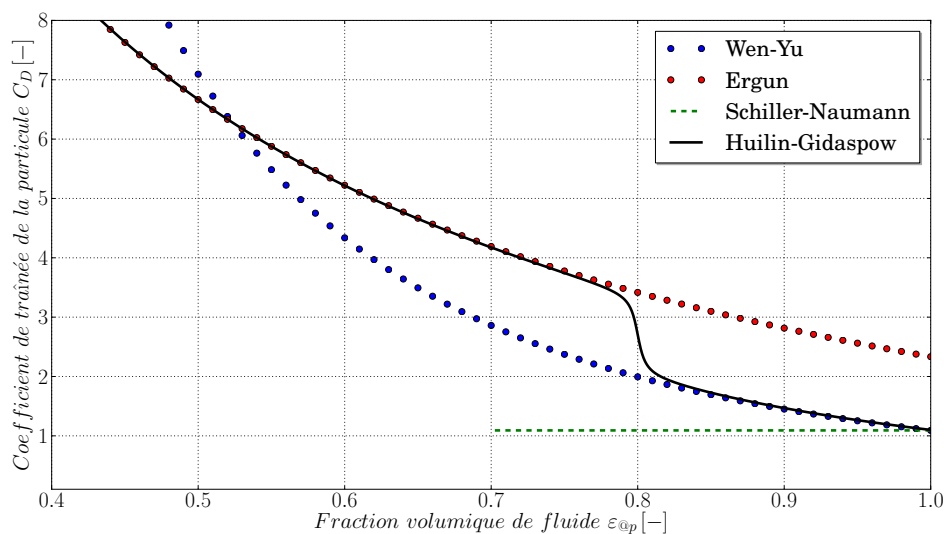


FIGURE 2.13: Représentation des coefficients de traînée donnés par les relations d'Ergun, de Wen & Yu, et de Huilin & Gidaspow pour une particule localisée dans un environnement avec une fraction volumique de fluide $\varepsilon_{@p}$ non unitaire à $Re_p = 100$. À titre indicatif, le coefficient de traînée donné par la relation de Schiller & Naumann pour une particule isolée est également illustré.

dans le formalisme de DEM/CFD, les particules étant généralement plus petites que les mailles, la fraction volumique locale se calcule simplement par sommation des volumes des particules situés dans un volume élémentaire de fluide. Ainsi, qu'importe la distribution des particules dans ce volume de fluide, la valeur de $\varepsilon_{@p}$ calculée sera la même. Toutes choses égales par ailleurs, la valeur du coefficient de traînée pour chaque particule sera donc également identique. Or expérimentalement il apparaît que l'agencement des particules possède lui aussi une influence sur la traînée. Parmi les travaux précurseurs de ce type de problématique, on trouve ceux de Hasimoto [132], qui étudia différents types de réseaux réguliers de particules ; cubique simple, cubique centré et cubique à faces centrées pour des nombres de Reynolds $Re_p \ll 1$ à l'aide de séries de Fourier, mettant en lumière des écarts de traînée. Des arrangements aléatoires de particules ont également été portés à l'étude : l'étude expérimentale de Sederman *et al.* [264] révèle que 40% du débit volumique de fluide passe dans seulement 8% des pores, provoquant de fortes hétérogénéités dans la structure de l'écoulement. En découlent des hétérogénéités semblables pour les forces appliquées à chaque sphère. Akiki *et al.* [9] ont étudié de façon numérique des distributions aléatoires de particules fixes pour différentes valeurs de porosité moyenne et de nombre de Reynolds. En comparant les forces de traînées obtenues à l'échelle microscopique sur les différentes particules, ils ont montré que les fluctuations RMS (Root Mean Square) de traînée pouvaient atteindre 25% de la traînée moyenne observée. Ceci s'explique par le fait que chaque particule "voit" une unique distribution locale de particules voisines. Plus important, Akiki *et al.* [9] ont même montré que ces écarts de force de traînée ne pouvaient être corrélés à la fraction volumique de fluide locale, qu'importe la définition employée, ce qui vient définitivement invalider les approches classiques précédemment décrites. Certains auteurs ont tenté de dépasser une partie de ces limitations en proposant des corrections anisotropes pour la traînée, dépendant par exemple du gradient de porosité locale, afin de prendre en compte un certain degré d'arrangement dans leurs simulations. Il en résulte une impressionnante quantité de modèles, qui malgré tout peinent à reproduire les observations expérimentales une fois sortis du contexte dans lequel ils ont

été créés. La figure 2.14 illustre certaines des disparités visibles dans une simulation numérique où seul le modèle de traînée varie. En plus des hauteurs de lits apparentes variables, les structures formées au sein du lit semblent elles aussi différentes. Ce manque d'unité a donné lieu à l'apparition d'approches transverses, utilisant les résultats issus de simulations DNS via des techniques de traitement de données massives, telles que le machine learning [10] [25].

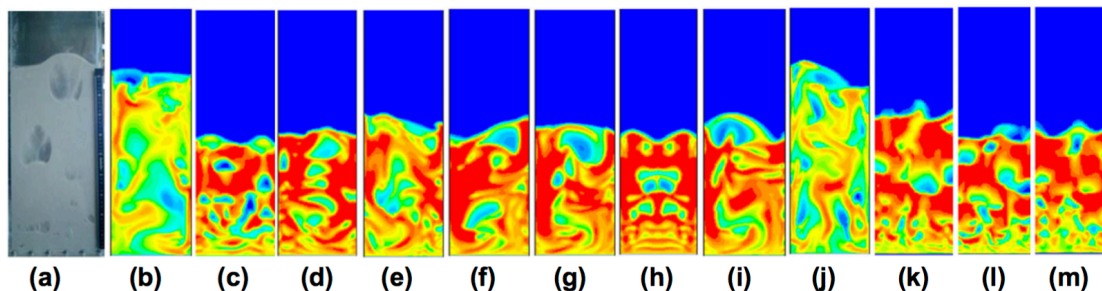


FIGURE 2.14: Comparaisons de contours de la fraction volumique de fluide instantanée obtenus de façon expérimentale (a), puis de façon numérique en utilisant différentes lois de traînées : Syamlal-O'Brien ajusté (b), Syamlal-O'Brien (c), Arastoopour (d), Gibilaro (e), Hill-Koch-Ladd (f), Zhang-Reese (g), Richardson-Zaki (h), RUC (i), Di Felice ajustée (j), Di Felice (k), Wen-Yu (l) et Gidaspow (m). Issu de [96].

Lorsque le mouvement de la particule est non rectiligne, d'autres forces doivent être prises en compte. C'est généralement le cas pour les écoulements cisailés ou rotationnels, dans lesquels des phénomènes de migration et de dispersion latérale des particules doivent être pris en compte [187]. Plusieurs contributions ont été mises à jour afin de caractériser ces effets. L'effet Magnus [189] se manifeste lorsqu'une particule est en rotation dans un fluide en mouvement. La mise en rotation des particules est fréquemment due à la friction lors de chocs avec les parois ou d'autres particules, ou à la présence de cisaillement dans l'écoulement. La rotation de la particule induit une modification de l'écoulement proche de sa surface : selon son sens de rotation, l'écoulement aura tendance à être accéléré d'un côté de la particule, et freiné de l'autre. Le principe de Bernoulli permet ensuite d'écrire que la pression augmente localement là où le fluide est freiné, tandis qu'elle diminue là où ce dernier est accéléré. Il s'ensuit un gradient de pression autour de la particule, et l'apparition d'une force contre-gradient. Ce principe a même été appliqué pour la propulsion de navires (voir figure 2.15), qui, équipés d'un ou plusieurs cylindre(s), peuvent tirer profit de l'effet Magnus. La seconde contribution est celle de l'effet Saffman [253], induite par le cisaillement de l'écoulement, même en l'absence de rotation de la particule. Il apparaît une force dite de portance due à la séparation de l'écoulement et dirigée dans le sens du gradient de vitesse environnant. Ces forces ne sont pas directement prises en compte dans le bilan des forces implémenté.

Toutefois, l'équation 2.12 fait figurer un terme hydrodynamique \mathcal{M}_D afin de prendre en compte l'influence de la rotation locale du fluide sur les particules. De la même façon que la force de traînée, ce moment des forces hydrodynamiques \mathcal{M}_D possède une expression analytique dans le régime de Stokes [336] :

$$\mathcal{M}_D = 8\pi\mu_{@p}r_p^3(\boldsymbol{\omega}_{@p} - \boldsymbol{\omega}_p), \quad (2.109)$$

où $\boldsymbol{\omega}_{@p}$ est le vecteur tourbillon interpolé au centre de la particule exprimé par :

$$\boldsymbol{\omega}_{@p} = \left(\frac{1}{2} \nabla \wedge \mathbf{u} \right)_{@p}. \quad (2.110)$$

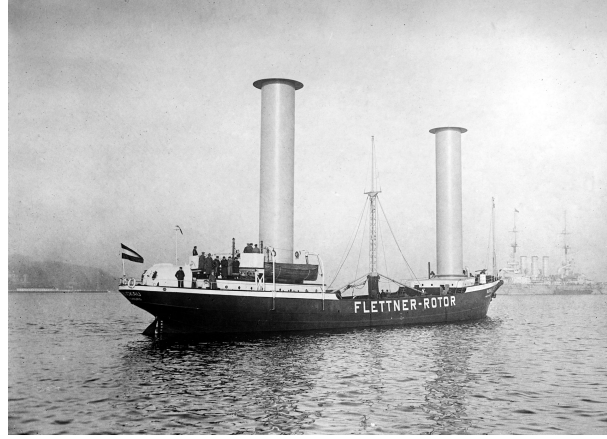


FIGURE 2.15: Le Buckau était équipé de deux rotors Flettner. Rebaptisé Baden-Baden, il traversa l'Atlantique et rallia New York le 9 mai 1926. Il était également équipé d'un moteur auxiliaire permettant son déplacement en l'absence de vent.

Pour étudier le mouvement de rotation, on introduit régulièrement un nombre de Reynolds particulier noté $Re_{r,p}$ tel que :

$$Re_{r,p} = \frac{d_p^2 \|\omega_{@p} - \omega_p\|}{\nu_{@p}}. \quad (2.111)$$

On rappelle ici que ω_p correspond à la vitesse angulaire de la particule. L'extension aux domaines de Reynolds de rotation plus élevés peut s'écrire [80] :

$$\mathcal{M}_D = \frac{d_p^5 \rho_{@p}}{64} C_R \|\omega_{@p} - \omega_p\| (\omega_{@p} - \omega_p), \quad (2.112)$$

où C_R est un coefficient de rotation qui nécessite une fermeture telle que [80] :

$$C_R = \begin{cases} \frac{64\pi}{Re_{r,p}} & \text{pour } Re_{r,p} < 32, \\ \frac{12.9}{\sqrt{Re_{r,p}}} + \frac{128.4}{Re_{r,p}} & \text{pour } 32 \leq Re_{r,p} < 1000. \end{cases} \quad (2.113)$$

C'est ce modèle qui a été incorporé au code YALES2.

2.4.2 Interactions thermiques

Après s'être intéressé aux échanges de quantité de mouvement, on aborde ici les transferts d'énergie fluide-particules. Dans le formalisme DEM-CFD, il est courant de remplacer l'approche locale de l'équation 2.16 par une approche moyenne en utilisant la loi de Newton :

$$Q_F = h_{fp} S_p (T_{@p} - T_p). \quad (2.114)$$

Le coefficient de transfert de chaleur h_{fp} est défini par le nombre de Nusselt comparant les transferts convectif et conductif tel que :

$$Nu = \frac{h_{fp} L}{\lambda}, \quad (2.115)$$

où L est une longueur caractéristique de l'écoulement. À l'échelle de la particule, on parle souvent de nombre de Nusselt particulaire, défini de la façon suivante :

$$Nu_p = \frac{h_{fp} d_p}{\lambda_{@p}}. \quad (2.116)$$

Alors que le calcul du nombre de Nusselt devrait être donné par l'équation :

$$Nu_p = \frac{d_p}{S_p(T_\infty - T_p)} \int_{S_p} \lambda \nabla T \cdot \mathbf{n}_p dS, \quad (2.117)$$

où T_∞ correspond à la température non perturbée du fluide, il est souvent issu d'une des nombreuses corrélations abritées par la littérature le liant au nombre de Reynolds et au nombre de Prandtl. En effet, la seule valeur analytique connue pour le nombre de Nusselt concerne le cas d'une particule isolée plongée dans un fluide au repos, c'est-à-dire en régime de diffusion pure. Dans ce cas $Nu_p = 2$. En dehors de ce régime, et notamment lorsque l'environnement d'une particule est perturbé par d'autres particules, il est courant de modéliser Nu_p en utilisant la fraction volumique de fluide ε , de la même façon que pour le coefficient de traînée. Parmi les corrélations les plus fréquemment rencontrées pour le nombre de Nusselt, on trouve la corrélation de Ranz & Marshall [239] :

$$Nu_{p,RM} = 2 + 1.8 Re_p^{1/2} Pr^{1/3}, \quad (2.118)$$

et celle de Gunn [127] obtenue à partir de plusieurs sources expérimentales, fruit d'une combinaison permettant de retrouver les comportements limites à bas/haut nombre de Reynolds, et basse/haute porosité :

$$Nu_{p,G} = (7 - 10\varepsilon + 5\varepsilon^2) (1 + 0.7 Re_p^{0.2} Pr^{1/3}) + (1.33 - 2.4\varepsilon + 1.2\varepsilon^2) Re_p^{0.7} Pr^{1/3}, \quad (2.119)$$

classique car validée sur de larges plages de porosité et de nombre de Reynolds : $0.35 \leq \varepsilon \leq 1$ et $1 \leq Re_p \leq 10^5$. On trouve également la correction apportée par Deen [78] :

$$Nu_{p,D} = (7 - 10\varepsilon + 5\varepsilon^2) (1 + 0.17 Re_p^{1/3}) + (1.33 - 2.31\varepsilon + 1.16\varepsilon^2) Re_p^{0.7} Pr^{1/3}. \quad (2.120)$$

La corrélation de Sun [284] est donnée par :

$$Nu_{p,S} = (-0.46 + 1.77\varepsilon + 0.69\varepsilon^2) \varepsilon^{-3} + (1.37 - 2.4\varepsilon + 1.2\varepsilon^2) Re_p^{0.7} Pr^{1/3}. \quad (2.121)$$

valable dans le domaine $0.5 \leq \varepsilon \leq 1$ et $1 \leq Re_p \leq 100$. Les corrélations de Sun et Deen sont toutes deux obtenues à partir de résultats de simulations DNS. L'obtention de ces corrélations induit l'utilisation d'un procédé de moyenne qui peut différer d'une technique à l'autre et qu'il convient de comparer pour en saisir les subtilités. L'expression implémentée correspond à l'équation 2.114, accompagnée d'une fermeture parmi les quatre décrites précédemment pour le nombre de Nusselt.

Il existe également des flux échangés par conduction lors d'un contact particule-particule ou particule-paroi. Cette énergie est échangée à travers l'aire de contact. Dans la réalité, cet échange est donc minime car les temps de contacts ($\sim 10^{-6} - 10^{-7}$ s) et les aires mis en jeu sont très faibles. Dans les écoulements denses, notamment dans les cas quasi-statiques, ces quantités peuvent suffire à rendre le phénomène non négligeable. On ne détaillera pas ici les différentes approches existantes car elles n'ont pas été implémentées. Le lecteur pourra se diriger vers l'article de Zhou *et al.* [338] pour plus de détails. À noter que pour obtenir des pas de temps raisonnables, les approches sphères molles font régulièrement appel

à des constantes de raideur diminuées, ce qui a tendance à allonger les temps de contact et les aires de contact, comme mis en lumière précédemment. Ceci peut conduire à une surestimation des flux échangés lors des contacts. Une correction est donc nécessaire afin de retrouver les bonnes quantités. Une de ces corrections est également utilisée par Zhou *et al.* [338], qui dans cet article ne consiste qu'en un facteur correcteur.

Les transferts radiatifs peuvent également, en fonction des températures explorées, devenir importants. Les différents modes de transferts de chaleur ainsi que leur prépondérance ont été discutés par Mickley & Fairbanks [204]. Il apparaît que l'augmentation de la température du milieu conduit à une quantité d'énergie échangée par rayonnement plus importante. De plus, pour des températures modérées, *i.e.* $< 500\text{K}$, les transferts convectifs semblent davantage représentatifs, tel qu'illustré sur la figure 2.16.

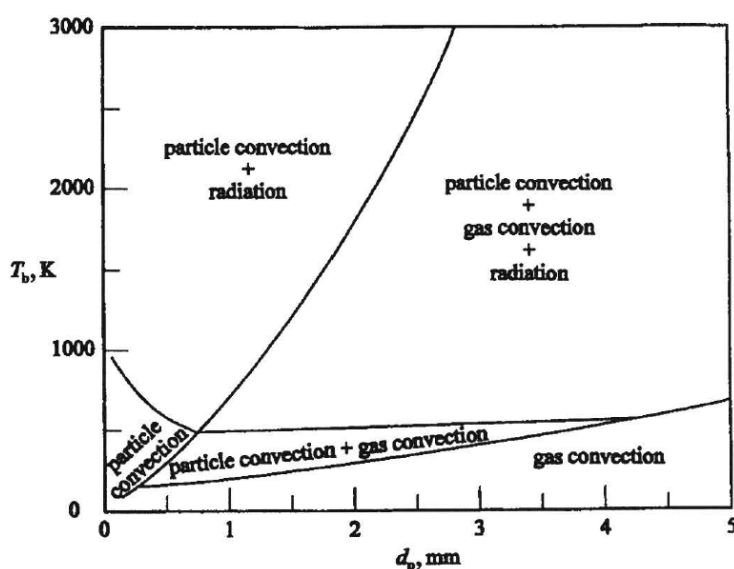


FIGURE 2.16: Prépondérance des différents régimes de transferts de chaleur en lits fluidisés. Diagramme tracé pour un mélange air/sable. T_b est ici la température du lit. Adapté de [106].

Enfin, lorsque des réactions chimiques interviennent, de façon surfacique ou volumique, au sein des particules, il est nécessaire de traiter le problème de transferts massiques entre les phases solides et fluides. On rappelle ici que ces phénomènes ne sont pas discutés dans cet exposé car les particules mises en jeu sont systématiquement chimiquement inertes. Notons cependant que nombre de corrélations sont utilisées indifféremment pour traiter les problèmes de transferts thermiques et massiques, ce dernier cas se ramenant souvent à la modélisation du nombre de Schmidt permettant d'obtenir les coefficients de transferts massiques, telle que la corrélation de Gunn [127] sus-mentionnée, par analogie avec le nombre de Nusselt permettant d'obtenir les coefficients de transferts de chaleur.

Notons finalement que dans certains cas, d'autres types d'interactions fluide-particules ou particules-particules existent, telles que les forces de Van Der Waals, les forces électrostatiques et magnétiques, les forces de lubrification etc. Ces forces ne sont pas comptabilisées dans cette étude. Une revue de ces interactions particulières a été décrite par Tomas [297].

L'interpolation au centre des particules de tous les champs fluides nécessaires revêt une importance capitale dans la modélisation CFD-DEM, comme il a été vu au cours de cette section. Les noyaux utilisés sont discutés dans la section suivante.

2.5 Opérateurs de couplage entre les phases

Le couplage entre la phase solide et la phase fluide est un point clé de la modélisation des écoulements granulaires. De nombreux champs Eulériens nécessitent d'être interpolés au centre de la particule, notamment lors de l'utilisation des différents modèles de fermeture détaillés dans la section précédente. Il s'agit par exemple de $T_{@p}$, $\mathbf{u}_{@p}$, $\rho_{@p}$, etc. À l'inverse, certaines grandeurs telles que V_p , $\mathbf{F}_{p \rightarrow f}$ et $Q_{p \rightarrow f}$ doivent être transférées depuis les particules vers la grille fluide lors d'une étape de projection, comme le montre l'écriture des équations de Navier-Stokes (voir section 2.1.1). Cette section détaille les mécanismes d'interpolation et de projection implémentés dans le code YALES2.

2.5.1 Interpolation des champs Eulériens vers les particules

Dans le code YALES2, les particules sont localisées dans une unique cellule de maillage d'après la position de leur centre de masse. Pour un scalaire ou un vecteur quelconque défini sur la grille Eulérienne $\Phi(\mathbf{x}, t)$, sa valeur interpolée au centre de la particule p notée $\Phi_{@p}(t)$ obéit à la relation suivante :

$$\Phi_{@p}(t) = \sum_{i \in C} \omega_{p,i}^C \Phi(\mathbf{x}, t) \quad \text{avec} \quad \sum_{i \in C} \omega_{p,i}^C = 1. \quad (2.122)$$

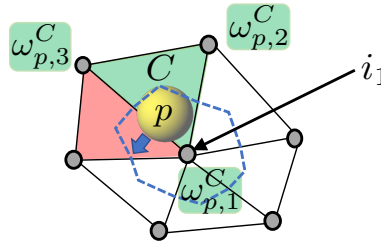


FIGURE 2.17: Représentation 2D de six cellules (SC_i) autour d'un noeud central i_1 . Une particule p localisée dans la cellule C (■) se déplace vers une cellule voisine (■). ● : noeud du maillage. - - - : volume de contrôle du noeud i_1 (ΔV_1). $\omega_{p,i}^C$: poids d'interpolation de la particule p dans C au noeud i .

Une illustration est visible sur la figure 2.17, où i est un indice se rapportant aux noeuds du maillage. " $i \in C$ " signifie "l'ensemble des noeuds i formant la cellule de maillage C dans laquelle est localisée la particule". $\omega_{p,i}^C$ est le poids d'interpolation de la particule p au noeud i . Il est calculé en réalisant une interpolation trilineaire dans les mailles hexaédriques et une interpolation linéaire sur les éléments tétraédriques. L'interpolation linéaire est illustrée sur la figure 2.18. En se référant à cette figure, les poids sont obtenus par :

$$\omega_{p,i} = \frac{\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{S}_i}{\sum_i \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{S}_i}. \quad (2.123)$$

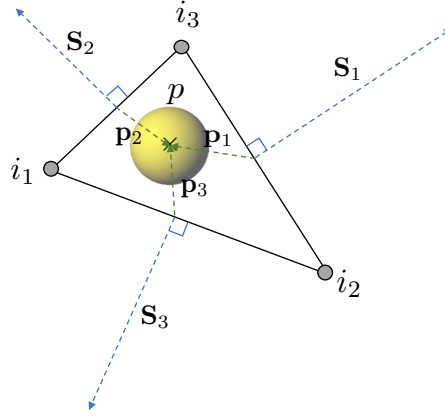


FIGURE 2.18: Représentation 2D d'une particule p dans un triangle composé des points i_1, i_2, i_3 et délimité par les surfaces S_1, S_2 et S_3 . Les vecteurs \mathbf{p}_i lient le centre de la face S_i et de p . Les vecteurs \mathbf{S}_i sont les normales à S_i , ont comme norme l'aire de S_i et sont dirigés vers l'extérieur. Le poids d'interpolation de la particule au noeud i est noté $\omega_{p,i}$ et vaut $\omega_{p,i} = \frac{\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{S}_i}{\sum_i \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{S}_i}$.

2.5.2 Projection des grandeurs Lagrangiennes vers la grille

Les poids $\omega_{p,i}$ utilisés pour l'interpolation vers les particules et la projection vers la grille sont les mêmes. L'opérateur conservatif de projection vers le noeud i s'écrit par exemple pour les termes sources :

$$\mathbf{F}_{p \rightarrow f, i} = -\frac{1}{\Delta V_i} \sum_{p \in SC_i} \omega_{p,i}^C (\mathbf{F}_D + \mathbf{F}_P) \quad \text{et} \quad Q_{p \rightarrow f, i} = -\frac{1}{\Delta V_i} \sum_{p \in SC_i} \omega_{p,i}^C Q_F, \quad (2.124)$$

où ΔV_i dénote le volume de contrôle associé au noeud i . La fraction volumique de fluide au noeud i est calculée de la manière suivante :

$$\varepsilon_i = 1 - \frac{1}{\Delta V_i} \sum_{p \in SC_i} \omega_{p,i}^C V_p. \quad (2.125)$$

" $p \in SC_i$ " (SC pour "Surrounding Cells") se réfère aux "particules localisées dans une des cellules voisines SC_i du noeud i ". En reprenant la figure 2.17, toutes les particules localisées dans une des cellules représentées participeront au calcul au noeud i_1 de ε (ainsi que $\mathbf{F}_{p \rightarrow f}$ et $Q_{p \rightarrow f}$).

Cette méthode consistant à distribuer les quantités issues des particules seulement dans la cellule où leur centre réside, généralement nommée "Particle Centroid Method" (PCM), peut conduire à des erreurs importantes, en particulier concernant le calcul de la fraction volumique de fluide [285]. Ceci est en partie dû au fait qu'un nombre important de code de CFD-DEM utilise des approches à grilles décalées (en anglais "staggered grid") pour lesquelles la fraction volumique de fluide est définie au centre des cellules. Il en résulte de fortes discontinuités dans les termes relatifs aux dérivées spatiales ou temporelles lorsque le centre d'une particule passe d'une cellule à une autre. Le code YALES2 au contraire utilise un maillage dual, si bien que la fraction volumique de fluide, à l'instar de tous les autres champs Eulériens sont définis aux noeuds. Comme dépeint sur la figure 2.17, une particule quelconque traversant l'interface entre les cellules verte et rouge ne causera aucune discontinuité lors du calcul de $\omega_{p,1}$ ou $\omega_{p,3}$. En effet, l'équation 2.123 est linéaire par morceaux au niveau de chaque cellule, mais également continue aux interfaces. De plus, $\omega_{p,2}$ ne sera pas non plus affecté de façon trop importante durant la traversée de

l'interface, car à mesure que la particule se rapproche de l'interface, $\omega_{p,2}$ tend vers 0. Le même raisonnement peut être étendu aux cas 3D ainsi que sur les maillages cartésiens.

L'expression de $Q_{p \rightarrow f,i}$ de l'équation 2.124 permet d'assurer le caractère conservatif de l'énergie thermique globale lors de l'étape de projection vers la grille. Dans la littérature, on trouve généralement l'expression 2.114 pour le calcul de Q_F . En notant qu'au sein d'une cellule :

$$\sum_{i \in C} \omega_{p,i} T_p = T_p, \quad (2.126)$$

et en utilisant la formule 2.122, on montre que l'expression 2.114 est parfaitement équivalente à :

$$Q_F = \sum_{i \in C} \omega_{p,i} h_{fp} S_p (T_i - T_p). \quad (2.127)$$

Cette expression fait alors apparaître les flux $h_{fp} S_p (T_i - T_p)$ transférés de chaque noeud i vers la particule. Il se déduit alors que la conservation locale de l'énergie, c'est-à-dire à l'échelle des volumes de contrôle, n'est possible que si ces mêmes flux sont transférés de la particule vers la grille au moment de la projection, soit :

$$\Delta V_i Q_{p \rightarrow f,i} = -\omega_{p,i} h_{fp} S_p (T_i - T_p). \quad (2.128)$$

Or, les opérateurs de projection classiquement rencontrés se basent sur l'écriture 2.114, et réalisent le calcul suivant du flux reçu par le noeud i :

$$\Delta V_i Q_{p \rightarrow f,i} = -\omega_{p,i} h_{fp} S_p (T_{@p} - T_p). \quad (2.129)$$

On peut alors remarquer que cette formulation ne renvoie pas au noeud i l'opposé du flux que celui-ci a émis. En outre, le signe du flux reçu par le noeud i ne dépend plus directement de la température au noeud i , mais seulement du signe de la différence $T_{@p} - T_p$. Il s'ensuit qu'un volume de contrôle au noeud i peut recevoir de l'énergie alors que $T_i > T_p$, le signe de l'erreur commise sur le flux étant liée au signe de $T_{@p} - T_i$ (indépendante de T_p). Cette erreur au noeud i , notée err_i , et calculée comme :

$$err_i = \frac{1}{\Delta V_i} \left[-\omega_{p,i} h_{fp} S_p (T_i - T_p) - (-\omega_{p,i} h_{fp} S_p (T_{@p} - T_p)) \right], \quad (2.130)$$

peut également s'écrire :

$$err_i = \frac{1}{\Delta V_i} \left[h_{fp} S_p \sum_{j \in C} \omega_{p,i} \omega_{p,j} (T_j - T_i) \right]. \quad (2.131)$$

err_i dépend donc linéairement du produit $h_{fp} S_p$, mais peut également devenir importante en cas de forts gradients thermiques, se traduisant par de hautes valeurs de $T_j - T_i$. La solution donnée par l'équation 2.128 est donc à privilégier devant celle de l'équation 2.129. Afin de mettre en place l'opérateur adapté pour la construction de $Q_{p \rightarrow f,i}$, les étapes suivantes sont réalisées :

1. on utilise la méthode classique pour projeter sur la grille les grandeurs $h_{fp} S_p T_p$ et $h_{fp} S_p$. Les résultats de ces projections au noeud i valent donc respectivement $\omega_{p,i} h_{fp} S_p T_p$ et $\omega_{p,i} h_{fp} S_p$, dans le cas d'une unique particule.
2. Sur chaque noeud, on peut donc construire la quantité :

$$\omega_{p,i} h_{fp} S_p T_p - T_i \omega_{p,i} h_{fp} S_p = \omega_{p,i} h_{fp} S_p (T_p - T_i).$$
3. Diviser cette quantité par le volume de contrôle ΔV_i permet donc de calculer $Q_{p \rightarrow f,i}$ en accord avec l'équation 2.128.

Ce processus est également applicable lorsque plusieurs particules sont localisées dans la cellule. Cette méthode s'inspire des travaux de Rickelt *et al.*, motivés par des problématiques multi-grilles.

Cette méthodologie est facilement applicable au sein d'une cellule. Néanmoins, elle est difficilement utilisable avec des stencils plus importants, mettant en jeu des noeuds distants, cela réclamant de stocker pour chaque particule les poids d'interpolation et les températures de l'ensemble des noeuds du stencil. Celui-ci s'étendant au-delà des cellules, la définition des poids d'interpolation nécessiterait alors d'être adaptée et de comprendre des étapes de communications parallèles risquant de compromettre les performances du code. Par conséquent, les deux méthodes décrites par les équations 2.128 et 2.129 ont été implémentées. Notons également que le calcul du terme $\mathbf{F}_{p \rightarrow f, i}$ suit le même comportement et subit donc les mêmes erreurs que $Q_{p \rightarrow f, i}$. Cependant, il semblerait qu'il ne soit pas aussi critique pour la stabilité du solveur. Finalement, aucune correction particulière n'est apportée lors du calcul de $\mathbf{F}_{p \rightarrow f, i}$.

Le terme retour particules vers fluide est également traité de façon spécifique en ce qui concerne la rotation due aux interactions hydrodynamiques. Ce terme a été désigné par $f(\mathcal{M}_D)$ dans l'équation 2.17 (voir section 2.1.3). L'avancement en temps de la quantité de mouvement du fluide (équation 2.6) ne se fait qu'à travers des termes de force, ainsi une simple projection du moment hydrodynamique subi par la particule sur la grille eulérienne suivant l'opérateur précédemment décrit n'est pas suffisante. La figure 2.19 montre la réaction qualitative attendue d'un fluide initialement au repos et soumis à la rotation d'une particule.

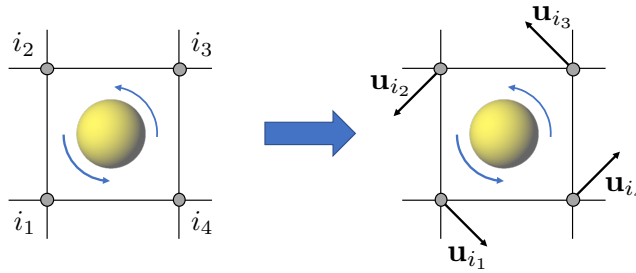


FIGURE 2.19: Schéma simplifié sur maillage cartésien 2D d'une particule en rotation dans le sens trigonométrique au milieu d'une cellule formée de quatre noeuds. Les directions des vecteurs vitesses de fluide résultant du couplage sont dessinés à droite.

L'objectif est ici de créer un projecteur capable de réécrire le moment de la particule sous la forme d'une force, qui sera ajoutée au bilan de quantité de mouvement sur chaque noeud de la grille proche de la particule. La figure 2.20 montre un cas cartésien 3D dans lequel une particule est en rotation dans le plan \mathcal{P} au milieu d'une cellule C . \mathcal{P} passe donc par l'équateur de la particule. Le moment hydrodynamique de la particule noté \mathcal{M}_D est orthogonal à \mathcal{P} , par définition. Le centre de la particule est noté P . On indique également deux vecteurs, l'un liant P au noeud i , l'autre liant P à l'intersection i' . Le moment issu de la rotation de la particule renvoyé au noeud i est noté \mathcal{M}_i .

Afin d'écrire la quantité de mouvement ajoutée au noeud i satisfaisant une contrainte de conservation du moment \mathcal{M}_D lors de la projection, on commence par décrire les coordonnées du vecteur $\mathbf{P}i'$ contenu dans le plan \mathcal{P} , en se référant toujours à la figure 2.20 :

$$\mathbf{P}i' = \mathbf{P}i - \frac{\mathbf{P}i \cdot \mathcal{M}_D}{\|\mathcal{M}_D\|^2} \mathcal{M}_D. \quad (2.132)$$

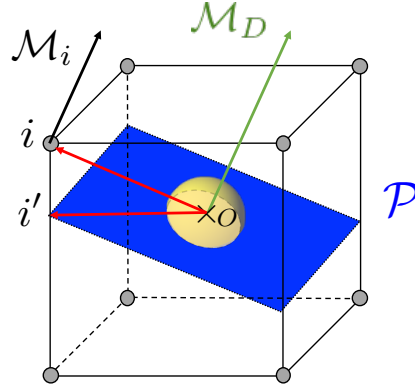


FIGURE 2.20: Schéma simplifié sur maillage cartésien 3D d'une particule en rotation dans le plan \mathcal{P} au milieu d'une cellule C . \mathcal{P} passe donc par l'équateur de la particule. Le moment hydrodynamique de la particule noté \mathcal{M}_D est orthogonal à \mathcal{P} , par définition. Le centre de la particule est noté P . On indique également deux vecteurs, l'un liant P au noeud i , l'autre liant P à l'intersection i' . Le moment renvoyé au noeud i est noté \mathcal{M}_i .

On écrit alors la quantité de mouvement à ajouter au noeud i , notée $\mathbf{F}_{R,i}$ (pour Force de Rotation) :

$$\mathbf{F}_{R,i} = \alpha_{p,i} \frac{\mathcal{M}_D \wedge \mathbf{P}\mathbf{i}'}{\|\mathbf{P}\mathbf{i}'\|^2}. \quad (2.133)$$

$\mathbf{F}_{R,i}$ correspond donc à la fonction $f(\mathcal{M}_D)$ qui était recherchée. Ici, $\alpha_{p,i}$ est un poids associée à la particule et au noeud i . En recalculant le moment \mathcal{M}_i dû à cette force $\mathbf{F}_{R,i}$, soit :

$$\mathcal{M}_i = \mathbf{P}\mathbf{i}' \wedge \mathbf{F}_{R,i}, \quad (2.134)$$

on obtient après quelques transformations :

$$\mathcal{M}_i = \alpha_{p,i} \mathcal{M}_D. \quad (2.135)$$

Ainsi, nous avons bien écrit une force $\mathbf{F}_{R,i}$ au noeud i dont le moment est une fraction du moment hydrodynamique de la particule \mathcal{M}_D . Pour assurer la conservation, il suffit donc de satisfaire :

$$\sum_{i \in C} \alpha_{p,i} = 1. \quad (2.136)$$

Cette condition peut être satisfaite en prenant comme valeur des $\alpha_{p,i}$ les poids d'interpolation définis plus haut :

$$\alpha_{p,i} = \omega_{p,i}. \quad (2.137)$$

Néanmoins, cette écriture peut générer des forces nulles $\forall i$ si \mathcal{M}_D est aligné avec une paire de noeud pour une particule très proche de cette dernière, en raison du produit vectoriel. Prendre un poids fixe égal à $1/8$ pour les $\alpha_{p,i}$ pourrait provoquer des discontinuités lors de la traversée des faces par la particule. Dans tous les cas, cette approche semble trop dépendante de la discrétisation spatiale. Enfin, assurer la conservation du moment cinétique lors du calcul de $\mathbf{F}_{R,i}$ (équation 2.133) étendu à des noeuds situés en-dehors de C nécessiterait des calculs de distance entre la particule et ces noeuds distants. Or l'opérateur de filtrage utilisé ne permet pas ce calcul. Cet opérateur, décrit dans la section suivante, effectue des opérations de proche en proche sur la grille eulérienne en "oubliant" la particule. Finalement, le modèle

implémenté pour calculer le terme retour dû à la rotation des particules est désactivé par défaut dans YALES2.

Lors des tests effectués, il a pu être qualitativement observé un phénomène instationnaire de précession pour une particule fixe tournant avec un nombre de Reynolds de rotation supérieur à 1 dans une configuration confinée, représenté sur la figure 2.21. La composante de la vitesse du fluide orientée selon la direction du vecteur rotation de la particule traverse son équateur et précède autour de ce dernier. Ce phénomène semble avoir été rapporté dans la littérature dans les simulations utilisant les IBM de Liu & Prosperetti [185].

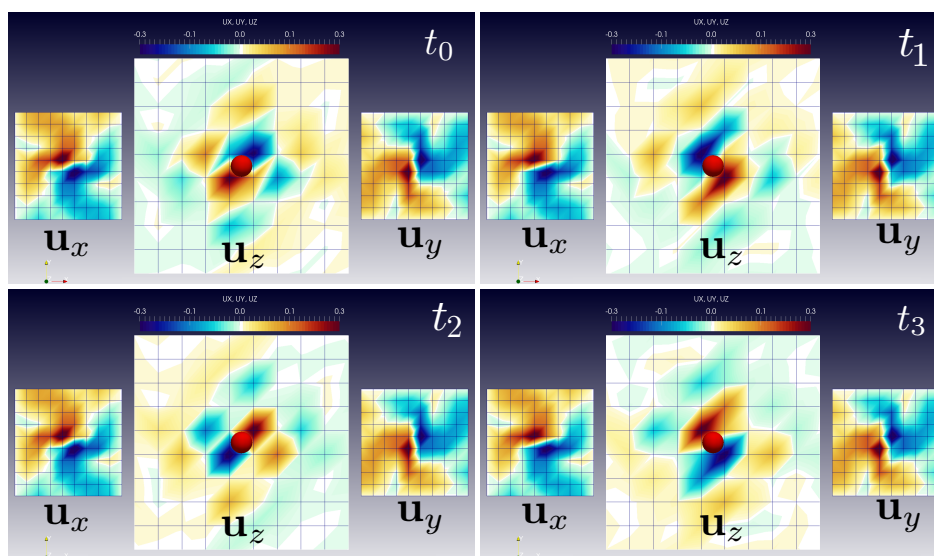


FIGURE 2.21: Phénomène de précession observé à différents instants sur un champ fluide 3D soumis à l'effet d'une particule immobile en rotation au centre d'une cellule. La particule tourne avec une vitesse angulaire fixe portée par l'axe z avec un nombre de Reynolds de rotation supérieur à 1, et tourne donc dans le plan xy . Pour chaque instant sont visibles trois coupes passant par le centre de la particule ; afin d'observer les composantes de la vitesse fluide u_x (à gauche), u_y (à droite), et u_z (au centre). Chaque composante est colorée selon son intensité, positive ou négative. On voit que pour u_z , un phénomène instationnaire apparaît qui conduit à la précession de u_z autour de l'axe z .

Notons que des méthodes plus élaborées permettraient effectivement de rendre compte de l'influence de la rotation des particules sur le fluide, telle que la Force Coupling Method (FCM), qui utilise un développement multipolaire pour décrire les forces appliquées au fluide [61][62].

2.5.3 Opérateur de filtrage pour les maillages non-structurés

Il n'est plus à démontrer que la méthode PCM peut induire des imprécisions et conduire à des instabilités numériques car elle ne peut empêcher la fraction volumique de fluide d'atteindre des valeurs irréalistes, en particulier lorsque les ratios de diamètre des particules et de taille de maille sont proches de l'unité. Le problème est aussi visible dans les zones de compaction maximale. Dans ces cas-ci, la valeur de la fraction volumique de fluide peut chuter jusqu'à des valeurs inférieures à la limite théorique. Pour contrecarrer cette limitation, un opérateur de filtrage conservatif adapté aux machines à mémoire

distribuée est utilisé. Un exemple est illustré sur la figure 2.22. Cet opérateur est construit de la façon

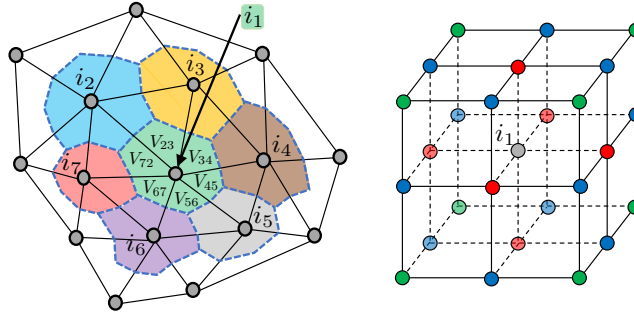


FIGURE 2.22: À gauche : représentation 2D d'un maillage non-structuré. ● : noeuds du maillage. Les volumes de contrôles associés aux noeuds i_1 (■), i_2 (■), i_3 (■), i_4 (■), i_5 (■), i_6 (■), i_7 (■) sont dessinés. Le volume de contrôle ΔV_{i_1} du noeud i_1 est formé des volumes V_{23} , V_{34} , V_{45} , V_{56} , V_{67} et V_{72} . À droite : représentation 3D d'un maillage cartésien régulier. ● : noeud i_1 . ● : Noeuds aux Centre des Faces (NCF). ● : Noeuds au Milieu des Paires (NMP). ● : Noeuds des Coins (NC).

suivante pour un champ eulérien quelconque Φ défini au noeud i , sa valeur filtrée étant notée $\hat{\Phi}_i$. Au noeud i_1 , on a pour $\hat{\Phi}_{i_1}$:

$$\hat{\Phi}_{i_1} = \frac{1}{3}\Phi_{i_1} + \frac{1}{3\Delta V_{i_1}} [(V_{23} + V_{34})\Phi_{i_3} + (V_{34} + V_{45})\Phi_{i_4} + \dots + (V_{72} + V_{23})\Phi_{i_2}]. \quad (2.138)$$

Dans cette relation : ΔV_{i_1} est le volume de contrôle associé au noeud i_1 , et V_{mn} est la fraction du volume ΔV_{i_1} délimité par les noeuds i_1 , i_m et i_n , tel qu'illustré à gauche sur la figure 2.22. Si tous les volumes de contrôles sont identiques, l'équation 2.138 devient :

$$\hat{\Phi}_{i_1} = \frac{1}{3}\Phi_{i_1} + \frac{1}{9} \sum_{m \in \{2;7\}} \Phi_{i_m}. \quad (2.139)$$

Le même type de filtre peut être dérivé en 3D. L'équation suivante donne la valeur de $\hat{\Phi}_{i_1}$ dans un cas 3D structuré où tous les volumes de contrôles sont égaux, comme montré à droite sur la figure 2.22 :

$$\hat{\Phi}_{i_1} = \frac{1}{8}\Phi_{i_1} + \frac{1}{64} \left(4 \sum_{m \in FCN} \Phi_{i_m} + 2 \sum_{m \in ECN} \Phi_{i_m} + \sum_{m \in CN} \Phi_{i_m} \right). \quad (2.140)$$

Cette opération de filtrage conservative peut être effectuée consécutivement à plusieurs reprises afin d'accroître la taille de filtre équivalente. Soulignons que lors du calcul de $\hat{\varepsilon}$, l'opération de filtrage est réalisée avant la division par le volume de contrôle de façon à conserver la masse totale dans le domaine de calcul Ω :

$$\text{Masse totale de solide} = \rho_p \int_{\Omega} (1 - \varepsilon) dV = \rho_p \int_{\Omega} (1 - \hat{\varepsilon}) dV. \quad (2.141)$$

De la même façon, afin de filtrer certaines quantités intensives de façon conservative telles que les grandeurs volumiques $\mathbf{F}_{p \rightarrow f, i}$ et $Q_{p \rightarrow f, i}$, on vient préalablement les multiplier par la valeur du volume de contrôle local. Le champ extensif résultant peut alors être filtré de façon conservative, et la dernière étape consiste alors à diviser le champ filtré par la valeur du volume de contrôle local. Ainsi pour un champ intensif :

$$\hat{\Phi} = \frac{\widehat{\Phi \cdot \Delta V}}{\Delta V}. \quad (2.142)$$

Les propriétés d'un tel opérateur de filtrage, *i.e.* ses moments, ne sont pas accessibles de façon triviale sur un maillage non-structuré quelconque [201]. Cependant il possède indéniablement l'avantage de ne mettre en jeu que les noeuds voisins. Ainsi, il ne nécessite pas de faire appel aux noeuds distants, d'où son attractivité pour l'implémentation et la performance parallèle lors de l'utilisation de maillages non-structurés. Son inconvénient principal réside dans le fait que la taille de filtre ne peut pas être obtenue explicitement car elle dépend de la taille de maille locale. Lors de son utilisation, il est donc impossible de prescrire une taille de filtre précise, mais seulement un certain nombre de répétitions. Cet opérateur suit donc le caractère anisotrope du maillage. Conscient de cette limitation, les maillages utilisés dans cette étude présentent des éléments de taille la plus homogène possible dans les zones où résident les particules. Notons également qu'avant l'étape d'interpolation d'un champ Eulérien à l'endroit d'une particule, ce dernier est filtré de la même façon que pour l'étape de projection.

2.5.4 Commentaires

D'autres méthodes de projection plus élaborées, utilisant des stencils plus importants, ont été développées de façon à contourner ce problème tout en assurant d'intéressantes propriétés mathématiques telle que la conservation des moments. La méthode appelée "mollification" est souvent citée. Elle consiste en l'utilisation d'un noyau gaussien avec une largeur à mi-hauteur de l'ordre de quelques Δx , et a déjà été utilisée à plusieurs reprises pour des applications liées aux écoulements granulaires [56]. Le poids d'interpolation $\omega_{p,i}$ issu de la mollification au noeud i de coordonnées \mathbf{x}_i a une expression de la forme :

$$\omega_{p,i} = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_p\|^2}{2\sigma^2}}, \quad (2.143)$$

où le paramètre σ peut être calculé par $\sigma = \Delta x / 2\sqrt{2 \ln 2}$ pour que la largeur à mi-hauteur du noyau gaussien vaille Δx [56]. La méthode de mollification a été implémentée dans le code YALES2. Néanmoins, en pratique, son coût de calcul la rend inutilisable dans les cas où le nombre de particules est important. En effet dans les codes non-structurés, elle nécessite un accès aux noeuds distants qui relève d'opérations lourdes. L'algorithme implémenté consiste dans sa version parallèle en :

- l'identification d'un halo de cellules autour de chaque processeur en fonction de la taille de filtre et l'échelle de coupure choisie, typiquement $\sim 4d_p$. Les noeuds ainsi identifiés appartiennent à d'autres processeurs. Il convient donc d'en faire une copie locale, appelée "ghost nodes". Dans le cas d'un maillage et d'un partitionnement fixe, cette opération est réalisée une seule fois par simulation. De cette façon, les particules locales sont capables de calculer les poids associés aux noeuds locaux, et grâce aux ghost nodes de calculer le poids total à attribuer. Cette étape est fondamentale en vue de la normalisation assurant la conservativité de l'opérateur. Les poids locaux sont immédiatement normalisés.
- les particules appartenant à ce halo sont ensuite envoyées aux processeurs voisins avec ce poids total, sous forme de particules "ghost". Pour chaque processeur ayant reçu ces particules ghost, il convient de calculer les poids associés au noyau gaussien, que l'on peut normaliser grâce au total des poids associé à chaque particules ghost.

Chaque calcul de poids nécessite un premier calcul de distance particule-noeuds afin de déterminer les noeuds situés à une distance inférieure à l'échelle de coupure. Ces opérations doivent être réalisées pour chaque variable échangée entre les phases. Notamment, afin de garantir une consistance mathématique, elles devraient être effectuées identiquement dans le sens de l'interpolation vers les particules et de la

projection sur la grille Eulérienne. Ayant été démontré que l'application du noyau gaussien de mollification était équivalent à la résolution d'une équation de diffusion sur un pseudo-temps spécifique [286], certains auteurs utilisent l'algorithme suivant [56] :

- pour la phase d'interpolation, utilisation des noeuds les plus proches (formant l'élément de maillage dans lequel la particule est localisée).
- Pour la phase de projection, première étape de projection vers les noeuds les plus proches, suivie de la résolution d'une équation de diffusion sur la grille eulérienne sur un pseudo-temps équivalent au filtrage à une taille de filtre donnée.

Cette technique permet de rendre le calcul plus facilement parallélisable, car les particules n'ont pas besoin de connaître les noeuds distants. Cependant, elle ne permet pas un transfert équivalent dans les sens de l'interpolation et de la projection, puisque les noeuds mis en jeu dans ces deux opérations ne sont pas les mêmes. Sundaram & Collins [289] ont montré que l'utilisation de poids différents lors des étapes d'interpolation et de projection engendrait des erreurs sur la conservation de l'énergie cinétique totale, qu'il conviendrait de quantifier pour cette approche. La mollification a été principalement utilisée sur des maillages cartésiens [56][97], plus rarement sur des maillages non-structurés [288], et en l'absence de transferts thermiques. Les variables qu'il convient de diffuser ont été discutées par Sun & Xiao [285]. On pourra également citer l'approche de régularisation de Sigüenza *et al.* [268], qui permet au prix d'un coût de calcul assez important d'effectuer une projection basée sur la conservation des moments d'ordres élevés. Cette méthode a été utilisée lors de simulations d'hématocytes déformables dans des capillaires sanguins [200].

Notons que dans le cas particulier du calcul de la fraction volumique de fluide, des méthodes analytiques ont été développées, consistant à calculer les intersections géométriques entre les particules sphériques et les mailles hexaédriques [109] ou tétraédriques [282]. La technique des cubes englobants permet d'approcher le calcul exact en considérant simplement les intersections entre le cube englobant une particule et la grille eulérienne [33].

L'un des inconvénients majeurs du formalisme CFD-DEM est que la plupart des champs eulériens qu'il est nécessaire d'interpoler au centre des particules, par exemple la vitesse \mathbf{u} et la température du fluide T , ont été précédemment perturbés par la présence de la particule. Au lieu de ça, les équations d'évolution de la température et de la vitesse des particules isolées sont censées mettre en jeu des champs non-perturbés. Il apparaît que l'erreur produite sur le calcul de $\mathbf{u}_{@p}$ peut conduire à de mauvaises prédictions de la vitesse terminale de chute libre. De plus, cette erreur dépend de la discrétisation spatiale. C'est pourquoi certains auteurs tentent de recréer un champ non perturbé par la particule afin d'améliorer les prédictions des valeurs interpolées [144].

2.6 Schémas numériques pour l'avancement en temps

2.6.1 Avancement en temps des particules

On cherche dans cette section à intégrer les équations 2.11, 2.12 et 2.13 au cours du temps. Pour utiliser les modèles de type sphères molles, la discrétisation temporelle employée pour l'avancement en temps explicite des particules est un point crucial. Comme écrit dans la section 2.2.2, des expressions mathématiques pour le temps de contact apparaissent pour l'utilisation du modèle linear-spring dashpot

(voir équation 2.41) et du modèle de Hertz (voir équation 2.57). Le formalisme sphères molles implique que le pas de temps employé pour la résolution temporelle de la collision Δt_p soit tel que :

$$\Delta t_p < \frac{1}{n} T_C, \quad (2.144)$$

où n est un nombre entier généralement ≥ 10 équivalent au nombre de pas de temps Δt_p dans le temps de contact T_C . Il existe deux principaux leviers pour alléger cette contrainte. Le premier consiste à augmenter la valeur de T_C . Pour les modèles de linear-spring dashpot et de Hertz, il est clair que $T_C(k_n)$ et $T_C(\tilde{k}_n)$ sont des fonctions décroissantes de k_n et \tilde{k}_n . Ces constantes de raideur ont une signification physique et leur valeur, dépendant des propriétés physiques des matériaux en contact, peut être déterminée de façon exacte. Pour le verre, on trouve une valeur $E \approx 70\text{GPa}$ pour le module d'Young. L'équation 2.51 renvoie alors une valeur approchée pour la constante de raideur normale $k_n \approx 7.0 \times 10^6 \text{N.m}^{-1}$. Les données issues des travaux expérimentaux de Drake [86] sur des billes plastiques donnent $\tilde{k}_n = 9.0 \times 10^7 \text{N.m}^{-3/2}$. Ces valeurs réalistes conduisent à des temps de contact $\sim 1.0 \times 10^{-6} \text{s}$, donc des pas de temps $\sim 1.0 \times 10^{-7} \text{s}$ au maximum. Ces pas de temps sont en général trop faibles pour permettre la simulation de plusieurs millions de particules dans un temps raisonnable. En conséquence, il est de coutume pour atteindre des pas de temps raisonnables de relaxer artificiellement la valeur de la constante de raideur. À noter que ce choix correspond à un simple étirement temporel de la période T_C de la solution 2.39 de l'équation 2.35 régissant l'évolution temporelle de la distance de recouvrement. Néanmoins, en se référant à un cas sans amortissement, il apparaît que la distance maximale de recouvrement atteinte durant le contact δ_{ab}^{max} est proportionnelle à T_C (voir équation 2.44). Ainsi, allonger la période T_C peut également compromettre la qualité de la résolution spatiale du contact en autorisant des recouvrements trop importants. En gardant à l'esprit que ces échelles microscopiques devraient rester petites devant les échelles macroscopiques de l'écoulement, en pratique on tolère un certain taux de recouvrement maximal, tel que 5% du diamètre des particules par exemple, puis à l'aide d'une estimation des vitesses d'impact des particules, on trouve une valeur typique de la raideur permettant d'accéder à un temps de contact acceptable.

Le choix du paramètre n de l'équation 2.144 dépend ensuite de la qualité de résolution désirée en fonction du schéma numérique employé. En effet, l'un des inconvénients du modèle sphères molles est que sa capacité à conserver l'énergie cinétique dépend grandement de la discrétisation temporelle employée. Par exemple, il a été démontré qu'une discrétisation à l'ordre 1, typiquement obtenu par les méthodes type Euler, provoquait l'apparition d'un terme source d'énergie toujours positif [306]. On observe alors une dérive énergétique, de l'énergie étant sans cesse injectée dans le système. Ce manque de précision peut être comblé en utilisant un grand nombre de pas de temps pour la résolution, au prix d'une augmentation drastique du temps de calcul. L'emploi de schémas numériques d'ordre plus élevé est donc préférable. Cependant, la littérature montre en général que les schémas d'ordre plus élevé nécessitent davantage de calculs des forces de collision, qui représentent un coût majeur dans les codes DEM-CFD. Allen & Tildesley [12] rappellent également qu'un schéma numérique devrait demander peu de quantités à stocker, être utilisable avec de grands pas de temps, et être facile à programmer. Il apparaît qu'en général, les algorithmes les plus complexes nécessitent de stocker davantage de quantités, mais autorisent de plus grands pas de temps [110]. Frenkel & Smit [110] notent que les algorithmes d'ordre élevé ont tendance à exhiber des propriétés de conservation de l'énergie excellentes aux temps courts, mais qui se dégradent de façon importante aux temps longs. Par contraste, les algorithmes plus simples tels que ceux de type Verlet possèdent de faibles dérives aux temps longs.

L'algorithme de Störmer-Verlet classique [308] est défini de la façon suivante : partons de l'expansion de Taylor de la position \mathbf{x}_p d'une particule aux temps $t + \Delta t_p$ et $t - \Delta t_p$ à l'ordre 4, qui donnent :

$$\mathbf{x}_p(t + \Delta t_p) = \mathbf{x}_p(t) + \mathbf{u}_p(t)\Delta t_p + \frac{\mathbf{a}_p(t)\Delta t_p^2}{2} + \frac{\mathbf{b}_p(t)\Delta t_p^3}{6} + \mathcal{O}(\Delta t_p^4), \quad (2.145)$$

et

$$\mathbf{x}_p(t - \Delta t_p) = \mathbf{x}_p(t) - \mathbf{u}_p(t)\Delta t_p + \frac{\mathbf{a}_p(t)\Delta t_p^2}{2} - \frac{\mathbf{b}_p(t)\Delta t_p^3}{6} + \mathcal{O}(\Delta t_p^4), \quad (2.146)$$

pour lesquelles \mathbf{a}_p est l'accélération de la particule et \mathbf{b}_p son à-coup (en anglais "jerk"). Par sommation de ces équations on obtient :

$$\mathbf{x}_p(t + \Delta t_p) = 2\mathbf{x}_p(t) - \mathbf{x}_p(t - \Delta t_p) + \mathbf{a}_p(t)\Delta t_p^2 + \mathcal{O}(\Delta t_p^4). \quad (2.147)$$

Cette expression montrant une erreur temporelle en $\mathcal{O}(\Delta t_p^4)$ peut servir à avancer la position des particules. Les vitesses n'apparaissent pas explicitement dans la formulation basique, bien qu'elles aient généralement besoin d'être calculées durant la simulation. Des variantes de cette méthode, tels que l'algorithme appelé Leapfrog [139], ou bien le "velocity-Verlet" [290], sont alors nécessaires. La première consiste à calculer les vitesses aux demi-instants $t + \Delta t_p/2$. Dans la seconde, les vitesses sont au contraire calculées aux mêmes instants que les positions. Toutes ces méthodes présentent des erreurs globales en $\mathcal{O}(\Delta t_p^2)$, et ont été analysées par Frenkel & Smit [110]. Ce type d'algorithme a suscité de nombreuses améliorations [220] [104]. D'autres variantes ont été écrites permettant de traiter les cas où les forces appliquées aux particules dépendent également de leur vitesse, et non pas seulement de leur position, notamment au travers d'un terme d'amortissement linéaire. La méthode écrite par Groot & Warren [126] utilise un mécanisme de prédiction-correction pour la vitesse généralisant la méthode velocity-Verlet. L'algorithme tiré de [126] s'écrit :

$$\begin{cases} \mathbf{x}_p(t + \Delta t_p) = \mathbf{x}_p(t) + \Delta t_p \mathbf{u}_p(t) + \frac{1}{2} \Delta t_p^2 \mathbf{a}_p(t), \\ \tilde{\mathbf{u}}_p(t + \Delta t_p) = \mathbf{u}_p(t) + \lambda \Delta t_p \mathbf{a}_p(t), \\ \mathbf{a}_p(t + \Delta t_p) = \mathbf{a}_p(\mathbf{x}_p(t + \Delta t_p), \tilde{\mathbf{u}}_p(t + \Delta t_p)), \\ \mathbf{u}_p(t + \Delta t_p) = \mathbf{u}_p(t) + \frac{1}{2} \Delta t_p [\mathbf{a}_p(t) + \mathbf{a}_p(t + \Delta t_p)], \end{cases} \quad (2.148)$$

où $\tilde{\mathbf{u}}_p$ correspond à vitesse prédite, corrigée à la 4ème étape. L'écriture $\mathbf{a}_p(\mathbf{x}_p(t + \Delta t_p), \tilde{\mathbf{u}}_p(t + \Delta t_p))$ dénote que l'accélération est calculée en fonction de la position à l'instant $t + \Delta t_p$ et du prédicteur de vitesse calculé antérieurement. L'écriture basique $\mathbf{a}_p(t)$ est la notation compacte de $\mathbf{a}_p(\mathbf{x}_p(t), \mathbf{u}_p(t))$, pour laquelle l'évaluation des grandeurs se fait au temps t . $\lambda \in [0; 1]$ est un paramètre numérique. Pour $\lambda = 1/2$, on retrouve l'équivalent de l'algorithme velocity-Verlet (VV). Cette méthode ne requiert qu'un calcul de \mathbf{a}_p , donc des forces de contact, par pas de temps, mais nécessite de stocker l'accélération au pas de temps précédent pour l'étape de correction de la vitesse.

Les formulations de type Runge-Kutta (RK) sont également classiques et peuvent être utilisées à des

ordres arbitraires supérieurs à 1. À l'ordre 2 (RK2), elles s'écrivent pour la position et la vitesse :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{a}_p(t + \Delta t_p/2) = \mathbf{a}_p(\mathbf{x}_p(t + \Delta t_p/2), \mathbf{u}_p(t + \Delta t_p/2)), \\ \mathbf{x}_p(t + \Delta t_p/2) = \mathbf{x}_p(t) + \frac{\Delta t_p}{2} \mathbf{u}_p(t), \\ \mathbf{u}_p(t + \Delta t_p/2) = \mathbf{u}_p(t) + \frac{\Delta t_p}{2} \mathbf{a}_p(t), \\ \mathbf{a}_p(t + \Delta t_p) = \mathbf{a}_p(\mathbf{x}_p(t + \Delta t_p/2), \mathbf{u}_p(t + \Delta t_p/2)), \\ \mathbf{x}_p(t + \Delta t_p) = \mathbf{x}_p(t) + \Delta t_p \mathbf{u}_p(t + \Delta t_p/2), \\ \mathbf{u}_p(t + \Delta t_p) = \mathbf{u}_p(t) + \Delta t_p \mathbf{a}_p(t + \Delta t_p/2). \end{array} \right. \quad (2.149)$$

Cette implémentation nécessite donc deux calculs des forces de contact par pas de temps, mais pas de stockage supplémentaire.

Afin de comparer les schémas numériques VV et RK tous deux à l'ordre 2, on se propose d'étudier l'erreur numérique pour le problème 1D suivant dans une configuration simple de rebond purement normal (sans friction) d'une particule a sur une paroi b dans le vide, en reprenant les notations de la section 2.2.1 :

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta_{ab}^0 = 0, \\ u_{ab,n}^0 > 0, \\ m_p a_p = f_{b \rightarrow a,n}^{col}, \end{array} \right. \quad (2.150)$$

où $f_{b \rightarrow a,n}^{col}$ est donnée par le modèle linear-spring dashpot (voir équation 2.27). Sont comparées les méthodes de RK2 (équation 2.149) et de velocity-Verlet (équation 2.148 avec $\lambda = 1/2$). La figure 2.23 présente l'évolution temporelle de la distance de recouvrement $\delta_{ab}(t)$ adimensionnée par sa valeur maximum (voir équation 2.45) en fonction du temps adimensionné par le temps de contact T_C . Sont comparés le calcul analytique et les résultats donnés par les méthodes numériques RK2 et velocity-Verlet. Le cas illustré correspond à $T_C/\Delta t_p = n = 10$ et $e_n = 0.8$. À noter que la valeur négative obtenue pour $\delta_{ab}^{T_C}$ correspond à la valeur brute donnée par les schémas numériques, bien que dans les simulations numériques les valeurs négatives ne sont pas prises en compte. De même, la figure 2.24 présente l'évolution temporelle de la vitesse $u_{ab,n}(t)$ adimensionnée par sa valeur initiale (voir équation 2.46) en fonction du temps adimensionné.

On relève les valeurs de l'erreur absolue maximale observée lors de l'avancement temporel de la distance de recouvrement $\delta_{ab}(t)$ et de la vitesse $u_{ab,n}(t)$, pour différentes qualités de discrétisation temporelle n , en faisant varier Δt_p (T_C restant identique). Cette erreur est calculée par $err = \max(|\delta_{ab}(t) - \delta_{ab,exacte}(t)|)$, où $\delta_{ab,exacte}(t)$ correspond à la solution analytique 2.39. De même pour la vitesse, où la solution analytique est donnée par 2.40. L'erreur sur $\delta_{ab}(t)$ et $u_{ab,n}(t)$ est respectivement tracée sur les figures 2.25 et 2.26. Les résultats sont acquis pour trois valeurs du coefficient normal de restitution e_n ; 1 (pas d'amortissement), 0.9, et 0.8.

On peut observer que les figures 2.25 et 2.26 dégagent les mêmes tendances. Pour $e_n = 1$, qui correspond à un cas non-amorti, les schémas RK2 et velocity-Verlet exhibent une erreur temporelle en $\mathcal{O}(\Delta t_p^2)$. Les schémas montrent donc un ordre 2. Le schéma velocity-Verlet donne cependant une erreur plus faible d'un facteur 3 environ. Alors que dans toutes les configurations étudiées, le schéma RK2 conserve parfaitement son ordre 2, l'ordre du schéma velocity-Verlet semble tendre vers 1, avec une erreur en $\mathcal{O}(\Delta t_p)$, pour les cas $e_n < 1$, c'est-à-dire lorsque l'expression de $f_{b \rightarrow a,n}^{col}$ devient dépendante de

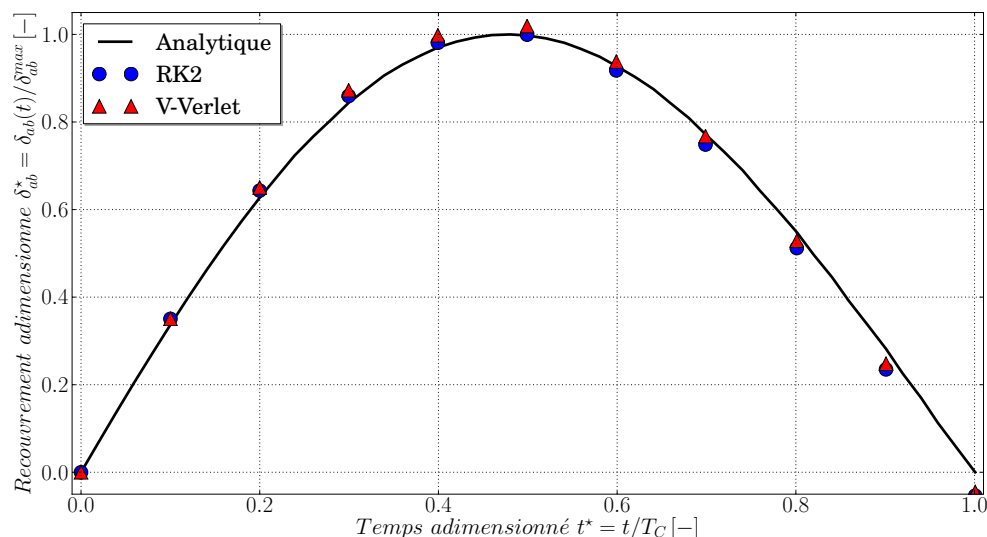


FIGURE 2.23: Évolution temporelle de la distance de recouvrement $\delta_{ab}(t)$ adimensionnée par sa valeur maximum en fonction du temps adimensionné par le temps de contact T_C . Sont comparés le calcul analytique et les résultats donnés par les méthodes numériques RK2 et velocity-Verlet. Le cas illustré correspond à $T_C/\Delta t_p = n = 10$ et $e_n = 0.8$.

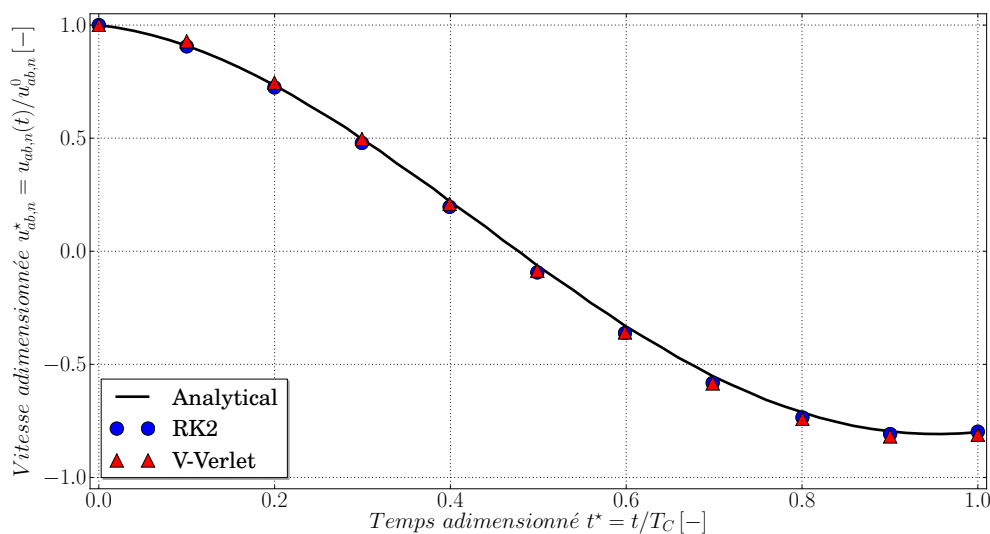


FIGURE 2.24: Évolution temporelle de la vitesse $u_{ab,n}(t)$ adimensionnée par sa valeur initiale en fonction du temps adimensionné par le temps de contact T_C . Sont comparés le calcul analytique et les résultats donnés par les méthodes numériques RK2 et velocity-Verlet. Le cas illustré correspond à $T_C/\Delta t_p = n = 10$ et $e_n = 0.8$.

la vitesse (voir équation 2.27). Il s'ensuit que l'implémentation de ces deux modèles peut être avantageuse. On pourra préférer le schéma de velocity-Verlet pour des valeurs faibles d'amortissement ou pour les très faibles valeurs de n , car il permet une erreur raisonnable en ne faisant qu'une unique fois appel au calcul des forces. Il est donc théoriquement deux fois plus rapide que RK2 pour l'avancement des particules. Notons que dans la grande majorité des simulations effectuées dans ces travaux, $e_n = 0.9$. Pour cet amortissement, le schéma velocity-Verlet donne une erreur maximale plus faible que RK2 jusqu'à

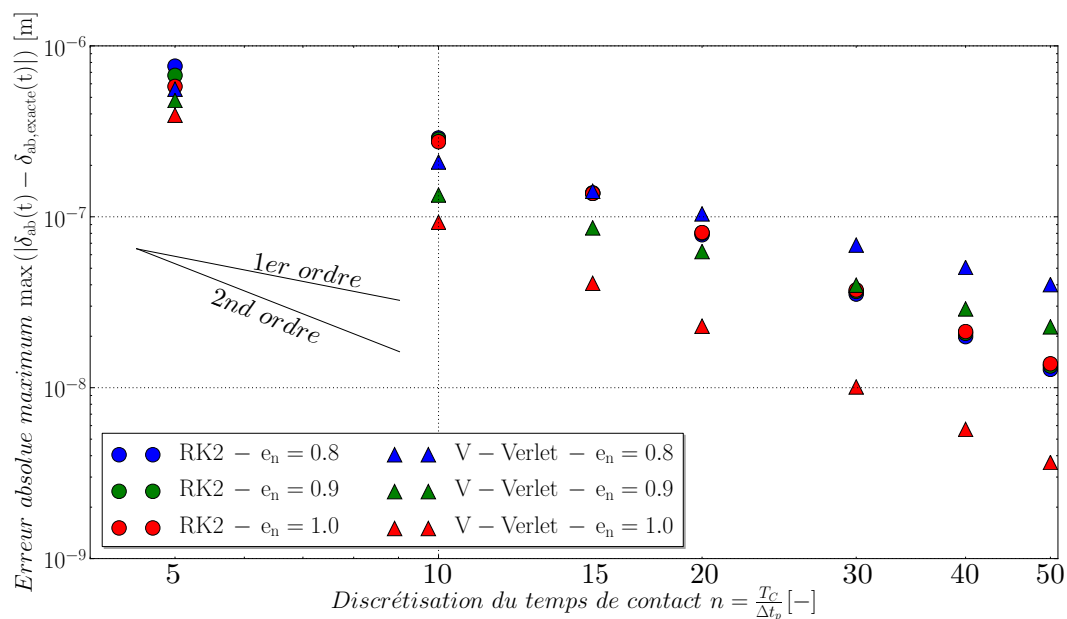


FIGURE 2.25: Erreur absolue maximum obtenue pendant l'avancement temporel de la position en fonction de la qualité de la discrétisation du temps de contact. Comparaison des méthodes de RK2 et de velocity-Verlet pour trois valeurs du coefficient normal de restitution e_n .

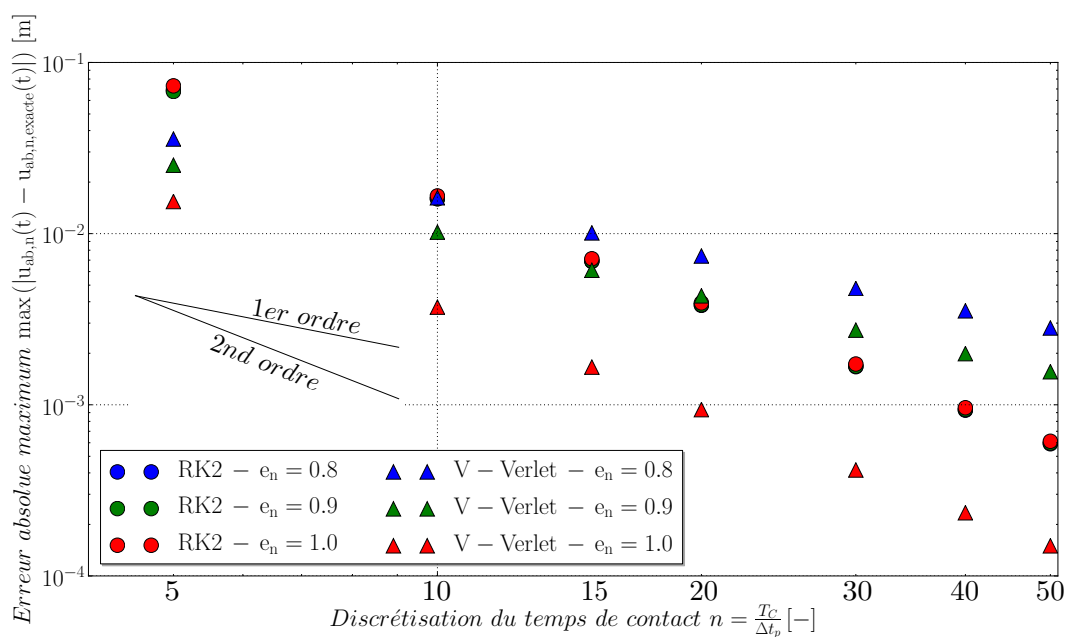


FIGURE 2.26: Erreur absolue maximum obtenue pendant l'avancement temporel de la vitesse en fonction de la qualité de la discrétisation du temps de contact. Comparaison des méthodes de RK2 et de velocity-Verlet pour trois valeurs du coefficient normal de restitution e_n .

$n \sim 17 - 18$ sur la vitesse, et jusqu'à $n \sim 25$ pour la position. Les schémas de RK2 et de velocity-Verlet ont tous deux été implémentés dans le code YALES2.

Les conclusions doivent être précautionneusement tirées de ces observations. En effet, il faut rappeler

que dans le cas général, d'autres forces que celle de collision normale sont à prendre en compte (friction, mais aussi traînée etc.). De plus, le modèle sphères molles autorise les contacts de trois particules ou plus, cas dans lesquels les résultats observés doivent varier. Ensuite, les tests exposés étaient réalisés avec des pas de temps constants, alors que dans une simulation celui-ci est recalculé à chaque instant. Enfin, il apparaît que la condition initiale utilisée pour tous les calculs $\delta_{ab}^0 = 0$, qui correspond à la première détection du contact, a en fait très peu de chance de se produire en réalité. À la place, le premier instant du contact est systématiquement différent et dépend de la configuration employée. Par exemple, dans le cas du rebond normal d'une particule sur une paroi, le premier instant du contact sera détecté pour une valeur de recouvrement δ_{ab} comprise entre 0^+ (quantité infinitésimale supérieure à 0) et $u_{ab,n}^0 \Delta t_p^-$ (quantité infinitésimale inférieure à $u_{ab,n}^0 \Delta t_p$) [255]. À la limite inférieure, la particule commence à "voir" la paroi, donc à subir les forces répulsives, dès qu'elle entre effectivement en contact avec elle. La limite supérieure $u_{ab,n}^0 \Delta t_p^-$ correspond au pire scénario : le contact n'a pas été détecté au pas de temps précédent car δ_{ab} valait 0^- . Ainsi, pendant la durée du pas de temps suivant, la particule ne "voit" pas la paroi, et continue à avancer avec une vitesse $u_{ab,n}^0$. Ce phénomène de décalage temporel est particulièrement visible pour les faibles valeurs de n ou les fortes valeurs de $u_{ab,n}^0$, se produit également à la fin du contact, et conduit à une dispersion observable sur la figure 2.27.

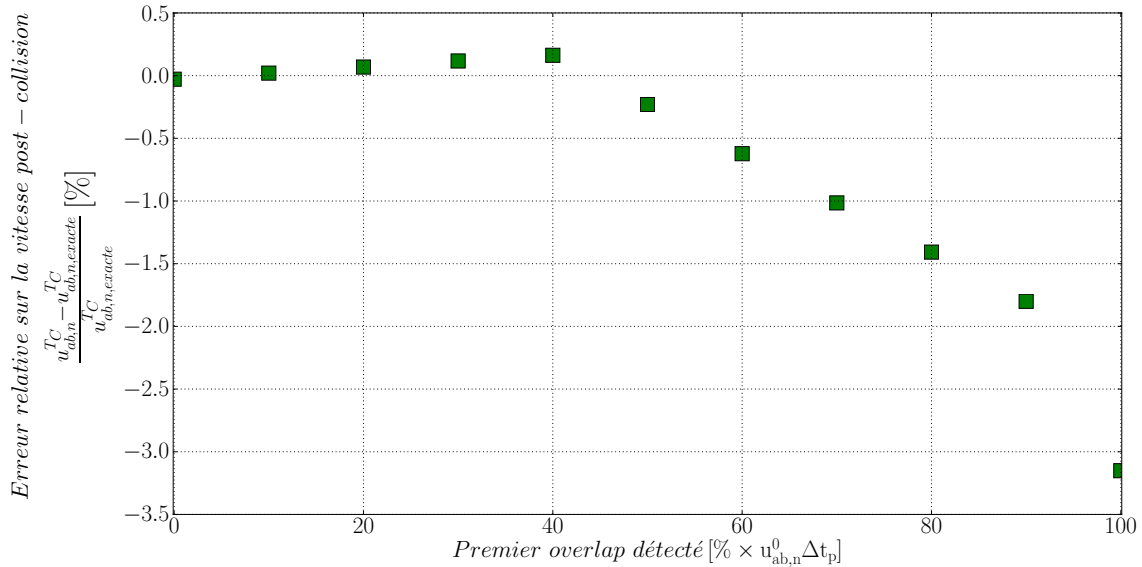


FIGURE 2.27: Erreur relative obtenue sur la vitesse post-collision $u_{ab,n}^{TC}$ par rapport à sa valeur analytique $u_{ab,n,exacte}^{TC}$ en fonction du premier overlap détecté, exprimé comme un pourcentage de la valeur maximum observable $u_{ab,n}^0 \Delta t_p$. Simulation mettant en jeu le schéma RK2, pour $e_n = 0.9$ et $n = 15$.

L'interprétation de l'erreur obtenue n'est pas triviale, mais on montre bien que la détection du premier contact influe sur la vitesse post-collisionnelle. Une solution efficace pour parer ce biais est de limiter le pas de temps particulier en fonction de la vitesse relative des particules, par exemple sur le critère suivant :

$$\Delta t_p < r \frac{\min(d_a, d_b)}{\|\mathbf{u}_{ab,n}\|}, \quad (2.151)$$

où r est un réel qui permet de limiter la distance parcourue par les particules a et b pendant un pas de temps, exprimée comme une fraction du plus petit des deux diamètres. Dans le cas d'une collision

particule-paroi, on emploie :

$$\Delta t_p < r \frac{d_a}{\|\mathbf{u}_{a,n}\|}. \quad (2.152)$$

D'autres critères de stabilité doivent être définis afin d'assurer une modélisation correcte des principaux phénomènes physiques prenant place à l'échelle des particules. Ainsi, la force de traînée \mathbf{F}_D peut se mettre sous la forme suivante :

$$\mathbf{F}_D = \frac{m_p}{\tau_{p,drag}} (\mathbf{u}_{@p} - \mathbf{u}_p), \quad (2.153)$$

où $\tau_{p,drag}$ est le temps de relaxation pour la traînée, qui s'exprime de la façon suivante :

$$\tau_{p,drag} = \frac{4\rho_p d_p}{3\rho_{@p} \varepsilon_{@p} C_D \|\mathbf{u}_{@p} - \mathbf{u}_p\|}. \quad (2.154)$$

Ainsi une condition de stabilité minimum pour ce phénomène s'écrit :

$$\Delta t_p < \tau_{p,drag}. \quad (2.155)$$

De même, concernant les échanges de chaleur, le flux reçu par une particule peut s'écrire :

$$Q_F = \frac{m_p C_{p,p}}{\tau_{p,heat}} (T_{@p} - T_p), \quad (2.156)$$

où $\tau_{p,heat}$ est le temps caractéristique pour les échanges de chaleur, qui s'exprime de la façon suivante :

$$\tau_{p,heat} = \frac{m_p C_{p,p}}{h_{fp} S_p} = \frac{d_p m_p C_{p,p}}{Nu_p \lambda_{@p} S_p}. \quad (2.157)$$

La condition de stabilité minimum pour ce phénomène s'écrit donc :

$$\Delta t_p < \tau_{p,heat}. \quad (2.158)$$

Une condition de stabilité s'écrit également pour la gravité :

$$\Delta t_p < GN \sqrt{\frac{\Delta x}{\|\mathbf{g}\|}}, \quad (2.159)$$

pour laquelle Δx est la taille caractéristique de la maille contenant la particule et GN le nombre de gravité. Enfin la condition de stabilité associée au transport lagrangien de la particule est :

$$\Delta t_p < CFL_p \frac{\Delta x}{\|\mathbf{u}_p\|}, \quad (2.160)$$

où CFL_p est l'équivalent d'un nombre de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) particulaire. Finalement, pour calculer le pas de temps particulaire, il convient de prendre :

$$\Delta t_p < \min \left(\frac{1}{n} T_C, r \frac{\min(d_a, d_b)}{\|\mathbf{u}_{ab,n}\|}, \tau_{p,drag}, \tau_{p,heat}, GN \sqrt{\frac{\Delta x}{\|\mathbf{g}\|}}, CFL_p \frac{\Delta x}{\|\mathbf{u}_p\|} \right). \quad (2.161)$$

Cette condition est recalculée au début de chaque pas de temps particulaire, qui peut varier dans le temps. Cependant, à cause du phénomène de collision, toutes les particules avancent au même pas de temps, vérifiant la condition 2.161 pour toutes les particules. En postulant que les phénomènes décrits ci-dessus au niveau des particules se produisent à des échelles temporelles moindres que celles associées au fluide, il

est possible de "sous-stepper" les particules, de façon à effectuer (si nécessaire), plusieurs pas de temps particulaires dans un pas de temps fluide. Au cours des sous-steps effectués par les particules, le fluide est figé, mais les particules peuvent se déplacer. Les poids d'interpolation définis dans la section 2.5 sont alors recalculés à chaque déplacement des particules, ainsi que l'ensemble des champs Eulériens interpolés en leur centre. Ceci permet de recalculer les forces hydrodynamiques sur les particules, en prenant en compte leur éventuel changement d'environnement. À la fin de chaque sous-step, l'étape de projection visant au calcul des termes sources $\mathbf{F}_{p \rightarrow f, i}$ et $Q_{p \rightarrow f, i}$ (voir section 2.5.2) est réalisée. De cette façon, au début du pas de temps fluide suivant, ces quantités ont bien été accumulées durant l'ensemble des sous-steps particulaires, et de façon conservative.

L'ensemble des schémas numériques cités peut également être utilisé pour décrire la rotation des particules (voir équation 2.12), à condition que leur moment d'inertie soit une constante, ce qui est le cas dans cette étude. Dans le cas contraire, des méthodes plus complexes doivent être utilisées, comme les angles d'Euler, les quaternions, ou les angles de Rodrigues [54]. Pour une vision globale des autres schémas classiques, le lecteur est redirigé vers la revue de Dziugys & Peters [90].

2.6.2 Avancement en temps du fluide

Afin d'intégrer les équations 2.5, 2.6, 2.7 et 2.8, on s'intéresse à des schémas explicites robustes haut-ordre en espace et en temps. La densité du fluide dépendant localement des espèces chimiques et de la température, le code YALES2 utilise un solveur à densité variable (en anglais "variable density solver" ou VDS). Un schéma centré du 4ème ordre est utilisé pour l'intégration spatiale, et un schéma du 4ème ordre appelé TFV4A [167], combinant les méthodes de Runge-Kutta et de Lax-Wendroff est utilisé pour l'intégration temporelle. L'avancement en temps est réalisé à l'aide d'une méthode de projection à pas fractionnés pour les écoulements à densité variable [233] décrite ci-dessous, où n décrit les instants discrets. Pour une question de clarté, le processus est décrit avec un schéma numérique de type Euler explicite :

1. Avancement de la phase lagrangienne

Premièrement, les particules sont avancées de $n + 1/2$ à $n + 3/2$. Cette étape a été précédemment décrite. Après que les particules ont été relocalisées sur la grille, la fraction volumique de fluide $\varepsilon^{n+3/2}$ peut être calculée en utilisant l'équation 2.125.

2. Prédiction de la densité pour l'avancement des scalaires

Un prédicteur de densité $(\varepsilon\rho)^*$ est ensuite déterminé au moyen de la conservation de la masse (voir équation 2.5) :

$$\frac{(\varepsilon\rho)^* - (\varepsilon\rho)^{n+1/2}}{\Delta t} = -\nabla \cdot (\varepsilon\rho\mathbf{u})^n. \quad (2.162)$$

3. Prédiction des scalaires

Ce prédicteur de densité est utilisé pour avancer les scalaires en temps, en particulier l'enthalpie sensible h_s et les fractions massiques des espèces chimiques Y_k . Pour un quelconque scalaire Φ :

$$\frac{(\varepsilon\rho\Phi)^* - (\varepsilon\rho\Phi)^{n+1/2}}{\Delta t} = -\nabla \cdot ((\varepsilon\rho\mathbf{u})^n \Phi^{n+1/2}) + \mathcal{D}(\Phi^{n+1/2}) + \mathcal{R}(\Phi^{n+1/2}), \quad (2.163)$$

où \mathcal{D} symbolise les termes de diffusion et \mathcal{R} les termes de réaction.

(a) Calcul de la température

Les polynômes NASA du 5ème ordre liant la capacité thermique d'une espèce chimique à la température, ceux-ci sont inversés pour obtenir T^* à partir des Y_K^* et de h_g^* . Un algorithme itératif de Newton-Raphson est utilisé à cet effet.

(b) Correction de la densité

La valeur de densité vérifiant la loi des gaz parfaits, notée ρ^{EOS} , est calculée en utilisant les scalaires prédits :

$$\rho^{EOS} = \frac{P_0}{r^* T^*}. \quad (2.164)$$

L'intégration temporelle des équations de Navier-Stokes à bas nombre de Mach pleinement conservative est non triviale, et nécessite habituellement une relaxation de l'équation d'état (en anglais "equation-of-state" ou EOS). Le code YALES2 applique une conservation stricte et une relaxation est appliquée sur l'équation d'état : la valeur de la densité à $n + 3/2$ est obtenue à partir du prédicteur de densité et de la densité obtenue à partir de l'EOS par le biais d'un coefficient de relaxation α :

$$(\varepsilon\rho)^{n+3/2} = \alpha\rho^{EOS}\varepsilon^{n+3/2} + (1 - \alpha)(\varepsilon\rho)^*. \quad (2.165)$$

Par défaut, la valeur de α est fixée à 0.7. Finalement, la densité au temps $n + 1$ est estimée par :

$$(\varepsilon\rho)^{n+1} = \frac{1}{2} [(\varepsilon\rho)^{n+1/2} + (\varepsilon\rho)^{n+3/2}]. \quad (2.166)$$

4. Prédiction de la vitesse

La vitesse peut ensuite être prédite en réutilisant le gradient de pression dynamique au pas de temps précédent :

$$\frac{(\varepsilon\rho\mathbf{u})^* - (\varepsilon\rho\mathbf{u})^n}{\Delta t} = -\nabla \cdot ((\varepsilon\rho\mathbf{u})^n \otimes \mathbf{u}^n) - \nabla P^{n-1/2} + \nabla \cdot \tau^n. \quad (2.167)$$

5. Correction de la vitesse

La correction de la vitesse est réalisée en mettant à jour le gradient de pression :

$$\frac{(\varepsilon\rho\mathbf{u})^{n+1} - (\varepsilon\rho\mathbf{u})^*}{\Delta t} = -\nabla (P^{n+1/2} - P^{n-1/2}). \quad (2.168)$$

L'équation de Poisson visant à calculer $P^{n+1/2}$ est obtenue en prenant la divergence de l'équation 2.168 et en y insérant la condition imposée par l'équation suivante de conservation de la masse (voir équation 2.5) écrite à l'instant $n + 1$:

$$\nabla \cdot (\varepsilon\rho\mathbf{u})^{n+1} = -\frac{(\varepsilon\rho)^{n+3/2} - (\varepsilon\rho)^{n+1/2}}{\Delta t}. \quad (2.169)$$

L'équation de Poisson s'écrit finalement :

$$\nabla \cdot (\nabla (P^{n+1/2} - P^{n-1/2})) = \frac{(\varepsilon\rho)^{n+3/2} - (\varepsilon\rho)^{n+1/2}}{\Delta t^2} + \frac{\nabla \cdot (\varepsilon\rho\mathbf{u})^*}{\Delta t}. \quad (2.170)$$

Ce système linéaire requiert un solveur itératif à la fois précis et performant. Une méthode de gradient conjugué avec préconditionnement est employée, dont la convergence est encore améliorée par l'utilisation d'une méthode de déflation, appelée DPCG (Deflated Preconditioned Conjugate Gradient) [311].

6. Correction des scalaires

Finalement, l'avancement des scalaires Φ nécessite une étape de correction à l'aide de la vitesse corrigée, ce qui donne :

$$\frac{(\varepsilon\rho\Phi)^{n+3/2} - (\varepsilon\rho\Phi)^{n+1/2}}{\Delta t} = -\nabla \cdot ((\varepsilon\rho\mathbf{u})^{n+1}\Phi^{n+1/2}) + \mathcal{D}(\Phi^{n+1/2}) + \mathcal{R}(\Phi^{n+1/2}). \quad (2.171)$$

L'avancement en temps résultant de l'application de cette méthode est parfaitement conservatif du point de vue de la masse, de la quantité de mouvement et de l'enthalpie, néanmoins les valeurs en fin de pas de temps ne satisfont pas pleinement l'équation d'état.

Le pas de temps pour la phase fluide, noté Δt , est recalculé à chaque itération du solveur en appliquant un certain nombre de critères de stabilité. Une valeur maximum du nombre de CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) est utilisée telle que :

$$\Delta t < CFL \frac{\Delta x}{\|\mathbf{u}\|}. \quad (2.172)$$

De même avec le nombre de Fourier Fo :

$$\Delta t < Fo \frac{\Delta x^2 \rho}{\mu + \mu_t}. \quad (2.173)$$

Ici, Δx se réfère à la taille des paires de noeuds. Une condition de stabilité de type Fourier est également appliquée pour la diffusion de l'enthalpie et des espèces, faisant respectivement intervenir la conductivité thermique λ et le coefficient de diffusion D_k de l'espèce k .

Concernant les échanges de chaleur, un temps caractéristique peut être extrait de l'équation de transport de l'enthalpie sensible (voir équation 2.7), en considérant seulement le terme source issu des particules et en se plaçant à $\varepsilon\rho C_p$ constant :

$$\varepsilon\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{\Delta V} \sum_p h_{fp} S_p. \quad (2.174)$$

Le temps caractéristique associé s'exprime alors :

$$\tau_{heat} = \frac{\rho\varepsilon\Delta V C_p}{\sum_p h_{fp} S_p}. \quad (2.175)$$

La condition de stabilité minimum pour ce phénomène s'écrit donc à partir d'un nombre caractéristique HN :

$$\Delta t < HN\tau_{heat}. \quad (2.176)$$

Ici l'opérateur de sommation \sum_p porte sur les particules influant sur le volume de contrôle ΔV . Le détail de ces opérations a été vu dans la section 2.5.2. Enfin, la condition sur le nombre de gravité GN est :

$$\Delta t < GN \sqrt{\frac{\Delta x}{\|\mathbf{g}\|}}. \quad (2.177)$$

Afin de s'affranchir de la contrainte multi-échelle temporelle, le code YALES2 utilise la méthode de séparation d'opérateurs (en anglais "operator splitting"). Cette méthode consiste en la résolution séparée de chaque opérateur (convection, diffusion et réaction) avec son propre pas de temps caractéristique. L'intérêt d'une telle méthode réside dans le choix du pas de temps d'une itération, pris comme le plus grand temps caractéristique entre chaque phénomène. Une description de la séparation d'opérateurs est détaillée dans la thèse de Benard [29].

2.7 Autres aspects de la modélisation

Le solveur DEM-CFD développé dans le code YALES2 a été doté de possibilités supplémentaires, utiles à la simulations de systèmes granulaires dans des cas spécifiques.

2.7.1 Pertes de charge en entrée

Comme évoqué précédemment, les lits fluidisés, parmi d'autres systèmes fluide-particules, comportent une grille supportant les particules et jouant le rôle de système d'injection. Le gaz préalablement acheminé dans la partie basse de l'installation ("boîte à vent") est introduit dans le système via les trous de cette grille. Afin d'empêcher la création de chemins préférentiels pour le gaz dans sa traversée du lit, donc de forcer un débit identique à travers tous les trous d'injections, il est courant d'introduire des pertes de charge artificielles (ou simplement de maîtriser la perte de charge de la grille). De cette façon, le gaz sera moins sensible à la perte de charge due à la présence hétérogène des particules. Cette perte de charge doit être d'au moins 1/3 du poids du lit [266]. De cette répartition de débit dépend souvent la qualité de la fluidisation et donc de celle du procédé dans son ensemble. De plus, numériquement, il peut parfois être intéressant d'éloigner les particules des conditions aux limites d'injection ou de sortie afin d'éviter des interactions et des effets de bords difficiles à contrôler. Certains codes utilisent à cet effet une couche de cellules virtuelles en entrée, par exemple pour calculer la fraction volumique dans les premières cellules de la même façon qu'au coeur du domaine de calcul [33]. Pour les lits fluidisés anisothermes, il peut également arriver que la quasi totalité des transferts de chaleur fluide-particules se produisent sur une hauteur équivalente à la taille de maille, d'où l'importance de bien contrôler la température du fluide avant qu'il entre en contact avec la phase solide.

Pour toutes ces raisons, le solveur granulaire du code YALES2 a été doté de la possibilité d'introduire une grille fictive au-dessus de l'entrée de fluide, vue seulement par les particules, sous laquelle une perte de charge artificielle est ajustable. Le fait de fixer une perte de charge lors de l'utilisation d'une telle grille d'injection fictive est nécessaire afin d'éviter l'apparition de chemins préférentiels discutés plus haut dans les cas expérimentaux. La perte de charge est assimilée à la présence d'un matériau poreux disposé sous la grille fictive. Bien que le fluide ne "voit" pas la grille fictive, les particules peuvent bien effectuer des collisions avec cette paroi.

Il existe plusieurs méthodes numériques pour modéliser les pertes de charges artificielles. La plus simple consiste en l'ajout d'un terme explicite de forçage dans l'équation de quantité de mouvement. Cette approche possède l'inconvénient d'introduire un critère de stabilité supplémentaire pour la résolution de cette équation, qu'il convient de calculer et qui pourrait éventuellement limiter le pas de temps du solveur. L'approche ayant été implémentée dans le code YALES2 est une méthode de pénalisation inconditionnellement stable, car elle consiste en l'ajout d'un terme linéarisé dans l'étape de prédiction de la vitesse lors de l'avancement temporel. L'équation résolue en l'absence de pertes de charge artificielles a été écrite dans la section précédente (voir équation 2.167). Partant de cette équation, on ajoute un terme représentant la présence du matériau poreux provoquant la perte de charge, tel que :

$$\frac{(\varepsilon\rho\mathbf{u})^* - (\varepsilon\rho\mathbf{u})^n}{\Delta t} = -\nabla \cdot ((\varepsilon\rho\mathbf{u})^n \otimes \mathbf{u}^n) - \nabla P^{n-1/2} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^n - \mathcal{H}(\mathbf{x}) \frac{(\varepsilon\rho\mathbf{u})^*}{\tau_{poreux}}, \quad (2.178)$$

où $\mathcal{H}(\mathbf{x})$ représente la fonction Heaviside :

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{x} \text{ est dans le poreux (c'est-à-dire sous la grille fictive),} \\ 0 & \text{si } \mathbf{x} \text{ est dans le reste du domaine,} \end{cases} \quad (2.179)$$

\mathbf{x} étant une coordonnée nodale. Le caractère inconditionnellement stable de cette formulation se traduit par le fait qu'elle est résolue sous la forme suivante :

$$(\varepsilon \rho \mathbf{u})^* = \frac{\tau_{poreux}}{\tau_{poreux} + \Delta t \times \mathcal{H}(\mathbf{x})} \left[(\varepsilon \rho \mathbf{u})^n + \Delta t \left(-\nabla \cdot ((\varepsilon \rho \mathbf{u})^n \otimes \mathbf{u}^n) - \nabla P^{n-1/2} + \nabla \cdot \tau^n \right) \right]. \quad (2.180)$$

Cette expression permet d'assurer que là où $\mathcal{H}(\mathbf{x}) = 0$ (absence de poreux), on retrouve la prédiction de vitesse classique. En pratique, le champ correspondant à la fonction $\mathcal{H}(\mathbf{x})$ doit être fourni, en fonction de la hauteur de grille fictive programmée. De cette façon, le terme ajouté n'est actif que dans une zone définie par la présence du poreux. τ_{poreux} est une variable nodale homogène à un temps dont il faut déterminer l'expression. On commence par écrire la formulation suivante de la loi de Darcy pour les milieux poreux, avec la vitesse circulante u :

$$\Delta P_{poreux} = \left(\frac{1}{\sigma^2} - 1 \right) \frac{1}{2} \rho u^2, \quad (2.181)$$

où ΔP_{poreux} est la contribution du poreux à la perte charge dynamique linéique, et σ est sa perméabilité définie comme le rapport de l'aire interstitielle sur l'aire superficielle. Le facteur devant le terme de pression dynamique $\frac{1}{2} \rho u^2$ est donc supérieur à 1, et vaut exactement 1 pour un matériau infiniment poreux. En appelant L la hauteur du poreux, le gradient de pression associé s'écrit :

$$\|\nabla P_{poreux}\| = \left(\frac{1}{\sigma^2} - 1 \right) \frac{1}{2} \frac{\rho u^2}{L}. \quad (2.182)$$

Discretisé puis linéarisé sous forme vectorielle, ce terme peut s'écrire :

$$\nabla P_{poreux} = \left(\frac{1}{\sigma^2} - 1 \right) \frac{1}{2} \frac{\rho^* \mathbf{u}^* \|\mathbf{u}^n\|}{L}. \quad (2.183)$$

C'est ce terme que l'on désire ajouter à l'équation de prédiction de la vitesse. Par identification avec la représentation employée $\frac{(\rho \mathbf{u})^*}{\tau_{poreux}}$, l'expression de τ_{poreux} est donnée par :

$$\tau_{poreux} = \frac{1}{\frac{1}{\sigma^2} - 1} \frac{2L}{\|\mathbf{u}^n\|}. \quad (2.184)$$

Notons que le terme ε vaut 1 dans le poreux car les particules en sont absentes, retenues par la paroi fictive. On peut ensuite définir le terme adimensionné suivant :

$$\frac{\|\nabla P_{poreux}\|}{\frac{1}{2} \rho u^2} = \left(\frac{1}{\sigma^2} - 1 \right) \frac{1}{L}, \quad (2.185)$$

correspondant à un gradient de pression normalisé et appelé NPG (pour Normalized Pressure Gradient). τ_{poreux} peut alors être exprimé en fonction de NPG :

$$\tau_{poreux} = \frac{2}{NPG \cdot \|\mathbf{u}^n\|}. \quad (2.186)$$

La perte de charge désirée sous la grille fictive peut alors être entièrement déterminée par la valeur de NPG .

Finalement, pour un poids de lit exprimé en terme de chute de pression ΔP_{lit} se calculant à partir des masses de solide et de fluide à fluidiser (voir équation 1.8), le gradient de pression normalisé NPG doit vérifier la relation suivante :

$$NPG \geq \frac{2\Delta P_{lit}}{3L\rho u^2}, \quad (2.187)$$

pour représenter un perte de charge additionnelle supérieure à $\frac{1}{3}\Delta P_{lit}$, où u peut être prise égale à la vitesse d'entrée (superficielle) du fluide U_{in} .

Parce que le gradient de pression ajouté n'est pas explicitement imposé et dépend de la vitesse à l'instant n , sa valeur effectivement comptabilisée dans la prédiction de la vitesse pourrait varier dans le temps et dans l'espace, et donc différer de la consigne. Afin d'obtenir les valeurs de perte de charge totale à travers le lit sans tenir compte du poreux modélisé, il convient de retrancher à la perte de charge totale la contribution du poreux, calculée de façon instantanée. Une bonne estimation de ΔP_{poreux} est obtenue en calculant l'intégrale volumique du gradient de pression conditionnée par la présence du poreux :

$$\Delta P_{poreux} = \frac{1}{S} \int_{\Omega} \|\nabla P\| \cdot \mathcal{H}(\mathbf{x}) dV, \quad (2.188)$$

quantité qui peut être monitorée durant le calcul. S représente la section totale du réacteur sur laquelle est appliquée le terme de perte de charge additionnel. La figure 2.28 montre les comportements à plusieurs instants de deux configurations fluidisées identiques où une grille fictive a été placée, la première avec un terme de perte de charge additionnelle sous la grille pris égal au poids du lit, la seconde sans terme ajouté. Dans le cas sans perte de charge ajoutée, on observe qualitativement la création de chemins préférentiels conduisant à une mauvaise fluidisation et à un envol anormal des particules.

2.7.2 Parois périodiques

La possibilité d'ajouter des parois périodiques a également été incorporée au code YALES2. La difficulté tient au fait de prendre en compte d'éventuels contacts entre particules situées de part et d'autre d'une périodicité. Pour ce faire, on se sert du fait que les particules sont localisées dans les cellules du maillage. Il s'agit alors d'identifier les cellules dont les particules devront subir une ou plusieurs transformation(s), donc celles qui sont proches des parois périodiques.

La figure 2.29 montre un cas simple 2D cartésien avec deux parois périodiques deux à deux. Une couleur y est associée à une paroi, elle-même associée à une transformation (ici de simples translations). Lorsqu'une particule est localisée dans une cellule colorée, elle doit subir la transformation correspondant à la couleur de la paroi associée. Concrètement, une copie identique de la particule est créée sur le processeur possédant la périodicité correspondante, qui peut être le même processeur ou bien un processeur distant. Les coordonnées de la copie, sa vitesse de translation et sa vitesse de rotation subissent la transformation, qui peut être une translation (comme dans le cas présenté), ou bien une rotation, ou bien une composition des deux. La figure 2.29 fait également apparaître des cellules de deux couleurs, c'est-à-dire des cellules situées aux intersections de plusieurs périodicités. Les particules situées dans

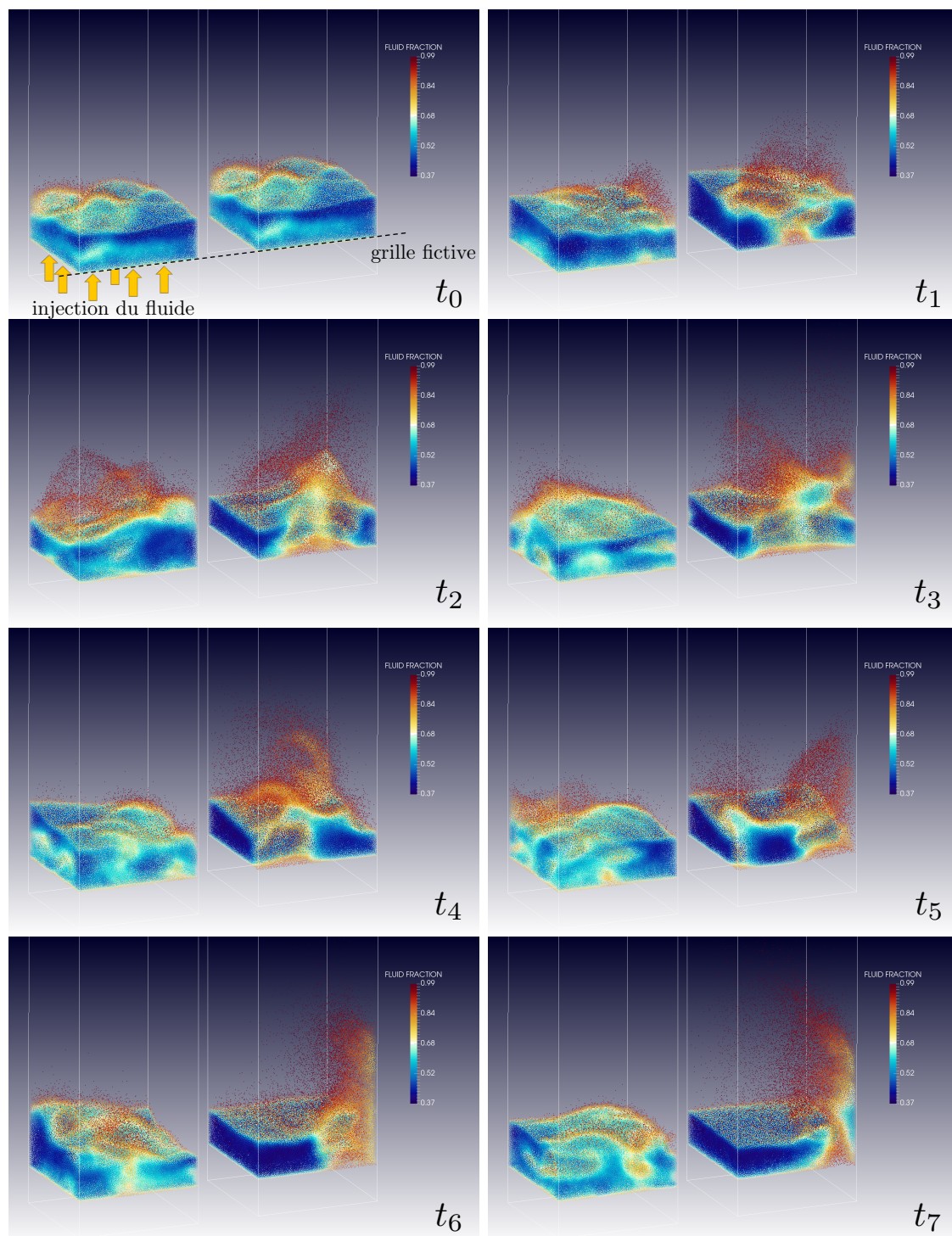


FIGURE 2.28: Comportement observé à divers instants lors d'une fluidisation avec prise en compte d'une grille fictive uniquement vue par les particules. Le fluide n'est pas représenté et les particules sont colorées par la fraction volumique de fluide locale. À gauche, un terme de perte de charge additionnelle est ajouté dans la zone située sous la grille. À droite, aucune perte de charge n'est ajoutée. L'apparition de chemins préférentiels empruntés par le fluide conduit à un envol des particules et une mauvaise fluidisation.

ces cellules doivent subir un traitement spécifique qui consiste à en créer trois copies au total : une copie d'après la transformation associée à la première couleur, puis une copie d'après la transformation associée à la seconde couleur, et enfin une copie associée à la composition des deux transformations (transformation double).

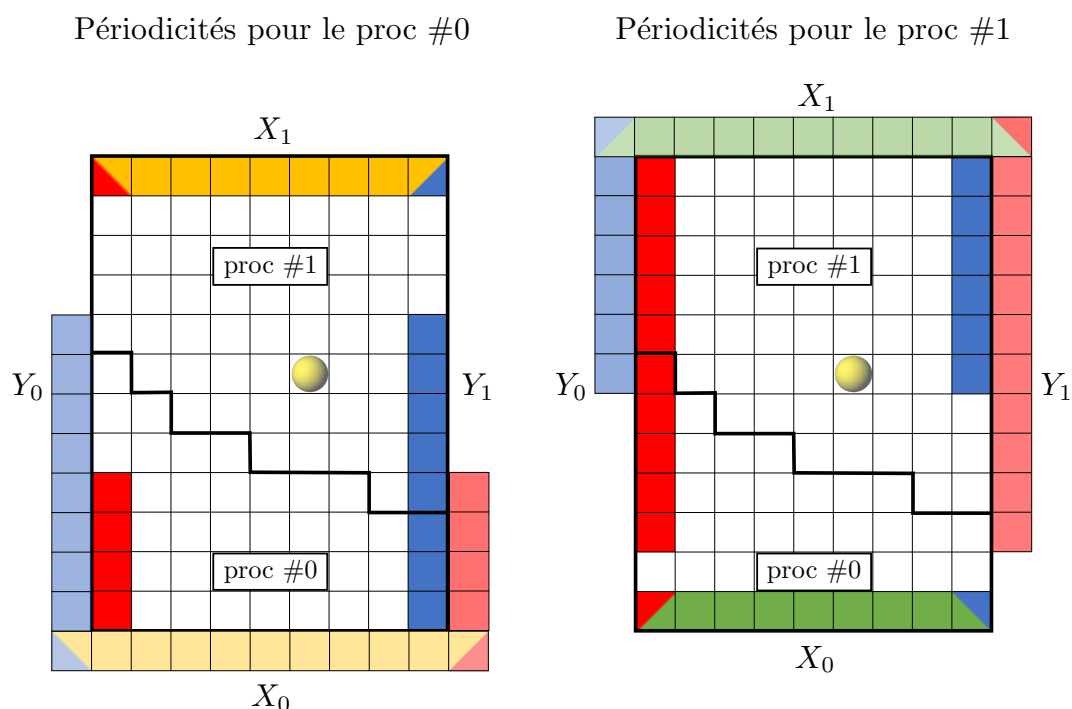


FIGURE 2.29: Périodicités sur un cas simple 2D cartésien. Le domaine rectangulaire est réparti sur deux processeurs proc #0 et proc #1 dont les frontières sont en trait noir épais. Les quatre parois X_0 , X_1 , Y_0 et Y_1 , sont périodiques deux à deux, tel que X_0 et X_1 sont liées, et Y_0 et Y_1 sont liées. Une particule est dessinée. Les cellules sont coloriées lorsque les particules qui y sont localisées doivent subir une ou plusieurs transformation(s) périodique(s) : les particules situées dans les cellules ■ doivent subir la transformation associée à X_0 . De même, les cellules ■ sont associées à X_1 , les cellules ■ à Y_0 , et les cellules ■ à Y_1 . Les particules situées dans les cellules constituées de deux couleurs doivent subir les deux transformations associées. Le même code couleur, mais avec des couleurs plus claires, est utilisé pour représenter les cellules fictives après avoir subies les transformations nécessaires. À gauche, les transformations pour le proc #0, à droite pour le proc #1.

Dans les cas 3D avec trois périodicités possédant des intersections, des cellules à trois couleurs apparaissent. Les particules s'y situant doivent alors subir les trois transformations élémentaires, puis les trois transformations doubles, et enfin la transformation triple, ce qui porte le nombre de copies à effectuer à 7. L'usage de périodicités engendrent donc un surcoût séquentiel dû à l'augmentation du nombre de particules (réels + fictives) à traiter, et un surcoût parallèle lorsque les copies doivent être envoyées à des processeurs distants. L'implémentation de périodicités est rendue plus complexe par le fait qu'elle doit être utilisable quelque soit la position et l'inclinaison des parois, et ce quelque soit le partitionnement et le maillage employés. De plus, selon le ratio de diamètre des particules et de taille de maille locale, il peut être nécessaire d'identifier des cellules qui ne sont pas directement en contact avec les parois.

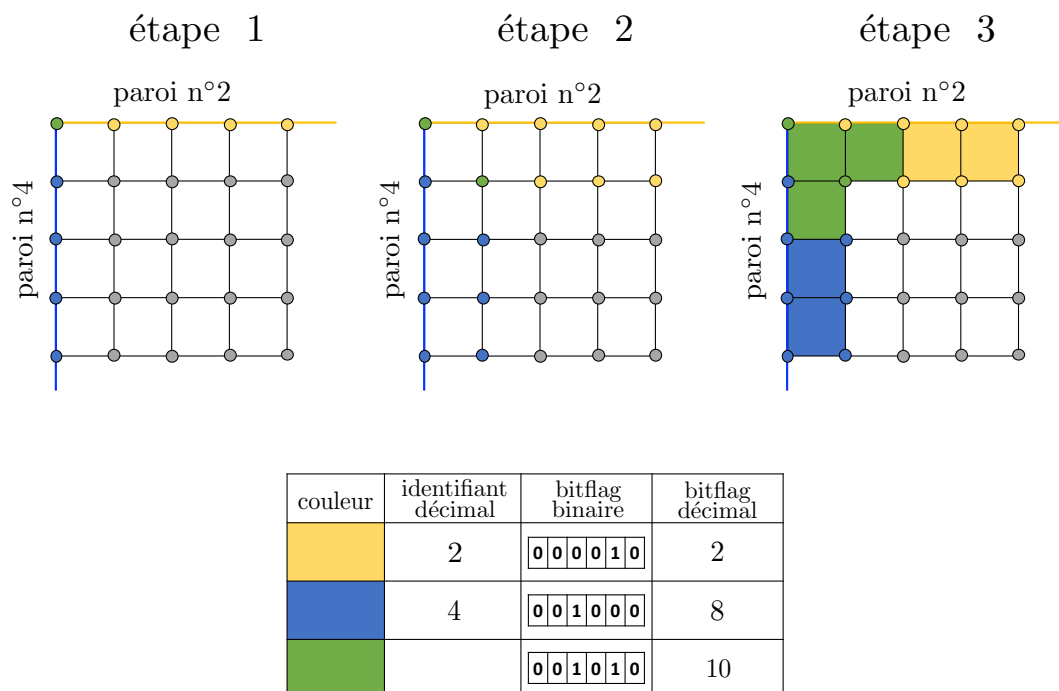


FIGURE 2.30: Mécanisme d'identification des cellules pour la prise en compte des périodicités. Le cas présenté correspond à une intersection de deux parois périodiques numérotées 2 et 4 (l'autre paroi avec laquelle chacune d'elles partage une périodicité n'est pas dessinée).

Le mécanisme utilisé, schématisé sur la figure 2.30, repose sur l'utilisation du formalisme binaire pour identifier les cellules associées à des transformations périodiques. Il suit le processus suivant :

1. à chaque nœud appartenant à une paroi périodique est attribué un identifiant appelé "bitflag" dépendant uniquement de la paroi à laquelle il appartient. Soit n l'identifiant d'une paroi périodique, le bitflag correspondant est 2^{n-1} . Le bitflag des nœuds appartenant simultanément à plusieurs parois est obtenu par une opération logique *XOR* des bitflags des deux parois sous forme binaire. C'est l'étape 1 de la figure 2.30.
2. Ces bitflags sont propagés de nœud en nœud depuis les parois périodiques vers l'intérieur du domaine de calcul. Au cours de la propagation, notamment dans les zones proches de deux parois périodiques, des nœuds marqués de plusieurs bitflags apparaissent également. C'est l'étape 2 de la figure 2.30.
3. Ensuite intervient l'étape de marquage des cellules, elles aussi munies d'un bitflag. Le bitflag de chaque cellule est calculé via une opération logique *XOR* des différents bitflags des nœuds composant la cellule, au format binaire. Chaque cellule est donc marquée d'un bitflag "empreint" de ceux de ses nœuds. Il est donc possible, pour n'importe quelle cellule, de remonter aux identifiants des parois périodiques dont son bitflag est issu par analyse de ce dernier, même si elle est distante de la paroi, voire localisée sur un processeur différent. C'est l'étape 3 de la figure 2.30.

Finalement, les particules situées dans des cellules marquées ont accès aux différentes transformations qu'elles doivent subir. Le mécanisme implémenté est générique et permet de simuler jusqu'à trois paires de périodicités ayant des intersections, sur maillages cartésiens et tétraédriques. La figure 2.31 montre un lit fluidisé quasi 2D où les parois latérales sont périodiques deux à deux. Qualitativement, on

peut voir une structure se former au travers de la périodicité.

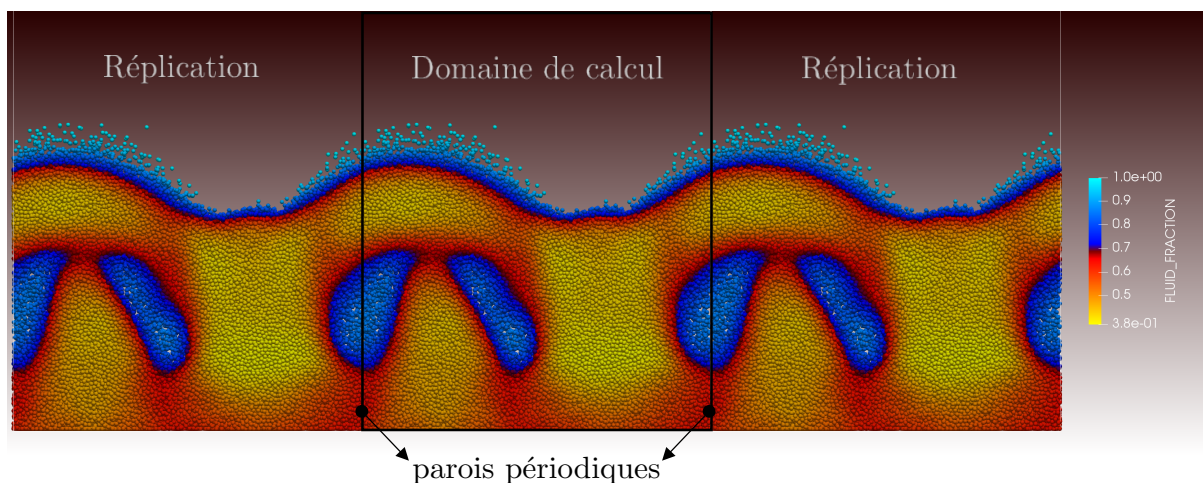


FIGURE 2.31: Lit fluidisé quasi 2D pour lequel les parois latérales sont périodiques deux à deux. Seules les particules sont visibles, et sont coloriées par la fraction volumique de fluide locale. Au centre, le domaine de calcul considéré, entouré par deux répliques virtuelles dûes aux périodicités.

2.7.3 Rugosité de paroi

La prise en compte de la rugosité des parois du domaine est parfois nécessaire afin d'obtenir une modélisation précise des écoulements granulaires confinés. En particulier, dans les cas où les contacts particules-paroi sont nombreux, par exemple dans le cas de particules inertielles, ceux-ci engendrent une perte de quantité de mouvement qui peut conduire à un grand nombre de particules glissant indéfiniment sur les parois si celles-ci sont considérées parfaitement planes [303]. Ce constat vient contredire les observations expérimentales, qui montrent qu'en réalité les particules s'éloignent du mur. Tsirkunov & Panvilov [299] ont d'ailleurs calculé que les particules rasantes ont une probabilité nulle de rebondir avec un angle nul sur une paroi. En réalité, la majorité des parois possèdent une rugosité (voir figure 2.32), dont les effets sur les particules sont principalement fonction du ratio du diamètre des particules et des dimensions des aspérités. Russin & Sommerfeld [171] ont montré que la prise en compte de cette rugosité conduisait à une augmentation de la dispersion transverse, des fluctuations de vitesse particulaire, et une diminution de leur vitesse moyenne de transport, en étudiant des écoulements turbulents en canal horizontal et vertical. Cette vitesse de transport moyenne des particules peut être réduite de 40% dans le cas de parois assez rugueuses [32]. Les effets de rugosité influencent directement les particules situées près des parois, qui dans les écoulements en canal ont tendance à être rasantes (angle incident faible) [274][162]. Sur la figure 2.33 issus de travaux sur un lit fluidisé [102] [103], on peut observer de façon qualitative que l'ajout d'un modèle de rugosité permet d'améliorer sensiblement le profil moyen de vitesse solide en proche paroi, là où sans rugosité celui-ci est surestimé le long de la paroi.

La rugosité peut se définir comme une perturbation localisée de l'épaisseur de la paroi autour de sa valeur moyenne. Elle peut être explicitement représentée, de façon géométrique, mais cette approche est rendue coûteuse par le fait qu'il faut suffisamment discrétiser la géométrie des parois, à des échelles inférieures à la taille des particules. Cela impose également de résoudre de façon explicite le contact

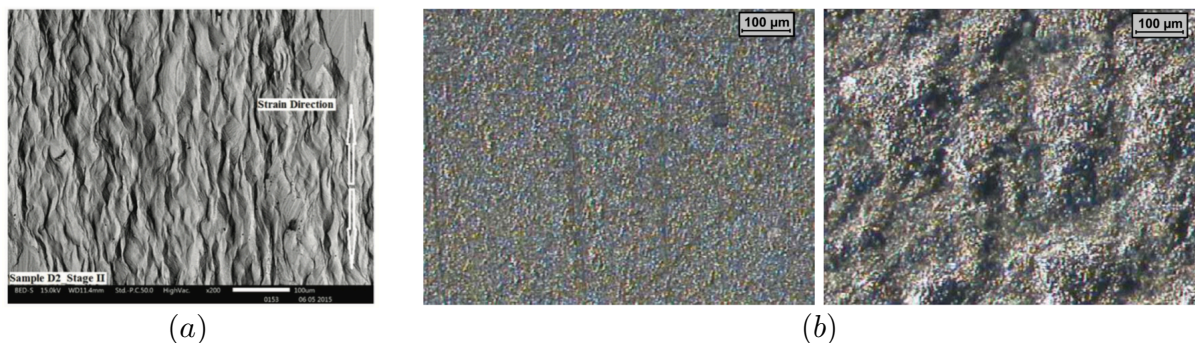


FIGURE 2.32: (a) Image obtenu par SEM de la rugosité (ici importante) d'un tube d'acier. Issu de [304]. (b) Photographie de la rugosité, faible (à gauche) ou forte (à droite) d'une plaque d'acier inoxydable. Issu de [276].

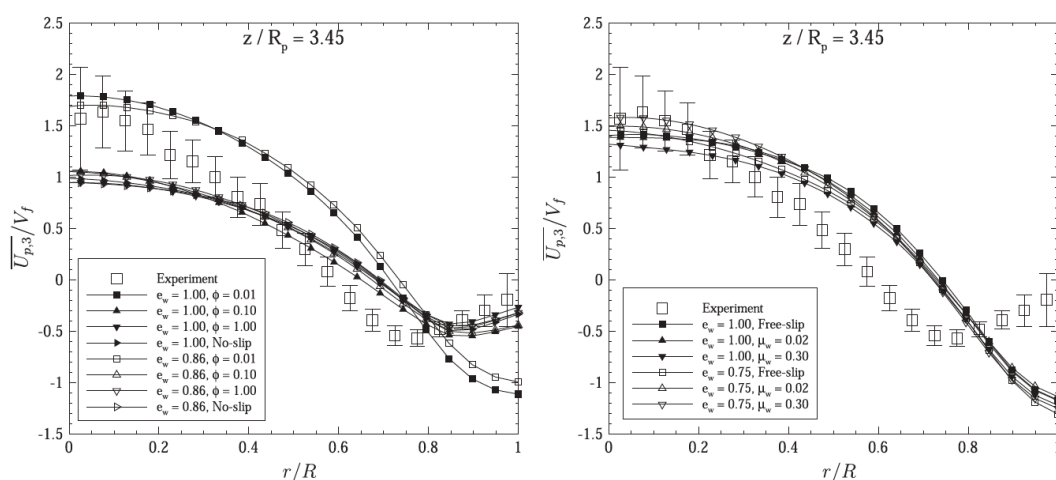


FIGURE 2.33: Comparaison de profils radiaux de moyenne temporelle de vitesse verticale de solide (normalisée) sur une section du lit fluidisé (réacteur cylindrique) expérimenté à l'Université de Birmingham [102] obtenus avec un formalisme Euler-Euler. À gauche, condition de non-glissement appliqué à la phase solide, équivalent à un certain modèle de rugosité. À droite, condition de glissement sans rugosité. Qualitativement, on observe que l'ajout d'un modèle de rugosité permet d'améliorer sensiblement le profil moyen de vitesse solide en proche paroi, là où sans rugosité le flux solide est surestimé le long de la paroi. Les points expérimentaux sont signalés par des carrés vides avec des marges d'erreur. Issu de [103].

particules-paroi, ce qui impose de faire une recherche du point de contact. À la place, il est possible de la représenter de façon stochastique. L'idée de base de Tsuji *et al.* [303] est de représenter la rugosité comme un mur virtuel incliné d'un certain angle par rapport au mur géométrique, visible sur la figure 2.34. Il s'agit d'une approche qui néglige la hauteur des aspérités. Sous le nom d'"abnormal bouncing model", elle permet de calculer l'angle pour le mur virtuel en fonction du nombre de Froode de l'écoulement et de l'angle incident de collision, à condition que ce dernier soit inférieur à 7° .

Le concept de mur incliné virtuel a été repris par Sommerfeld [274] dans son "shadow effect model". Dans cette approche, l'angle virtuel est calculé aléatoirement selon une loi de probabilité, typiquement

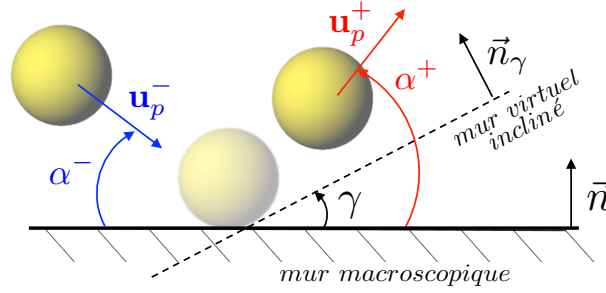


FIGURE 2.34: Représentation de la rugosité pariétale d'après le concept de mur virtuel, incliné d'un angle virtuel γ [303]. La normale pour ce mur virtuel est \vec{n}_γ . La vitesse et l'angle d'incidence avant et après le contact sont respectivement notés \mathbf{u}_p^- et α^- , et \mathbf{u}_p^+ et α^+ . Adapté de [163].

une loi normale centrée et bornée par des valeurs minimum et maximum avec un écart type, et pour toutes les particules incidentes. L'effet dit d'incidence, que l'on peut se représenter comme un effet de perspective (les particules ne "voient" pas la même rugosité suivant leur angle d'attaque sur la paroi), n'est ici pas pris en compte, contrairement à l'"abnormal bouncing model" précédent. Ce modèle pose un problème pour les particules rasantes lorsqu'un angle virtuel négatif est tiré, car les particules peuvent rentrer dans le mur à la fin du contact. Pour les petits angles d'attaque, la valeur absolue de l'angle virtuel est donc considérée. En conséquence, la loi de probabilité sur l'angle virtuel n'est donc plus une loi normale classique pour les petits angles incidents. Ceci souligne l'importance de la prise en compte de l'effet d'incidence dans la modélisation du rebond. Or, les mesures de Schade & Hädrich [257] valident l'aspect gaussien pour approximer le véritable profil de rugosité de paroi, mais précisent que la densité de probabilité pour l'angle de rugosité expérimenté par les particules devrait correspondre à la véritable distribution d'angle rugueux modulé par un effet d'incidence. D'après Sommerfeld & Huber [275], il existe un "shadow effect" pour les particules à faible angle d'incidence, fruit d'un effet de perspective décrit plus haut, et d'un effet de rebond qui doit obligatoirement les éloigner de la paroi. Sur des arguments géométriques et mathématiques, ils montrent alors que la PDF normalisée d'angle virtuel vu par les particules $P^*(\alpha^-, \Delta\gamma, \gamma)$ s'écrit :

$$P^*(\alpha^-, \Delta\gamma, \gamma) = \frac{\sin(\alpha^- + \gamma)}{\sin(\alpha^-)} \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta\gamma^2}} \exp\left(\frac{-\gamma^2}{2\Delta\gamma^2}\right), \quad (2.189)$$

pour laquelle $\Delta\gamma$ correspond à l'écart type d'angle virtuel γ , et α^- est l'angle incident (voir figure 2.34). Cette loi correspond donc à un terme issu d'une distribution gaussienne centrée pour décrire γ (terme $\frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta\gamma^2}} \exp(-\gamma^2/2\Delta\gamma^2)$), modulé par un effet d'incidence $\frac{\sin(\alpha^- + \gamma)}{\sin(\alpha^-)}$. Néanmoins, l'algorithme suivi par les auteurs, appelé "shadow effect model", comportant des tests de rejet afin d'éviter des collisions non-physiques, ne représente pas effectivement la relation 2.189, et son emploi résulte en de nombreuses particules continuant à glisser le long des parois, en particulier pour les particules à faible angle d'incidence [164]. L'effet attendu de rebond est donc partiellement représenté pour les particules rasantes, ce qui est gênant compte tenu du fait que beaucoup de particules arrivent sur les parois avec des angles faibles [274][162]. Il apparaît qu'un modèle stochastique efficace devrait prendre en compte les effets de rebonds multiples, qui en fin de compte, même si l'angle de rebond du premier contact reste rasant, permet assurément à la particule de s'éloigner de la paroi à la fin du dernier rebond [299].

Dans leurs travaux comportant des simulations numériques de rebonds déterministes sur des parois rugueuses, Konan *et al.* [163] vérifient la loi de probabilité issue de l'équation 2.189, ce qui montre

qu'elle reproduit bien l'effet d'incidence désiré. Cependant, ils observent que la probabilité d'obtenir plus d'un rebond selon la valeur du premier angle de rebond reste supérieure à 0 pour les petits angles positifs, contrairement à Sommerfeld & Huber [275] qui considèrent que la condition de positivité de l'angle est suffisante pour assurer que la particule s'éloigne de la paroi. Les résultats montrent encore que la PDF d'angle final de rebond pour les particules ayant subi un rebond unique est la même que celle des particules dans leur ensemble (rebond unique + rebond multiple), ce qui implique une faible influence des rebonds multiples sur la trajectoire finale des particules. Les contacts multiples sont cependant cruciaux pour décrire les contacts rasants. Tous ces arguments ont conduit Konan *et al.* [163] à imaginer leur propre modèle stochastique pour les collisions, appelé "rough wall multi-collisions model". Ce modèle s'appuie sur l'équation 2.189 pour générer un angle virtuel, puis à utiliser les modèles usuels de collision particules-paroi pour calculer l'angle de rebond de la particule à partir de la normale du mur virtuel \mathbf{n}_γ . La dernière étape de la procédure consiste à s'assurer que la probabilité de faire un unique rebond avec l'angle virtuel généré correspond à celle issue de leurs observations (et considérée comme universelle). Finalement, ce modèle permet, par rapport au "shadow effect model", de considérer l'effet d'incidence et de rebond désiré avec un rebond unique. Il faut noter cependant, bien que Konan *et al.* [163] semble postuler que ces résultats puissent être généralisés, ces derniers sont tirés de cas uniquement 2D, où la rugosité ne varie que dans la direction de la collision. En réalité, la rugosité possède un caractère tridimensionnel qui devrait être expérimenté par les particules, et ainsi forcer leur vitesse de rebond à s'aventurer hors du plan initial. De plus, les simulations effectuées dans ces travaux mettaient en jeu des contacts instantanés. Un traitement adapté est donc nécessaire pour l'application du modèle sphères molles.

Concernant ce dernier point, Mallouppas & van Wachem [192] ont appliqué les mécanismes issus de Sommerfeld & Huber [275] et Konan *et al.* [163] dans le cadre du modèle sphères molles. Les difficultés relatives à cette implémentation sont inhérentes au fait que la particule pénètre dans la paroi. Le traitement modifié consiste à générer un premier mur virtuel lorsque la distance entre la particule et la paroi vaut l'amplitude de la rugosité considérée. Ensuite, si la particule continue à se rapprocher de telle façon que sa distance à la paroi vaille la moitié de la distance à laquelle le dernier mur virtuel a été placé, on place un nouveau mur virtuel, et ainsi de suite. Chaque mur virtuel est généré indépendamment des précédents à partir d'un nouveau tirage d'angle virtuel γ , et ce jusqu'à ce que la particule s'éloigne du mur. Récemment, Radenkovic & Simonin [237] se sont appuyés sur les analyses de Sommerfeld & Huber [275] et Konan *et al.* [163] afin de mettre au point un traitement tridimensionnel de la rugosité de paroi. Leurs résultats indiquent que l'angle de rebond final par rapport au mur réel α^+ est bien représenté par le modèle 2D de Konan *et al.* [163], cependant ils démontrent également la présence d'une déviation transverse de cet angle de rebond. En introduisant un angle virtuel transverse γ^* , dont les simulations prouvent qu'il est affecté ni par le shadow effect ni par les rebonds multiples, Radenkovic & Simonin [237] mettent au point un algorithme sensiblement équivalent à celui issu de Konan *et al.* [163] et capable de traiter la rugosité 3D.

Une modélisation rudimentaire de la rugosité 3D a été implémentée dans le code YALES2. L'approche simplifiée consiste à générer pour chaque noeud des parois une nouvelle position, correspondant à l'application d'une légère perturbation de sa position initiale. Le processus mis en oeuvre est le suivant :

1. sur les parois qui ne sont ni des entrées, ni des sorties, ni périodiques, chaque noeud i génère un vecteur perturbation propre, noté \mathbf{Pert}_i et possédant (en 3D) trois coordonnées sans unité.

Chacune de ces coordonnées est générée de façon à obéir à une loi normale standard réduite (moyenne nulle, écart-type unitaire) en utilisant la méthode de Box-Muller [42]. La distribution des vecteurs $\mathbf{Pert}_i/||\mathbf{Pert}_i||$ générés de cette manière est uniforme sur la surface d'une sphère unitaire centrée sur le noeud i [194].

2. Sur chaque noeud, on dimensionne \mathbf{Pert}_i pour obtenir \mathbf{Pert}_i^* en mètres, en introduisant un paramètre de rugosité σ_{rugo} tel que :

$$\mathbf{Pert}_i^* = \mathbf{Pert}_i \cdot \Delta x_i \cdot \sigma_{rugo}. \quad (2.190)$$

Δx_i correspond à une dimension caractéristique du volume de contrôle associé au noeud i . σ_{rugo} est une constante dans tout le domaine, généralement comprise entre 0 et 0.2.

3. Finalement, on déplace les noeuds en mettant à jour leurs coordonnées, suivant :

$$\mathbf{x}'_i = \mathbf{x}_i + \mathbf{Pert}_i^*, \quad (2.191)$$

\mathbf{x}'_i symbolisant les nouvelles coordonnées du noeud i , et \mathbf{x}_i ses anciennes. Lors de la transformation, les connectivités des différents éléments du maillage restent inchangées, néanmoins les métriques doivent être recalculées. Les structures de données introduites pour le traitement explicite des contacts particule-paroi présentées dans la section 2.3 doivent également être mises à jour.

Ce traitement consiste donc à assimiler les différentes échelles de la rugosité réelle à une rugosité macroscopique dont la taille caractéristique est proche de la taille de maille locale. Les contacts particules-paroi peuvent alors être traités de façon explicite suivant l'algorithme détaillé dans la section 2.3. Outre sa simplicité, cette méthode permettrait de traiter de façon immédiate la rugosité 3D. La description géométrique de la perturbation permettrait également de prendre naturellement en compte un effet d'incidence. La capacité de cette méthode à modéliser la rugosité 3D pour l'approche sphères molles à travers des essais quantitatifs est actuellement en cours de vérification dans la thèse de A. Nigmatova (IMFT, Toulouse, France). D'excellents accords avec les résultats obtenus par Radenkovic & Simonin [237] ont d'ores-et-déjà été mis à jour.

Chapitre 3

Optimisation du solveur granulaire de YALES2

Ce troisième chapitre se consacre spécifiquement à l'accélération des performances du code dans un paradigme de décomposition de domaine de type MPI appliqué aux maillages non-structurés. La parallélisation du code met en jeu des communications non-bloquantes avec packing et unpacking des données, ainsi qu'un algorithme de load balancing dynamique pour répartir au mieux la charge de calcul entre les processeurs.

Sommaire

3.1	Accélération du calcul des forces de collision interparticulaires	128
3.2	Parallélisation du code	132
3.2.1	Structures de données de YALES2	134
3.2.2	Identification du halo de cellules pour le parallélisme	136
3.2.3	Traitement des particules fantômes	142
3.3	Performances du code	149
3.3.1	Mesures sur le cas factice	149
3.3.2	Mesures sur le cas Birmingham	153
3.4	Répartition dynamique de charge	156
3.4.1	Le problème de la répartition de charge	156
3.4.2	Première écriture d'une fonction de coût pour le partitionnement	157
3.4.3	Seconde écriture d'une fonction de coût pour le partitionnement	160
3.4.4	Caractère dynamique de l'algorithme	162
3.4.5	Stabilité de l'algorithme	162

3.1 Accélération du calcul des forces de collision interparticulaires

Le calcul des forces de collision interparticulaires est une étape qui peut s'avérer très coûteuse pour les codes de CFD-DEM en terme de temps CPU. En effet, *a priori*, cette étape nécessite de calculer les distances interparticulaires pour toutes les paires de particules, exhibant alors un coût de calcul en $\mathcal{O}(N_p^2)$, N_p étant le nombre de particules présentes dans le domaine. Il est alors fréquent d'introduire un mécanisme permettant d'éliminer rapidement les particules trop éloignées les unes des autres et sans calcul de distance, afin de réduire ce coût. Le concept de grille de détection (en anglais "linked cell")

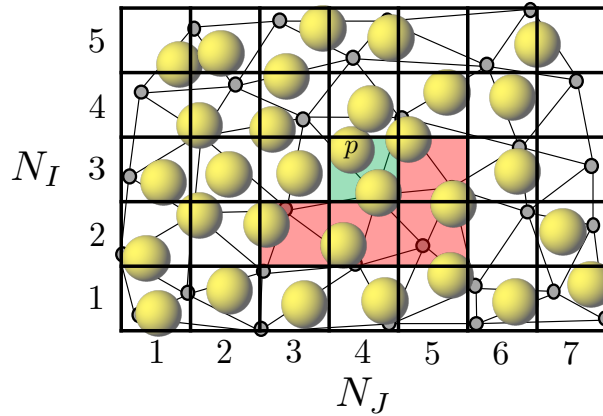


FIGURE 3.1: Méthode de recherche des partenaires potentiels de collision dans un cas 2D. \bullet : noeuds de la grille. $-$: grille cartésienne superposée. La particule ciblée p est située dans la cellule centrale (■). Les autres particules localisées dans cette cellule ou dans les cellules adjacentes (■) sont identifiées comme ses partenaires potentiels de collision.

imaginé par Verlet [308] consiste à discrétiser le domaine de calcul en cellules parallélépipédiques dont les dimensions sont plus grandes que les diamètres des particules. Chaque particule est localisée grâce à ses coordonnées dans une cellule de la grille de détection. Identifier les partenaires potentiels de collision d'une particule consiste alors à effectuer une boucle sur les cellules adjacentes (y compris la cellule contenant la particule ciblée) pour retrouver les particules y ayant été localisées (voir figure 3.1). Est ainsi constituée une liste de partenaires potentiels de collision. Les seuls calculs de distance à effectuer concernent donc ces voisins potentiels, d'où l'économie de temps. Le nombre de cellules adjacentes à vérifier est donc de 8 en 2D et de 26 en 3D, +1 pour la cellule centrale. Néanmoins, la 3ème loi de Newton autorise à ne vérifier que la moitié de ces cellules [160]. En effet les interactions au sein d'une paire ne nécessitent d'être vérifiées que par l'une des deux particules constituant la paire.

Il existe de nombreuses variantes et de nombreuses façons d'implémenter ce type de technique. Un algorithme appelé No Binary Search (NBS) très efficace est présenté par Munjiza & Andrews [214] pour traiter les objets sphériques de même dimension. Celui-ci atteint un coût linéaire en $\mathcal{O}(N_p)$, qui semble être la meilleure scalabilité théorique possible [260]. Pour des applications polydisperses, il convient d'utiliser la taille du plus gros objet comme taille minimale des cases, ce qui conduit à la détection de beaucoup de petits objets, d'où la nécessité d'adapter les techniques. L'algorithme proposé par Peters *et al.* [232] est optimisé pour traiter les collisions d'objets de tailles différentes. Certains auteurs font en sorte d'actualiser la liste des partenaires potentiels de collision seulement "lorsque c'est nécessaire". Un critère basé sur la vitesse des particules permet de postuler que cette liste restera identique pendant un certain temps, sur lequel le déplacement des particules est limité.

Afin de n'introduire aucune hypothèse, et dans la limite de distributions monodisperses, l'algorithme implémenté au cours de ces travaux est présenté ci-dessous. Dans le cadre d'une décomposition de domaine de type MPI, celui-ci est réalisé individuellement par chaque processeur :

1. Comptage du nombre de particules N_p appartenant au processeur et détermination d'un cube englobant ces particules, de coordonnées minimum I_{min} , J_{min} et K_{min} , et de coordonnées maximum I_{max} , J_{max} et K_{max} . Le système de coordonnées utilisé repose sur les axes x , y et z classiques. Les particules sont identifiables de façon unique par un indice $p_n \in \llbracket 1 : N_p \rrbracket$.

2. Construction de la grille cartésienne de détection. Les cellules, cubiques, ont un côté égal au diamètre des particules. Détermination du nombre de cellules dans les trois directions de l'espace, N_I , N_J et N_K .

3. Localisation des particules sur la grille grâce à trois coordonnées "entières" (P_I, P_J, P_K) telles que :

- $P_I = \text{INT} \left(\frac{\mathbf{x}_p(1) - I_{min}}{N_I} \right) + 1$,
- $P_J = \text{INT} \left(\frac{\mathbf{x}_p(2) - J_{min}}{N_J} \right) + 1$,
- $P_K = \text{INT} \left(\frac{\mathbf{x}_p(3) - K_{min}}{N_K} \right) + 1$,

où 1, 2 et 3 se rapportent aux coordonnées x , y et z . Chaque particule stocke un indice unique $P_N = P_I + N_I \cdot (P_J - 1) + N_I N_J \cdot (P_K - 1)$. Construction d'un vecteur de dimension $N_I N_J N_K$ contenant le nombre de particules dans chaque case, appelé *ppc* pour *particle per cell*.

4. Construction d'un vecteur de dimension $N_I N_J N_K$ contenant le nombre de particules dans les cases précédentes et dans la cellule courante, appelé *cumul_ppc + cc* pour *cumulated particle per cell + current cell*, de la façon suivante :

- $\text{cumul_ppc} + \text{cc}(1) = \text{ppc}(1)$ (premier indice),
- $\text{cumul_ppc} + \text{cc}(i) = \text{cumul_ppc} + \text{cc}(i - 1) + \text{ppc}(i)$, $i \in \llbracket 2, N_I N_J N_K \rrbracket$,

5. De la même façon, construction du vecteur *cumul_ppc* de taille $N_I N_J N_K$ contenant le nombre de particules dans les cases précédentes et tel que :

$$\text{cumul_ppc}(i) = \text{cumul_ppc} + \text{cc}(i) - \text{ppc}(i), \quad i \in \llbracket 1, N_I N_J N_K \rrbracket.$$

6. Construction du vecteur *pt_index* de taille N_p , qui consiste à ranger les particules dans l'ordre correspondant aux vecteurs précédents. Ainsi pour chaque particule contenue dans la cellule P_N , on effectue le calcul :

- $\text{start} = \text{cumul_ppc}(P_N) + 1$,
- $\text{pt_index}(\text{start}) = p_n$,
- $\text{cumul_ppc}(P_N) = \text{cumul_ppc}(P_N) + 1$.

7. On recrée le vecteur *cumul_ppc* (voir étape 5).

8. Les particules sont maintenant ordonnées de façon idoine dans le vecteur *pt_index*, et on peut procéder à l'identification des voisins. Pour chaque particule localisée en case P_N , on boucle sur les cases adjacentes notées $P_{N,adj}$.

- Au sein de chacune de ces cellules, on boucle sur le nombre de particules présentes, donné par $\text{ppc}(P_{N,adj})$.
- Ces particules sont indicées p_{adj} , et on a donc $p_{adj} \in \llbracket 0, \text{ppc}(P_{N,adj}) \rrbracket$. Pour chaque particule p_{adj} , on crée un indice *ind* tel que :
 $\text{ind} = p_{adj} + \text{cumul_ppc}(P_{N,adj})$,
- Le vecteur *my_collision_partners* associé à la particule traitée et contenant la liste de ses partenaires potentiels de collision est rempli avec :
 $\text{my_collision_partners}(i + 1) = \text{pt_index}(\text{ind})$,
où i correspond ici au nombre de voisins potentiels actuel de la particule traitée, incrémenté au cours de la procédure. Le nombre total de voisins détectés par particule est stocké.

La dimension du vecteur *my_collision_partners* ne pouvant être connue *a priori*, celle-ci est initialisée à une valeur de 30, et cette taille est augmentée par paliers de 10 lorsque c'est nécessaire. L'utilisation de paliers se justifie par le fait qu'augmenter la taille du vecteur *my_collision_partners* tout en conservant son contenu précédent passe nécessairement par un mécanisme de désallocation/allocation mémoire dont la récurrence est à éviter.

Un traitement spécifique est mis en place pour traiter les particules situées dans la même cellule que la particule dont on identifie les voisins. Afin de garantir que les interactions ne sont bien traitées qu'une seule fois par paire, on attribue un numéro à chaque particule localisée dans une même cellule. Durant l'étape de détection, on s'assure alors qu'une particule numérotée n ne peut détecter une particule numérotée m seulement si $n < m$. De cette façon, en prenant l'exemple de 3 particules contenues dans la cellule centrale, la particule 1 pourra détecter la particule 2 et la particule 3, la particule 2 pourra détecter la particule 3, et la particule 3 ne détectera aucune particule. Les paires de particules 1 – 2 (ou 2 – 1), 1 – 3 (ou 3 – 1), et 2 – 3 (ou 2 – 3), ne seront donc traitées et stockées qu'une fois.

Afin de quantifier la dépendance de la vitesse de cet algorithme avec le nombre de particules, on réalise deux séries de tests, dont la première est extraite des travaux de Munjiza & Andrews [214] sur un cas 2D. Les deux configurations mises en oeuvre sont respectivement représentées sur les figures 3.2(a) et 3.2(b). Elles consistent respectivement en :

1. Dans la direction x , les particules sont arrangées de façon à ce que la distance entre chaque centre vaille leur diamètre. Dans la direction y , la distance inter-centre vaut deux fois ce diamètre. Ces tests ont été réalisés en quasi 2D avec YALES2, c'est-à-dire dans un domaine de calcul 3D mais ne contenant qu'une cellule dans la direction z . Différents nombres de particules sont testés, allant de 5000 à 90000 particules, en conservant un domaine de calcul carré.
2. Configuration cubique simple purement 3D où l'espacement entre deux centres consécutifs vaut le diamètre des particules dans toutes les directions, correspondant à une fraction volumique homogène d'environ 0.476. Différents nombres de particules sont testés, allant de 5000 à 90000 particules, en conservant un domaine de calcul cubique.

Pour ces deux séries de tests, un seul processeur est utilisé. On relève le temps de calcul nécessaire à dix opérations d'identification et de stockage des partenaires potentiels de collision pour l'ensemble des particules. Les résultats sont visibles sur la figure 3.3. Dans les deux cas, un coût linéaire en $\mathcal{O}(N_p)$ est observé, ce qui témoigne de la bonne scalabilité de l'algorithme implémenté vis-à-vis de la quantité de particules.

Cet algorithme peut devenir coûteux en terme de mémoire. En effet, outre le stockage des voisins potentiels de collision, il nécessite la création de trois vecteurs de taille $N_I N_J N_K$ et un vecteur de taille N_p . Pour construire les trois premiers, on se base initialement sur une taille de cellule égale au diamètre des particules afin de détecter le moins de voisins possibles pour une particule. De plus, par souci de simplification il a été omis que les particules sont identifiées par deux numéros (dû à la double décomposition de domaine du code YALES2) et non par un, et le dernier vecteur est en fait une matrice de taille $(2, N_p)$, tout comme les vecteurs où sont stockés les voisins détectés lors de l'étape finale (étape 8 de l'algorithme ci-dessus). Pour limiter la quantité de mémoire allouée, il est possible de limiter le nombre total de cellules $N_I N_J N_K$. En cas de dépassement de la valeur $(N_I N_J N_K)_{max}$ instruite, le programme

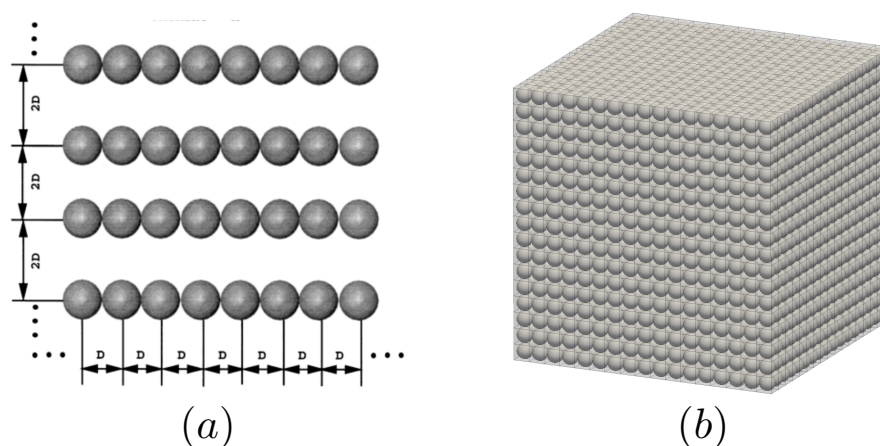


FIGURE 3.2: (a) Configuration 2D utilisée par Munjiza & Andrews [214]. Le diamètre des particules est ici noté D . L'espace entre les centres de deux particules consécutives vaut D dans la direction x , et $2D$ dans la direction y . (b) Configuration cubique simple utilisée pour le second test. L'espace entre deux centres consécutifs vaut D dans toutes les directions.

recalcule une taille de maille satisfaisant ce critère. Ceci résultera dans un nombre de cases moins important, donc une allocation de mémoire réduite, résultant cependant dans un surcoût de l'identification des voisins (étape 8 de l'algorithme ci-dessus), puisque le nombre de particules dans chaque cellule sera plus important. La taille et le nombre de cases, employés sont calculés indépendamment sur chaque processeur. Les coordonnées extrêmes de la grille de détection s'appuient sur les coordonnées des particules et non pas sur celles du domaine de calcul du processeur, afin de limiter l'allocation de mémoire lorsqu'un processeur contient peu de particules groupées. Enfin, en cas de non-contiguïté du domaine de calcul d'un processeur, qui peut se trouver réparti sur deux (ou davantage) blocs de maillages distants, une grille de détection est créée sur chaque bloc. Ceci permet là encore de limiter une explosion du nombre de cellules utilisées. L'ensemble des grilles de détection est déterminé de façon dynamique à chaque pas de temps particulaire.

3.2 Parallélisation du code

Aller vers la simulation à l'échelle pilote de systèmes complexes pour les simulations CFD-DEM impose que de bonnes performances ainsi qu'une scalabilité satisfaisante puissent être atteintes sur les machines de calcul. Dû au fait que des collisions peuvent survenir entre des particules n'étant pas localisées sur le même processeur, voire entre des processeurs dont les domaines sont disjoints, un traitement parallèle spécifique est requis pour calculer les forces de collision. Ce problème a été résolu en accord avec la structure de données du code YALES2 pour les maillages non-structurés, détaillée dans la section 3.2.1 ci-dessous, en implémentant une méthode de particules fantômes (ghost particles) dans un paradigme MPI (Message Passing Interface). En effet, la décomposition de domaine est une option attractive pour la parallélisation des problèmes de CFD-DEM, en particulier avec l'émergence de grands centres de calcul à mémoire distribuée, pour sa capacité à fournir de hautes scalabilités même pour de grands nombres de processeurs. À noter que la parallélisation à mémoire partagée (OpenMP) a aussi été explorée avec succès dans ce domaine d'étude [13], montrant de meilleures scalabilités parallèles

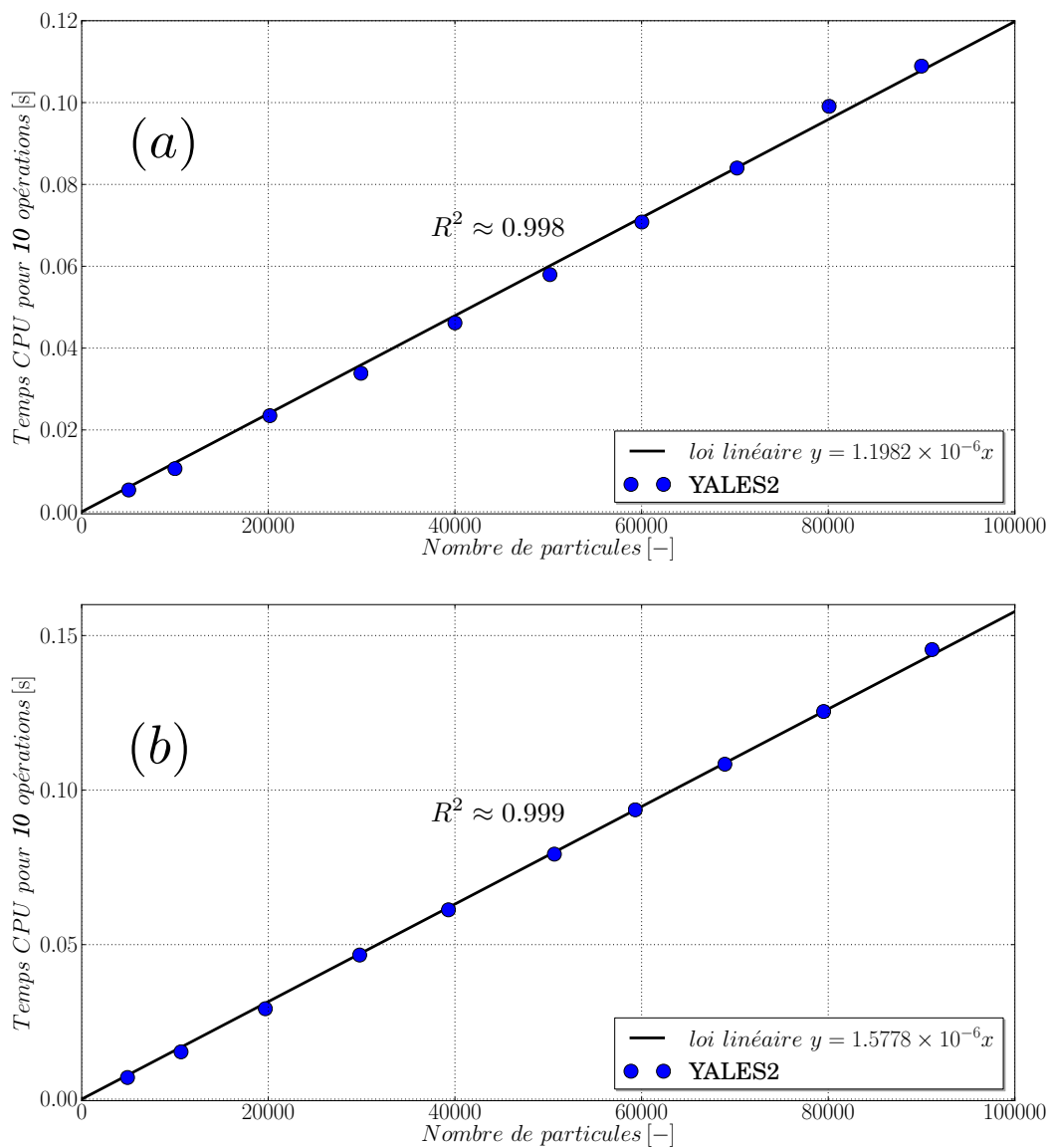


FIGURE 3.3: (a) Résultats obtenus avec YALES2 sur la configuration présentée sur la figure 3.2(a). Un coût linéaire est observé, avec un coefficient de détermination valant $R^2 \approx 0.998$. (b) Résultats obtenus avec YALES2 sur la configuration cubique simple de la figure 3.2(b). Un coût linéaire est également observé, avec un coefficient de détermination valant $R^2 \approx 0.999$. Les temps CPU relevés correspondent à 10 opérations de détection et stockage des partenaires potentiels de collision. Les unités utilisées sont identiques à la publication originale de Munjiza & Andrews [214].

(comparé à MPI) pour de petits nombres de particules. Un code DEM exécuté sur des GPU (Graphics Processing Unit) [234] [332], parfois combiné avec un code CFD exécuté sur des CPU (Central Processing Unit) [149], a également été reportée comme une méthode à hautes performances prometteuse.

L'algorithme aujourd'hui implémenté dans le code YALES2 peut être résumé de la façon suivante : d'abord, les particules fantômes sont identifiées grâce à un halo de cellules défini autour du domaine de calcul de chaque processeur. Ensuite, les données nécessaires des particules appartenant à un halo sont groupées, ou "packées", et échangées entre les processeurs voisins. Enfin, après une étape dite "d'un-packing", les particules fantômes sont traitées pour être localisées sur la grille de détection mentionnée précédemment (voir Section 3.1), avec les particules nativement présentes sur le processeur récepteur. Les sous-sections suivantes détaillent chaque étape de cet algorithme. Tous les tests présentés dans cette partie ont été menés sur la configuration de Birmingham détaillée dans la section 5.4, et effectués sur le supercalculateur Curie du CEA (Commissariat à l'Énergie Atomique). Sauf spécification, les statistiques ont été obtenues sur 1s de temps physique, et démarrées après avoir initialisé la fluidisation durant 2.5s. Il sera vu dans la section 5.4 que sans permettre une convergence statistique complète du lit, ces échelles temporelles permettent d'atteindre un état représentatif du point de vue des performances. En effet, la hauteur de lit et la perte de charge ont déjà atteint un régime d'oscillation autour de leur moyenne.

3.2.1 Structures de données de YALES2

Dans un premier temps, certaines propriétés du code YALES2 concernant le partitionnement des maillages non-structurés sont soulignées. Les structures de données associées sont également introduites, car elles ont fortement influencé les méthodologies implémentées, qui seront discutées plus tard dans ce chapitre. Des détails supplémentaires concernant ces aspects du code peuvent être trouvés dans [211]. Comme mentionné précédemment, les équations de Navier-Stokes dans l'approximation des bas nombres de Mach sont résolues sur des maillages non-structurés, qui permettent une maîtrise locale des tailles de mailles employées ainsi que la description de géométries arbitrairement complexes. Une décomposition de domaine à deux niveaux (double décomposition de domaine ou DDD) est employée, et organisée de la façon suivante : à un niveau de granularité grossier, les éléments de maillage sont répartis sur les processeurs. Cela consiste en la séparation du domaine de calcul en sous-domaines, chacun affecté à un coeur de calcul. À un niveau de granularité plus fin, à l'échelle du processeur, on rencontre des groupes de cellules appelés groupes d'éléments (en anglais "ELement GRouPs" ou ELGRPs), représentés sur la figure 3.4. En 3D, les ELGRPs contiennent typiquement $\mathcal{O}(10^3)$ éléments. Suivant la même représentation, les particules localisées sur un ELGRP spécifique sont stockées dans des groupes de particules (en anglais "ParTicle GRouPs" ou PTGRPs), contenant jusqu'à 500 particules chacun.

Comparée à la décomposition de domaine simple (en anglais "Single-level Domain Decomposition" ou SDD), la DDD permet une meilleure gestion de la mémoire des processeurs utilisée pour les algorithmes de type cache-aware. En effet, si toutes les données d'un ELGRP peuvent entrer dans la mémoire cache du coeur, toutes les opérations sur ces données peuvent être effectuées sans nécessiter d'étapes de chargement ou déchargement du cache. Ce niveau de parallélisme supplémentaire peut également être exploité pour d'autres algorithmes : ces grilles emboîtées peuvent être utiles aux méthodes multi-grilles [191]. Dans ce cas, le plus bas niveau de granularité peut être utilisé pour le préconditionnement de l'équation de Poisson. Le partitionnement aux deux échelles peut être effectué grâce à la librairie METIS [155], parmi d'autres.

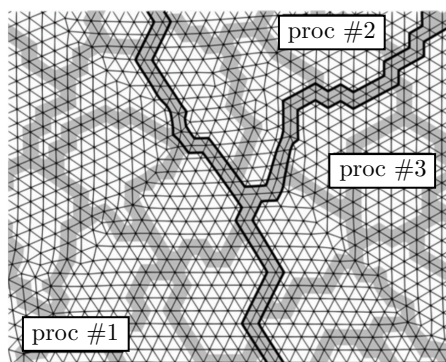


FIGURE 3.4: Double décomposition de domaine (DDD). Les éléments grisés participent aux communications intérieures et extérieures du domaine des processeurs. Ceux repassés en noir participent uniquement aux communications extérieures. Issu de [211].

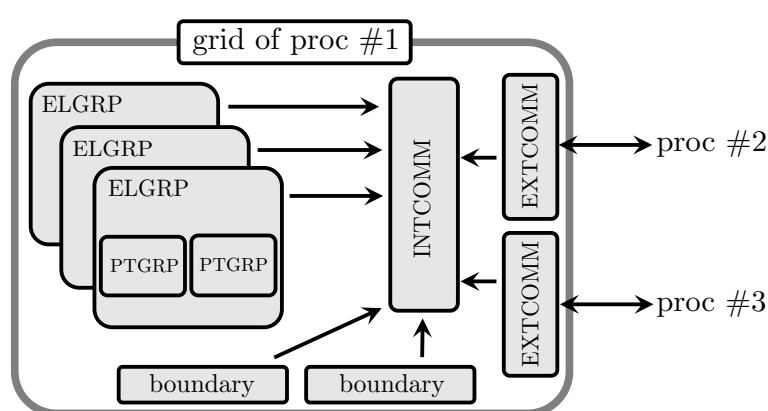


FIGURE 3.5: Communicateurs interne (INTCOMM) et externe (EXTCOMM) correspondant à la figure 3.4.

L'utilisation de la DDD requiert la mise en place d'une structure de données spécifique. En effet, dans ce contexte, chaque ELGRP représente un bloc de maillage indépendant, entre lesquels des communications interviennent, par exemple lors du calcul de gradients ou de l'assemblage des résidus. Ainsi, en plus des connectivités classiques inter-processeurs, certains éléments géométriques tels que les faces, les paires et les noeuds, ont besoin d'échanger des données à l'intérieur des processeurs durant les étapes de communication. Une structure additionnelle est donc nécessaire afin de connecter ces éléments au niveau des frontières entre ELGRPs. Plutôt qu'utiliser une méthode de cellules fantômes, un communicateur interne (en anglais "INTErnal COMMunicator" ou INTCOMM) contenant une copie de toutes les faces, paires et de tous les noeuds appartenant à une interface ELGRP-ELGRP, ELGRP-proc, ou proc-proc, est déployé. Des communicateurs externes (en anglais "EXTernal COMMunicators" ou EXTCOMMs) contiennent également leur propre copie des éléments situés au niveau des interfaces proc-proc. Cette architecture particulière est schématisée sur la figure 3.5, sur laquelle la structure de données particulière aux parois (boundaries) est également représentée.

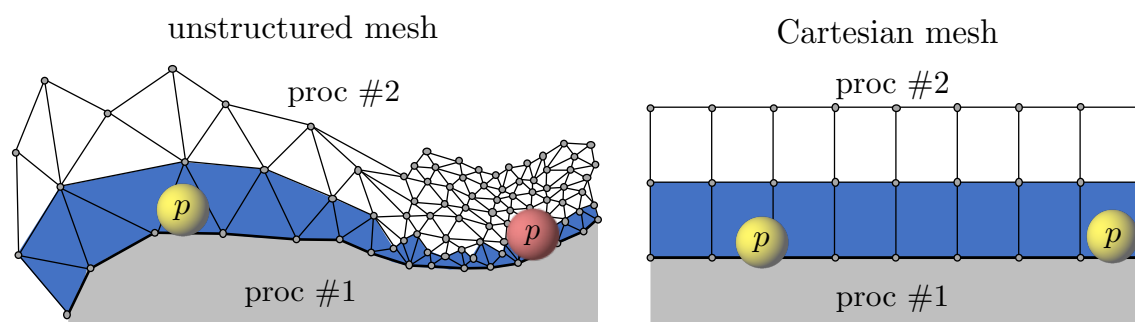


FIGURE 3.6: Marquage d'une couche de cellules (■) à l'interface entre deux domaines de processeurs. À gauche, sur maillage non-structuré, la particule p rouge n'est pas identifiée comme appartenant au halo. À droite, sur maillage régulier, une couche de cellules est un critère suffisant pour identifier les particules fantômes.

3.2.2 Identification du halo de cellules pour le parallélisme

La première étape pour la parallélisation du code consiste en la définition des halos de cellules autour du domaine de calcul de chaque processeur, servant à déterminer les particules les plus proches des interfaces entre processeurs. Une sélection efficace de ces cellules limitera le nombre de particules fantômes à échanger, facilitant ainsi la construction de la grille de détection des partenaires potentiels de collision tout en limitant l'impact sur le temps nécessaire au calcul des forces de collision.

L'identification de ces cellules composant un halo autour du domaine de calcul de chaque processeur peut être réalisée facilement sur des maillages cartésiens réguliers, et dans la plupart des cas, une couche de cellules est suffisante pour le construire et s'assurer qu'aucune collision ne soit oubliée. Cependant, des hétérogénéités dans les tailles de maille, par exemple lors de l'utilisation de maillages o-grid ou non-structurés, peuvent rendre ce critère caduque et conduire à l'oubli de nombreuses collisions, comme représenté sur la figure 3.6. Ceci souligne le besoin d'une stratégie adaptative pour marquer les cellules, qui idéalement devrait être basé sur un calcul de distance exacte à l'interface entre processeurs.

Ce problème de calcul de distance entre les noeuds du maillage et une interface a été résolu de façon exacte dans la section 2.3.3, pour la sélection spatiale des particules proches des parois du domaine. Théoriquement, la même méthode pourrait être utilisée ici, par construction des régions de Voronoi des interfaces inter-processeurs. Néanmoins, celle-ci est consommatrice de mémoire car elle réclame la création et le stockage de nombreuses métriques et connectivités. La quantité d'interfaces inter-processeurs pouvant être bien plus conséquente que la surface des parois lorsqu'un nombre important de processeurs est utilisé, l'approche implémentée pour la création de halo utilise cette fois un calcul approché des distances. On peut également souligner que le calcul exact de la distance est attractif pour le calcul des forces de collision particule-paroi, car le calcul de ces dernières repose sur celui de la distance de recouvrement avec les parois. Hors, le marquage des cellules proches de l'interface doit simplement obéir à un critère de distance minimum : il faut que le halo soit au moins aussi large que la distance prescrite. La qualité de l'approximation permettra simplement une meilleure sélection des cellules, donc un gain de temps de calcul.

La difficulté réside dans le fait qu'*a priori*, ce problème nécessite le calcul de la distance entre chaque

noeud du maillage et chaque face, arête et noeud présents sur une interface processeur-processeur, d'où un coût de calcul potentiellement conséquent s'accompagnant de nombreuses communications parallèles. Pour contourner cette difficulté, l'algorithme implémenté s'inspire des méthodes de fast-marching développées pour les méthodes de type Level-Set [265][300]. Il repose sur la génération de points sur toute la surface des interfaces processeur-processeur appelés marqueurs, dont les coordonnées seront propagées de noeud à noeud depuis l'interface et jusqu'à satisfaire le critère de distance imposé. L'algorithme suit la progression ci-dessous, tel que schématisé sur la figure 3.7, où d_{min} représente une instruction de distance pour l'épaisseur du halo de cellules.

1. Les noeuds appartenant à l'interface proc-proc sont marqués 0 (formant l'ensemble des noeuds de niveau 0). Les cellules contenant un noeud de niveau 0, étant en contact avec l'interface, sont elles aussi marquées 0. Les cellules de niveau 0 possèdent donc au moins un noeud, une arête, ou une face appartenant à l'interface proc-proc. Les autres noeuds de ces cellules sont marqués 1, formant l'ensemble des noeuds de niveau 1. Les noeuds de niveau 1 appartiennent ainsi à des cellules possédant un noeud, une arête ou une face de l'interface.
2. Une liste de marqueurs est créée sur chaque noeud du maillage. Cette liste est capable de contenir les coordonnées de plusieurs marqueurs, ainsi que leur distance au noeud notée d . À cet instant, les listes des noeuds de niveau 1 sont remplies, ce qui consiste à :
 - (a) boucler sur les cellules de niveau 0,
 - (b) pour chacune de ces cellules, boucler sur les noeuds de niveau 1,
 - (c) pour chacun de ces noeuds, générer des marqueurs de façon aléatoire sur les entités (noeud, arête ou face) de la cellule de niveau 0 courante en contact avec l'interface,
 - (d) calculer toutes les distances entre ces marqueurs et le noeud de niveau 1 en cours de traitement,
 - (e) remplir la liste de marqueurs du noeud traité en identifiant les marqueurs les plus proches. Les coordonnées de ces marqueurs ainsi que leur distance au noeud, sont stockées au sein de cette liste. Les marqueurs sont classés par ordre croissant de distance au noeud.
3. Une fois tous les noeuds de niveau 1 traités, les listes de marqueurs sont propagées : chaque noeud 1 construit sa nouvelle liste en fusionnant successivement sa liste actuelle avec celle des noeuds 1 avec lesquels il partage une connexion. Un nouveau classement des marqueurs est effectué au sein des nouvelles listes. Lors d'une fusion de deux listes, seuls les marqueurs les plus proches sont conservés.
4. Pour chaque noeud de niveau 1, on vérifie si le marqueur de la liste le plus proche (donc le premier) est à une distance $d \leq d_{min}$. d correspond à la meilleure approximation de la distance noeud-interface. Si oui, les éléments de maillage non-marqués contenant ce noeud sont à leur tour marqués 1. Les autres noeuds de ces éléments sont également marqués 1.
5. On répète les opérations 3 et 4 jusqu'à ce qu'il n'y ait plus aucun noeud marqué tel que $d \leq d_{min}$.

Notons que lors de la mise-à-jour des listes de marqueurs (étape 3), des tests d'unicité sont réalisés afin d'éviter que plusieurs copies d'un même marqueur viennent les polluer. Ainsi, lorsqu'un marqueur situé à une certaine distance doit être ajouté à une liste déjà constituée, on vient d'abord vérifier qu'aucun marqueur déjà présent dans la liste n'est situé à la même distance. Ensuite, si un marqueur déjà présent est situé à la même distance, on compare individuellement chaque coordonnée. Si la distance au noeud

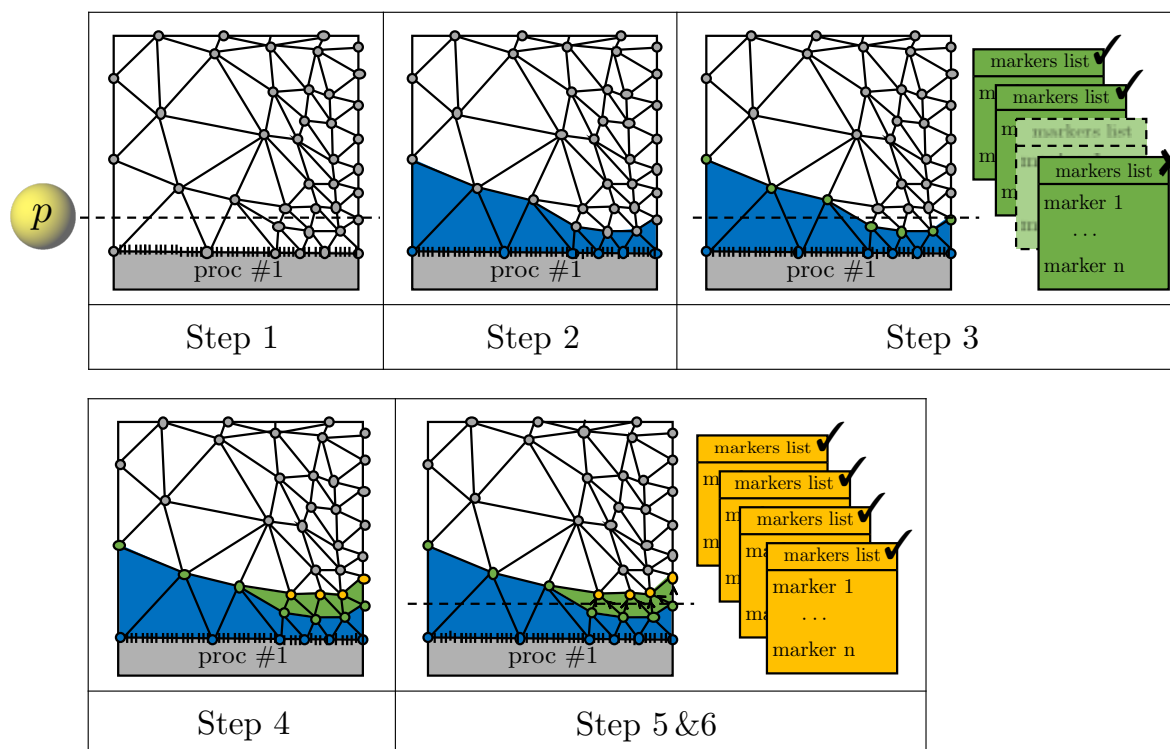


FIGURE 3.7: Algorithme de type fast-marching. La distance instruite d_{min} correspond naturellement au rayon de la particule p . Un élément ou un noeud coloré signifie qu'il est marqué. Les marqueurs sont générés sur la frontière du processeur #1. ■ : éléments et noeuds de niveau 0. ■ : éléments et noeuds de niveau 1. Ici, certains de ces noeuds vérifient $d \leq d_{min}$. ■ : éléments et noeuds de niveau 1 marqués lors de la seconde propagation des listes. Tous ces noeuds sont à une distance suffisante. Les éléments colorés définissent alors le halo autour du processeur #1.

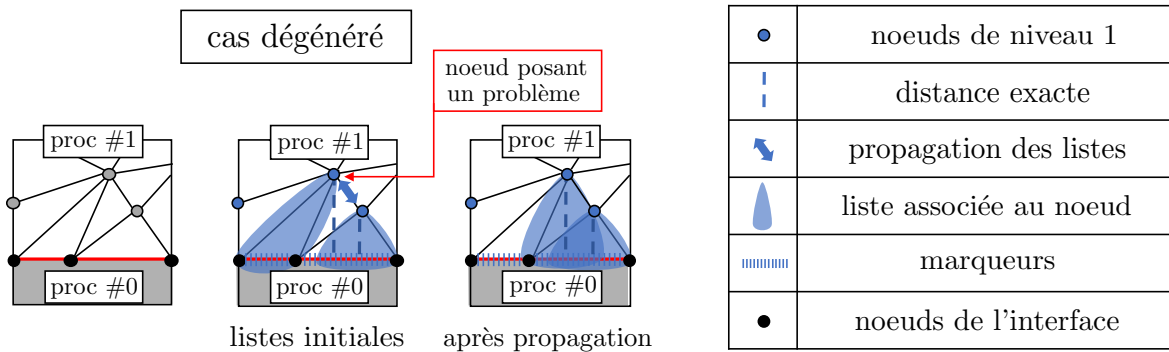


FIGURE 3.8: Cas dégénéré pouvant apparaître sur les maillages non-structurés : la liste initiale du noeud posant problème ne contient pas les marqueurs les plus proches de l’interface. Le problème est résolu en fusionnant sa liste avec celle du noeud adjacent.

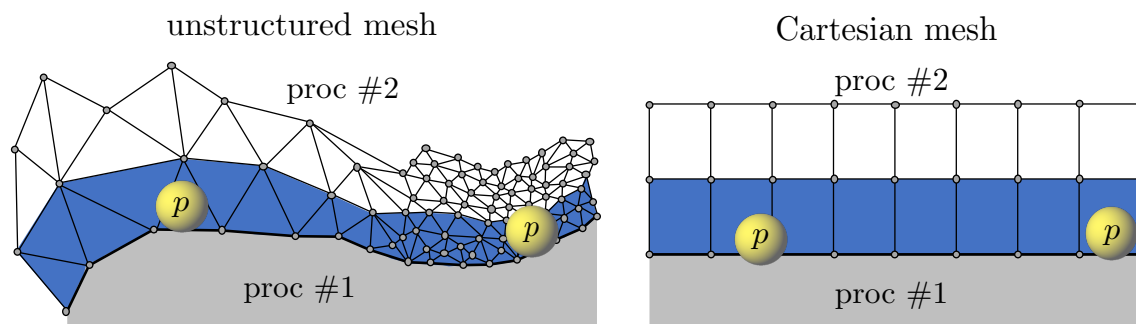


FIGURE 3.9: Marquage de couches d’éléments (■) suivant une instruction de distance à l’interface de deux domaines de processeurs. À gauche, sur le maillage structuré, les particules p sont maintenant toutes deux identifiables. À droite, sur le maillage régulier, on obtient les mêmes résultats.

concerné et les coordonnées sont identiques, alors on conclut que le marqueur traité est déjà présent dans la liste, et il n’est finalement pas ajouté.

De plus, il est fondamental que l’ensemble des noeuds partagent leur liste, et ce quel que soit l’ordre dans lequel ils ont été marqués, d’où l’absence d’incréméntation de leur numérotation. En effet, la figure 3.8 montre un cas dégénéré, où initialement un noeud appartenant à un triangle obtusangle ne peut que détecter les marqueurs générés sur la face du triangle appartenant à l’interface. Dans cette configuration, la hauteur du triangle, indiquant ici la distance exacte à l’interface, réside à l’extérieur du triangle. Ainsi, les marqueurs initialement présents dans la liste ne peuvent correctement représenter cette distance. Après fusion de sa liste avec celle du noeud adjacent, le noeud posant problème récupère les marqueurs les mieux positionnés pour le calcul de distance. Le fait que les marqueurs soient successivement générés sur chaque objet ; noeud, arête ou face de l’interface, lors du traitement de la cellule de niveau 0 correspondant, permet leur bufferisation et donc l’économie de mémoire.

Effectuer ce processus permet, au début d’une simulation et tant que le partitionnement reste inchangé, d’identifier les éléments requis pour le traitement des particules fantômes, puisque tous les éléments contenant un noeud plus proche d’une interface proc-proc qu’un rayon de particule sont marqués (voir figure 3.9). Cette technique fonctionne sur n’importe quel type de mailles : tétraèdres, hexahèdres, prismes, pyramides, ainsi que sur les maillages hybrides. Elle est également indépendante du partitionne-

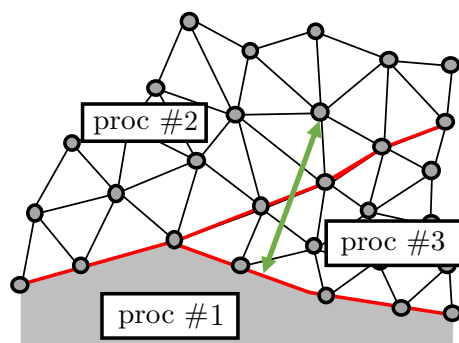


FIGURE 3.10: Cas classique où la distance entre un nœud et un marqueur est calculée au travers l'interface d'un processeur tiers.

ment, notamment au moment de la propagation des listes de marqueurs, *i.e.* lorsque les listes doivent se propager au travers d'une autre interface proc-proc. L'une des configurations régulièrement rencontrée est schématisée sur la figure 3.10. À cet effet, lors de l'étape 3, une mise-à-jour parallèle est réalisée, d'après les structures de données introduites en sous-section 3.2.1. La mise-à-jour parallèle est représentée sur la figure 3.11 : chaque nœud dupliqué (une copie sur le processeur #2, une sur le processeur #3) construit sa propre liste de marqueurs en fonction des nœuds voisins connus. Ensuite, ces listes construites localement sont copiées vers l'INTCOMM, puis vers l'EXTCOMM, où une communication MPI vient partager les listes entre les deux processeurs. Finalement, au niveau de l'INTCOMM de chaque processeur, l'étape d'actualisation (étape 3) peut être réalisée de façon à ce que chaque nœud dupliqué acquiert la même liste de marqueurs.

Le tableau 3.1 fournit les temps CPU relatifs (par rapport au temps CPU de la méthode de référence) mesurés lors de différentes étapes de l'avancement temporel des particules. Ces temps correspondent au processeur le plus lent. Différentes méthodes d'identification de halo sont comparées : la référence correspond à la méthode adaptative présentée dans cette section. Les trois autres correspondent à des méthodes moins élaborées où l'instruction consiste à marquer la première couche d'élément près de l'interface, puis les deux premières couches, et enfin les trois premières. Pour ce test, le lit fluidisé de Birmingham (voir section 5.4) lancé sur 512 processeurs a servi d'illustration. Il s'agit d'une configuration simple et commune où le rayon des particules est plus petit que la taille moyenne des mailles. Il est donc évident qu'une couche de cellules devrait être suffisante dans la majorité des cas pour l'identification du halo. Dans des cas présentant des ratios de tailles de cellules plus importants, ces résultats seraient bien entendu différents.

Les valeurs obtenues indiquent une forte dépendance avec la taille du halo, ce qui correspond à un comportement attendu dès lors que la quantité de particules ghosts à échanger entre processeurs, à localiser sur la grille de détection puis à traiter pour les collisions, varie fortement en fonction de cette taille. Dans le cas illustré, le calcul des forces de contact semble être la partie la plus sensible. Une analyse approfondie des cellules marquées permet de comprendre les écarts observables entre la méthode adaptative et la méthode à une couche de cellules, alors que celles-ci devraient ici donner des résultats quasiment identiques : par construction, l'algorithme à une couche de cellules peut identifier quelques cellules de la seconde couche de cellules dans les zones à courbures négatives, d'où les meilleurs temps obtenus avec la méthode adaptative.

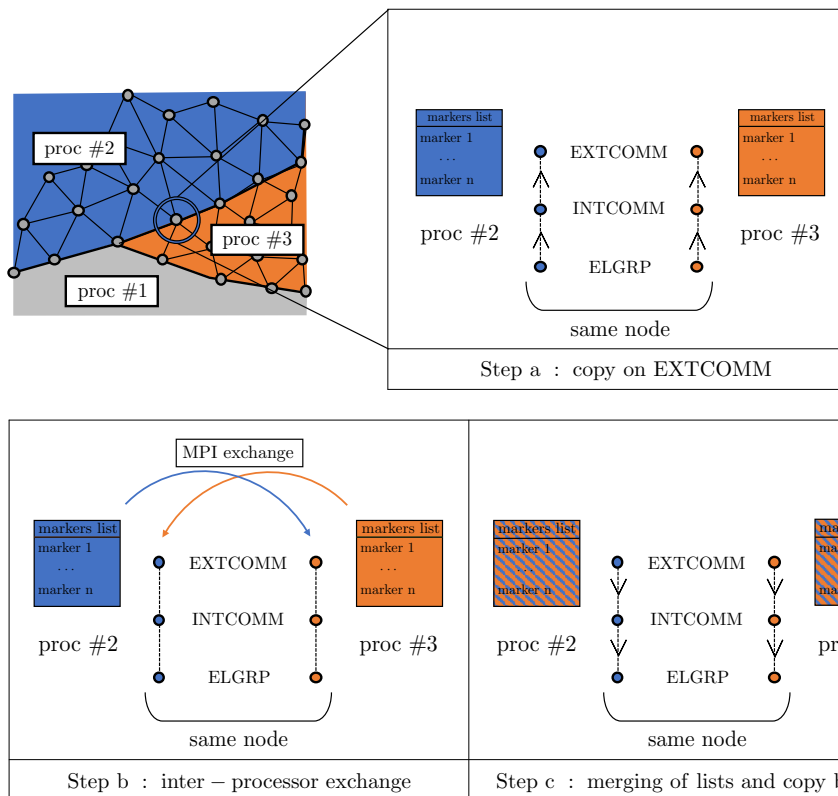


FIGURE 3.11: Actualisation parallèle des listes pour l’algorithme de fast-marching.

TABLE 3.1: Influence de la méthode d’identification du halo sur le temps CPU.

Méthode utilisée	Temps CPU relatif du processeur le plus lent		
	Échange de particules fantômes	Détection des partenaires potentiels de collision	Calcul des forces de contact
Méthode adaptative	1.00	1.00	1.00
Une couche de cellules	1.04	1.07	1.35
Deux couches de cellules	1.69	1.66	1.98
Trois couches de cellules	2.63	2.55	3.07

Plusieurs inconvénients sont attribuables à la méthode adaptative implémentée :

- Elle fournit une approximation de la distance, dont la valeur peut dépendre du nombre de marqueurs qu’un noeud peut stocker, *i.e.* la taille des listes de marqueurs, ainsi que de la quantité et de la localisation initiale des marqueurs. Ces points seront discutés quantitativement dans la section 4.4.
- Le critère de distance d_{min} doit être connu avant la simulation ; soit le plus grand rayon parmi les particules présentes, ou une échelle de coupure pour d’éventuelles interactions particulières à distance (*e.g.* les forces électrostatiques), ou encore une taille de filtre pour le couplage avec la phase fluide.
- Cette méthode est plus coûteuse que la méthode classique consistant à marquer des couches de cellules successives.

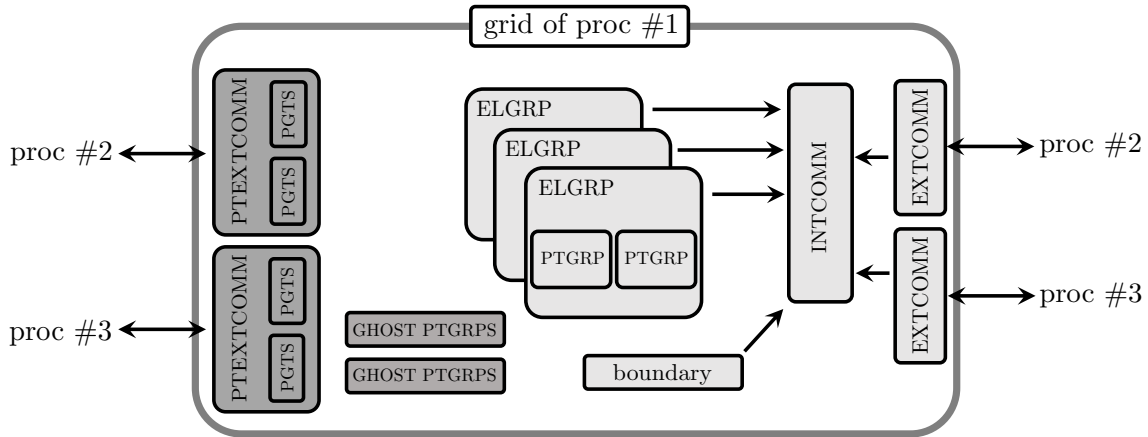


FIGURE 3.12: Structure améliorée des communicateurs, contenant les Particle EXTERNAL COMMunicators (PTEXTCOMMs), et les ghost ParTicle GRouPS (GHOST PTGRPS).

Pour bénéficier pleinement de cette méthode d'identification du halo, une nouvelle structure de données appelée Particle EXTERNAL COMMunicators (PTEXTCOMM) est créée, jouant le même rôle que les communicateurs externes précédemment mentionnés, mais dédiés aux particules. À cet instant, la nouvelle architecture est dessinée sur la figure 3.12. Sur chaque processeur, un PTEXTCOMM est alloué pour chaque autre processeur atteint durant la création du halo, qui permettra le traitement des échanges MPI paire à paire entre processeurs. Pour assurer que chaque paire de processeurs est bien constituée, et que sur chaque processeur de cette paire il existe bien un PTEXTCOMM dédié à cette paire, une opération supplémentaire de sécurité est effectuée une fois les halos définis. Comme illustré sur la figure 3.12, chaque PTEXTCOMM peut contenir plusieurs groupes de particules particuliers appelés Particle Groups To Send ou PGTS. Ils conservent également la liste des éléments appartenant au halo. Il est intéressant de noter que la liste des PTEXTCOMMs peut contenir davantage d'éléments que la liste des EXTCOMMs, puisque des processeurs distants peuvent être atteints durant la propagation.

3.2.3 Traitement des particules fantômes

Une fois défini le halo de cellules basé sur le calcul approximatif de la distance à l'interface, les particules fantômes, qui sont celles contenues dans les halos, doivent être échangées. Sur la figure 3.13, on représente un halo de cellules autour du processeur #1 dans une géométrie cylindrique décrite par un maillage non-structuré. Ce halo s'est visiblement propagé sur les domaines de calcul des processeurs #2, #3, #4, #5 et #6. Ainsi, ces processeurs devront envoyer au processeur #1, via un procédé décrit dans cette section, une copie de leurs particules contenues dans ce halo, qui formeront les particules fantômes du processeur #1.

Le traitement pour l'échange des particules contenues dans les halos est décrit ici. On prend l'exemple d'un processeur noté $\#p$, dont le halo contient des cellules de plusieurs processeurs voisins notés $\#n$.

1. Les particules appartenant aux différents processeurs $\#n$ et contenues dans les cellules du halo du processeur $\#p$ sont copiées dans le PTEXTCOMM correspondant à la paire $\#n - \#p$, et réparties dans ses PGTS.
2. Une fois constitués les PGTS au sein de chaque PTEXTCOMM, ceux-ci subissent une opéra-

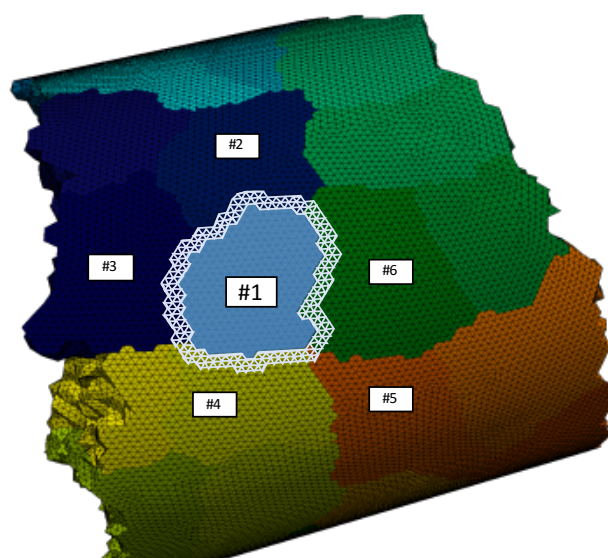


FIGURE 3.13: Halo de cellules du processeur #1 (■). Les processeurs voisins prenant part à ce halo sont de rang #2, #3, #4, #5 et #6. Ainsi, ces processeurs devront envoyer au processeur #1 une copie de leurs particules contenues dans ce halo, qui formeront les particules fantômes du processeur #1.

tion de packing : l'ensemble des particules des PGTS sont groupées dans un unique tableau ne contenant que des nombres réels (une opération de transfert de type est réalisée sur les données non-réelles). Seules les données nécessaires au calcul des forces de contact, *i.e.* le diamètre, la masse, la position, et les vitesses translationnelle et rotationnelle, sont packées.

3. Chaque processeur # n envoie ses PGTS sous forme packée au processeur # p (communications point-à-point non-bloquantes d'un unique message).
4. Au moment de la réception, le processeur # p déballe (il "unpack") les paquets reçus, et recrée des PTGRPs spéciaux contenant les particules fantômes, appelés ghost PTGRPs.
5. Vérification que toutes les communications MPI sont terminées.

Finalement, les particules fantômes contenues dans les ghost PTGRPs sont traitées comme les particules locales par le processeur # p pour le calcul des forces de contact. Une fois les forces de contact calculées, les ghost PTGRPs sont vidés et réinitialisés. Des simulations réalisées sur le cas du lit fluidisé de Birmingham (voir section 5.4) sur 512 coeurs ont montré que l'échange des particules fantômes pouvaient représenter 50% du temps de simulation total en cas de codage naïf (pas de packing, échanges MPI bloquants). La suite de cette section est consacrée à l'implémentation d'une stratégie de parallélisme efficace pour la réduction du coût de l'opération 3 de l'algorithme précédemment présenté.

Plusieurs limitations matérielles ont une forte influence sur l'efficacité parallèle des échanges MPI, parmi lesquelles la bande passante, qui représente la quantité de données qui peut transiter entre les processeurs sur un temps donné, et la latence réseau $\tau_{network}$, qui représente le temps nécessaire au transfert interprocesseur d'un message de taille nulle. On fait ici l'hypothèse que tous les processeurs sont synchronisés, c'est-à-dire qu'ils déclenchent leurs communications au même instant. La latence

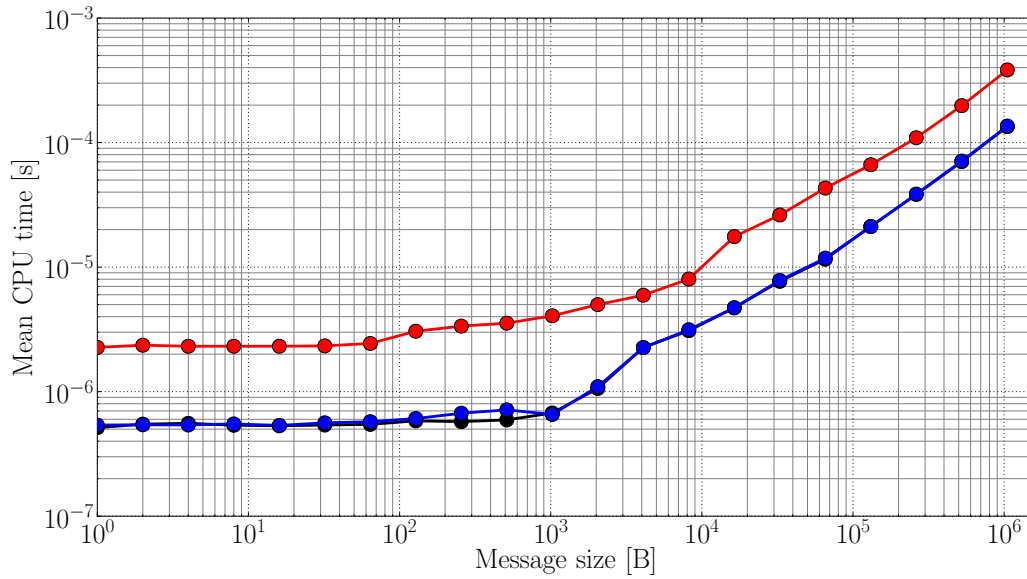


FIGURE 3.14: Mesure de la latence globale sur le supercalculateur Curie pour un "ping pong" test dans trois configurations réseaux différentes : ●● : communications intra-noeud intra-socket, ●● : communications intra-noeud extra-socket, ●● : communications extra-noeud.

globale $\tau_{latency}$, que l'on définit comme le temps total nécessaire au transfert d'un paquet de données est donc :

$$\tau_{latency}(\text{en s}) = \tau_{network}(\text{en s}) + \text{bande passante}(\text{en s/B}) \times \text{taille du message}(\text{en B}). \quad (3.1)$$

Parmi les termes de droite de l'équation 3.1, celui qui a le plus de chance d'être limitant doit être identifié dans l'objectif d'écrire le code approprié. Pour ce faire, un test préliminaire est effectué, afin de mesurer la latence globale en fonction de la taille du message. Deux processeurs interconnectés via un réseau de type InfiniBand QDR Full Fat Tree du supercalculateur Curie du CEA (France) réalisant des échanges MPI bloquants (test présent dans la littérature sous le nom "ping pong" [272]) sont utilisés pour ce test. Les résultats sont exposés sur la figure 3.14. Les temps montrés correspondent à des temps moyens observés sur 10'000 tests pour chaque cas, afin de cacher des effets indésirables tels que les temps de déclenchement des chronomètres, la préparation et la mise en cache des processeurs notamment lors de la première communication, ou les appels au noyau. On rappelle ici qu'au sein d'un même noeud, plusieurs coeurs sont groupés en sous-ensembles appelés sockets. Pour ce "ping-pong" test, il est possible de placer les deux processeurs utilisés sur le même noeud et sur le même socket (communications intra-noeud intra-socket), sur le même noeud mais des sockets différents (communications intra-noeud extra-socket), ou bien sur des noeuds différents (communications extra-noeud).

Deux comportements distincts peuvent être identifiés sur la figure 3.14 en fonction de la taille de message. Le fait que le temps de communication reste stable pour les messages de tailles allant de 0B à approximativement 1kB indique que la latence réseau est limitante dans cette zone. Sa valeur peut être estimée à $2\mu\text{s}$ pour une communication extra-noeud, et $0.5\mu\text{s}$ pour une communication intra-noeud. Pour des tailles de message au-delà de 10kB, toutes les courbes exhibent un comportement linéaire attribuable à la bande passante. Sa valeur peut être estimée à $0.4\mu\text{s}/\text{MB}$ pour une communication extra-noeud, et à $0.15\mu\text{s}/\text{MB}$ pour une communication intra-noeud. Par conséquent, il apparaît que dépendant de la quan-

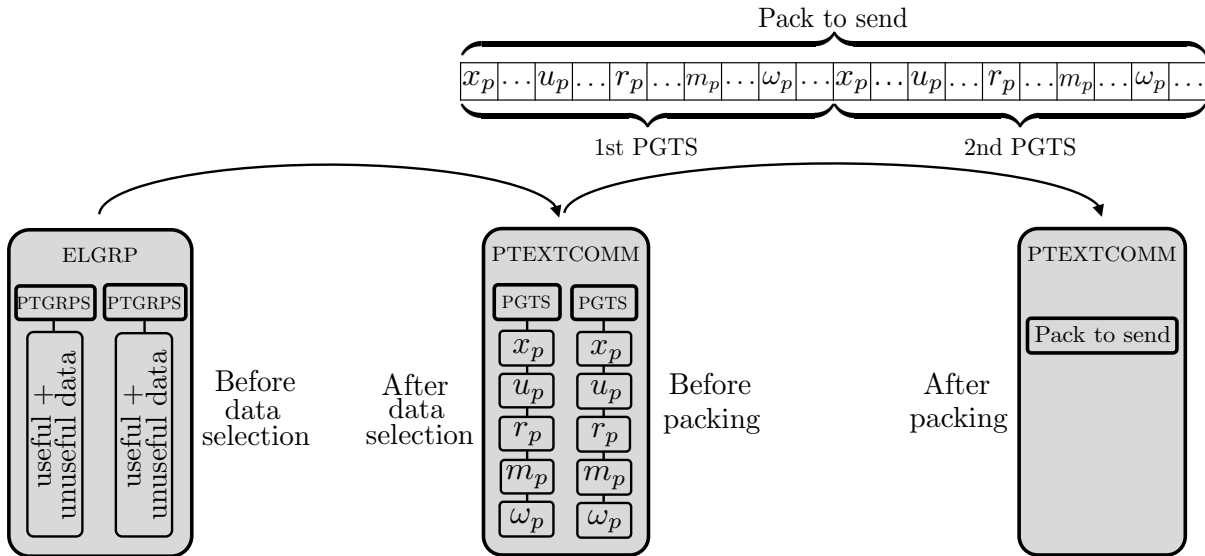


FIGURE 3.15: Illustration du packing. Avant le packing, un PTEXTCOMM contient deux PGTS. Chaque PGTS est composé d'un tableau pour chaque donnée associée aux particules. Le packing consiste à grouper les tableaux nécessaires dans un unique vecteur afin de simplifier la gestion des communications MPI.

tité d'échanges, utiliser des petits messages peut ne pas toujours constituer la meilleure solution. Malgré une tendance similaire, chaque configuration intra/extra-noeud/socket offre une efficacité temporelle variable, comme le montrent les valeurs de latence réseau de bande passante calculées. Conformément à ce qui était attendu, les communications extra-noeud sont plus coûteuses, et viennent donc limiter les performances parallèles globales du code dès que plusieurs noeuds sont requis. Les noeuds de calcul sont également groupés en structures appelées "racks". Des mesure de temps "extra-racks" pourraient également être réalisées pour compléter l'étude.

Une stratégie de packing, consistant à grouper tous les PGTS d'un PTEXTCOMM dans un unique vecteur avant de l'envoyer, est implémentée afin de s'affranchir du problème de latence réseau des petits messages (voir figure 3.15). À la réception des paquets, une étape d' "unpacking" permet de reconstituer des groupes de particules fantômes appelés ghost PTGRPs. Afin d'éviter de trop nombreuses opérations d'allocation/déallocation de la mémoire, la taille des packs stockés en mémoire n'est augmentée seulement si elle devient insuffisante, mais elle n'est jamais réduite, pour aider à la réutilisation des buffers. La figure 3.16 illustre la distribution du nombre de messages MPI en fonction de la taille des messages pour deux stratégies : la première sans packing des données du halo, pour laquelle, pour chaque PGTS d'un PTEXTCOMM, chaque tableau correspondant à une donnée des particules est envoyé individuellement, avec envoi préliminaire de la taille pour l'allocation en mémoire (codage naïf). La seconde stratégie utilise la technique de packing/unpacking sus-mentionnée. Les résultats sont issus de simulations du lit fluidisé de Birmingham (voir section 5.4) sur 512 processeurs menées sur 30 itérations. Il est évident que le codage naïf conduit à un nombre de messages beaucoup plus important que la stratégie de packing/unpacking (environ 1'000 fois plus de messages). Ces messages sont donc beaucoup plus petits dans la première stratégie (environ 1'000 fois plus petits), et plus de 40% des messages envoyés sont des messages de 4B. Toujours pour la première stratégie, les plus grands messages ont une taille de 12kB. En ce qui concerne la seconde stratégie, les tailles de messages observées correspondent bien à la taille

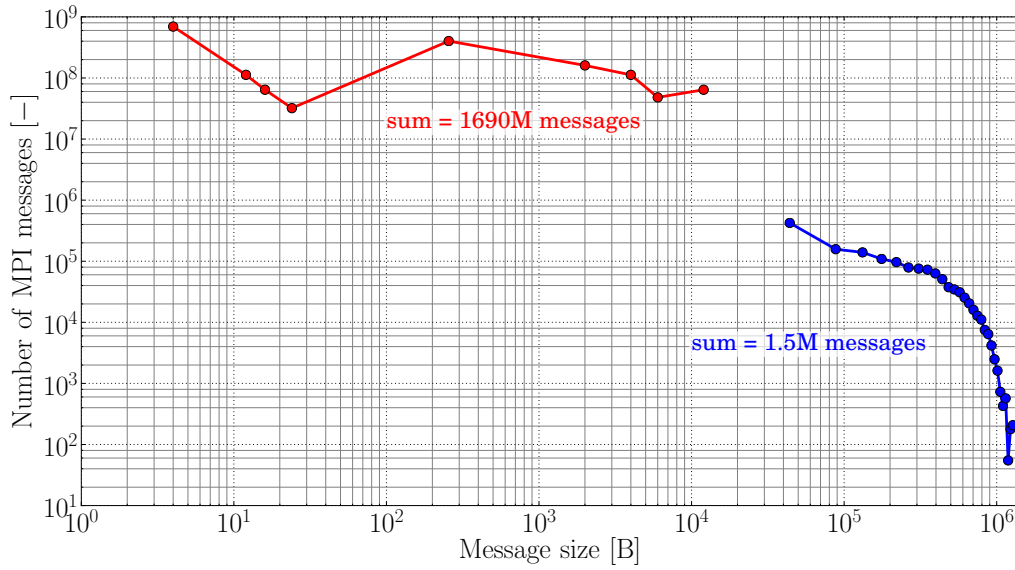


FIGURE 3.16: Distribution du nombre de messages MPI en fonction de la taille des messages pour deux stratégies de communication : ●● : sans packing, ●● : avec packing. Les résultats sont issus de 30 itérations effectuées sur le lit fluidisé de Birmingham sur 512 processeurs. Les sommes sous chaque courbe correspondent au nombre total de messages envoyés.

de vecteurs packés de nombres définis de PGTS, ici allant de 1 PGTS (représentant des messages de 45kB contenant jusqu'à 500 particules), qui sont les plus représentés, jusqu'à 29 PGTS (représentant des messages de 1.28MB contenant jusqu'à 14500 particules).

Le coût en terme de temps CPU des opérations de packing et d'unpacking des PGTSs est investigué sur la figure 3.17, et montre une dépendance linéaire avec le nombre de PGTSs concernés. Dans les cas où on effectue également une sélection préliminaire des données à échanger (ici, données nécessaires au calcul des forces de collision), le coût total se voit réduit d'un facteur 14, approximativement. En effet, dans un contexte multiphysique tel que celui dans lequel évolue le code YALES2, des données très diverses peuvent être attribuées aux particules, d'où le très fort gain observé.

En recoupant les résultats précédent, le temps total attribué aux communications est estimé en fonction de la taille des messages sur la figure 3.18. Le temps total est calculé de la façon suivante pour la stratégie sans packing :

$$\text{temps total}(k) = \tau_{\text{latency}}(k) \times \text{nombre de messages}(k), \quad (3.2)$$

et comme suit pour la stratégie mettant en jeu le packing, où τ_{pack} et τ_{unpack} représentent respectivement les coûts du packing et de l'unpacking :

$$\text{temps total}(k) = [\tau_{\text{latency}}(k) + \tau_{\text{pack}}(k) + \tau_{\text{unpack}}(k)] \times \text{nombre de messages}(k), \quad (3.3)$$

où k dénote une certaine taille de message. Ici, la latence globale est extraite d'une communication extra-noeud (voir figure 3.14), et les coûts de packing et d'unpacking pris en compte correspondent au cas où une sélection préliminaire des données est effectuée (voir figure 3.17). On peut observer que même en

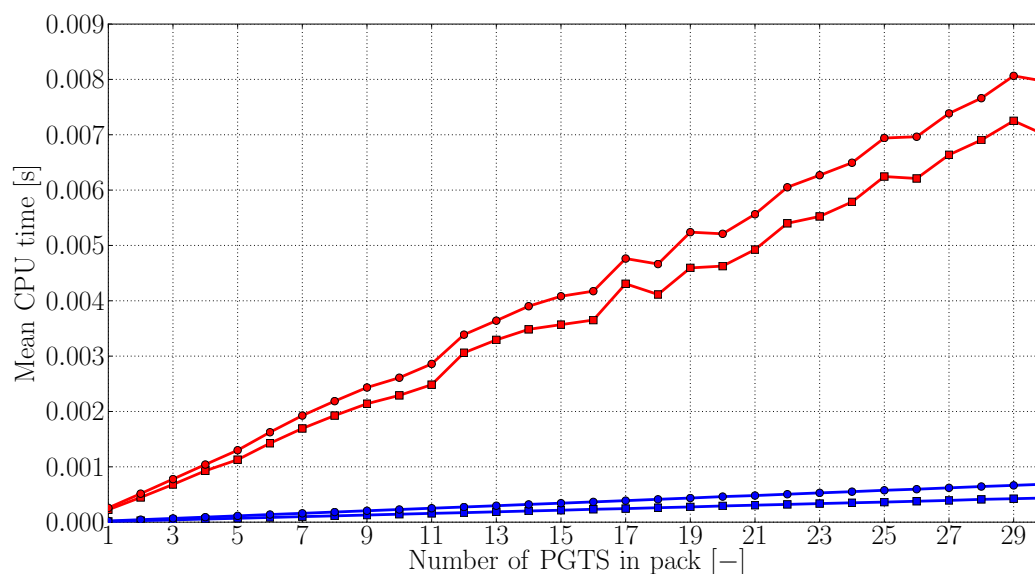


FIGURE 3.17: Coût en terme de temps CPU des opérations de packing (■-■) et d'unpacking (●-●) avec sélection préliminaire des données échangées, et du packing (■-■) et unpacking (●-●) sans sélection des données, en fonction du nombre de PGTSs traités.

comptabilisant les coûts des opérations de packing et d'unpacking de chaque message, la seconde stratégie reste approximativement 12 fois plus rapide que le codage naïf sans packing. À noter que ces calculs fournissent des temps maximums, car on formule l'hypothèse selon laquelle les échanges sont tous réalisés les uns à la suite des autres, alors qu'en réalité, certains peuvent être effectués sur la même période : même dans le cadre une stratégie MPI bloquante, les échanges au sein de paires de processeurs disjointes peuvent se faire simultanément. Ce temps de traitement n'a pas été comptabilisé dans cette étude. Il est également possible d'argumenter en faveur de la stratégie de packing que même sur un réseau idéal (latence réseau nulle, bande passante infinie), les messages ne peuvent être traités de façon parfaitement simultanée au moment de leur réception, d'où l'économie de temps automatiquement réalisée pour des quantités moindres de messages.

Pour conclure, tous les résultats présentés sont en faveur d'une stratégie MPI mettant en oeuvre la méthode de packing/unpacking des données. Des simulations menées sur le lit fluidisé de Birmingham (voir section 5.4) sur 512 processeurs ont montré que les communications MPI pouvaient représenter jusqu'à 50% du coût total de la simulation sans traitement spécifique des données échangées. Les résultats obtenus avec utilisation la stratégie de packing/unpacking présentée montre un coût lié aux communications divisé par 3, permettant à la simulation de tourner 30% plus rapidement.

Comme observé précédemment, le temps CPU passé dans les opérations de packing/unpacking n'est pas négligeable comparé à la latence globale des communications parallèles (voir figure 3.17), ce qui suggère encore d'autres opportunités d'amélioration des performances. Dans ce contexte, un algorithme de communication asynchrone permettant un recouvrement travail/communication est implémenté, comme illustré sur la figure 3.19. L'objectif d'une telle méthode est de maximiser la réalisation d'opérations de packing et d'unpacking à la volée, afin de les recouvrir avec les temps de communications à proprement

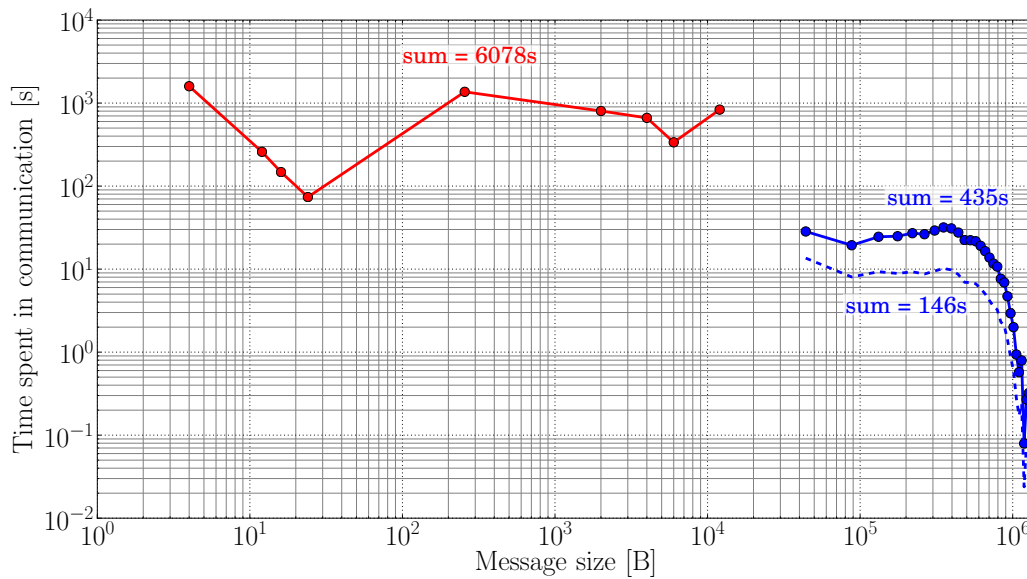


FIGURE 3.18: Temps théorique maximum passé dans les communications en fonction de la taille des messages pour deux stratégies : ●● : sans packing, et ●● : avec packing. À titre indicatif, on représente également le cas avec packing sans prise en compte du coût des opérations de packing/unpacking (---). Les résultats sont issus de 30 itérations effectuées sur le lit fluidisé de Birmingham sur 512 processeurs. Les sommes sous chaque courbe correspondent au coût total engendré.

parler. Lors d'une première étape, les tailles de tous les packs à envoyer sont calculées, puis les requêtes de réceptions et d'envois non-bloquants pour l'échange de ces tailles sont postées. Ces tailles de pack seront utilisées pour allouer la mémoire nécessaire côté receveur. En fonction de la synchronisation initiale des processeurs, il peut alors être utile de sonder les requêtes de réception afin d'identifier la première taille de pack effectivement reçue. Si cette première sonde indique qu'un nombre m de PTEXTCOMMs ont effectivement reçu les tailles des packs qu'ils devront collecter, alors ces m PTEXTCOMMs sont immédiatement capables de packer leurs propres PGTS et de poster une seconde volée de requêtes de réceptions et d'envois non-bloquants, cette fois-ci pour l'échange du pack lui-même. En conséquence, le temps nécessaire au packing est recouvert avec le temps nécessaire à la récupération des tailles de pack restantes. Si la sonde indique qu'aucune taille de pack n'a été reçue, une instruction permet d'attendre jusqu'à ce qu'au moins une taille soit reçue. Dans ce cas, le recouvrement ne peut avoir lieu. Ce premier sondage pour la réception des tailles est répété jusqu'à ce que celles-ci soient toutes réceptionnées, ce qui est effectué en un nombre de sondages variable selon la synchronisation initiale des processeurs. Une étape supplémentaire à cet endroit consiste à éliminer pour le reste des communications les PTEXTCOMMs pour lesquels l'un au moins des processeurs de la paire associée n'a pas de particules à envoyer. Chaque processeur de cette paire voit donc le PTEXTCOMM associé "éliminé". La seconde partie de l'algorithme consiste d'abord, une fois la seconde volée de réceptions et d'envois non-bloquants postée pour les packs eux-mêmes, à sonder les réceptions de ces derniers. Là encore, si cette sonde indique qu'un nombre m de PTEXTCOMMs a bien reçu les packs à collecter, les opérations d'unpacking sur ces packs reçus peuvent débuter, tandis que les communications restantes sont parachevées. Une instruction d'attente prend place jusqu'à ce qu'un pack au moins soit reçu, et ce jusqu'à ce que tous les packs le soient.

La capacité de cet algorithme à tirer profit du recouvrement travail/communication peut être évaluée en comparant ses performances à l'algorithme bloquant classique, la méthode de packing/unpacking étant employée dans les deux cas. Dans le cas bloquant, les tailles de pack sont échangées de façon ordonnée avant d'effectuer le packing, puis les packs sont eux-mêmes échangés de la même façon, avant d'en arriver à l'étape d'unpacking. Lancé sur 512 processeurs, le lit fluidisé de Birmingham a montré que le temps CPU nécessaire au traitement des particules fantômes décroît d'un facteur 2.6 lorsque la méthode asynchrone est utilisée.

3.3 Performances du code

Les performances parallèles du code sont quantifiées dans cette section, au travers l'étude de son speed-up qui caractérise la scalabilité forte, soit le gain de performances lors d'une augmentation du nombre de processeurs pour un problème de taille fixe, et de son scale-up qui caractérise la scalabilité faible, soit le gain de performances lors d'une augmentation du nombre de processeurs pour un problème de taille fixe par processeur. On étudie d'abord un cas factice canonique pour lequel les particules sont aléatoirement réparties dans un domaine cubique. Les particules y sont présentes en quantité à peu près similaires sur chacun des processeurs. Conscients que ce cas n'est pas représentatif des configurations étudiées dans ces travaux, qui concernent majoritairement des lits fluidisés où des zones de vide cohabitent avec des zones denses, l'analyse est complétée par l'étude du lit fluidisé de Birmingham. Les détails de cette dernière configuration sont abordés dans la section 5.4.

3.3.1 Mesures sur le cas factice

Un premier cas ne relevant d'aucune physique particulière est d'abord décrit (cas dit "factice"). Ce cas consiste en une boîte cubique maillée à l'aide de tétraèdres. Les particules sont réparties aléatoirement dans le domaine de calcul, avec une porosité moyenne de 0.54, et chaque tétraèdre contient en moyenne près de 11 particules. Les parois sont considérées complexes, et donc traitées via l'algorithme décrit dans la section 2.3. Afin de prendre en compte l'intégralité des coûts CPU de chaque étape de l'avancement temporel, notamment les étapes d'interpolation et de projection, une phase fluide est également présente. Aucun transfert de chaleur n'est pris en compte dans cette étude. Pour le relevé de performances, le pas de temps particulaire est choisi de façon à ce que $\Delta t = 10\Delta t_p$. Dix pas de temps particuliers sont donc réalisés pour chaque pas de temps fluide, ce qui correspond à une situation classique de sous-stepping. Ce cas a été lancé sur le calculateur régional Myria du CRIANN (Centre Régional Informatique et d'Applications Numériques de Normandie), doté d'une puissance crête de 403 TFlop/s et architecturé autour d'un réseau Intel Omni-Path. Les processeurs utilisés sont des Intel Broadwell 14 coeurs à 2.4GHz dotés de 128Go de RAM (soit environ 4 Go par coeur).

La scalabilité forte (speed-up) est d'abord obtenu en lançant la même simulation sur différents nombres de processeurs, allant de 532 (simulation de référence) à 4144. Chaque simulation rassemble environ 38M de tétraèdres et 410M de particules. En notant t_{CPU}^{ref} le temps CPU correspondant à la boucle temporelle du solveur granulaire sur $Nprocs^{ref} = 532$ processeurs, le speed-up obtenu pour un temps t_{CPU} sur $Nprocs$ processeurs est calculé via :

$$\text{speed-up}(Nprocs) = Nprocs^{ref} \times \frac{t_{CPU}^{ref}}{t_{CPU}}. \quad (3.4)$$

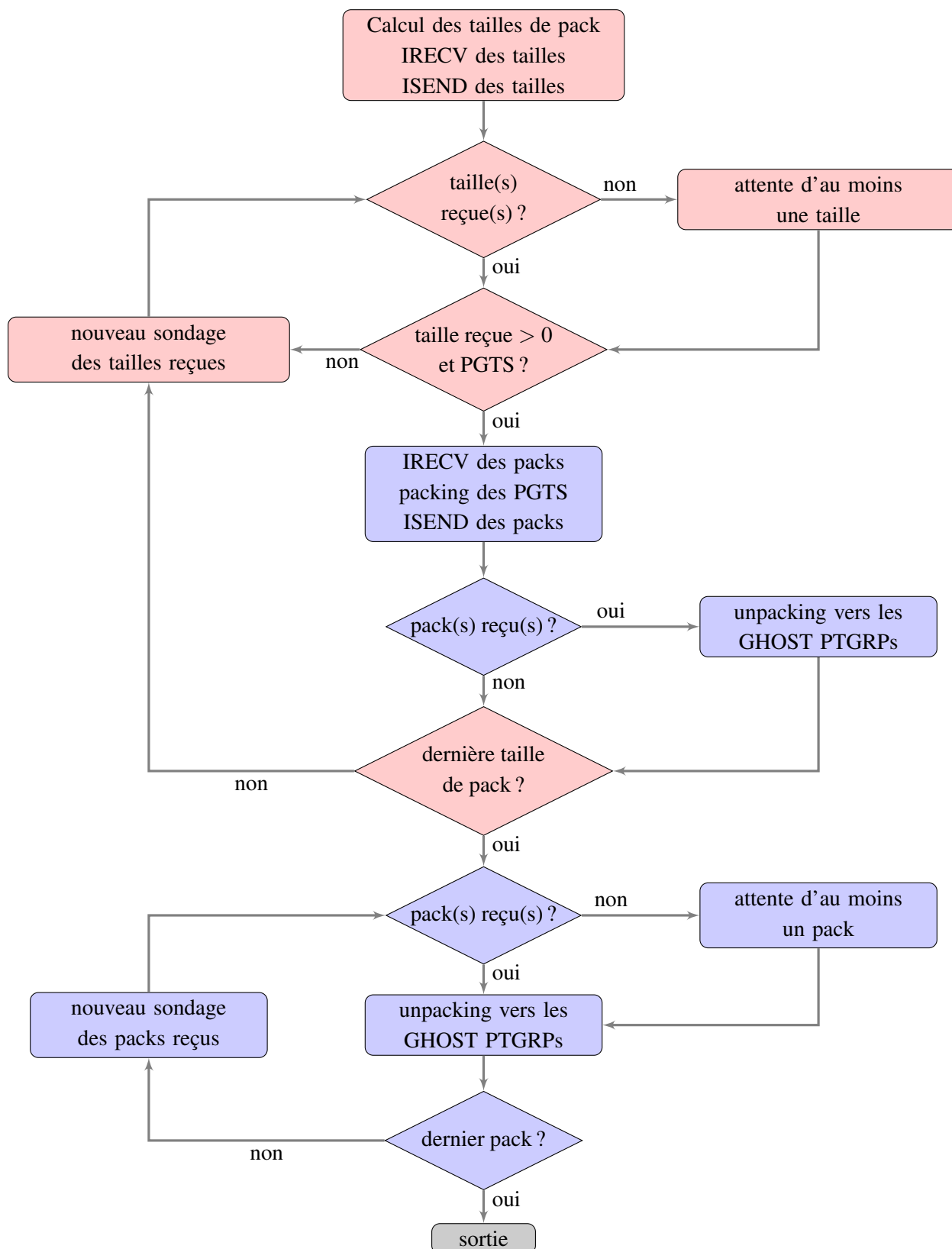


FIGURE 3.19: Organigramme de l’algorithme asynchrone pour le traitement des particules fantômes avec packing/unpacking des données du halo et le recouvrement travail/communication. Étapes relatives à l’échange des tailles de pack (■) et des packs eux-mêmes (■).

TABLE 3.2: Relevé des performances de speed-up sur le cas factice.

Nprocs	$N_p/proc$	$N_c/proc$	$t_{CPU}^{\Delta t_p}$	$t_{CPU}^{\circ, \Delta t_p}$	Speed-up	$t_{CPU}^{\Delta t}$	Speed-up
			[s]	[ns]	DEM	[s]	CFD D
532	767596	71409	3.34	8.19	532	0.26	532
1036	394266	36670	1.77	4.34	1003	0.15	921
2072	197415	18334	0.93	2.27	1915	0.12	1149
4144	98850	9167	0.53	1.28	3401	0.15	918

Nprocs	$t_{CPU}^{10\Delta t_p + \Delta t}$	Speed-up
	[s]	DEM+CFD
532	33.7	532
1036	17.9	1002
2072	9.4	1902
4144	5.4	3322

Le tableau 3.2 rassemble les données temporelles relevées. Dans ce tableau, $N_p/proc$ et $N_c/proc$ sont respectivement les nombres moyens de particules et de cellules par processeur. Les temps CPU mesurés pour un pas de temps de la partie DEM du solveur (avancement temporel des particules), un pas de temps de la partie CFD du solveur (avancement temporel du fluide), et une itération complète comprenant dix pas de temps particulaires et un pas de temps fluide sont respectivement notés $t_{CPU}^{\Delta t_p}$, $t_{CPU}^{\Delta t}$ et $t_{CPU}^{10\Delta t_p + \Delta t}$. Les speed-ups propres à la partie DEM, à la partie CFD, et au solveur complet, sont calculés par la formule 3.4 et indiqués dans le tableau. Le temps $t_{CPU}^{\Delta t_p}$ ramené à une particule est noté $t_{CPU}^{\circ, \Delta t_p}$. Il s'agit donc du coût CPU moyen d'une particule. La partie DEM du solveur montre une bonne scalabilité jusqu'à 4144 processeurs, avec un speed-up atteignant 82% du speed-up idéal. La mauvaise scalabilité de la partie CFD est majoritairement imputable à la faible quantité de cellules par processeur ($N_c/proc$), ici trop éloignée des préconisations du code : il est généralement préférable de maintenir $50k < N_c/proc$. Dans cette simulation cependant, dix pas de temps particulaires sont réalisés pour un pas de temps fluide, et les premiers sont bien plus coûteux. Il en résulte que la partie CFD est très peu visible sur le speed-up d'une itération complète, qui reste supérieur à 80% de sa valeur idéale. Celui-ci est tracé sur la figure 3.20.

La figure 3.21 montre la répartition des temps CPU des routines les plus coûteuses du solveur exprimés comme des pourcentages du temps global. Sont indiquées les moyennes observées sur l'ensemble des tests de speed-up. Comme dans la plupart des codes de DEM-CFD, le calcul des forces de collision reste la partie la plus coûteuse du processus. Ici, elle cumule le coût des collisions particules-particules et particules-parois complexes. La relocalisation des particules, qui n'est pas été traitée dans cet exposé, consiste en l'identification de la cellule, de l'ELGRP, et du processeur contenant chaque particule. Cette partie contient également l'envoi/réception (non-bloquant et utilisant la technique de packing-unpacking vue dans la section précédente) des particules ayant traversé une interface processeur-processeur durant le pas de temps. Le traitement des particules fantômes rassemble l'identification des particules du halo (voir section précédente), leur envoi/réception avec packing et unpacking, ainsi que leur stockage sous forme de particules fantômes. Chacune de ces routines est appelée à chaque pas de temps particulaire.

Dans un second temps, on s'intéresse à la scalabilité faible (scale-up) du code, c'est-à-dire à la mesure

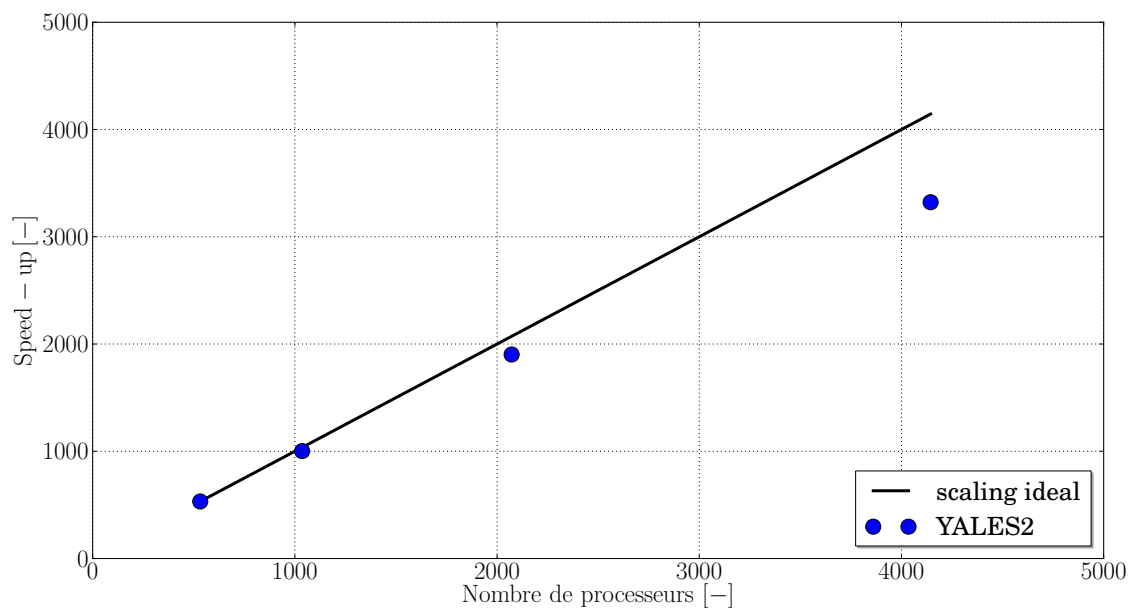


FIGURE 3.20: Courbe de speed-up obtenue sur le cas factice.

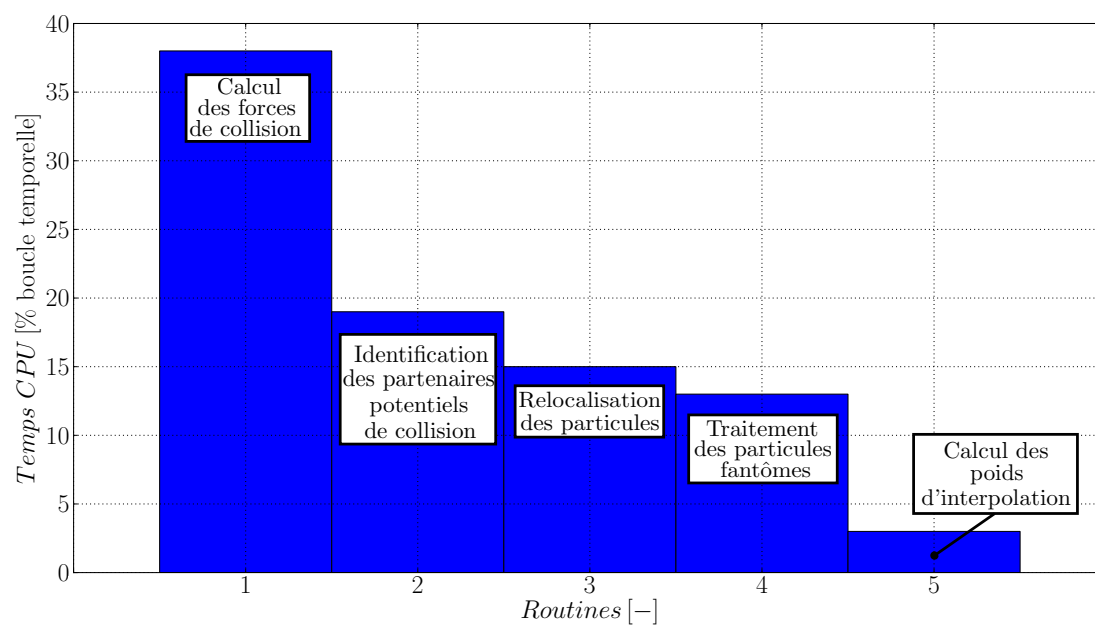


FIGURE 3.21: Répartition des temps CPU des routines les plus coûteuses exprimés en pourcentages de la boucle temporelle globale.

des performances à charge constante par processeur sur un nombre variable de processeurs. Le nombre de particules par processeur est maintenu à environ 99000, et le nombre de tétraèdres par processeur à environ 9100. Le nombre de processeurs est augmenté de 252 (simulation de référence) à 4144. Le scale-up est alors obtenu par la formulation suivante :

$$\text{scale-up}(N_{procs}) = N_{procs}^{ref} \times \frac{t_{CPU}^{ref}}{N_c^{ref}} \frac{N_c}{t_{CPU}}. \quad (3.5)$$

Le tableau 3.3 rassemble les temps CPU collectés sur le cas factice. On y introduit un temps appelé RCT_{DEM} (pour "Reduced Computational Time") correspondant au temps CPU mesuré pour effectuer une itération du solveur DEM rapporté au nombre de particules par processeur, soit :

$$RCT_{DEM} = \frac{t_{CPU}^{\Delta t_p} \times N_{procs}}{N_p}. \quad (3.6)$$

De même, RCT_{CFD} peut être défini pour la partie CFD du solveur :

$$RCT_{CFD} = \frac{t_{CPU}^{\Delta t} \times N_{procs}}{N_c}. \quad (3.7)$$

On peut enfin associer un RCT global sur une itération, prenant en compte le fait que 10 pas de temps particulaires sont effectués pour 1 pas de temps fluide :

$$RCT = 1 \times RCT_{CFD} \times \frac{N_c}{N_c + N_p} + 10 \times RCT_{DEM} \times \frac{N_p}{N_c + N_p}. \quad (3.8)$$

Dans un cas de scale-up idéal, ces différents RCT sont indépendants du nombre de processeurs utilisés. Le tableau 3.3 indique une très faible variation des RCT_{DEM} en fonction du nombre de processeurs, ce qui est confirmé par le scale-up mesuré pour la partie DEM, excellent jusqu'à 4144 processeurs. Celui de la partie CFD est mauvais, du fait de la valeur de $N_c/proc$ très éloignée des préconisations. Le scale-up global correspondant à une itération complète est tracé sur la figure 3.20 et montre une excellente scalabilité.

3.3.2 Mesures sur le cas Birmingham

On s'intéresse ensuite à la mesure des performances sur le cas du lit fluidisé de Birmingham, décrit en détail dans la section 5.4. Les paramètres numériques utilisés dans les simulations y sont résumés dans le tableau 5.5. Le lit de Birmingham comprend environ 10M de particules, et le domaine cylindrique est maillé à l'aide de 3.7M de tétraèdres. Les performances sont relevées au bout d'une seconde de temps physique simulée, le lit ayant été préalablement fluidisé pendant 2.5 secondes. Il sera vu dans la section 5.4 que sans permettre une convergence statistique complète du lit, ces échelles temporelles permettent d'atteindre un état représentatif du point de vue des performances. En effet, la hauteur de lit et la perte de charge ont déjà atteint un régime d'oscillation autour de leur moyenne. Il s'agit donc de simulations en conditions réalistes, où la vitesse d'exécution du solveur dépend de la physique à l'oeuvre, les pas de temps particulaire et fluide sont recalculés à chaque itération etc., contrairement au cas factice. Les tests ont été menés sur le calculateur Curie du TGCC (Très Grand Centre de Calcul). Cette machine est munie d'un Réseau InfiniBand QDR Full Fat Tree. Les noeuds de calcul utilisés rassemblent deux processeurs octo-coeurs Intel® Sandy Bridge à 2.7 GHz dotés de 64 Go de RAM (soit 4 Go par coeur).

TABLE 3.3: Relevé des performances de scale-up sur le cas factice.

Nprocs	$t_{CPU}^{\Delta t_p}$	RCT_{DEM}	Scale-up	$t_{CPU}^{\Delta t}$	RCT_{CFD}	Scale-up
	[s]	[μ s]	DEM	[s]	[μ s]	CFD
252	0.53	5.32	252	0.04	4.58	252
532	0.54	5.62	497	0.05	5.56	438
1036	0.55	5.49	997	0.06	6.45	735
2072	0.56	5.61	1940	0.08	9.02	1052
4144	0.52	5.31	4132	0.15	16.36	1160

Nprocs	$t_{CPU}^{10\Delta t_p + \Delta t}$	RCT	Scale-up
	[s]	[μ s]	DEM+CFD
252	5.33	49.0	252
532	5.47	52.0	497
1036	5.56	50.8	994
2072	5.69	52.1	1927
4144	5.40	50.0	4049

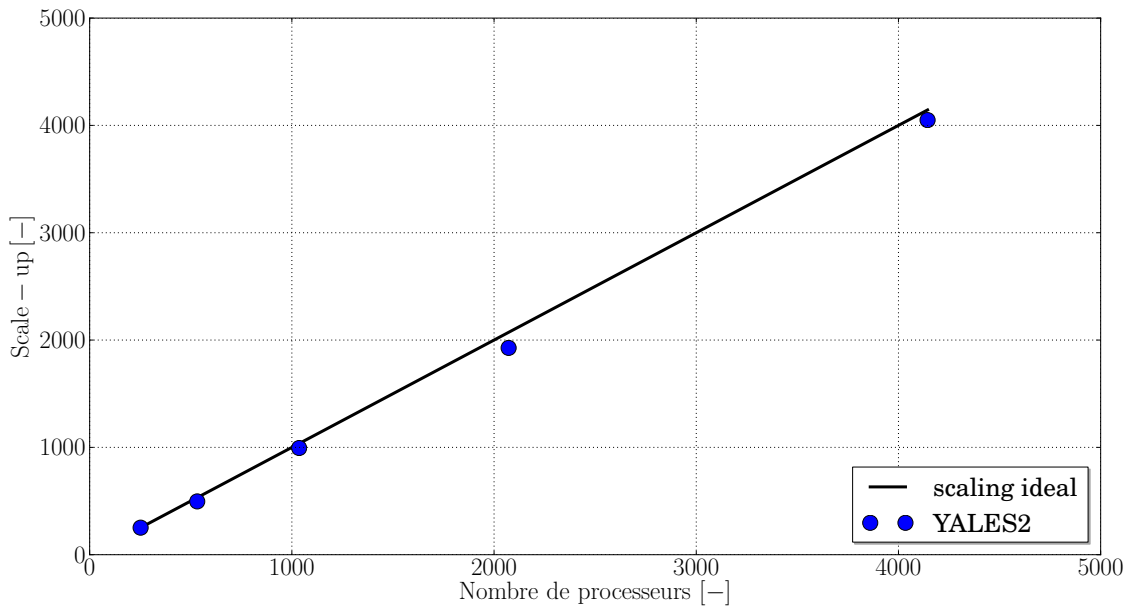


FIGURE 3.22: Courbe de scale-up obtenue sur le cas factice.

Le speed-up est obtenu en lançant la même simulation sur différents nombres de processeurs, allant de 64 (simulation de référence) à 1024. Le tableau 3.4 rassemble les données temporelles relevées. Ici, t_{CPU}^{DEM} , t_{CPU}^{CFD} et $t_{CPU}^{DEM+CFD}$ font respectivement référence aux temps CPU de la partie DEM du solveur (avancement temporel des particules), de la partie CFD du solveur (avancement temporel du fluide), et du solveur complet, nécessaires à l'obtention d'une seconde de temps physique. La partie DEM montre une scalabilité raisonnable jusqu'à 1024 processeurs, avec un speed-up atteignant 60% de sa valeur idéale. Là encore, la partie CFD montre une mauvaise scalabilité due à des valeurs de $N_c/proc$ largement en-deçà

TABLE 3.4: Relevé des performances de speed-up sur le cas Birmingham.

Nprocs	$N_p/proc$	$N_c/proc$	t_{CPU}^{DEM}	Speed-up	t_{CPU}^{CFD}	Speed-up	$t_{CPU}^{DEM+CFD}$	Speed-up
			[s]	DEM	[s]	CFD	[s]	DEM+CFD
64	150489	57892	286981	64.0	3309	64.0	290290	64.0
96	100326	38595	203874	90.1	2727	77.7	206601	89.9
128	75245	28946	157127	116.9	2393	88.5	159520	116.5
192	50163	19297	110395	166.4	2138	99.1	112533	165.1
256	37622	14473	91342	201.1	1674	126.5	93016	199.7
384	25082	9649	67133	273.6	2076	102.0	69209	268.4
512	18811	7237	54377	337.8	2148	98.6	56525	328.7
768	12541	4824	38244	480.3	2702	78.4	40946	453.7
1024	9406	3618	29831	615.7	3077	68.8	32908	564.6

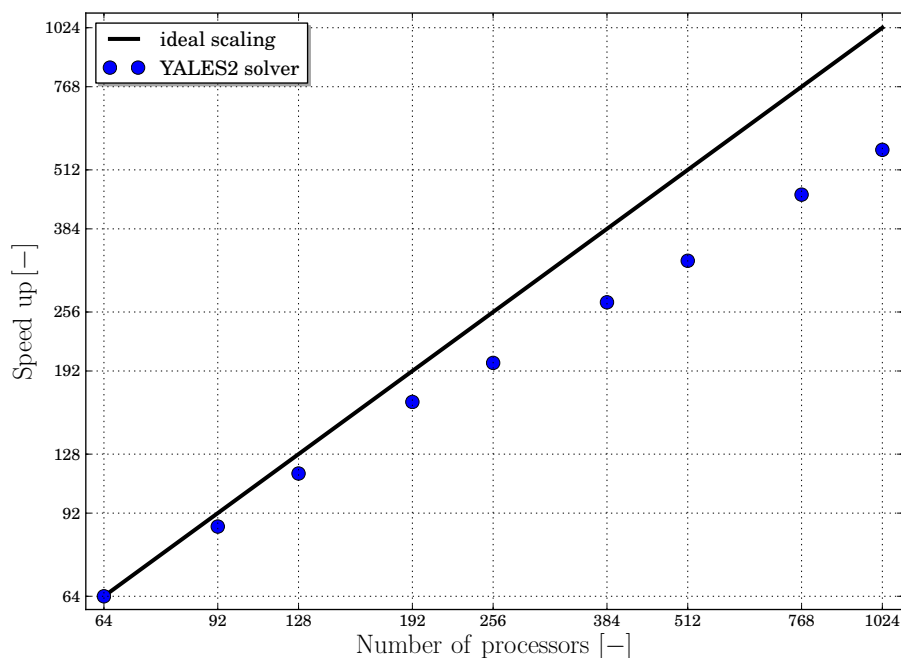


FIGURE 3.23: Courbe de speed-up obtenue sur le cas du lit fluidisé de Birmingham.

des préconisations. Globalement, sur 1024 processeurs, le solveur complet se maintient à un speed-up de 55% de sa valeur idéale, ce qui est acceptable, et confirme le surcoût de l'avancement temporel des particules devant celui du fluide. Ce chiffre, assez éloigné de la valeur obtenue dans le cas factice (80%), témoigne de la difficulté d'obtenir de bonnes performances en dehors des cas idéaux. Dans les cas réalistes en effet, la distribution des particules sur les processeurs peut être extrêmement dispersée, notamment dans le cas des lits fluidisés. Les processeurs devant régulièrement se synchroniser lors des communications MPI parfois bloquantes, le processeur le plus densément peuplé vient souvent limiter l'ensemble des performances globales du code. On rappelle que les valeurs $N_p/proc$ du tableau 3.4 sont toujours des moyennes. La dispersion des particules sera quantifiée dans la section suivante. La courbe de speed-up globale obtenue est tracée sur la figure 3.23.

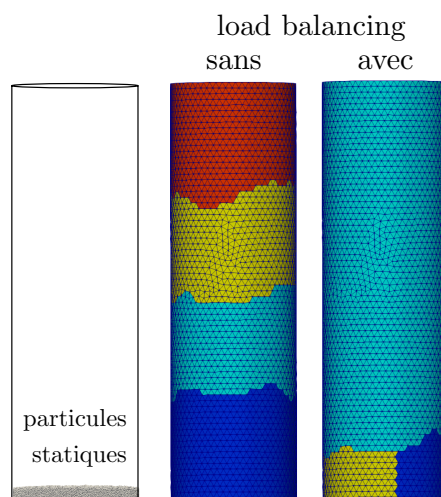


FIGURE 3.24: Configuration cylindrique élémentaire. Les particules sont statiques au fond du cylindre. Le partitionnement classique sur quatre processeurs, ici colorés, correspond au cas sans répartition de charge (load balancing). Dans ce cas, la phase solide entière est localisée dans le domaine de calcul d'un unique processeur. À droite, le cas avec load balancing montre que la charge solide est maintenant répartie sur trois processeurs (le dernier étant caché derrière).

3.4 Répartition dynamique de charge

3.4.1 Le problème de la répartition de charge

Il n'est plus à démontrer que dans nombre de simulations au formalisme DEM-CFD, le coût de calcul est largement dominé par la modélisation de la phase solide. L'identification des partenaires potentiels de collision, le traitement des parois complexes, et le calcul des forces de contact, sont des étapes particulièrement coûteuses. Ce constat s'affirme notamment en raison du fait que les outils de partitionnement de maillage classiques, dont le rôle est de procéder à la répartition du domaine de calcul sur autant de processeurs que souhaité, ne prennent pas en compte la localisation de la phase solide. À la place, les critères de répartition fréquemment rencontrés se basent sur :

- la répartition du nombre d'éléments de maillage, afin que chaque processeur se voit attribué un nombre identique (dans la mesure du possible) de cellules,
- la minimisation de la quantité d'interface entre domaines de processeurs (en anglais "edge cut"), afin de limiter le surcoût lié aux communications sur la grille eulérienne, qui font intervenir les noeuds situés de part et d'autres des interfaces.

Ces critères sont donc uniquement basés sur les caractéristiques du maillage, et sont capitaux dans les simulations de CFD classiques. Ils sont néanmoins insuffisants pour assurer de bonnes performances dès lors qu'une phase solide, donc très coûteuse dans le formalisme DEM, est localisée dans une zone particulière du domaine de calcul. Un cas pathologique est identifié sur la figure 3.24.

Il s'agit du cas fictif d'un cylindre dans lequel un million de particules sont statiques dans la partie basse du cylindre. On montre sur cette figure le partitionnement de maillage sur quatre processeurs classique obtenu par application des deux critères sus-mentionnés. Dans un cas sans fluide, la modélisation de la phase solide représente à elle seule la totalité du coût de calcul, cependant elle n'est localisée que sur un processeur. Les trois autres sont donc dans ce cas inutiles, et passent leur temps à attendre le dernier. Le temps CPU nécessaire au calcul est ainsi identique à la même configuration lancée de façon

séquentielle, et 75% des ressources sont gâchées. Au contraire, on montre aussi sur cette figure qu'un autre partitionnement, prenant cette fois-ci en considération la présence des particules, permettrait de les répartir sur trois processeurs, tandis que le quatrième reste vide. On s'attend alors à ce que le temps CPU nécessaire au calcul soit trois fois plus petit. Par contraste, on s'aperçoit alors que la prise en compte de la présence des particules viole au minimum le premier des deux critères de partitionnement classiques. Par exemple, le processeur ne contenant aucune particule possède maintenant la quasi-totalité des mailles du domaine. Par conséquent, ceci nuit obligatoirement aux performances de la partie fluide du solveur dans une simulation diphasique.

Il s'agit alors de trouver un équilibre dans le partitionnement permettant de réduire le coût de la phase solide tout en maintenant un coût le plus bas possible de la phase fluide. La difficulté réside dans le fait que cet équilibre dépend du cas de calcul considéré : nombre de mailles et nombre de particules, répartition de ces dernières, géométrie, simulation isotherme ou anisotherme/réactive (car le coût de la phase fluide en dépend grandement), nombre de processeurs employés, etc. De plus, même si dans certains cas une répartition statique de la charge solide peut s'avérer suffisante pour assurer des performances convenables, une répartition dynamique, c'est-à-dire pouvant être modifiée en cours de calcul, peut être plus adaptée au cas des lits fluidisés, qui sont des systèmes fortement instationnaires.

3.4.2 Première écriture d'une fonction de coût pour le partitionnement

Les possibilités pour répartir au mieux le coût de la phase solide peuvent revêtir diverses formes. La première option envisageable consiste à conserver le partitionnement classique, et de répartir seulement le calcul des termes les plus coûteux entre les processeurs. Cette technique permet de ne pas avoir à redéfinir les domaines de calcul des processeurs, et donc de ne pas avoir à relocaliser les particules, par exemple. Elle est mise en oeuvre dans le code YALES2 pour le calcul des termes sources des espèces chimiques, qui présente une forte intensité computationnelle. En effet, dans ce cas particulier le temps d'échange des données est petit par rapport au coût des opérations flottantes. Elle reste difficilement applicable dans le formalisme DEM, car l'ensemble des étapes de calcul propre à l'avancement temporel des particules nécessite un nombre très importants d'accès mémoire. Il serait alors requis de communiquer une grande quantité d'informations relatives aux particules pour être capable de calculer, par exemple, les termes de collision sur un processeur distant. Ainsi, le temps d'échange entre les processeurs serait plus important, et celui-ci ne peut pas être compensé par davantage de CPU.

C'est pourquoi dans cette étude, une seconde option consistant à modifier le partitionnement de façon à effectuer une meilleure répartition de charge (en anglais "load balancing") a été préférée. L'outil de partitionnement de maillage de la librairie METIS [155] permet d'attribuer des poids personnalisables à des groupes de cellules, qui serviront à les déplacer d'un processeur à l'autre, avec pour objectif d'équilibrer les poids totaux sur chaque processeur. Ces poids sont nuls dans le cas d'un partitionnement classique, et sont calculés grâce à une fonction de coût pour le load balancing. Dans le cas où plusieurs fonctions de coût indépendantes peuvent être définies, on parle de partitionnement double contrainte. Dans YALES2, ces poids sont attribués aux ELGRPs décrits dans la section 3.2.1 et sont uniques (partitionnement monocontrainte). Leur calcul est détaillé dans cette section. La librairie METIS [155] se charge alors de construire un graphe des ELGRPs, et de redéfinir les contours des domaines de calcul des processeurs en y ajoutant ou soustrayant un ou plusieurs ELGRP(s). Finalement, cette opération ne modifie ni le

maillage, ni le nombre total d'ELGRPs, ni celui des processeurs. À noter que d'autres bibliothèques telles que SCOTCH [229] permettent de réaliser et de personnaliser le partitionnement de maillages non-structurés.

La fonction de coût définissant les poids attribués à chaque ELGRP doit être définie. Idéalement, elle peut résulter d'une estimation du coût CPU effectif de la phase solide au sein de chaque ELGRP. Il est cependant non-trivial d'estimer ce coût, car celui-ci dépend de la topologie locale de l'écoulement : à nombre égal de particules, le coût de la partie DEM du code sera plus élevé en présence d'une zone densément peuplée, en raison des nombreux calculs de forces de collision. Il en va de même pour les particules qui sont proches de la paroi, car celles-ci doivent être traitées par l'algorithme de collisions décrit dans la section 2.3, et sont donc plus coûteuses. Au contraire, si l'écoulement est localement dilué, avec un libre parcours moyen élevé, le coût de la partie DEM tend vers celui d'un code lagrangien classique réalisant le simple transport des particules.

Finalement, un premier choix est fait de ne construire la fonction de coût qu'à partir de la quantité de particules localisées dans chaque ELGRP. Afin de ne pas occulter totalement la contrainte native sur le nombre de cellules par processeur, la fonction de coût prend également ce dernier paramètre en compte. En notant $\text{weight1}(\text{ELGRP})$ le poids attribué à un ELGRP suivant cette contrainte, $N_c(\text{ELGRP})$ son nombre de cellules et $N_p(\text{ELGRP})$ son nombre de particules, on écrit :

$$\text{weight1}(\text{ELGRP}) = N_c(\text{ELGRP}) \times \text{elem_weight} + N_p(\text{ELGRP}) \times \text{pt_weight}. \quad (3.9)$$

Les grandeurs elem_weight et pt_weight correspondent respectivement aux poids élémentaires d'une cellule de maillage et d'une particule. Le poids elem_weight étant fixé à une valeur unitaire, le choix réside dans la valeur de pt_weight , qui peut *a priori* prendre n'importe quelle valeur dans l'intervalle $[0; +\infty]$. La valeur de pt_weight revient à une estimation du coût relatif des particules par rapport aux cellules fluides.

Une application rudimentaire est visible sur la figure 3.25 montrant le cas de la vidange du sablier, qui sera étudié dans la section 5.1. À un instant donné de la simulation, lancée sur 10 processeurs, on compare les distributions de particules par processeur avant et après une étape de load balancing utilisant la fonction de coût de l'expression 3.9. Avant l'étape de load balancing, on observe une forte dispersion du nombre de particules par processeur, allant de 0 (processeur vide) à 32% (processeur contenant un tiers des particules). Après load balancing avec $\text{pt_weight}=2$, le nombre de particules par processeur est contenu entre 4 et 14%, se resserrant autour de la moyenne idéale de 10%. Le processeur le plus chargé en particules passe donc de 1/3 à 1/7 des particules, ce qui laisse entrevoir un gain de temps légèrement supérieur à 2, le fluide n'étant pas modélisé dans cette simulation. Si l'on étudie sur le même cas l'influence de la valeur de pt_weight , on remarque que son augmentation permet de se rapprocher peu à peu de la répartition idéale. Comme il a été dit précédemment, dans les cas comportant effectivement une phase fluide, augmenter la valeur de pt_weight ne signifie pas forcément une amélioration monotone des performances globales du solveur, car en améliorant la répartition des particules, on dégrade la répartition des cellules.

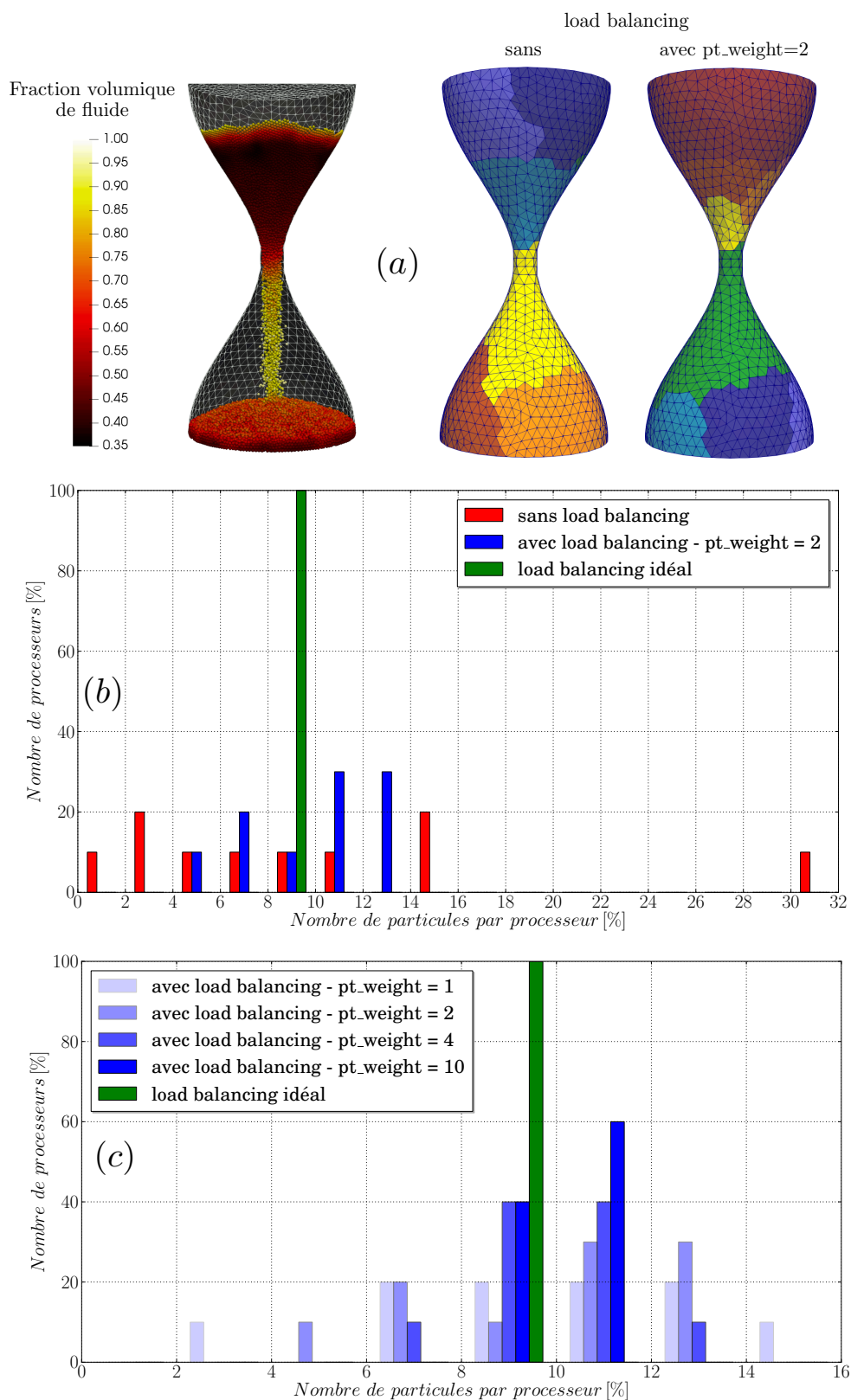


FIGURE 3.25: (a) À gauche, position instantanée des particules. À droite, domaine de calcul des 10 processeurs ; obtenus sans puis avec load balancing, avec une fonction de coût dépendant uniquement de la quantité de particules par processeur. (b) distribution du nombre de particules (en %) par processeur dans les cas sans load balancing et avec load balancing pour `pt_weight = 2`. Le load balancing idéal correspond à un nombre identique de particules sur chaque processeur. La taille des classes est de 2% du nombre total de particules. (c) Influence de `pt_weight` sur la distribution de particules.

3.4.3 Seconde écriture d'une fonction de coût pour le partitionnement

Contrairement au cas du sablier comportant deux principales zones d'accumulation des particules (au-dessus de l'orifice, puis au fond du sablier), dans la plupart des lits fluidisés denses, les particules résident en moyenne dans la partie basse du réacteur. Dans la configuration du lit fluidisé de Birmingham, étudiée dans la section 5.4 il a été observé que près de 60% des processeurs ne contiennent aucune particule, et ce durant la totalité d'une simulation, sans répartition de charge. Lors de l'application de la contrainte décrite précédemment (voir section 3.4.2) sur cette configuration, il peut s'avérer difficile de trouver une valeur adéquate pour `pt_weight`, car en l'augmentant, on force les processeurs initialement situés dans la partie haute du réacteur à "venir chercher des particules" situées dans sa partie basse. Il peut en résulter des domaines de processeurs aux formes allongées, plutôt que compactes, ce qui peut provoquer une baisse des performances globales du solveur. Celle-ci est attribuable à l'augmentation drastique de la quantité d'interfaces, mais aussi à l'augmentation de la dispersion du nombre de cellules par processeur, qui vient gêner la résolution du système linéaire lors de l'étape de correction de la vitesse (voir section 2.6.2).

On peut alors imaginer une seconde fonction de coût qui consiste à attribuer à la zone dense située sous la hauteur de lit un maximum de processeurs. Les premiers tests menés sur la configuration de Birmingham ont montré que réserver la zone au-dessus de la hauteur de lit à un unique processeur ne permettait pas d'améliorer les performances de calcul, là encore pour des raisons de pénalisation du fluide, ce processeur se voyant allouer un nombre très important de mailles. Il s'ensuit qu'il est nécessaire de viser une certaine proportion de processeurs pour décrire la zone dense du lit. Cette proportion est cas-dépendante. Sur la configuration de Birmingham, il a été observé que les meilleurs gains étaient obtenus pour une proportion 85 – 15 : 85% des processeurs sont attribués à la zone située sous la hauteur de lit, et 15% à la zone située au-dessus. La hauteur de lit est calculée comme la hauteur du 95ème centile de particules. Puisqu'il n'est pas possible de prescrire de façon explicite cette proportion à la librairie METIS, l'objectif est de lui fournir des poids associés aux ELGRPs calculés de telle façon que le partitionnement final correspondra à la proportion souhaitée. On note le nombre total de processeurs utilisés pour le calcul `Nprocs`. On note `low_prop` la proportion de processeurs que l'on souhaite attribuer à la zone située sous la hauteur de lit, et `Nlow_procs = Nprocs × low_prop` le nombre de processeurs équivalent. On note encore respectivement `Nlow_elgrps` et `Nhigh_elgrps` le nombre d'ELGRPs situés en-dessous et au-dessus de la hauteur de lit, et `Nelgrps` leur nombre total. La hauteur de lit est notée h_{bed} . Le calcul des poids de chaque ELGRP pour cette nouvelle contrainte basée sur la hauteur de lit, noté `weight2(ELGRP)`, s'écrit alors :

$$\text{weight2(ELGRP)} = \begin{cases} \frac{N_{\text{high_elgrps}}}{N_{\text{procs}} - N_{\text{low_procs}}} & \text{si ELGRP au-dessus de } h_{bed}, \\ \frac{N_{\text{low_elgrps}}}{N_{\text{low_procs}}} & \text{si ELGRP en-dessous de } h_{bed}. \end{cases} \quad (3.10)$$

La figure 3.26 montre une vue de côté du lit fluidisé de Birmingham et compare un partitionnement classique avec un partitionnement issu de la contrainte 3.10 sur la hauteur de lit, tous deux obtenus sur 192 processeurs.

L'équation 3.10 montre que le poids attribué à chaque ELGRP ne dépend que de sa position vis-à-vis de la hauteur de lit. En réalité, de meilleurs gains (vérifiés sur la configuration de Birmingham)

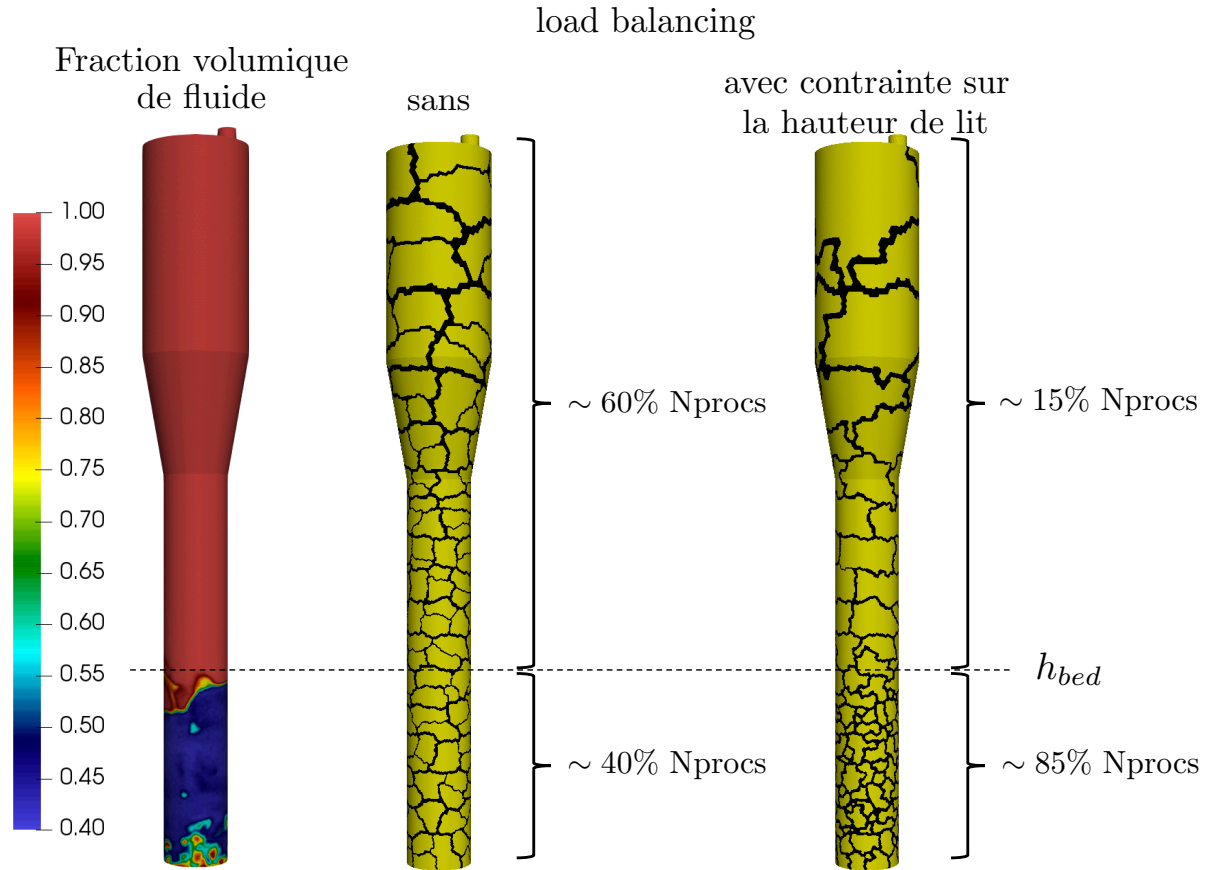


FIGURE 3.26: Vues de côté du lit fluidisé de Birmingham. À gauche, champ instantané de fraction volumique de fluide. À droite, contour des domaines attribués à chaque processeur pour des partitionnements sur 192 processeurs ; obtenus sans load balancing (partitionnement classique) et avec load balancing, où environ 85% des processeurs sont maintenant utilisés dans la zone dense du lit.

peuvent être obtenus lorsque les deux contraintes décrites ici ; la première sur le nombre de particules (équation 3.9), la seconde sur la hauteur de lit (équation 3.10), sont utilisées conjointement. Il s'agit alors, pour les processeurs situés sous la hauteur de lit, dont la proportion est personnalisable, d'être répartis selon la quantité locale de particules, ce suivant le pt_weight de l'équation 3.9. Ici, $low_elgrps_weights$ représente le poids total des ELGRPs situés en-dessous de la hauteur de lit, calculée comme la somme des $weight1(ELGRP)$ correspondants. Cette double contrainte est décrite par le calcul de poids suivant :

$$weight2(ELGRP) = \begin{cases} \frac{N_{high_elgrps}}{N_{procs} - N_{low_procs}} & \text{si ELGRP au-dessus de } h_{bed}, \\ \frac{N_{low_elgrps}}{N_{low_procs}} \times \frac{weight1(ELGRP)}{low_elgrps_weights} & \text{si ELGRP en-dessous de } h_{bed}. \end{cases} \quad (3.11)$$

Ce calcul correspond simplement à une pondération des poids des ELGRPs situés sous h_{bed} suivant la première contrainte. L'implémentation choisie dans le code YALES2 permet de piloter indépendamment les deux contraintes décrites par les équations 3.9 et 3.10. Il est également possible de désactiver l'une des deux contraintes afin de couvrir un maximum de configurations.

3.4.4 Caractère dynamique de l'algorithme

Les particules se déplaçant durant une simulation, une version dynamique du load balancing suivant les contraintes décrites dans les sections 3.4.2 et 3.4.3 est implementée dans le code YALES2. Elle consiste à effectuer plusieurs étapes de load balancing au cours du calcul. Il est possible de fournir pour ce besoin une fréquence basée sur le nombre d'itérations ou sur le temps physique à laquelle réaliser ces opérations. À chaque étape de load balancing, de nombreuses opérations visant à prendre en compte le nouveau partitionnement sont effectuées sur la grille eulérienne, mais aussi pour les particules : il faut par exemple recréer les PTEXTCOMMs décrits dans la section 3.2.2, les BFGs décrits dans la section 2.3.3, réallouer la mémoire si besoin, etc. Afin de limiter ce surcoût, l'algorithme implémenté est capable de juger si un nouveau load balancing est réellement nécessaire ou non : à chaque itération ou temps physique correspondant à la fréquence prescrite, celui-ci vérifie un ensemble de critères qui peuvent aboutir à un nouveau partitionnement, ou bien juger que le partitionnement actuel est suffisant. Par exemple, si l'utilisateur prescrit une fréquence de load balancing trop élevée comparée à la dynamique de l'écoulement, celle-ci est en réalité réduite. La fréquence prescrite correspond ainsi à une fréquence maximum. Les critères utilisés pour juger de la nécessité d'un nouveau load balancing sont les suivants :

- Si la hauteur de lit actuelle diffère de plus de 10% de la dernière hauteur de lit calculée (lors du dernier load balancing), on effectue un nouveau load balancing. C'est le critère sur la seconde contrainte.
- Sinon, on calcule le poids moyen actuel des processeurs situés sous la hauteur de lit selon la première contrainte (équation 3.9). Le poids équivalent d'un processeur se calcule comme la somme des poids de ses ELGRPs constitutifs. On calcule alors le nombre de processeurs dont le poids diffère de plus de 50% du poids moyen de l'ensemble des processeurs situés sous h_{bed} . Si plus de 5% de ces processeurs sont dans ce cas, on effectue un nouveau load balancing. Ceci correspond à un critère sur la première contrainte pour les processeurs situés sous h_{bed} .
- Si les deux premiers critères ne sont pas vérifiés, le partitionnement actuel est conservé.

Le second critère de cette liste est basé sur le poids des processeurs, car c'est celui-ci qui dicte la performance. Il est possible que les poids de ses ELGRPs constitutifs ait varié mais que celui du processeur reste quasiment inchangé. Le poids moyen utilisé correspond à un poids théorique idéal, puisqu'il correspond à une répartition identique du nombre d'éléments et de particules sur chaque processeur localisé sous h_{bed} . L'ensemble des critères utilisés est totalement empirique, et est basé sur de nombreux tests effectués sur la configuration de Birmingham. Cette configuration est assez typique des lits fluidisés denses utilisés dans les laboratoires à l'échelle pilote, ce qui renforce la confiance accordée à ces choix.

3.4.5 Stabilité de l'algorithme

L'utilisation de critères empiriques pour le load balancing dynamique rend celui-ci sujet à des comportements déviants, telle que l'impossibilité de parvenir à un partitionnement respectant les contraintes fournies par l'utilisateur. Il est alors possible que la simulation s'arrête au moment de la construction du graphe des ELGRPs par la librairie METIS. Durant les tests menés sur la configuration de Birmingham, il a pu être remarqué que ces arrêts étaient provoqués par des contraintes fournies trop fortes, qui conduisaient à l'impossibilité d'allouer des ELGRPs à certains processeurs. Un certain nombre d'entre eux se trouvaient alors sans domaine de calcul alloué.

Afin d'assurer que chaque processeur se voit bien confier au moins un ELGRP, une sécurité est ajoutée au code : partant d'un poids élémentaire de particules associé à la première contrainte `pt_weight`, si au moins un processeur se trouve vide après le load balancing, une nouvelle tentative est effectuée en abaissant `pt_weight` de 10%. En cas d'échec, celle-ci est encore diminuée, jusqu'à parvenir à une situation sans processeur vide. Si `pt_weight` se trouve à 0 (la seconde contrainte sur la hauteur de lit est alors toujours active) sans que cet objectif soit rempli, l'ensemble des contraintes est levé. Le nouveau partitionnement correspond alors au partitionnement classique obtenu par application des contraintes décrites dans la section 3.4.1. Si au contraire abaisser la valeur de `pt_weight` a permis de parvenir à l'équilibre souhaité, sa valeur est augmentée de 10% pour la prochaine étape de load balancing. La valeur de `pt_weight` ne peut augmenter au-delà de 1 par ce procédé.

La figure 3.27 révèle le temps physique atteint pour des simulations de 24h sur le lit fluidisé de Birmingham sur divers nombres de processeurs sans utilisation du load balancing, et avec utilisation du load balancing dynamique suivant la double contrainte (équation 3.11). Pour chacune de ces simulations, le maillage est identique. On peut noter que les performances obtenues sur 1024 processeurs sans load balancing sont équivalentes à celles obtenues sur 384 processeurs lorsque le load balancing dynamique est utilisé. Le gain fourni par l'utilisation du load balancing dynamique est supérieur à 2 jusqu'à 384 processeurs. À partir de 512 processeurs, ce gain décroît jusqu'à atteindre 1.5 sur 1024 processeurs. Cette baisse du gain est due à une diminution automatique de la valeur de `pt_weight` afin d'assurer la stabilité du processus de load balancing. En effet, pour un nombre de processeurs en augmentation il devient de plus en plus difficile de respecter les contraintes fournies par l'utilisateur, car ceux-ci contiennent en moyenne de moins en moins d'ELGRPs. Cela montre l'utilité de l'amélioration apportée à la stabilité du processus de load balancing dynamique, sans quoi ces simulations n'auraient pas pu tourner. L'ensemble de ces simulations effectuées sur la configuration de Birmingham montre qu'en moyenne environ 10–15 étapes de load balancing sont effectuées par seconde de temps physique, alors que la fréquence prescrite correspondait à 80 étapes de load balancing par seconde de temps physique. L'algorithme a donc jugé qu'environ 85% des opérations étaient inutiles compte tenu des critères décrits dans la section 3.4.4. Le surcoût maximum engendré par les modifications successives du partitionnement était équivalent à 5% du temps total passé dans la boucle temporelle.

La figure 3.28 illustre la distribution du nombre de particules par processeur dans les cas sans load balancing et avec load balancing dynamique double contrainte (prescriptions : 85% des processeurs sous la hauteur de lit et `pt_weight = 1`), moyennée sur 1s de temps physique. 256 processeurs ont été utilisés pour ce test. La distribution du cas sans load balancing présente là encore une forte dispersion. Plus de 60% des processeurs ne possèdent en moyenne quasiment aucune particule, tandis que les plus chargés, peu nombreux, en possèdent jusqu'à 1.7%, soit environ 160000. L'application de la méthodologie de load balancing dynamique permet de resserrer la distribution autour du load balancing idéal : près de 70% des processeurs possèdent environ 0.45% des particules, soit environ 45000. Les processeurs les plus chargés possèdent environ 53000 particules, ce qui représente trois fois moins de particules que le processeur le plus chargé sans load balancing. Au lieu d'un facteur 3, la figure 3.27 révèle pour le cas sur 256 processeurs que le gain obtenu par application du load balancing dynamique n'est que de 2. Cela est en grande majorité dû à la dégradation des performances de la partie fluide : les communications point-à-point sur la grille eulérienne mettant en jeu les communicateurs interne et externe voient leur coût augmenter de 55%, et la résolution de l'équation de Poisson de 150%, par utilisation du load balancing

dynamique.

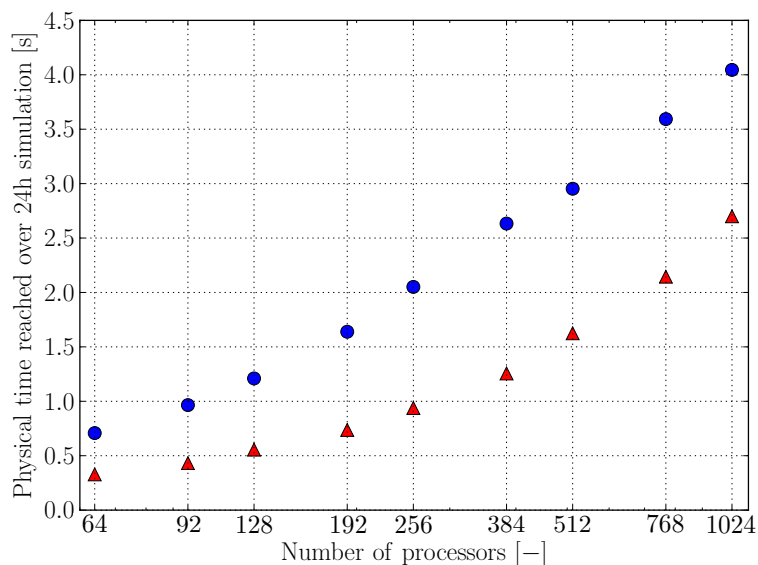


FIGURE 3.27: Temps physique atteint pour des simulations de 24h sur le lit fluidisé de Birmingham sur divers nombres de processeurs sans utilisation du load balancing (\blacktriangle), et avec utilisation du load balancing suivant la double contrainte (\bullet). Pour ces tests, le pas de temps particulaire maximum était de $\Delta t_p = T_C/6$.

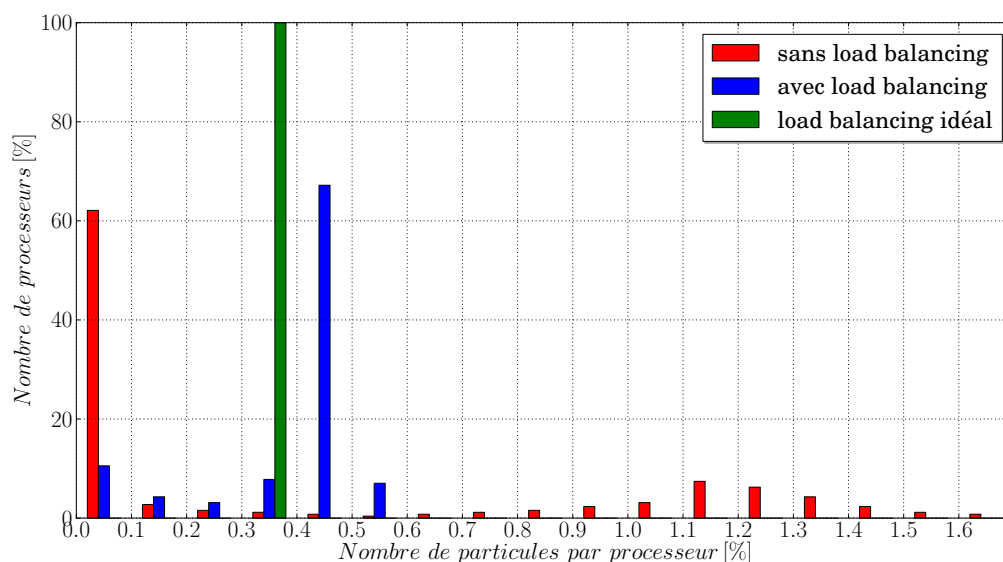


FIGURE 3.28: Distribution du nombre de particules (en %) par processeur dans les cas sans load balancing et avec load balancing double contrainte (prescriptions : 85% des processeurs sous la hauteur de lit et $pt_weight = 1$), moyennée sur 1s de temps physique. Le test est mené sur le cas de Birmingham lancé sur 256 processeurs. Le load balancing idéal, correspondant à un nombre identique de particules sur chaque processeur, est également indiqué. La taille des classes est de 0.1% du nombre total de particules, soit ~ 10000 particules.

Chapitre 4

Vérifications

Ce chapitre décrit différentes vérifications utilisées pour valider l'implémentation du code, au travers l'étude de cas simples fictifs secs, puis avec une phase fluide (cas dits couplés), dans des configurations isothermes et anisothermes. La méthode de fast marching utilisée pour la création de halos de cellules autour des processeurs est également étudiée.

Sommaire

4.1	Cas secs	167
4.1.1	Comparaisons avec le modèle de sphères dures	167
4.1.2	Comparaisons expérimentales	170
4.2	Cas couplés isothermes	172
4.2.1	Perte de charge en lit fixe	172
4.2.2	Perte de charge en lit fluidisé	172
4.2.3	Sphère en rotation dans un gaz	174
4.3	Cas mixtes anisothermes	175
4.3.1	Cas couplé instationnaire sans convection	175
4.3.2	Cas stationnaire avec convection	184
4.3.3	Cas couplé instationnaire avec convection	186
4.4	Méthode de fast marching pour la création de halo	194
4.4.1	Analyse d'un cas particulier	196
4.4.2	Influence de la taille des listes	199
4.4.3	Influence du nombre de marqueurs	205
4.4.4	Conclusion de l'étude paramétrique.	209

4.1 Cas secs

Cette première partie a pour but de vérifier l'implémentation du code en cas dit "sec", c'est-à-dire sans phase fluide (dans le vide). L'objectif sous-jacent est de décrire l'erreur inhérente au choix du modèle collisionnel des sphères molles. Le premier cas étudié consiste en une comparaison avec un modèle sphères dures. Le second se base sur une expérimentation à laquelle s'est déjà confronté un autre code DEM basé sur les mêmes hypothèses que celui développé dans ces travaux, mais évoluant dans un cadre structuré.

4.1.1 Comparaisons avec le modèle de sphères dures

On s'intéresse d'abord à la comparaison du modèle sphères molles utilisé dans ces travaux avec un modèle sphères dures décrit par Sakiz [254] et trouvant son origine dans les travaux de Walton [315]. Le cas de comparaison, schématisé sur la figure 4.1, consiste en un rebond d'une particule sur une paroi pour différentes valeurs des vitesses de translation et de rotation pré-collisionnelles. On rappelle que dans le cadre sphères dures, la collision est instantanée. La vitesse de la particule, sa composante tangentielle, sa vitesse de rotation et son angle d'impact pré-collisionnelles sont respectivement notés \mathbf{u}_p^- , $\mathbf{u}_{p,t}^-$, ω_p^- et α^- . Les grandeurs post-collisionnelles sont indicées $^+$.

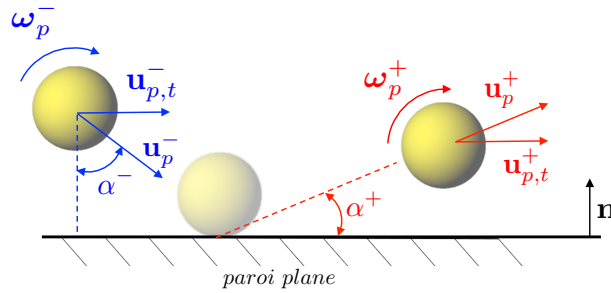


FIGURE 4.1: Schéma annoté du test d'une particule heurtant une plaque plane. La vitesse de la particule, sa composante tangentielle, sa vitesse de rotation et son angle d'impact pré-collisionnelles sont respectivement notés \mathbf{u}_p^- , $\mathbf{u}_{p,t}^-$, ω_p^- et α^- . Les grandeurs post-collisionnelles sont indicées $^+$. \mathbf{n} est le vecteur normal à la paroi.

Dans le cas d'une collision particule-paroi, le modèle sphères dures donne les expressions suivantes [254] pour exprimer les grandeurs post-collision en fonction du vecteur impulsion \mathbf{J} et des grandeurs pré-collision. On a pour la vitesse de translation :

$$\mathbf{u}_p^+ = \mathbf{u}_p^- - \frac{1}{m_p} \mathbf{J}, \quad (4.1)$$

et celle de rotation :

$$\omega_p^+ = \omega_p^- + \frac{1}{I_p} \frac{d_p}{2} \mathbf{n} \wedge \mathbf{J}. \quad (4.2)$$

L'expression de la vitesse de glissement au point de contact est :

$$\mathbf{u}^g = \mathbf{u}_{p,t}^- - \frac{1}{2} d_p \omega_p^- \wedge \mathbf{n}, \quad (4.3)$$

pour laquelle :

$$\mathbf{u}_{p,t}^- = \mathbf{u}_p^- - (\mathbf{u}_p^- \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n}. \quad (4.4)$$

TABLE 4.1: Paramètres numériques utilisés pour les simulations.

Paramètre fixé	Valeur	Unité
d_p	0.5	[mm]
ρ_p	918	[kg.m ⁻³]
k_n	500	[N.m ⁻¹]
e_n	0.9	[-]
e_t (pour le modèle sphères dures)	0.8	[-]
γ_s (pour le modèle sphères molles de Haff & Werner)	1.0	[kg.s ⁻¹]
μ_c	0.2	[-]
$u_{p,n}^-$	-0.5	[m.s ⁻¹]
Δt_p	$T_C/15 \sim 1.6 \times 10^{-6}$	[s]

Le calcul du vecteur impulsion \mathbf{J} s'exprime de la façon suivante :

$$\mathbf{J} = \begin{cases} m_p(1 + e_n)(\mathbf{u}_p^- \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} + \frac{2}{7}m_p(1 + e_t)\mathbf{u}^g & \text{si } \|\mathbf{u}^g\| < \frac{7}{2} \frac{\mu_c(1 + e_n)}{1 + e_t} |\mathbf{u}_p^- \cdot \mathbf{n}| \\ m_p(1 + e_n)(\mathbf{u}_p^- \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} - \mu_c m_p(1 + e_n)(\mathbf{u}_p^- \cdot \mathbf{n}) \frac{\mathbf{u}^g}{\|\mathbf{u}^g\|} & \text{sinon.} \end{cases} \quad (4.5)$$

La première condition correspond au cas sans glissement, et la seconde au cas avec glissement. Concrètement, si l'impulsion nécessaire pour un rebond sans glissement est trop forte, le glissement apparaît [254]. Ce modèle a été étudié et validé sur une large gamme d'incidence (voir les références citées dans les travaux de Sakiz [254]), et constitue naturellement la référence pour ce test.

L'ensemble des paramètres numériques utilisés pour ce test est réuni au sein du tableau 4.1. La vitesse normale à la paroi est initialisée à -0.5m.s^{-1} , et le coefficient de restitution normal est fixé à 0.9. Durant tous les tests, la valeur prédite de la vitesse normale post-collision était constante et valait 0.4498m.s^{-1} (valeur analytique : 0.45m.s^{-1}), ainsi ces valeurs ne figurent pas parmi les résultats. Tous les tests ont été réalisés dans un plan unique défini par le vecteur vitesse initial et orthogonal à la paroi. Seule la composante de la vitesse de rotation selon l'axe z (orthogonale au plan de collision) a été investiguée, par conséquent l'indice z n'apparaît pas dans l'écriture de ω_p . De même, l'indice y est implicite dans l'écriture de $u_{p,t}$. La comparaison avec le modèle de sphères dures a nécessité de fixer un coefficient de restitution tangentiel e_t , ici à une valeur de 0.8. Ce coefficient n'est pas présent dans les modèles de collision testés dans YALES2, comme décrit dans la section 2.2.2. Le modèle de Haff & Werner fait cependant appel à un paramètre γ_s , dont la valeur a été fixée à 1kg.s^{-1} pour ces tests. Ce choix, *a priori* arbitraire puisque l'interprétation physique de γ_s reste floue [258], correspond à une valeur typique dans les travaux de Becker & Schwager [23], qui visaient à analyser ce modèle en détail. Le schéma numérique utilisé pour l'avancement en temps des particules était celui de Groot & Warren (voir section 2.6.1). La gravité est désactivée.

Les résultats obtenus sont présentés dans les tableaux 4.2 pour la caractérisation du régime de glissement, et 4.3 pour celle du régime de non-glissement. Dans ces deux tableaux sont présentées les colonnes correspondant :

- aux vitesses tangentielle et de rotation initiales $u_{p,t}^-$ et ω_p^- ,
- aux $u_{p,t}^+$ et ω_p^+ donnés par le modèle sphères dures décrit par les équations 4.1 et 4.2,

TABLE 4.2: Résultats obtenus pour différents contacts en condition de glissement.

sphères dures		YALES2 Coulomb				YALES2 Haff & Werner					
$u_{p,t}^-$ [m.s ⁻¹]	ω_p^- [s ⁻¹]	$u_{p,t}^+$ [m.s ⁻¹]	ω_p^+ [s ⁻¹]	$u_{p,t}^+$ [m.s ⁻¹]	err [%]	ω_p^+ [s ⁻¹]	err [%]	$u_{p,t}^+$ [m.s ⁻¹]	err [%]	ω_p^+ [s ⁻¹]	err [%]
0.8	10000	0.99	8100	0.99	0.0	8100	0	0.99	0.0	8100	0
0.8	5000	0.99	3100	0.93	6.2	3715	-20	0.93	6.5	3724	-20
0.8	1000	0.61	2900	0.64	-5.4	2572	11	0.65	-6.2	2567	12
0.8	0	0.61	1900	0.61	0.0	1900	0	0.61	0.0	1900	0
0.8	-5000	0.61	-3100	0.61	0.0	-3100	0	0.61	0.0	-3100	0
0.3	-5000	0.11	-3100	0.11	0.0	-3100	0	0.11	0.0	-3100	0
0.2	10000	0.39	8100	0.39	0.0	8100	0	0.39	0.0	8100	0
0.2	-5000	0.01	-3100	0.01	-0.4	-3100	0	0.01	-0.3	-3100	0
0.2	-10000	0.01	-8100	0.01	-0.4	-8100	0	0.01	-0.4	-8100	0
-0.1	10000	0.09	8100	0.1	0.0	8100	0	0.09	0.0	8100	0

TABLE 4.3: Résultats obtenus pour différents contacts en condition de non-glissement.

sphères dures		YALES2 Coulomb				YALES2 Haff & Werner					
$u_{p,t}^-$ [m.s ⁻¹]	ω_p^- [s ⁻¹]	$u_{p,t}^+$ [m.s ⁻¹]	ω_p^+ [s ⁻¹]	$u_{p,t}^+$ [m.s ⁻¹]	err [%]	ω_p^+ [s ⁻¹]	err [%]	$u_{p,t}^+$ [m.s ⁻¹]	err [%]	ω_p^+ [s ⁻¹]	err [%]
-0.1	1000	0.08	-800	0.00	100.3	2	100	0.00	102	14	98
-0.1	100	-0.04	-543	-0.06	-81.0	-254	53	-0.06	-81	-289	47
-0.2	-1000	-0.23	-743	-0.21	5.0	-856	-15	-0.21	5	-875	-18
-0.2	-2000	-0.35	-457	-0.29	19.2	-1136	-149	-0.28	20	-1145	-151
-0.3	-800	-0.25	-1314	-0.27	-9.0	-1091	17	-0.27	-9	-1084	18
-0.5	-1000	-0.37	-2286	-0.43	-15.4	-1715	25	-0.43	-16	-1736	24
-0.5	-2000	-0.50	-2000	-0.50	0.0	-2000	0	-0.50	0	-2000	0
-0.5	-3000	-0.63	-1714	-0.57	9.1	-2285	-33	-0.57	9	-2265	-32

- aux $u_{p,t}^+$ et ω_p^+ obtenues par le modèle de friction Coulombienne implémenté (voir équation 2.61), ainsi que leur erreur relative avec le modèle sphères dures.
- et aux $u_{p,t}^+$ et ω_p^+ obtenues par le modèle de friction tangentielle de Haff & Werner implémenté (voir équation 2.62), ainsi que leur erreur relative avec le modèle sphères dures.

L'erreur signée relative en % est calculée de la façon suivante sur une grandeur post-collision ϕ^+ :

$$\text{err} = \frac{\phi_{\text{sphères dures}}^+ - \phi_{\text{sphères molles}}^+}{\phi_{\text{sphères dures}}^+} \times 100, \quad (4.6)$$

où $\phi_{\text{sphères dures}}^+$ est la valeur de la donnée ϕ^+ rendue par le modèle de sphères dures, et $\phi_{\text{sphères molles}}^+$ est la valeur de la donnée ϕ^+ rendue par le modèle de sphères molles (modèle de friction coulombienne ou de Haff & Werner). Les chiffres relatifs aux vitesses tangentielles sont arrondis au centième, à leur erreur au dixième, et tous les autres sont arrondis à l'unité. Notons que par essence, les modèles de friction Coulombienne et de Haff & Werner ne sont pas capables de représenter les situations où e_t (coefficient

TABLE 4.4: Paramètres numériques issus de Di Renzo & Di Maio [82] utilisés pour les simulations.

Paramètre fixé	Valeur	Unité
d_p	5	[mm]
ρ_p	4000	[kg.m ⁻³]
k_n	1.72×10^7	[N.m ⁻¹]
e_n	1	[—]
μ_c	9.2×10^{-2}	[—]
$u_{p,n}^-$	-3.9	[m.s ⁻¹]
Δt_p	$T_C/850 \sim 1.0 \times 10^{-8}$	[s]

de restitution tangential) est négatif, ainsi seule une valeur positive de e_t a été testée.

À partir du tableau 4.2 récapitulant les erreurs en condition de glissement, on observe une erreur quasiment nulle par rapport au modèle sphères dures pour les deux modèles de friction testés en sphères molles. Seuls deux cas présentent une erreur $> 5\%$. Des erreurs beaucoup plus grandes apparaissent dans le tableau 4.3, qui une fois de plus sont très proches quel que soit le modèle de friction expérimenté en sphères molles. Ces erreurs sont de même nature et dûes au fait qu'en condition de non-glissement, pour $e_t > 0$, le modèle sphères dures prédit que la vitesse de glissement change de direction au cours du contact. Cette situation n'est pas représentable avec les modèles sphères molles implémentés, qui plutôt qu'inverser la direction de la vitesse de glissement, ne peuvent que la faire tendre vers 0. En effet, les valeurs de $u_{p,t}^+$ et ω_p^+ obtenues pour les modèles sphères molles dans le tableau 4.3 correspondent toutes à des valeurs nulles de \mathbf{u}^g post-collision (voir équation 4.3). L'inversion du signe de la vitesse de glissement au cours du contact peut aussi se produire en situation de glissement. C'est notamment le cas pour les contacts présentant une erreur $> 5\%$ dans le tableau 4.2. Ces limitations avaient été discutées par Schäfer *et al.* [258].

4.1.2 Comparaisons expérimentales

On reproduit ici les simulations et expériences menées par Di Renzo & Di Maio [82] consistant en un contact unique d'une particule avec une paroi plane pour différentes conditions de rebond. Les notations employées sont les mêmes que celles introduites sur la figure 4.1. Les paramètres numériques utilisés pour les simulations numériques réalisées avec YALES2 sont présentés dans le tableau 4.4. Seul le modèle de friction coulombienne a été testé. Le schéma numérique utilisé pour l'avancement en temps des particules était RK2 (voir section 2.6.1).

Parmi l'ensemble des résultats obtenus par Di Renzo & Di Maio [82], on représente sur la figure 4.2 ceux qui concernent, pour différents angles d'impact; l'angle de rebond α^+ (figure 4.2(a)), la vitesse angulaire ω_p^+ (figure 4.2(b)), et le coefficient de restitution tangential e_t (figure 4.2(c)) post-collision.

Les défauts du modèle de friction statique sont particulièrement visibles sur le graphique 4.2(c) présentant les comparaisons de coefficient de restitution tangential. On retrouve le fait que pour les petits angles d'impact ($\leq 30^\circ$), le modèle de friction statique sous-estime la force tangentielle en fournissant un coefficient de restitution tangential trop important, tandis que pour les très petits angles d'impact ($< 8^\circ$), il surestime la force tangentielle en fournissant un coefficient trop faible. Les mêmes résultats avaient été obtenus par Capecehatro [55] lors de simulations numériques effectuées avec le code NGA [81]. Ces

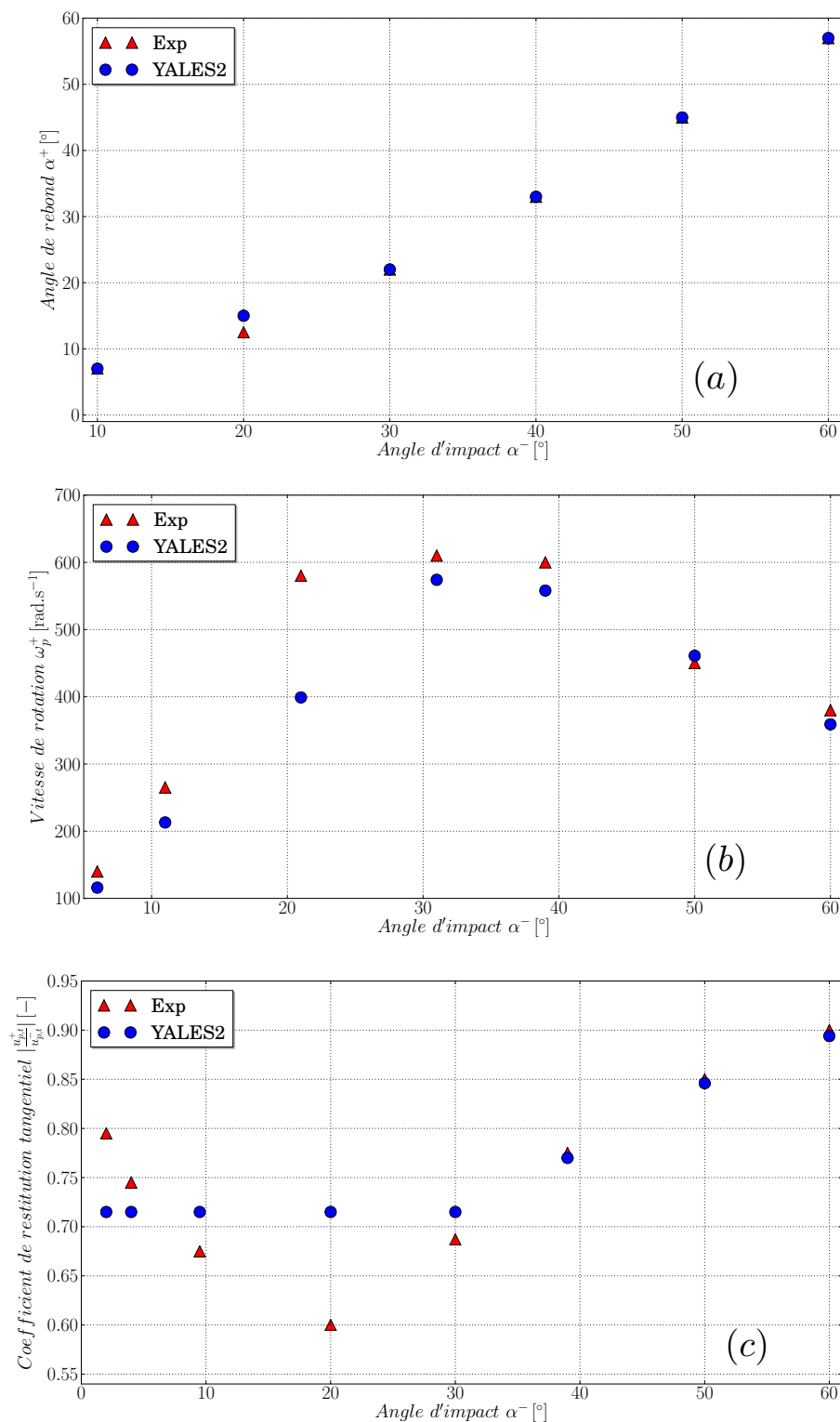


FIGURE 4.2: Comparaison des résultats entre l'expérience menée par Di Renzo & Di Maio [82] (\blacktriangle) et les simulations YALES2 (\bullet) utilisant le modèle de friction statique coulombienne. On observe pour différents angles d'impact ; l'angle de rebond (a), la vitesse angulaire (b), et le coefficient de restitution tangential (c) post-collision.

TABLE 4.5: Valeurs numériques utilisées pour la validation de la perte de charge en lit fixe.

Propriété fixée	Valeur	Unité
ρ	1.18	[kg.m ⁻³]
μ	1.8×10^{-5}	[Pa.s]
Condition limite pour les parois latérales	murs glissants	[-]

Propriété fixée	Valeur	Unité
d_p	0.002	[m]
ρ_p	1500	[kg.m ⁻³]
ε	0.476	[-]
H	0.40	[m]
N_p	320000	[-]

simulations utilisaient également le modèle de friction de Coulomb. Le modèle rudimentaire de friction statique apparaît malgré tout comme un bon compromis entre précision et coût de calcul.

4.2 Cas couplés isothermes

On s'intéresse ici à quelques validations du code dans des cas couplés (fluide + solide) isothermes.

4.2.1 Perte de charge en lit fixe

Premièrement, on utilise une configuration en lit fixe afin de vérifier la qualité de l'accord avec la corrélation d'Ergun donnant la perte de charge en fonction de la vitesse d'entrée du fluide et de la porosité. Physiquement, cette perte de charge est liée à la quantité de mouvement fluide-particules échangée, simplement modélisée par la traînée dans notre cas. Cette vérification permet donc de valider le couplage de quantité de mouvement entre les deux phases. Les paramètres utilisés pour les simulations mises en lumière ici sont présentés dans le tableau 4.5. Le test consistait en un empilement cubique de 320000 particules d'une hauteur de 40cm. La vitesse minimum de fluidisation issue de la relation d'Ergun (voir équation 1.21) est de 1.08m.s^{-1} .

Les résultats obtenus pour différentes vitesses d'entrée exprimées en terme de % de la vitesse minimum de fluidisation sont visibles sur la figure 4.3. L'accord obtenu est très bon, ce qui valide l'implémentation du couplage de quantité de mouvement fluide-particules.

4.2.2 Perte de charge en lit fluidisé

La qualité du couplage de quantité de mouvement fluide-particules est maintenant vérifiée sur une configuration de lit fluidisé. Les particules sont donc mobiles et la hauteur de lit variable. Les paramètres numériques utilisés sont détaillés dans le tableau 4.6.

Comme vu précédemment, la corrélation d'Ergun est valable pour un lit fixe, c'est-à-dire dans les régime où les forces exercées par le fluide ne sont pas suffisantes pour le soulever. Lorsque le poids du lit est équilibré par ces forces, soit pour $U_{in} = U_{mf}$, la perte de charge se stabilise à une valeur proche du poids théorique du lit. Les résultats sont visibles sur la figure 4.4 et montrent la perte de charge obtenue

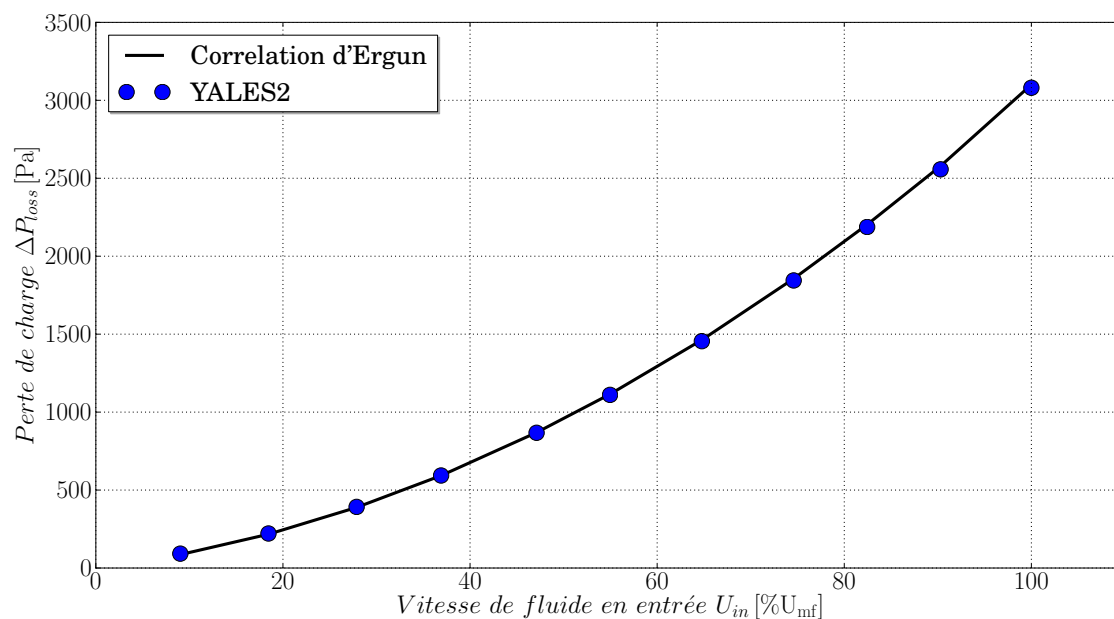


FIGURE 4.3: Comparaison des valeurs pour la perte de charge au travers un lit fixe prédites par la relation d'Ergun et obtenues par simulation numérique.

TABLE 4.6: Valeurs numériques utilisées pour la validation de la perte de charge en lit fluidisé.

Propriété fixée	Valeur	Unité
ρ	1.18	[kg.m ⁻³]
μ	1.8×10^{-5}	[Pa.s]
Condition limite	murs glissants	[-]

Propriété fixée	Valeur	Unité
d_p	0.5	[mm]
ρ_p	2000	[kg.m ⁻³]
N_p	10000	[-]
k_n	50	[N.m ⁻¹]
e_n	0.9	[-]
μ_c	0.1	[-]
Δt_p	$T_C/10$	[s]

par simulation numérique comparée à la perte de charge prédite par la relation d'Ergun pour quatre valeurs de fraction volumique de fluide très proches. En effet, on rappelle qu'une valeur unique de fraction volumique de fluide doit être entrée dans la corrélation d'Ergun pour donner une perte de charge, or dans un lit fluidisé cette valeur est fluctuante. De plus on a vu précédemment que les résultats donnés par la corrélation d'Ergun était très sensibles à la valeur de fraction volumique de fluide. On reproduit également sur la figure 4.4 la valeur de la vitesse minimum de fluidisation $U_{mf} \approx 0.18 \text{m.s}^{-1}$ prédite par la relation d'Ergun (voir équation 1.21, calculée pour $\varepsilon = 0.4$), ainsi que le poids théorique du lit en terme de perte de charge (voir équation 1.8).

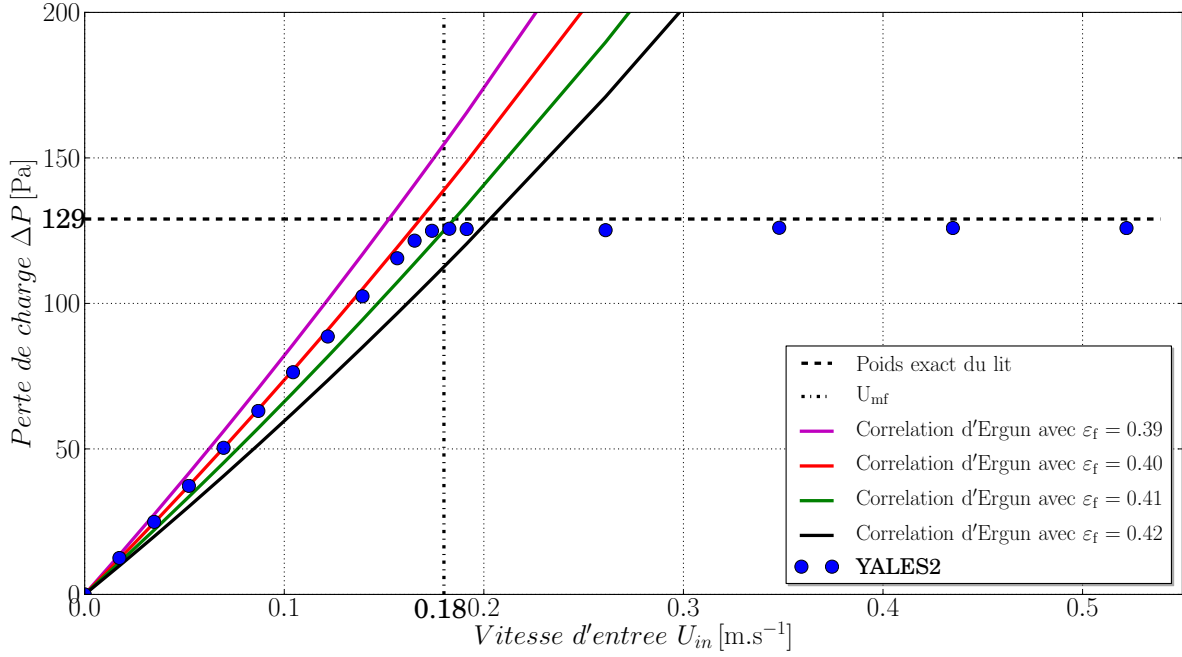


FIGURE 4.4: Comparaison des valeurs pour la perte de charge au travers un lit fluidisé prédites par la relation d'Ergun et obtenues par simulation numérique.

Les résultats obtenus montrent que la loi d'Ergun pour la perte de charge est bien suivie tant que le lit reste fixe (régime $U_{in} < U_{mf}$) pour des valeurs de fraction volumique de fluide correspondant à des empilements denses. Le lit commence à se fluidiser à une vitesse très proche de $U_{mf} \approx 0.18 \text{ m.s}^{-1}$ prédite par la relation d'Ergun. Pour $U_{in} > U_{mf}$ la perte de charge est très proche du poids théorique du lit calculé à $\approx 129 \text{ Pa}$. Ce cas complète la validation du couplage fluide-solide implémenté. Les chiffres de la perte de charge issus de la simulation numérique ont été prélevés une fois le régime périodique des oscillations de pression bien établi, et correspondent à la moyenne du signal observé.

4.2.3 Sphère en rotation dans un gaz

Pour clore la validation du code en configuration isotherme, on cherche à vérifier la validité de la corrélation issue de Dennis *et al.* [80] pour la modélisation du moment hydrodynamique subi par une particule isolée fixe en rotation à un nombre de Reynolds de rotation fixe dans un fluide au repos. La comparaison est effectuée avec les corrélations issues de la publication de Liu & Prosperetti [185] (voir les auteurs cités dans cette référence) ayant été dérivées semi-analytiquement (développements asymptotiques). Ces corrélations sont les suivantes :

$$\mathcal{M}_D \approx \begin{cases} -8\pi\mu\omega_p r_p^3 \left(1 + \frac{1}{1200} Re_R^2 - \frac{15647}{20744640000} Re_R^4\right) & \text{aux bas } Re_R, \\ -0.5\rho \left(\frac{6.45}{\sqrt{Re_R}} + \frac{32.1}{Re_R}\right) r_p^5 \omega_p^2 & \text{aux hauts } Re_R. \end{cases} \quad (4.7)$$

On rappelle ici l'expression que l'expression de Re_R employée est :

$$Re_R = \frac{r_p^2 \omega_p \rho}{\mu}. \quad (4.8)$$

Les paramètres numériques utilisés sont détaillés dans le tableau 4.7. Les résultats sont montrés sur la figure 4.5. L'accord obtenu est conforme aux attentes.

TABLE 4.7: Valeurs numériques utilisées pour la validation du moment hydrodynamique appliqué à une particule isolée en rotation.

Propriété fixée	Valeur	Unité
ρ	1.18	[kg.m ⁻³]
μ	1.8×10^{-5}	[Pa.s]

Propriété fixée	Valeur	Unité
d_p	0.001	[m]

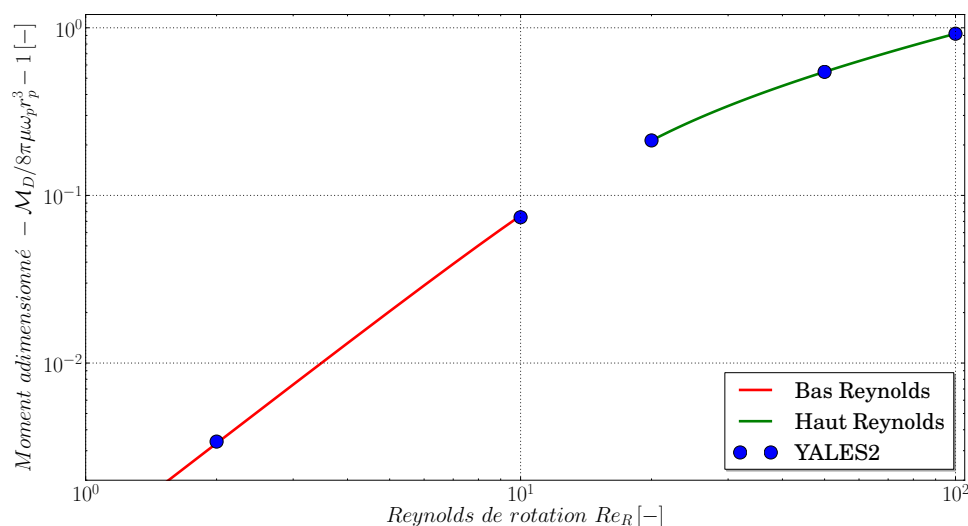


FIGURE 4.5: Comparaison des valeurs pour le moment hydrodynamique appliqué à une particule fixe en rotation pour divers Re_R obtenues par les corrélations issues de [185] et des simulations numériques.

4.3 Cas mixtes anisothermes

On valide dans cette section les différentes méthodologies développées pour la prise en compte des transferts de chaleur fluide-particules.

4.3.1 Cas couplé instationnaire sans convection

On s'intéresse dans un premier temps au cas d'une particule fixe dans une maille tétraédrique, sans convection ni diffusion dans le fluide. Les seules grandeurs évoluant dans le temps sont les températures de la particule et de chacun des noeuds composant la maille. Comme il a été vu dans la section 2.5.2, il existe deux manières conservatives de transférer l'énergie depuis la particule vers les noeuds de la cellule. La première consiste à conserver l'énergie localement (équation 2.128). Dans ce contexte, on

rappelle l'équation d'évolution de la température de la particule. Ici $\omega_{p,i}$ est simplement noté ω_i car il n'y a qu'une seule particule :

$$m_p C_{p,p} \frac{dT_p}{dt} = \sum_{i \in 4} \omega_i h_{fp} S_p (T_i - T_p). \quad (4.9)$$

En l'absence de mécanismes de convection et de diffusion, et pour toute propriété (autre que la température) constante, l'équation de la chaleur appliquée à un volume de fluide $\Delta V_i \varepsilon_i$ de température T_i s'écrit :

$$\rho \Delta V_i \varepsilon_i C_p \frac{dT_i}{dt} = -\omega_i h_{fp} S_p (T_i - T_p). \quad (4.10)$$

Le système à résoudre pour trouver l'évolution temporelle de chaque température est donc le suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dT_p}{dt} = \frac{h_{fp} S_p}{m_p C_{p,p}} \sum_{i \in 4} \omega_i (T_i - T_p) \quad \text{Particule} \\ \frac{dT_1}{dt} = -\frac{h_{fp} S_p}{\rho \Delta V_1 \varepsilon_1 C_p} \omega_1 (T_1 - T_p) \quad \text{Noeud 1} \\ \frac{dT_2}{dt} = -\frac{h_{fp} S_p}{\rho \Delta V_2 \varepsilon_2 C_p} \omega_2 (T_2 - T_p) \quad \text{Noeud 2} \\ \frac{dT_3}{dt} = -\frac{h_{fp} S_p}{\rho \Delta V_3 \varepsilon_3 C_p} \omega_3 (T_3 - T_p) \quad \text{Noeud 3} \\ \frac{dT_4}{dt} = -\frac{h_{fp} S_p}{\rho \Delta V_4 \varepsilon_4 C_p} \omega_4 (T_4 - T_p) \quad \text{Noeud 4} \end{array} \right. \quad (4.11)$$

On définit ici les temps caractéristiques associés aux échanges de chaleur du côté de la particule τ_p et du côté du i ème noeud fluide τ_i , en omettant l'indice *heat* par souci de clarté :

$$\tau_p = \frac{m_p C_{p,p}}{h_{fp} S_p} \quad \text{et} \quad \tau_i = \frac{\rho \Delta V_i \varepsilon_i C_p}{h_{fp} S_p}, \quad (4.12)$$

ce qui permet une réécriture plus compacte du système :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dT_p}{dt} = \frac{1}{\tau_p} \sum_{i \in 4} \omega_i (T_i - T_p) \quad \text{Particule} \\ \frac{dT_1}{dt} = -\frac{\omega_1}{\tau_1} (T_1 - T_p) \quad \text{Noeud 1} \\ \frac{dT_2}{dt} = -\frac{\omega_2}{\tau_2} (T_2 - T_p) \quad \text{Noeud 2} \\ \frac{dT_3}{dt} = -\frac{\omega_3}{\tau_3} (T_3 - T_p) \quad \text{Noeud 3} \\ \frac{dT_4}{dt} = -\frac{\omega_4}{\tau_4} (T_4 - T_p) \quad \text{Noeud 4} \end{array} \right. \quad (4.13)$$

Pour résoudre ce système, on peut utiliser son écriture matriciel de la forme suivante, en notant que par définition la somme des poids d'interpolation ω_i vaut 1 :

$$\frac{dX}{dt} = AX, \quad (4.14)$$

où :

$$X = \begin{pmatrix} T_p \\ T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\tau_p} & \frac{\omega_1}{\tau_p} & \frac{\omega_2}{\tau_p} & \frac{\omega_3}{\tau_p} & \frac{\omega_4}{\tau_p} \\ \frac{\omega_1}{\tau_1} & -\frac{\omega_1}{\tau_1} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\omega_2}{\tau_2} & 0 & -\frac{\omega_2}{\tau_2} & 0 & 0 \\ \frac{\omega_3}{\tau_3} & 0 & 0 & -\frac{\omega_3}{\tau_3} & 0 \\ \frac{\omega_4}{\tau_4} & 0 & 0 & 0 & -\frac{\omega_4}{\tau_4} \end{pmatrix}. \quad (4.15)$$

Il s'agit alors de diagonaliser la matrice A pour trouver l'expression du vecteur solution X . Le rang de A est inférieur à sa dimension car ses lignes sont liées par la conservation de l'énergie. Cette propriété est donc utilisée pour simplifier le système. On écrit que l'énergie thermique totale, soit la somme des énergies thermiques dans la phase solide et dans la phase fluide, est conservée au cours du temps. En particulier, elle peut être exprimée comme la somme des énergies à l'instant initial, dépendant des températures initiales T_p^0 de la particule et T_i^0 du noeud i :

$$m_p C_{p,p} T_p(t) + \sum_{i \in 4} \rho \Delta V_i \varepsilon_i C_p T_i(t) = m_p C_{p,p} T_p^0 + \sum_{i \in 4} \rho \Delta V_i \varepsilon_i C_p T_i^0. \quad (4.16)$$

De plus, en notant T_∞ la température d'équilibre globale du système lorsque $t \rightarrow \infty$, on peut se ramener à :

$$m_p C_{p,p} T_\infty + \sum_{i \in 4} \rho \Delta V_i \varepsilon_i C_p T_\infty = m_p C_{p,p} T_p(t) + \sum_{i \in 4} \rho \Delta V_i \varepsilon_i C_p T_i(t), \quad (4.17)$$

D'où une expression de la température d'équilibre globale du système :

$$T_\infty = \frac{m_p C_{p,p} T_p(t) + \sum_{i \in 4} \rho \Delta V_i \varepsilon_i C_p T_i(t)}{m_p C_{p,p} + \sum_{i \in 4} \rho \Delta V_i \varepsilon_i C_p}. \quad (4.18)$$

En notant que :

$$\sum_{i \in 4} \rho \Delta V_i \varepsilon_i C_p = \rho C_p \sum_{i \in 4} \Delta V_i \left(1 - \frac{\omega_i V_p}{\Delta V_i}\right) = \rho C_p (\Delta V_t - V_p), \quad (4.19)$$

par définition de la fraction volumique de fluide, où $\Delta V_t = \sum_{i \in 4} \Delta V_i$ est la somme des volumes de contrôle de chaque noeud i , on obtient l'expression suivante pour T_∞ :

$$T_\infty = \frac{m_p C_{p,p} T_p(t) + \sum_{i \in 4} \rho \Delta V_i \varepsilon_i C_p T_i(t)}{m_p C_{p,p} + \rho (\Delta V_t - V_p) C_p}. \quad (4.20)$$

Par souci de clarté, on emploie les notations introduites dans l'équation 4.12 et on définit τ_{eq} tel que :

$$\tau_{eq} = \sum_{i \in 4} \tau_i = \frac{\rho (\Delta V_t - V_p) C_p}{h_{fp} S_p}, \quad (4.21)$$

pour obtenir une expression plus compacte de T_∞ :

$$T_\infty = \frac{\tau_p T_p(t) + \sum_{i \in 4} \tau_i T_i(t)}{\tau_p + \tau_{eq}}. \quad (4.22)$$

Lorsque prise à $t = 0s$, cette relation fournit une valeur exacte de T_∞ , qui servira de référence. Pour tout t il découle alors une relation entre $T_p(t)$ et les $T_i(t)$:

$$T_p(t) = \frac{T_\infty}{\tau_p} (\tau_p + \tau_{eq}) - \frac{1}{\tau_p} \sum_{i \in 4} \tau_i T_i(t), \quad (4.23)$$

qui peut alors être substituée dans l'expression du système linéaire 4.30 afin de se ramener à un nouveau système de dimension 4 ne mettant en jeu que les températures aux noeuds fluides T_i :

$$\begin{cases} \frac{dT_1}{dt} = -\frac{\omega_1}{\tau_1} \left(T_1 - \frac{T_\infty}{\tau_p} (\tau_p + \tau_{eq}) + \frac{1}{\tau_p} \sum_{i \in 4} \tau_i T_i \right) & \text{Noeud 1} \\ \frac{dT_2}{dt} = -\frac{\omega_2}{\tau_2} \left(T_2 - \frac{T_\infty}{\tau_p} (\tau_p + \tau_{eq}) + \frac{1}{\tau_p} \sum_{i \in 4} \tau_i T_i \right) & \text{Noeud 2} \\ \frac{dT_3}{dt} = -\frac{\omega_3}{\tau_3} \left(T_3 - \frac{T_\infty}{\tau_p} (\tau_p + \tau_{eq}) + \frac{1}{\tau_p} \sum_{i \in 4} \tau_i T_i \right) & \text{Noeud 3} \\ \frac{dT_4}{dt} = -\frac{\omega_4}{\tau_4} \left(T_4 - \frac{T_\infty}{\tau_p} (\tau_p + \tau_{eq}) + \frac{1}{\tau_p} \sum_{i \in 4} \tau_i T_i \right) & \text{Noeud 4} \end{cases} \quad (4.24)$$

Après quelques étapes de développement, le système peut simplement se réécrire :

$$\begin{cases} \frac{dT_1}{dt} = -\frac{\omega_1}{\tau_p \tau_1} [(\tau_p + \tau_1)T_1 + \tau_2 T_2 + \tau_3 T_3 + \tau_4 T_4 - (\tau_p + \tau_{eq})T_\infty] & \text{Noeud 1} \\ \frac{dT_2}{dt} = -\frac{\omega_2}{\tau_p \tau_2} [\tau_1 T_1 + (\tau_p + \tau_2)T_2 + \tau_3 T_3 + \tau_4 T_4 - (\tau_p + \tau_{eq})T_\infty] & \text{Noeud 2} \\ \frac{dT_3}{dt} = -\frac{\omega_3}{\tau_p \tau_3} [\tau_1 T_1 + \tau_2 T_2 + (\tau_p + \tau_3)T_3 + \tau_4 T_4 - (\tau_p + \tau_{eq})T_\infty] & \text{Noeud 3} \\ \frac{dT_4}{dt} = -\frac{\omega_4}{\tau_p \tau_4} [\tau_1 T_1 + \tau_2 T_2 + \tau_3 T_3 + (\tau_p + \tau_4)T_4 - (\tau_p + \tau_{eq})T_\infty] & \text{Noeud 4} \end{cases} \quad (4.25)$$

Sous forme matricielle, $dX/dt = AX + B$, on réécrit les matrices A et B comme suit :

$$A = \begin{pmatrix} -\frac{\omega_1}{\tau_p \tau_1} (\tau_p + \tau_1) & -\frac{\omega_1}{\tau_p \tau_1} \tau_2 & -\frac{\omega_1}{\tau_p \tau_1} \tau_3 & -\frac{\omega_1}{\tau_p \tau_1} \tau_4 \\ -\frac{\omega_2}{\tau_p \tau_2} \tau_1 & -\frac{\omega_2}{\tau_p \tau_2} (\tau_p + \tau_2) & -\frac{\omega_2}{\tau_p \tau_2} \tau_3 & -\frac{\omega_2}{\tau_p \tau_2} \tau_4 \\ -\frac{\omega_3}{\tau_p \tau_3} \tau_1 & -\frac{\omega_3}{\tau_p \tau_3} \tau_2 & -\frac{\omega_3}{\tau_p \tau_3} (\tau_p + \tau_3) & -\frac{\omega_3}{\tau_p \tau_3} \tau_4 \\ -\frac{\omega_4}{\tau_p \tau_4} \tau_1 & -\frac{\omega_4}{\tau_p \tau_4} \tau_2 & -\frac{\omega_4}{\tau_p \tau_4} \tau_3 & -\frac{\omega_4}{\tau_p \tau_4} (\tau_p + \tau_4) \end{pmatrix}, \quad (4.26)$$

$$X = \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \end{pmatrix}, \quad B = (\tau_p + \tau_{eq})T_\infty \begin{pmatrix} \frac{\omega_1}{\tau_p \tau_1} \\ \frac{\omega_2}{\tau_p \tau_2} \\ \frac{\omega_3}{\tau_p \tau_3} \\ \frac{\omega_4}{\tau_p \tau_4} \end{pmatrix}.$$

TABLE 4.8: Valeurs numériques utilisées pour la résolution du système matriciel.

Propriété fixée	Noeud 1	Noeud 2	Noeud 3	Noeud 4	Unité
T_i^0	298.330	334.853	404.688	548.465	[K]
T_∞	433.784	433.784	433.784	433.784	[K]
ω_i	0.21961	0.34242	0.19881	0.23916	[-]
ΔV_i	1.28771	2.40865	2.65518	2.51224	[10^{-8}m^3]
ε_i	0.92856	0.94045	0.96864	0.96012	[-]
τ_i	0.01123	0.02127	0.02415	0.02265	[s]
ρ	1.18	1.18	1.18	1.18	[kg.m^{-3}]
C_p	1000	1000	1000	1000	[$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$]

Propriété fixée	Particule	Unité
T_p^0	503.0	[K]
T_∞	433.784	[K]
d_p	0.002	[m]
ρ_p	2500	[kg.m^{-3}]
$C_{p,p}$	3.0	[$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$]
τ_p	0.025	[s]
h_{fp}	100.0	[$\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$]

À ce point du développement on étudie un cas particulier afin de remplacer chacun des termes par sa valeur numérique, accessible dans le tableau 4.8. Pour ce cas, une particule a été générée aléatoirement sur une maille tétraédrique irrégulière. La particule ainsi que chaque noeud du tétraèdre ont été initialisés à une température propre aléatoire. La chaleur massique de la particule a été fixée à une valeur anormalement faible afin d'homogénéiser les valeurs prises par les temps caractéristiques.

La matrice carrée A est diagonalisable car son déterminant est non nul, par conséquent la solution générale de l'équation $dX/dt = AX + B$ est donnée par :

$$X(t) = Pe^{Dt}P^{-1}X^0 + \int_0^t Pe^{D(t-t')}P^{-1}Bdt' = Pe^{Dt}P^{-1}X^0 + Pe^{Dt}D^{-1}[I - e^{-Dt}]P^{-1}B, \quad (4.27)$$

où D est la matrice diagonale ayant comme coefficients diagonaux les valeurs propres issues de la diagonalisation de A , P et P^{-1} sont respectivement la matrice de passage formée par une base de vecteurs propres et son inverse, X^0 est le vecteur formé par les températures initiales de chaque noeud, et I la matrice identité. La résolution de l'équation 4.27 régissant l'évolution temporelle de la température aux noeuds fluides fournit à son tour l'évolution temporelle de la température de la particule grâce à l'équation 4.23.

La figure 4.6 compare les résultats issus de la simulation numérique avec les résultats issus des développements analytiques et montre un parfait accord. Le noeud numéroté 4 exhibe un comportement singulier mais toutes les températures convergent vers la valeur de T_∞ prédite par la théorie et l'équilibre thermique est atteint.

Pour le même problème de transfert de chaleur, une formulation différente décrite précédemment dans l'équation 2.129 est souvent retenue dans la littérature, faisant intervenir $T_{@p}$ la température du

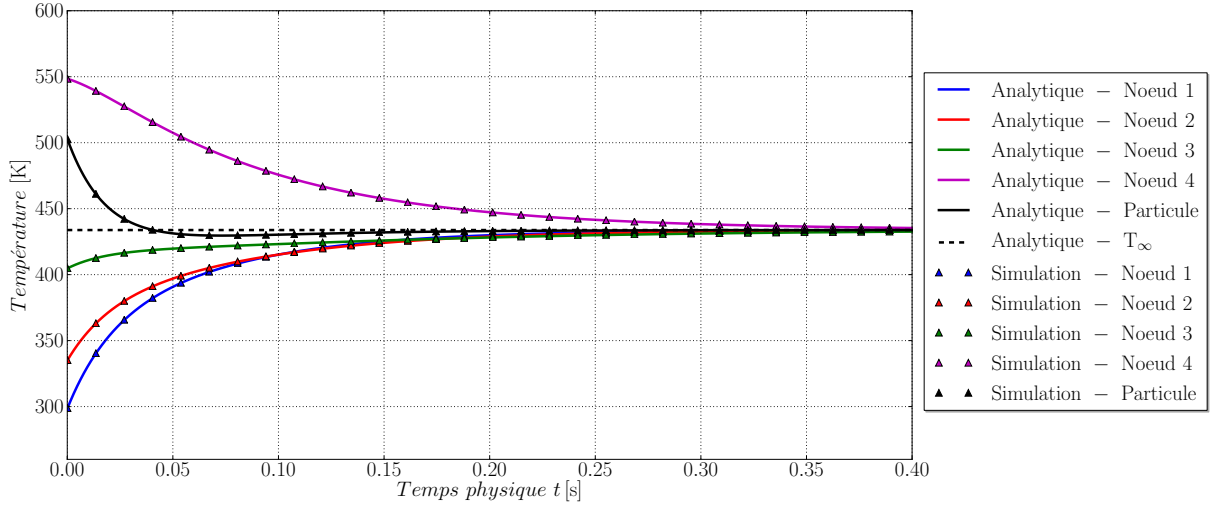


FIGURE 4.6: Comparaison des résultats analytiques et issus de la simulation numérique pour le cas d'une particule immobile transférant de la chaleur avec les quatre noeuds du tétraèdre auquel elle appartient. Cas sans convection ni diffusion dans la phase gazeuse.

fluide interpolée au centre de la particule, soit $T_{@p} = \sum_{i \in 4} \omega_i T_i$. Dans ce cadre, l'évolution temporelle de la température de la particule est strictement équivalente à l'équation 4.9. On la réécrit ici pour faire explicitement apparaître $T_{@p}$:

$$m_p C_{p,p} \frac{dT_p}{dt} = h_{fp} S_p (T_{@p} - T_p). \quad (4.28)$$

Du côté du fluide, on rappelle que cette formulation, qui n'est pas localement conservative, s'écrit :

$$\rho \Delta V_i \varepsilon_i C_p \frac{dT_i}{dt} = -\omega_i h_{fp} S_p (T_{@p} - T_p). \quad (4.29)$$

Il est évident que cette formulation est elle aussi globalement conservative puisque la somme des flux échangés est nulle. La différence avec la formulation précédemment validée se situe dans la répartition des flux sur les noeuds de la grille Eulérienne. Dans le premier cas on avait $T_i(t) = f(T_i(t), T_p(t))$ (voir équation 4.10) alors que l'équation 4.29 montre une dépendance du type $T_i(t) = f(T_{@p}(t), T_p(t))$. Le nouveau système linéaire s'écrit donc :

$$\begin{cases} \frac{dT_p}{dt} = \frac{1}{\tau_p} \sum_{i \in 4} \omega_i (T_i - T_p) & \text{Particule} \\ \frac{dT_1}{dt} = -\frac{\omega_1}{\tau_1} \left(\sum_{i \in 4} \omega_i T_i - T_p \right) & \text{Noeud 1} \\ \frac{dT_2}{dt} = -\frac{\omega_2}{\tau_2} \left(\sum_{i \in 4} \omega_i T_i - T_p \right) & \text{Noeud 2} \\ \frac{dT_3}{dt} = -\frac{\omega_3}{\tau_3} \left(\sum_{i \in 4} \omega_i T_i - T_p \right) & \text{Noeud 3} \\ \frac{dT_4}{dt} = -\frac{\omega_4}{\tau_4} \left(\sum_{i \in 4} \omega_i T_i - T_p \right) & \text{Noeud 4} \end{cases} \quad (4.30)$$

Là encore, afin d'exprimer ce système sous forme matricielle et se ramener à un problème de diagonalisation de matrice, on utilise la relation 4.22 qui permet d'exprimer $T_p(t)$ en fonction des $T_i(t)$, ce qui, après quelques opérations, conduit au système suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dT_1}{dt} = -\frac{\omega_1}{\tau_p \tau_1} \left[\sum_{i \in 4} (\omega_i \tau_p + \tau_i) T_1 - (\tau_p + \tau_{eq}) T_\infty \right] \text{ Noeud 1} \\ \frac{dT_2}{dt} = -\frac{\omega_2}{\tau_p \tau_2} \left[\sum_{i \in 4} (\omega_i \tau_p + \tau_i) T_2 - (\tau_p + \tau_{eq}) T_\infty \right] \text{ Noeud 2} \\ \frac{dT_3}{dt} = -\frac{\omega_3}{\tau_p \tau_3} \left[\sum_{i \in 4} (\omega_i \tau_p + \tau_i) T_3 - (\tau_p + \tau_{eq}) T_\infty \right] \text{ Noeud 3} \\ \frac{dT_4}{dt} = -\frac{\omega_4}{\tau_p \tau_4} \left[\sum_{i \in 4} (\omega_i \tau_p + \tau_i) T_4 - (\tau_p + \tau_{eq}) T_\infty \right] \text{ Noeud 4} \end{array} \right. \quad (4.31)$$

Sous forme matricielle, $dX/dt = A'X + B'$, on écrit les matrices A' et B' comme suit :

$$A' = \begin{pmatrix} -\frac{\omega_1}{\tau_p \tau_1} (\omega_1 \tau_p + \tau_1) & -\frac{\omega_1}{\tau_p \tau_1} (\omega_2 \tau_p + \tau_2) & -\frac{\omega_1}{\tau_p \tau_1} (\omega_3 \tau_p + \tau_3) & -\frac{\omega_1}{\tau_p \tau_1} (\omega_4 \tau_p + \tau_4) \\ -\frac{\omega_2}{\tau_p \tau_2} (\omega_1 \tau_p + \tau_1) & -\frac{\omega_2}{\tau_p \tau_2} (\omega_2 \tau_p + \tau_2) & -\frac{\omega_2}{\tau_p \tau_2} (\omega_3 \tau_p + \tau_3) & -\frac{\omega_2}{\tau_p \tau_2} (\omega_4 \tau_p + \tau_4) \\ -\frac{\omega_3}{\tau_p \tau_3} (\omega_1 \tau_p + \tau_1) & -\frac{\omega_3}{\tau_p \tau_3} (\omega_2 \tau_p + \tau_2) & -\frac{\omega_3}{\tau_p \tau_3} (\omega_3 \tau_p + \tau_3) & -\frac{\omega_3}{\tau_p \tau_3} (\omega_4 \tau_p + \tau_4) \\ -\frac{\omega_4}{\tau_p \tau_4} (\omega_1 \tau_p + \tau_1) & -\frac{\omega_4}{\tau_p \tau_4} (\omega_2 \tau_p + \tau_2) & -\frac{\omega_4}{\tau_p \tau_4} (\omega_3 \tau_p + \tau_3) & -\frac{\omega_4}{\tau_p \tau_4} (\omega_4 \tau_p + \tau_4) \end{pmatrix}, \quad (4.32)$$

$$X = \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \end{pmatrix}, \quad B' = B = (\tau_p + \tau_{eq}) T_\infty \begin{pmatrix} \frac{\omega_1}{\tau_p \tau_1} \\ \frac{\omega_2}{\tau_p \tau_2} \\ \frac{\omega_3}{\tau_p \tau_3} \\ \frac{\omega_4}{\tau_p \tau_4} \end{pmatrix}.$$

Les résultats analytiques du même cas de calcul que précédemment, dont les paramètres sont accessibles dans le tableau 4.8, sont obtenus après avoir utilisé la relation 4.27, ce qui a nécessité de diagonaliser la matrice A' . Ces résultats analytiques sont comparés aux résultats de la simulation numérique sur la figure 4.7 et montrent là encore un parfait accord.

Par rapport à l'approche précédemment développée, il apparaît qu'aucune température ne converge vers T_∞ . Chaque température exhibe un régime convergé pour lequel une température stationnaire est atteinte, cependant l'équilibre thermique n'est pas atteint car ces températures sont différentes. On peut également observer que la température au noeud 4 augmente au lieu de diminuer. Ceci est dû au fait que pour cette approche le signe du flux appliqué à chacun des noeuds ne dépend que du signe de la différence $T_{@p}(t) - T_p(t)$: si cette différence est positive alors le flux appliqué à la particule est positif, et la méthode répartit en fonction des poids d'interpolation l'opposé de ce flux sur les noeuds afin de garantir la conservation de l'énergie. Par conséquent même les noeuds comportant les températures les plus faibles du système se verront extraire de l'énergie thermique. A l'inverse si le terme $T_{@p}(t) - T_p(t)$ est négatif, le flux thermique est dirigé de la particule vers l'ensemble des noeuds, et même les noeuds

avec les températures les plus élevées se verront octroyer de l'énergie thermique : c'est ce phénomène qui est visible pour le noeud 4. Cette approche a donc le défaut d'entretenir les gradients thermiques dans le temps au lieu de les réduire, et empêche d'atteindre l'équilibre thermique.

En comparant les figures 4.6 et 4.7 on peut également observer des temps de relaxation vers l'état convergé qui sont plus courts, et sensiblement équivalents pour chaque noeud, dans le second cas. On se place dans un cas symétrique où $\forall i \in [1, 4], \omega_i = \omega = 0.25$, et $\tau_i = \tau$. On note A_{ij} les coefficients de la matrice A pour l'approche localement conservative (système 4.25), qui sont homogènes à l'inverse d'un temps caractéristique de convergence. Deux valeurs sont discernables : pour les coefficients diagonaux, $A_{ii} = \omega(\tau + \tau)/\tau^2 = 1/2\tau$. Ailleurs, on a $A_{ij, j \neq i} = \omega\tau/\tau^2 = 1/4\tau$. Cela indique que la composante de la solution $T_i(t)$ liée au noeud i est sensible aux temps courts ($t \sim 2\tau$), cependant la convergence est ralentie par la composante liée aux autres noeuds, qui possède un temps caractéristique de l'ordre de 4τ . À l'inverse, les coefficients de la matrice A' (système 4.31) notés A'_{ij} ont des valeurs homogènes de l'ordre $A'_{ij} = \omega(\omega\tau + \tau)/\tau^2 \approx 1/3\tau$. Pour cette approche, le temps caractéristique de convergence de chaque température du système couplé est ainsi approximativement de 3τ , donc inférieur à celui de l'approche précédente.

Bien que la seconde approche soit à proscrire du point de vue de la répartition de l'énergie sur la grille Eulérienne, elle est parfaitement conservative et son utilisation ne nécessite pas de technique spécifique, comme spécifié dans la section 2.5.2.

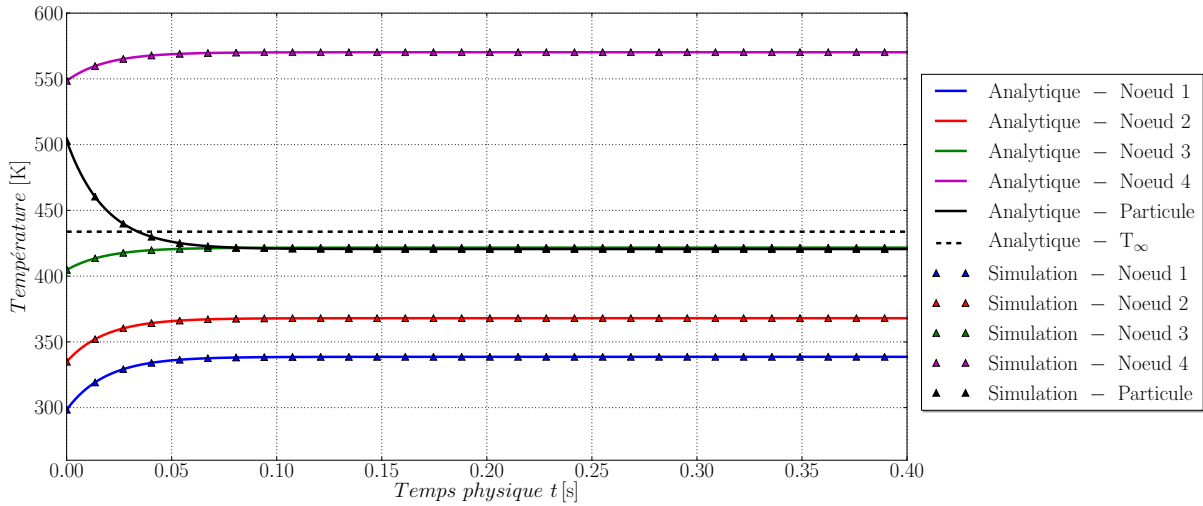


FIGURE 4.7: Comparaison des résultats analytiques et issus de la simulation numérique pour le cas d'une particule immobile transférant de la chaleur avec les quatre noeuds du tétraèdre auquel elle appartient. Cas sans convection ni diffusion dans la phase gazeuse.

Lors du déplacement d'une particule sur une grille Eulérienne, il peut également se présenter le cas limite où la particule n'échange de chaleur qu'avec un seul volume de contrôle de fluide, lorsqu'elle est quasiment superposée avec le noeud associé. Pour une particule superposée avec un noeud j , on a $\omega_j = 1$ et $\omega_{i \neq j} = 0$, par conséquent les deux approches précédentes conduisent au même système linéaire, composé de deux équations :

$$\begin{cases} \frac{dT_p}{dt} = \frac{1}{\tau_p}(T_j - T_p) & \text{Particule} \\ \frac{dT_j}{dt} = -\frac{1}{\tau_j}(T_j - T_p) & \text{Noeud } j \end{cases} \quad (4.33)$$

Ce système peut être simplement résolu en opérant le changement de variable $Y = T_j - T_p$, ce qui permet d'écrire :

$$\frac{dY}{dt} = -\left(\frac{1}{\tau_p} + \frac{1}{\tau_j}\right) Y, \quad (4.34)$$

dont la solution est :

$$Y(t) = (T_j^0 - T_p^0) e^{-\left(\frac{1}{\tau_p} + \frac{1}{\tau_j}\right)t}. \quad (4.35)$$

Cette expression de $Y(t)$ peut être substituée dans le système précédent ce qui donne :

$$\begin{cases} \frac{dT_p}{dt} = \frac{T_j^0 - T_p^0}{\tau_p} e^{-\left(\frac{1}{\tau_p} + \frac{1}{\tau_j}\right)t} & \text{Particule} \\ T_j(t) = (T_j^0 - T_p^0) e^{-\left(\frac{1}{\tau_p} + \frac{1}{\tau_j}\right)t} + T_p(t) & \text{Noeud j} \end{cases} \quad (4.36)$$

Les solutions du système s'écrivent finalement :

$$\begin{cases} T_p(t) = \frac{\tau_j}{\tau_j + \tau_p} (T_j^0 - T_p^0) \left[1 - e^{-\left(\frac{1}{\tau_p} + \frac{1}{\tau_j}\right)t} \right] + T_p^0 & \text{Particule} \\ T_j(t) = \frac{\tau_p}{\tau_j + \tau_p} (T_j^0 - T_p^0) e^{-\left(\frac{1}{\tau_p} + \frac{1}{\tau_j}\right)t} + \frac{\tau_j T_j^0 + \tau_p T_p^0}{\tau_j + \tau_p} & \text{Noeud j} \end{cases} \quad (4.37)$$

La figure 4.8 compare les profils analytiques issus du système 4.37 avec les profils obtenus par simulation numérique pour trois cas correspondant à trois rapports de temps caractéristiques différents. Conformément à nos attentes, les courbes sont en accord.

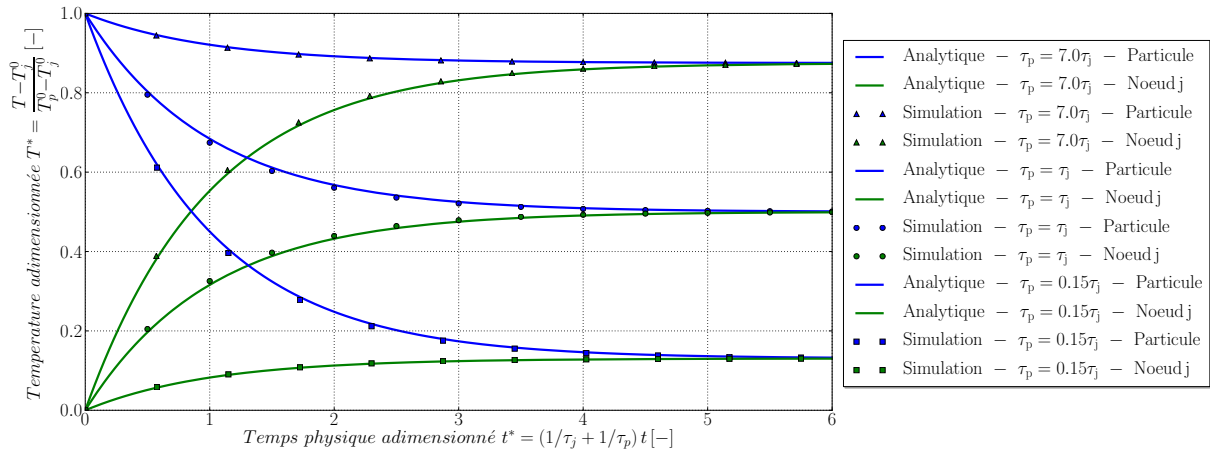


FIGURE 4.8: Comparaison des résultats analytiques et issus de la simulation numérique pour le cas d'une particule immobile transférant de la chaleur avec un unique noeud j. Cas sans convection ni diffusion dans la phase gazeuse.

L'ensemble des résultats obtenus dans cette section permet de valider l'implémentation du couplage fluide-particule thermique.

4.3.2 Cas stationnaire avec convection

Dans cette partie, on s'intéresse aux transferts de chaleur convectifs dans la phase fluide, en régime stationnaire. On considère un canal 3D dans lequel les particules sont fixes, empilées de façon à obtenir une fraction volumique de fluide homogène $\varepsilon = 1 - \frac{\pi}{6} \approx 0.476$, et de température fixée à T_0 . Le gaz circule de façon unidirectionnel avec une vitesse interstitielle verticale constante u . La diffusion n'est pas prise en compte dans la phase fluide, et toute autre propriété que sa température est maintenue constante. À l'instant initial, les deux phases sont à l'équilibre thermique à T_0 . On cherche à caractériser l'évolution spatiale de la température du fluide, qui n'évolue que le long du canal. Une visualisation du domaine de calcul est accessible sur la figure 4.9. Les paramètres numériques utilisés dans ce test sont présentés dans le tableau 4.9.

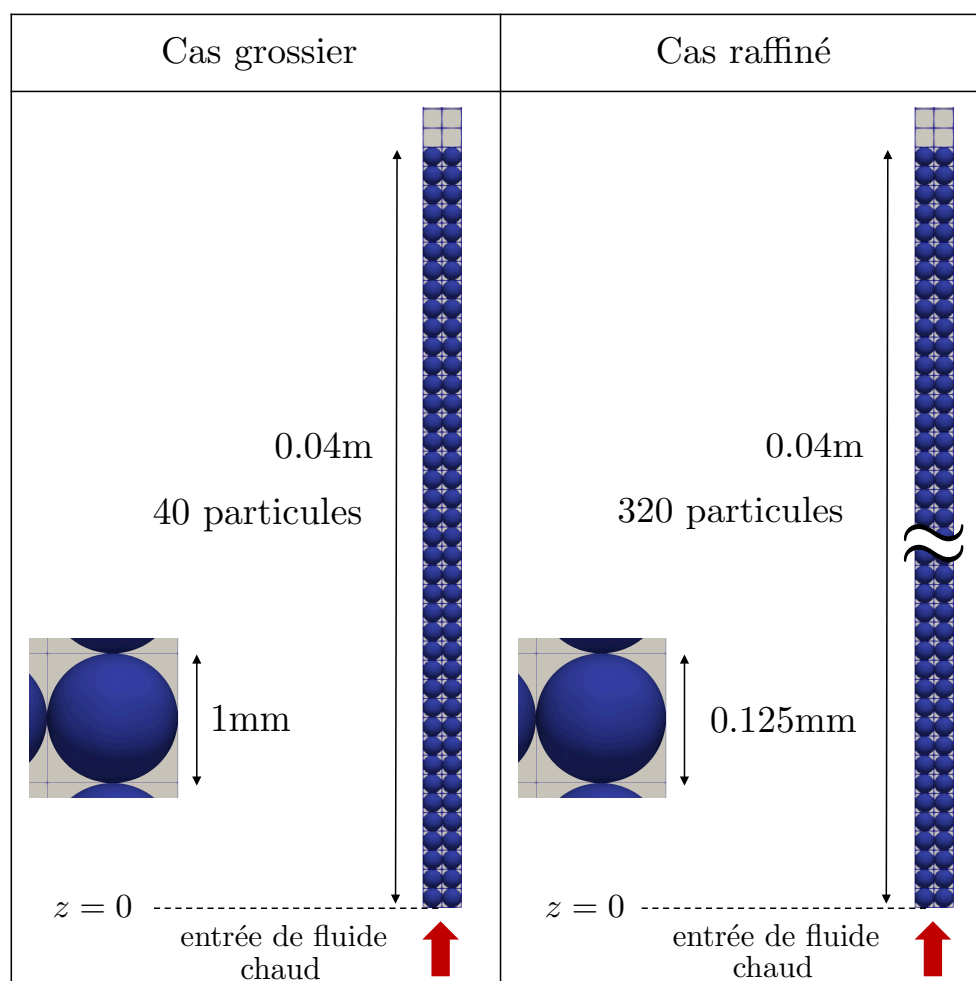


FIGURE 4.9: Cas de calcul utilisé pour la validation du code en situation stationnaire, puis couplée instationnaire (voir section suivante). Dans les deux cas, les particules sont fixes et empilées de façon cubique. Les parois sont glissantes afin de ne pas perturber l'écoulement vertical. Les températures du fluide et des particules sont initialisées à T_0 . Un cas grossier et un cas raffiné, dans lequel les nombres de mailles et de particules sont multipliés par 8, sont testés. Dans le cas stationnaire, la température des particules est fixée. Dans le cas couplé instationnaire, les températures du fluide et des particules évoluent en fonction de l'altitude z et du temps t , et seuls les transferts fluide-particules sont comptabilisés pour la phase solide.

TABLE 4.9: Valeurs numériques utilisées pour le test.

Propriété fixée	Valeur numérique	Unité
$T(z = 0)$	293	[K]
ρ	1.18	[kg.m ⁻³]
C_p	1000	[J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]
ε	$1 - \frac{\pi}{6}$	[-]

Propriété fixée	Valeur numérique	Unité
T_p	700	[K]
ρ_p	2500	[kg.m ⁻³]
$C_{p,p}$	840	[J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]
h_{fp}	200	[W.m ⁻² .K ⁻¹]
d_p	0.001	[m]

L'équation de transport de l'enthalpie 1D stationnaire appliquée à un gaz en l'absence de diffusion et pour des propriétés indépendantes de la température s'écrit :

$$u\varepsilon\rho C_p \frac{\partial T}{\partial z}(z) = -h_{fp}a_p(T(z) - T_p). \quad (4.38)$$

$a_p = S_p/\Delta V$ représente la densité d'interface fluide-solide. Cette équation se résout simplement et donne la solution suivante :

$$T(z) = T_p + (T(z = 0) - T_p)e^{-z/\tau'_{heat}}. \quad (4.39)$$

Elle fait apparaître un temps caractéristique de convection de la chaleur τ'_{heat} tel que :

$$\tau'_{heat} = \frac{U_{in}\rho C_p}{h_{fp}a_p}, \quad (4.40)$$

où U_{in} est ici parfaitement équivalente à εu .

Les résultats sont accessibles sous forme adimensionnée sur la figure 4.10 pour les maillages grossier et raffiné. Les courbes sont tracées pour différentes valeurs de la vitesse d'entrée exprimées en fonction de la vitesse au minimum de fluidisation, dont la valeur approximative est de 0.564m.s⁻¹. L'adimensionnalisation de la température fluide est réalisée de la façon suivante :

$$T^*(z) = \frac{T(z) - T_p}{T(z = 0) - T_p}. \quad (4.41)$$

On observe que le profil de température le long du lit fixe se raidit pour les petites vitesses d'entrée du fluide, phénomène dû à l'augmentation du temps de séjour du gaz, et donc du temps de contact avec les particules. Ceci est particulièrement visible ici puisque le coefficient de transfert de chaleur h_{fp} est fixé à une valeur constante. Dans la réalité, ce coefficient est une fonction croissante de la vitesse du gaz car la convection opère davantage à la surface de la particule. Ce sont donc deux effets antagonistes. L'accord trouvé est très bon même pour le cas grossier, cependant raffiner le maillage donne lieu à une meilleure prédiction de la température sur le premier noeud. Pour $U_{in} = U_{mf}$, les transferts de chaleur ont entièrement lieu sur une épaisseur d'environ quatre mailles grossières. Le maillage raffiné permet donc de mieux capter les gradients de température dans ce cas.

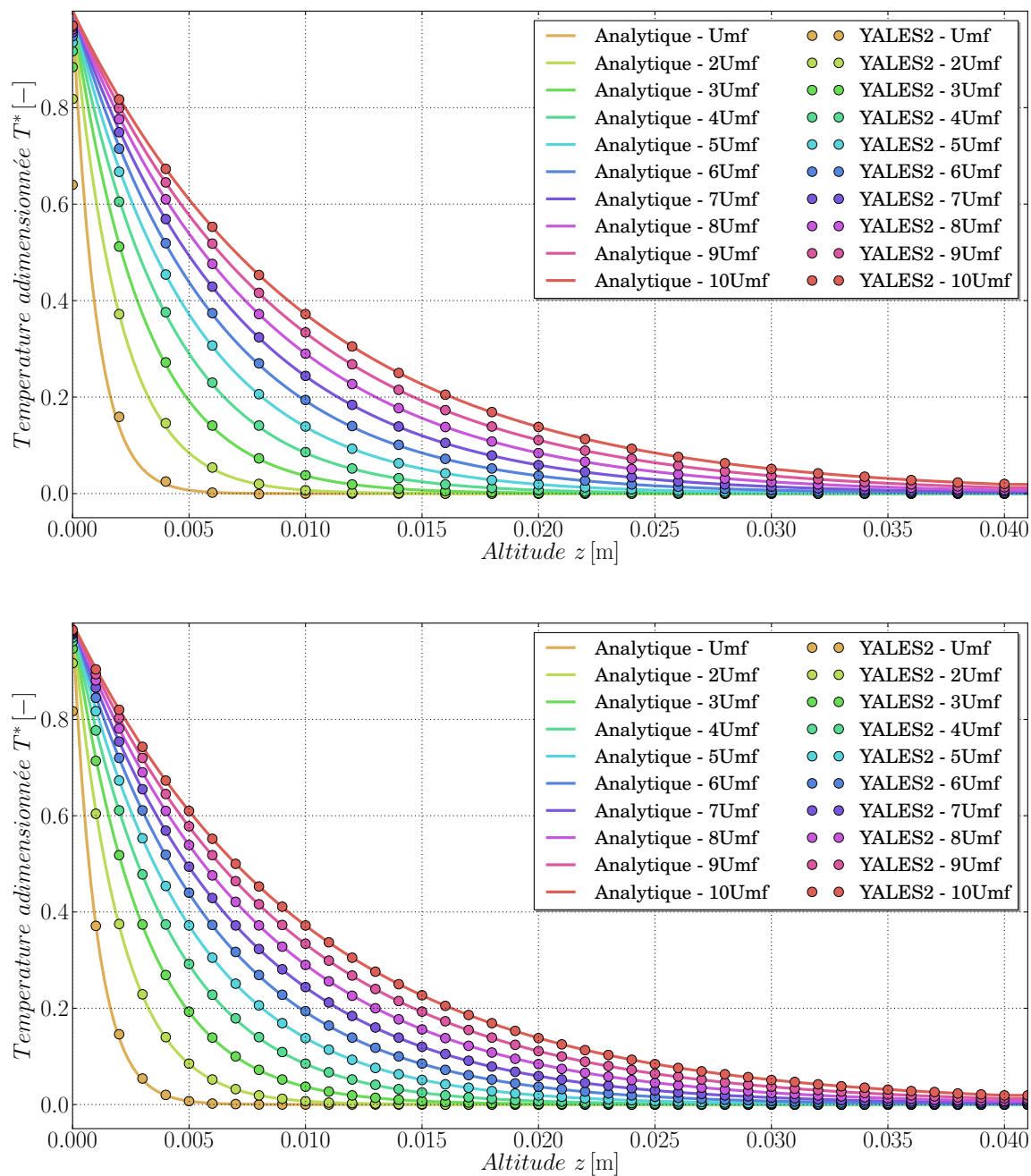


FIGURE 4.10: Comparaison des températures de fluide adimensionnées T^* en fonction de la hauteur z fournies par le calcul analytique (équation 4.39) et par la simulation numérique, en régime stationnaire et pour des valeurs de vitesses d'entrée échelonnées de U_{mf} à $10U_{mf}$. Maillage grossier (en haut) et raffiné (en bas).

4.3.3 Cas couplé instationnaire avec convection

Dans cette partie, on reprend le problème précédent ainsi que l'ensemble des hypothèses formulées, mais en laissant la température des particules et du fluide évoluer dans le temps et le long du canal. Une visualisation du domaine de calcul est accessible sur la figure 4.9.

Pour une particule dont le centre se situe à l'altitude z dans le canal, l'équation de la chaleur s'écrit, sous les hypothèses formulées :

$$m_p C_{p,p} \frac{dT_p}{dt}(t) = h_{fp} S_p (T(z, t) - T_p(t)), \quad (4.42)$$

où $T(z, t)$ est la température du fluide à l'altitude z et au temps t . Afin de représenter cette équation de façon continue, on assimile le canal à un milieu poreux, de fraction volumique fluide ou porosité $\varepsilon = 1 - \frac{\pi}{6}$, et on désigne la température solide à l'altitude z et au temps t par $T_p(z, t)$. En rappelant que :

$$V_p = (1 - \varepsilon) \Delta V, \quad (4.43)$$

et en notant que a_p se définit de la manière suivante pour un empilement cubique de sphères :

$$a_p = \frac{S_p}{\Delta V} = \frac{6(1 - \varepsilon)}{d_p}, \quad (4.44)$$

on peut écrire pour la phase solide équivalente :

$$\frac{\partial T_p}{\partial t}(z, t) = \frac{h_{fp} a_p}{(1 - \varepsilon) \rho_p C_{p,p}} (T(z, t) - T_p(t)). \quad (4.45)$$

Dans la phase fluide, l'équation de la chaleur 1D appliquée à un gaz en l'absence de diffusion et sous les hypothèses formulées s'écrit :

$$\varepsilon \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t}(z, t) + u \varepsilon \rho C_p \frac{\partial T}{\partial z}(z, t) = -h_{fp} a_p (T(z, t) - T_p(z, t)). \quad (4.46)$$

On effectue le changement de variable $\zeta = ut$. En découle le système suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial T}{\partial \zeta}(z, \zeta) + \frac{\partial T}{\partial z}(z, \zeta) = -\theta_f (T(z, \zeta) - T_p(z, \zeta)) & \text{Phase fluide} \\ \frac{\partial T_p}{\partial \zeta}(z, \zeta) = \theta_p (T(z, \zeta) - T_p(z, \zeta)) & \text{Phase solide} \end{cases} \quad (4.47)$$

Les constantes θ_f et θ_p sont respectivement donnée par :

$$\begin{cases} \theta_f = \frac{h_{fp} a_p}{u \varepsilon \rho C_p} \\ \theta_p = \frac{h_{fp} a_p}{u (1 - \varepsilon) \rho_p C_{p,p}} \end{cases} \quad (4.48)$$

On cherche alors les solutions $T(z, \zeta)$ et $T_p(z, \zeta)$ satisfaisant le système 4.47 avec la condition initiale :

$$T(z, \zeta = 0) = T_p(z, \zeta = 0) = T_0. \quad (4.49)$$

Ce problème est connu sous le nom de problème de Schumann ou problème de Nusselt, et a déjà été résolu de façon analytique par le passé [262][17] en utilisant la condition d'entrée :

$$T(z = 0, t) = T_p(z = 0, t) = T_{inlet} \mathcal{H}(t), \quad (4.50)$$

où $\mathcal{H}(t)$ représente la fonction Heaviside :

$$\mathcal{H}(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } t < 0, \\ 1 & \text{si } t \geq 0. \end{cases} \quad (4.51)$$

Ce problème possède une solution bien connue. Néanmoins, la diffusion numérique due à la discrétisation spatiale rend la discontinuité de cette condition d'entrée impossible à représenter dans les simulations numériques. Nous cherchons donc les solutions satisfaisant le système 4.47 avec la condition initiale suivante :

$$T(z = 0, t) = T_p(z = 0, t) = at \quad \forall t \geq 0, \quad (4.52)$$

où a est une constante ici fixée à $1K.s^{-1}$. Par souci de clarté, on occulte la notation (z, ζ) dans la suite des calculs, étant entendu que T et T_p dépendent tous deux de z et ζ , soit :

$$\begin{cases} \frac{\partial T}{\partial \zeta} + \frac{\partial T}{\partial z} = -\theta_f(T - T_p) & \text{Phase fluide} \\ \frac{\partial T_p}{\partial \zeta} = \theta_p(T - T_p) & \text{Phase solide} \end{cases} \quad (4.53)$$

Pour ce faire, on utilise les transformations de Laplace \mathcal{L} vis-à-vis de la variable ζ , en notant s la variable dans l'espace de Laplace. Le système devient alors :

$$\begin{cases} s\widehat{T} + \frac{\partial \widehat{T}}{\partial z} = -\theta_f(\widehat{T} - \widehat{T}_p) \\ s\widehat{T}_p = \theta_p(\widehat{T} - \widehat{T}_p) \end{cases} \quad (4.54)$$

en posant $\mathcal{L}\{T\} = \widehat{T}$ et $\mathcal{L}\{T_p\} = \widehat{T}_p$. Les grandeurs \widehat{T}_p et \widehat{T} ont pour variables s (paramètre générique de la transformée) et z , que l'on occulte par la suite là encore par souci de clarté. L'expression de la deuxième équation de ce système peut donc se réécrire :

$$\widehat{T}_p = \frac{\theta_p}{s + \theta_p} \widehat{T}, \quad (4.55)$$

qui peut maintenant être substituée dans la première équation pour donner :

$$\frac{\partial \widehat{T}}{\partial z} = \left(-s - \theta_f + \frac{\theta_f \theta_p}{s + \theta_p} \right) \widehat{T}. \quad (4.56)$$

Il s'agit une équation différentielle du 1er ordre à coefficient constant. En notant que la condition d'entrée $T(z = 0, t) = at$ devient $T(z = 0, \zeta) = \frac{a\zeta}{u}$, d'où en prenant la transformée de Laplace $\widehat{T}(z = 0, s) = \frac{a}{us^2}$, on obtient sa solution :

$$\widehat{T} = \frac{a}{us^2} \exp \left[\left(-s - \theta_f + \frac{\theta_f \theta_p}{s + \theta_p} \right) z \right]. \quad (4.57)$$

Les termes de cette expression peuvent alors être réarrangés de la façon suivante :

$$\widehat{T} = \frac{a}{u} \exp(-\theta_f z) \left[\exp(-sz) \cdot \frac{1}{s^2} \exp \left(\frac{\theta_f \theta_p}{s + \theta_p} z \right) \right]. \quad (4.58)$$

L'expression de T est finalement donnée par :

$$T = \frac{a}{u} \exp(-\theta_f z) \mathcal{L}^{-1} \left\{ \exp(-sz) \cdot \frac{1}{s^2} \exp \left(\frac{\theta_f \theta_p}{s + \theta_p} z \right) \right\}, \quad (4.59)$$

l'opérateur \mathcal{L}^{-1} définissant la transformée de Laplace inverse. On reconnaît alors un terme de retard dans l'espace de Laplace $\exp(-sz)$. En utilisant la propriété de décalage temporel des transformées de Laplace suivante, en notant f une fonction quelconque, et F sa transformée de Laplace telle que $F = \mathcal{L}(f)$:

$$\mathcal{L}\{f(\zeta - z)\mathcal{H}(\zeta - z)\} = \exp(-sz)F(\zeta), \quad (4.60)$$

avec :

$$\mathcal{H}(\zeta - z) = \begin{cases} 0 & \text{si } \zeta < z, \\ 1 & \text{si } \zeta \geq z, \end{cases} \quad (4.61)$$

on montre ainsi qu'il nous faut trouver l'expression de $\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{s^2} \exp \left(\frac{\theta_f \theta_p}{s + \theta_p} z \right) \right\}$. Dans sa résolution du problème de Schumann, Hiep [135] montre que :

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{s} \exp \left(\frac{\theta_f \theta_p}{s + \theta_p} z \right) \right\} = 1 + \sqrt{\theta_f \theta_p z} \int_0^\zeta e^{-\theta_p \xi} I_1 (2\sqrt{\theta_f \theta_p z \xi}) \xi^{-1/2} d\xi, \quad (4.62)$$

où I_1 désigne la fonction de Bessel modifiée d'ordre 1. Il en découle que :

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{s^2} \exp \left(\frac{\theta_f \theta_p}{s + \theta_p} z \right) \right\} = \int_0^\zeta \left[1 + \sqrt{\theta_f \theta_p z} \int_0^\sigma e^{-\theta_p \xi} I_1 (2\sqrt{\theta_f \theta_p z \xi}) \xi^{-1/2} d\xi \right] d\sigma, \quad (4.63)$$

soit :

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{s^2} \exp \left(\frac{\theta_f \theta_p}{s + \theta_p} z \right) \right\} = \zeta + \sqrt{\theta_f \theta_p z} \int_0^\zeta \int_0^\sigma e^{-\theta_p \xi} I_1 (2\sqrt{\theta_f \theta_p z \xi}) \xi^{-1/2} d\xi d\sigma, \quad (4.64)$$

Ainsi, finalement, la solution finale recherchée s'écrit, en rappelant que $\zeta = ut$:

$$T(z, t) = \begin{cases} T_0 & \text{si } ut < z, \\ T_0 + \frac{a}{u} e^{-\theta_f z} \left[ut - z + \sqrt{\theta_f \theta_p z} \int_0^{ut-z} \int_0^\sigma e^{-\theta_p \xi} I_1 (2\sqrt{\theta_f \theta_p z \xi}) \xi^{-1/2} d\xi d\sigma \right] & \text{si } ut \geq z. \end{cases} \quad (4.65)$$

De même, en utilisant l'équation 4.55, on a :

$$\widehat{T}_p = \frac{a\theta_p}{u} \exp(-\theta_f z) \left[\exp(-sz) \cdot \frac{1}{s^2(s + \theta_p)} \exp \left(\frac{\theta_f \theta_p}{s + \theta_p} z \right) \right]. \quad (4.66)$$

Pour $\theta_p > 0$, on peut alors remarquer que :

$$\frac{1}{s^2(s + \theta_p)} = \frac{1}{\theta_p} \left[\frac{1}{s^2} - \frac{1}{s(s + \theta_p)} \right]. \quad (4.67)$$

Ensuite, en se servant du résultat suivant issu de [135] :

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{s(s + \theta_p)} \exp \left(\frac{\theta_f \theta_p}{s + \theta_p} z \right) \right\} = \int_0^\zeta e^{-\theta_p \xi} I_0 (2\sqrt{\theta_f \theta_p z \xi}) d\xi, \quad (4.68)$$

on obtient par linéarité :

$$T_p(z, t) = \begin{cases} T_0 & \text{si } ut < z, \\ T_0 + \frac{a}{u} e^{-\theta_f z} \left[ut - z + \sqrt{\theta_f \theta_p z} \int_0^{ut-z} \int_0^\sigma e^{-\theta_p \xi} I_1 (2\sqrt{\theta_f \theta_p z \xi}) \xi^{-1/2} d\xi d\sigma \right. \\ \quad \left. - \int_0^{ut-z} e^{-\theta_p \xi} I_0 (2\sqrt{\theta_f \theta_p z \xi}) d\xi \right] & \text{si } ut \geq z. \end{cases} \quad (4.69)$$

On compare les simulations numériques, menées sur les mêmes maillages grossier et raffiné que précédemment, au calcul analytique. Les paramètres utilisés pour ces simulations dans le cas grossier sont

TABLE 4.10: Valeurs numériques utilisées pour la résolution des équations 4.65 et 4.69 dans le cas grossier.

Propriété fixée	Valeur numérique	Unité
T_0	293	[K]
a	1	[K.s ⁻¹]
ρ	1.18	[kg.m ⁻³]
C_p	1000	[J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]
u	2.263	[m.s ⁻¹]
ε	$1 - \frac{\pi}{6}$	[-]

Propriété fixée	Valeur numérique	Unité
T_0	293	[K]
ρ_p	2500	[kg.m ⁻³]
$C_{p,p}$	840	[J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]
a_p	$6 \frac{1-\varepsilon}{d_p}$	[m ² .m ⁻³]
h_{fp}	800	[W.m ⁻² .K ⁻¹]
d_p	0.001	[m]

détaillés dans le tableau 4.10. On précise que pour maintenir les mêmes valeurs de θ_p et θ_f dans ces deux cas, bien que a_p soit 8 fois plus important dans le cas raffiné (d_p étant 8 fois plus petit), on divise h_{fp} par 8 pour ce dernier. Les profils verticaux des températures fluide et solide à différents instants t sont respectivement visibles sur les figures 4.11 et 4.12. Un bon accord est observé entre le calcul analytique issu des équations 4.65 et 4.69 et la simulation numérique. Dans le cas grossier, on peut observer que la pente subit une dérive temporelle de plus en plus marquée. Ceci trahit le fait que les flux thermiques échangés entre le fluide et les particules dépendent de la discrétisation. Ces erreurs deviennent moins importantes dans le cas raffiné, qui montre un excellent accord avec les solutions analytiques.

En considérant le cas limite où $\theta_f \rightarrow 0$, correspondant à une situation pour laquelle le fluide possède une inertie thermique infinie, les solutions se réécrivent de la façon suivante :

$$\begin{cases}
 T(z, t) = \begin{cases} T_0 & \text{si } ut < z, \\ T_0 + a \left(t - \frac{z}{u} \right) & \text{si } ut \geq z \end{cases} & \text{Phase fluide} \\
 T_p(z, t) = \begin{cases} T_0 & \text{si } ut < z, \\ T_0 + \frac{a}{u} \left[ut - z + \frac{1}{\theta_p} \left(e^{-\theta_p(ut-z)} - 1 \right) \right] & \text{si } ut \geq z \end{cases} & \text{Phase solide}
 \end{cases} \quad (4.70)$$

Dans ce cas, la rampe de température en entrée de domaine $T(z = 0, t) = at$ est simplement advectée à la vitesse u le long du canal. Pour cette étude en particulier, les valeurs de u et h_{fp} sont modifiées (voir tableau 4.11) afin de mieux observer l'instantanéité du phénomène de transfert. Les résultats concernant la température des particules pour ce cas limite sont visibles sur la figure 4.13. Là encore, un bon accord est observé entre le calcul analytique issu du système 4.70 et la simulation numérique. Raffiner le maillage permet de légèrement réduire les écarts.

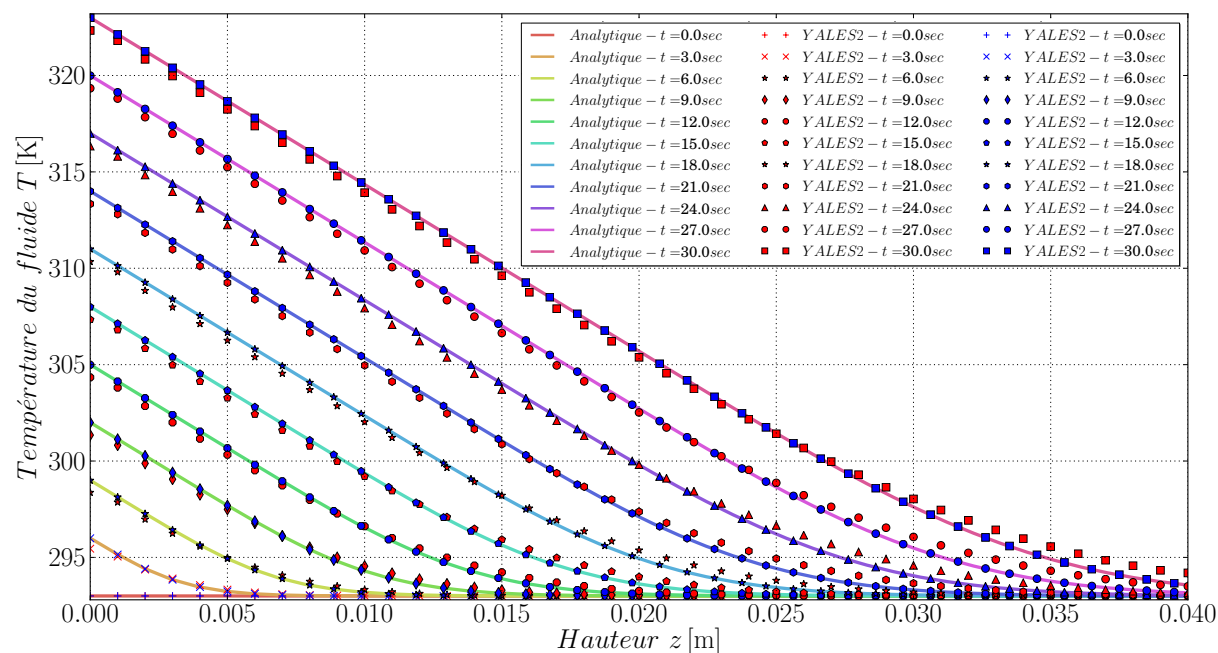


FIGURE 4.11: Comparaison des températures de fluide T en fonction de la hauteur z à différents instants t fournies par le calcul analytique (équation 4.65) et par la simulation numérique. Les données numériques en rouge symbolisent le cas grossier, tandis que les données numériques en bleu symbolisent le cas raffiné.

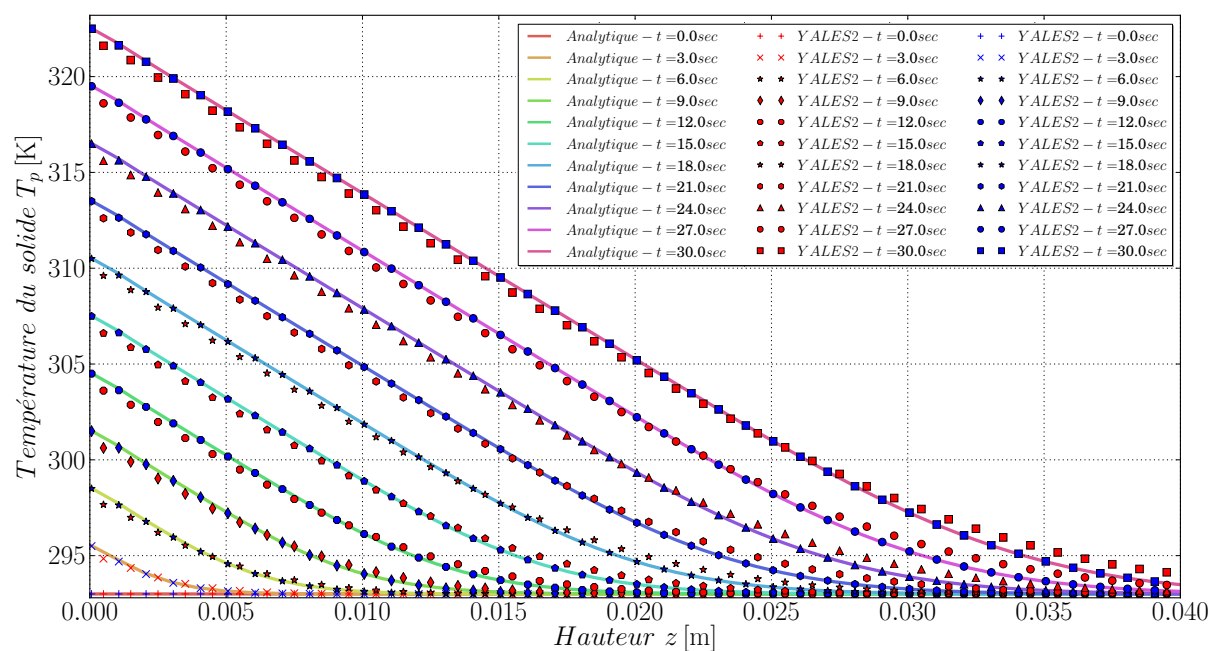


FIGURE 4.12: Comparaison des températures de solide T_p en fonction de la hauteur z à différents instants t fournies par le calcul analytique (équation 4.69) et par la simulation numérique. Les données numériques en rouge symbolisent le cas grossier, tandis que les données numériques en bleu symbolisent le cas raffiné.

TABLE 4.11: Valeurs numériques utilisées pour la résolution du système 4.70 dans le cas grossier.

Propriété fixée	Valeur numérique	Unité
u	0.01	$[\text{m.s}^{-1}]$

Propriété fixée	Valeur numérique	Unité
h_{fp}	800	$[\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}]$

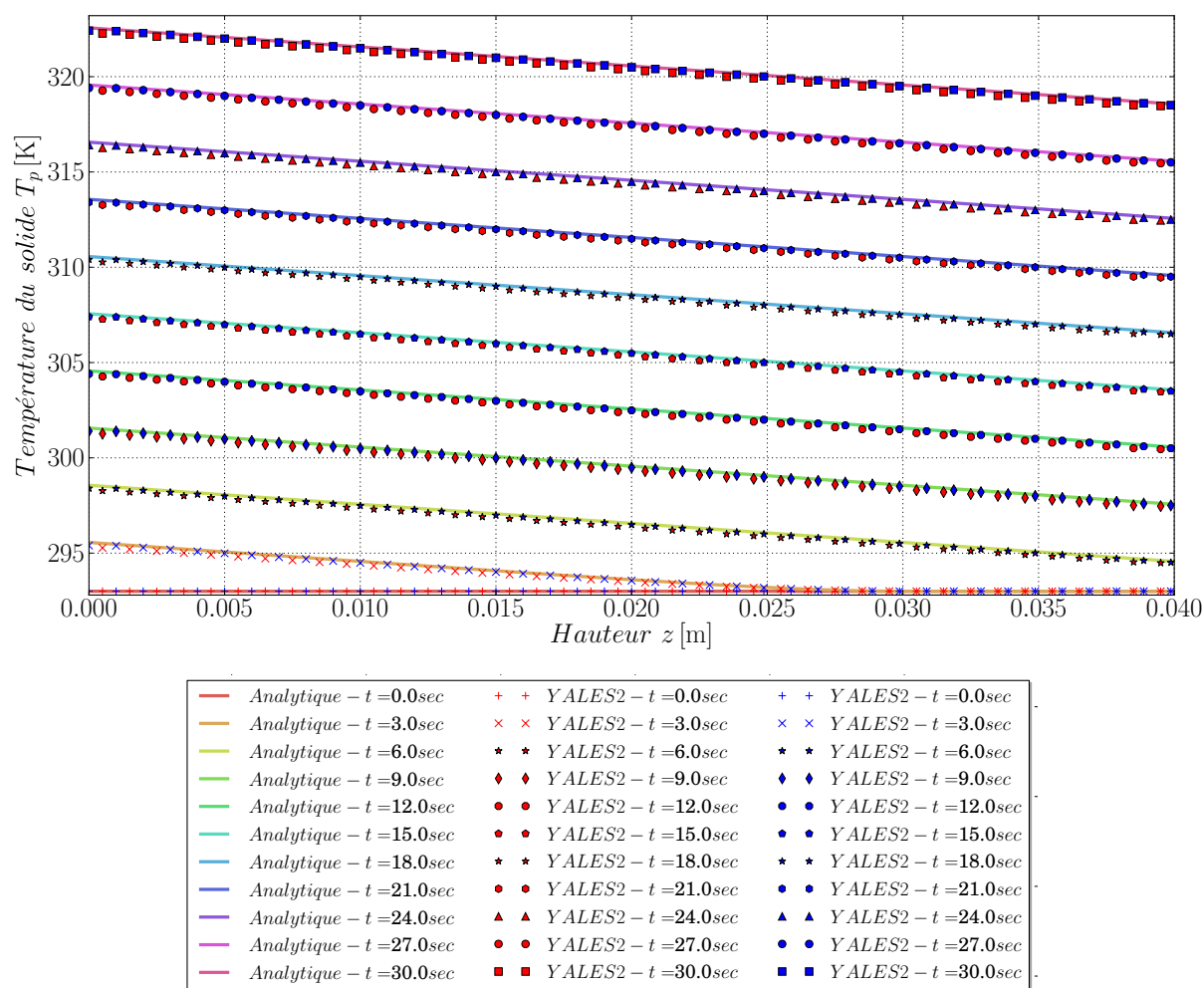


FIGURE 4.13: Cas limite où $\theta_f \rightarrow 0$. Comparaison des températures de solide T_p en fonction de la hauteur z à différents instants t fournies par le calcul analytique (équation 4.70) et par la simulation numérique. Les données numériques en rouge symbolisent le cas grossier, tandis que les données numériques en bleu symbolisent le cas raffiné. Pour ce dernier cas, la plupart des marqueurs sont omis afin d'obtenir une meilleure visibilité.

TABLE 4.12: Valeurs numériques utilisées pour la résolution du système 4.71 dans le cas grossier.

Propriété fixée	Valeur numérique	Unité
u	2.263	$[\text{m.s}^{-1}]$

Propriété fixée	Valeur numérique	Unité
h_{fp}	25	$[\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}]$

En considérant cette fois le cas limite où $\theta_p \rightarrow 0$, correspondant à une situation pour laquelle les particules ont une inertie thermique infinie, les solutions se réécrivent de la façon suivante :

$$\begin{cases} T(z, t) = \begin{cases} T_0 & \text{si } ut < z, \\ T_0 + a \left(t - \frac{z}{u} \right) e^{-\theta_f z} & \text{si } ut \geq z \end{cases} & \text{Phase fluide} \\ T_p(z, t) = T_0 & \text{Phase solide} \end{cases} \quad (4.71)$$

Pour la même raison que dans le cas limite précédent, les valeurs de u et h_{fp} sont modifiées, et indiquées dans le tableau 4.12. Les résultats concernant la température du fluide pour ce cas limite sont visibles sur la figure 4.14. Là encore, un bon accord est observé entre le calcul analytique issu du système 4.71 et la simulation numérique. Dans ce cas particulier où les particules ont une température fixe, aucune différence n'était observable entre le maillage grossier et le maillage raffiné.

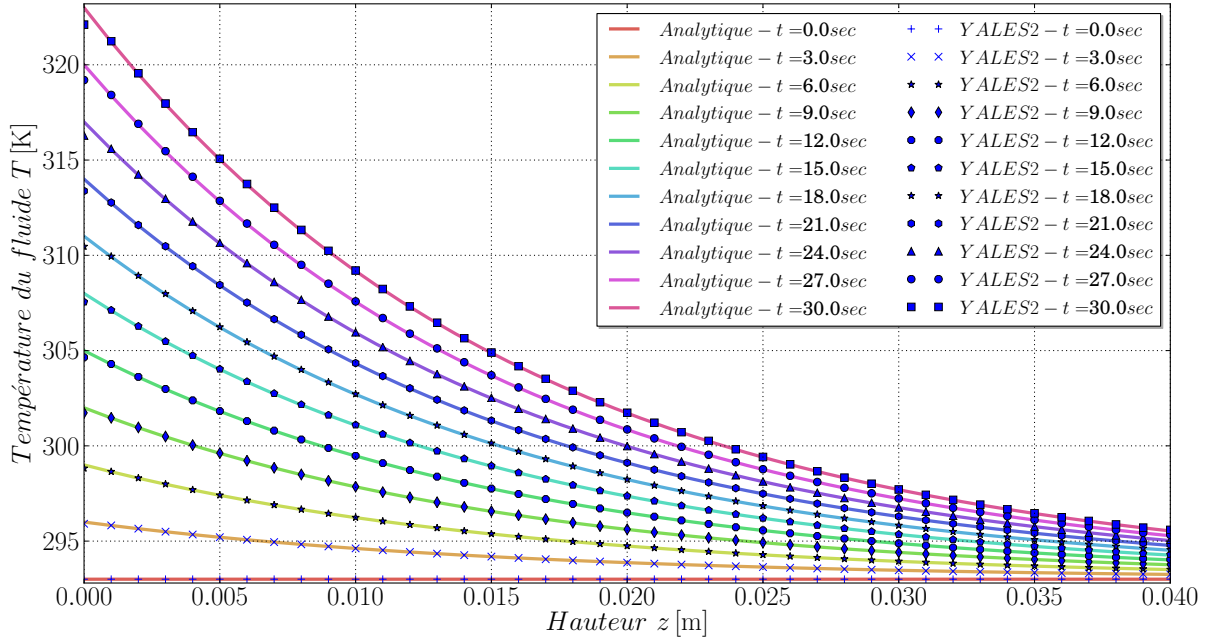


FIGURE 4.14: Cas limite où $\theta_p \rightarrow 0$. Comparaison des températures de fluide T en fonction de la hauteur z à différents instants t fournies par le calcul analytique (équation 4.71) et par la simulation numérique. Aucune différence n'étant observable entre les résultats obtenus pour le cas grossier et le cas raffiné, un seul est représenté.

L'ensemble des situations explorées dans cette étude, à savoir un cas entièrement couplé fluide-solide ($\theta_p, \theta_f \neq 0$), puis un cas à température de fluide non perturbée par les particules ($\theta_p \neq 0, \theta_f = 0$), et enfin un cas à température de particules non perturbée par le fluide ($\theta_p = 0, \theta_f \neq 0$), valident l'aspect instationnaire du solveur granulaire en présence de convection.

Les problèmes de transferts de chaleur diphasiques transitoires étant légion dans beaucoup d'applications industrielles, de nombreux auteurs se sont intéressés à la résolution mathématique de systèmes couplés tel que celui présenté ici. Brinkley [45] s'est intéressé à l'ajout d'un terme source de chaleur dans l'équation régissant la température de la phase solide. Villatoro *et al.* [309] ont cherché à identifier une solution approchée lorsqu'un terme de diffusion est présent de l'équation de la chaleur côté fluide. Ferreira *et al.* [105] ont ajouté un terme de dispersion axiale (modèle 2D) dans leur résolution. Enfin, dans certains cas, il est possible de résoudre une unique équation tenant compte des propriétés équivalentes du milieu solide+fluide [217], ce qui simplifie grandement les calculs. Cette approximation prend son sens lorsque la phase solide est thermiquement très inerte par rapport à la phase gazeuse [312], et a été utilisée pour étudier des systèmes de stockage d'énergie, dans lesquels cette hypothèse se vérifie régulièrement [15]. La thèse de Yu [334] montre la résolution analytique du modèle à une équation avec un terme de diffusion sous divers types de condition d'entrée, puis en considérant les caractéristiques du fluide (coefficient de diffusion, vitesse) comme étant des fonctions dépendant du temps.

4.4 Méthode de fast marching pour la création de halo

La précision de la méthode de type fast marching évoquée dans la section 3.2.2 pour identifier les cellules situées à certaine distance d'une interface de processeurs est quantifiée dans cette partie.

On définit la configuration suivante : un domaine cubique de 1m de côté est maillé à l'aide d'environ un million de tétraèdres de taille caractéristique homogène $\Delta x \sim 0.01\text{m}$. Celui-ci est représenté sur la figure 4.15. Les mailles contenues dans le domaine de calcul du processeur servant de cible pour les tests menés y sont visibles. À droite sur la même figure, le halo de cellules autour du processeur cible obtenu par la méthode de fast marching est coloré par la distance de chaque noeud à l'interface. C'est ce halo qui sera étudié par la suite. Une vue 3D du domaine de calcul du processeur cible est visible sur la figure 4.16.

Deux types de simulations sont effectuées pour ce test :

1. Dans une première salve de simulations lancées sur 20 processeurs, le halo de cellules autour du processeur cible est créé grâce à la méthode de fast marching (méthode approchée). Pour chacune de ces simulations, on fait varier les deux paramètres de la méthode de fast marching, à savoir la quantité de marqueurs utilisés pour décrire l'interface, et la taille des listes de marqueurs stockées aux noeuds.
2. Lors d'une seconde étape, le domaine du processeur cible est retiré du cube, si bien que son interface constitue à présent une paroi à part entière. Il est donc maintenant possible d'utiliser la méthode analytique de calcul de distance à une paroi, basée sur la décomposition de Voronoi expliquée dans la section 2.3.

Dans les deux cas, il est demandé au code d'identifier tous les noeuds situés à une distance inférieure à 0.15m, soit grossièrement 15 couches de tétraèdres. En comparant pour chaque noeud du halo identifié de façon exacte la distance exacte d_{exacte} et la distance obtenue par fast marching d_{FM} , on obtient

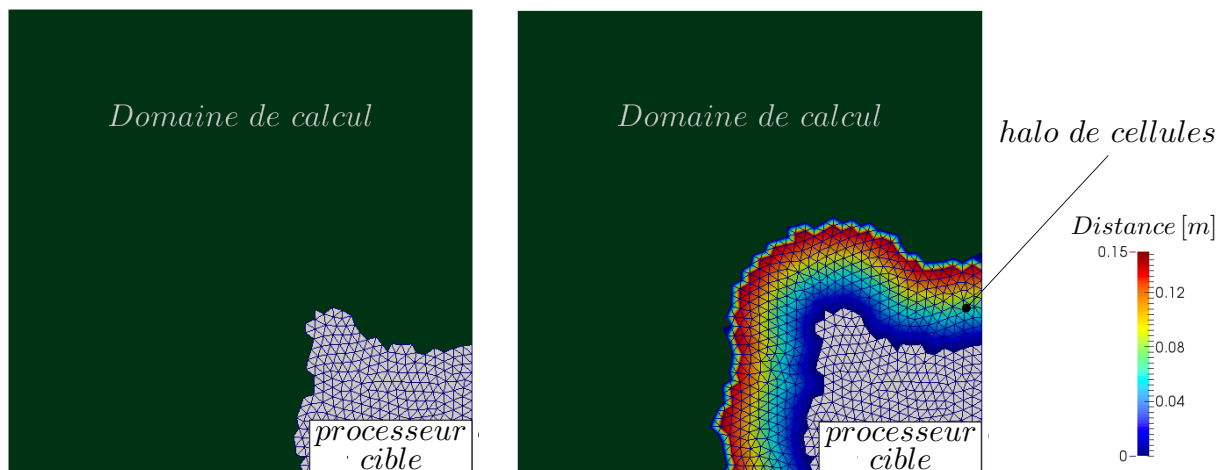


FIGURE 4.15: Le domaine de calcul cubique utilisé pour le test de validation de la méthode de fast marching est ici vu de côté. Les mailles contenues dans le domaine de calcul du processeur servant de cible sont représentées. A droite, le halo de cellules obtenu par la méthode de fast marching est coloré par la distance de chaque noeud à l'interface du processeur cible.

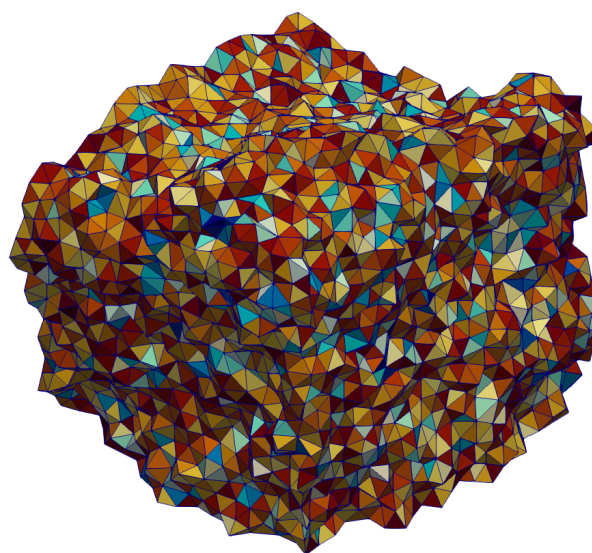


FIGURE 4.16: Aperçu en trois dimensions du domaine de calcul du processeur cible colorié arbitrairement, autour duquel est construit le halo.

une quantification de l'erreur commise. Cet exercice relève d'une complexité réaliste, où les domaines de calcul des processeurs sont découpés automatiquement par l'outil de partitionnement de maillage, et présentent donc des formes irrégulières. De plus, la taille de halo demandée (0.15m) est volontairement choisie très grande devant la taille caractéristique des éléments ($\Delta x \sim 0.01\text{m}$) afin de faire apparaître d'éventuelles erreurs dans le mécanisme de propagation de la méthode de fast marching. En effet, dans une simulation réelle, définir un halo de cette dimension ne serait utile que dans le cas de particules de rayon 0.15m. Le halo de référence, obtenu par calcul exacte de la distance, se compose de 6308 noeuds.

4.4.1 Analyse d'un cas particulier

Avant de procéder à l'étude paramétrique complète, on analyse les résultats obtenus dans un cas particulier arbitrairement choisi afin d'introduire quelques points fondamentaux. Ce cas comporte 30 marqueurs générés par face, 20 par paire de noeuds, et 1 par noeud, sur l'intégralité de l'interface du processeur cible. Les listes stockées aux noeuds comprennent un maximum de 60 marqueurs.

Sur la figure 4.18, la distance obtenue par fast marching d_{FM} est tracée en fonction de la distance exacte à l'interface d_{exacte} pour chaque noeud du halo. La majorité des noeuds semble située près de l'axe $d_{FM} = d_{exacte}$, ce qui correspond au comportement recherché. Afin de faire apparaître plus finement les écarts de valeur, la figure 4.19 représente l'erreur signée commise pour chaque noeud $d_{exacte} - d_{FM}$ en fonction de d_{exacte} . Pour la quasi totalité des noeuds du halo, la valeur absolue de l'erreur est inférieure à $\frac{1}{100}\Delta x$. Une erreur maximum d'environ $\frac{1}{20}\Delta x$ est observée. Toutes ces erreurs sont à valeur négative, ainsi $d_{exacte} \leq d_{FM}$: la méthode de fast marching a donc tendance à surestimer la distance, ce qui correspond à un comportement logique. Une telle surestimation de la distance ne va cependant pas dans le sens souhaité, car elle pourrait éventuellement conduire à l'oubli de certains noeuds. Il s'agit donc d'ajouter une sécurité supplémentaire basée sur la mesure de l'erreur commise, d'où l'importance de sa quantification. L'analyse est donc complétée par la figure 4.20, qui illustre l'erreur signée relative $\frac{d_{exacte} - d_{FM}}{d_{exacte}}$ en % en fonction de la distance exacte à l'interface. Cette figure fait apparaître une erreur relative maximum pour quelques noeuds situés à des distances entre 0.01 et 0.04m, soit entre 1 et $4\Delta x$ de l'interface. Il s'agit donc des noeuds les plus proches de l'interface. Ce résultat n'est pas surprenant : plus les noeuds sont proches de l'interface, plus ils "voient" la discrétisation appliquée à l'aide des marqueurs. Conformément à cette observation, l'erreur diminue en moyenne pour les noeuds plus lointains, puisque leur distance à l'interface devient de plus en plus grande devant l'espacement des marqueurs.

Afin de vérifier ces tendances, la figure 4.17 illustre l'exemple simple d'un noeud utilisant un marqueur pour estimer sa distance à une portion d'interface. La valeur de Δm , qui représente l'écart entre le projeté orthogonal du noeud sur l'interface et le marqueur, est directement liée à la qualité de la discrétisation, donc au nombre de marqueurs utilisés. En remarquant que :

$$d_{exacte} = \cos(\theta)d_{FM} \quad \text{et} \quad \Delta m = \tan(\theta)d_{exacte}, \quad (4.72)$$

on peut écrire pour $d_{exacte} > 0$ que :

$$d_{exacte} - d_{FM} = \left[1 - \frac{1}{\cos(\arctan(\Delta m/d_{exacte}))} \right] d_{exacte}. \quad (4.73)$$

Cette écriture peut se simplifier de la façon suivante en exprimant l'erreur relative :

$$\frac{d_{exacte} - d_{FM}}{d_{exacte}} = 1 - \sqrt{1 + \left(\frac{\Delta m}{d_{exacte}} \right)^2}. \quad (4.74)$$

L'allure de la fonction $\frac{d_{exacte} - d_{FM}}{d_{exacte}} = f(d_{exacte})$ pour trois valeurs non-nulles de Δm est également représentée sur la figure 4.17. Cette courbe représente l'erreur relative en l'absence de toute autre erreur que celle de discrétisation, liée à la valeur de Δm . Il s'agit donc d'une erreur "minimale". Son tracé confirme que l'erreur est à valeurs négatives, et tend vers 0 de façon monotone avec l'augmentation de la distance exacte. De surcroît, plus la discrétisation est fine, plus Δm tend vers 0, ce qui en toute logique conduit à des erreurs plus faibles. Les noeuds les plus proches de l'interface sont les plus sensibles à

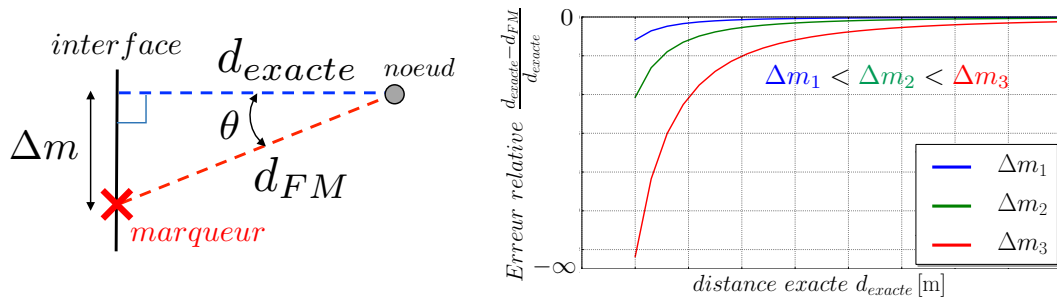


FIGURE 4.17: À gauche : représentation de la distance exacte d_{exacte} entre un noeud et une portion d'interface plane, et approximation par fast marching d_{FM} . La distance entre le marqueur sélectionné et le projeté orthogonal du noeud sur l'interface est notée Δm . À droite : allure de la courbe d'erreur relative en fonction de la distance exacte pour trois valeurs de Δm , donnée par la relation 4.74.

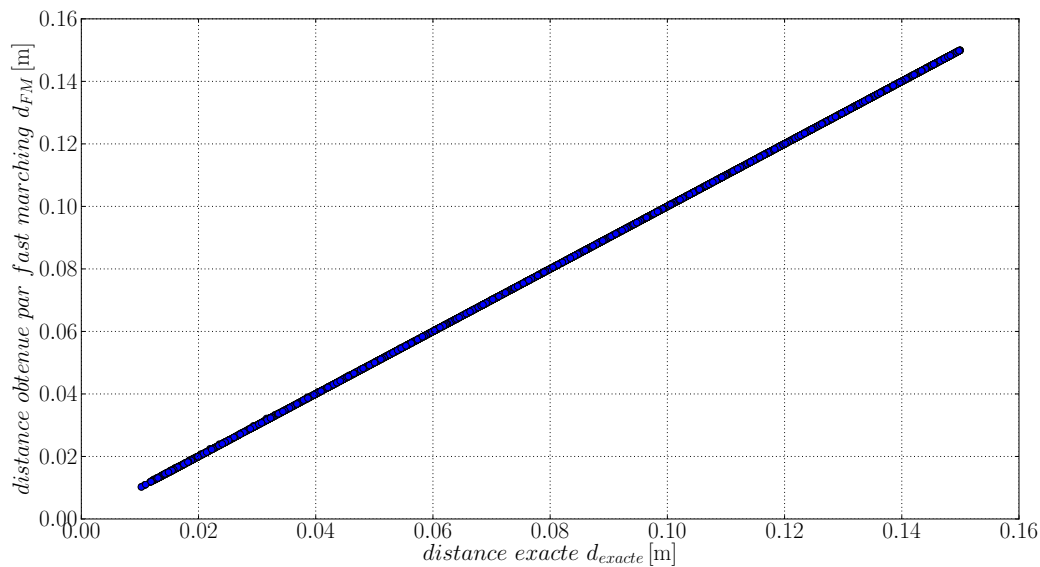


FIGURE 4.18: Pour l'ensemble des noeuds appartenant au halo autour du processeur cible, signalés par des points bleus (6308 points au total), la distance obtenue par fast marching est tracée en fonction de la distance exacte à l'interface.

la qualité de la discrétisation. À noter que la relation 4.74 n'est valable que dans le cas d'une portion d'interface plane. Dans un cas non plan, on peut s'attendre à ce que pour les mêmes valeurs de Δm et d_{exacte} l'erreur soit plus importante.

Finalement, la figure 4.21 illustre la densité de probabilité pour l'erreur relative associée à la figure 4.20 en considérant des intervalles de largeur 0.05%. Elle montre que près de 90% des distances calculées par la méthode de fast marching prédisent la distance exacte à mieux que 99.95%. À noter que l'axe des abscisses a été tronqué, donc l'erreur maximum n'est pas observable sur la figure.

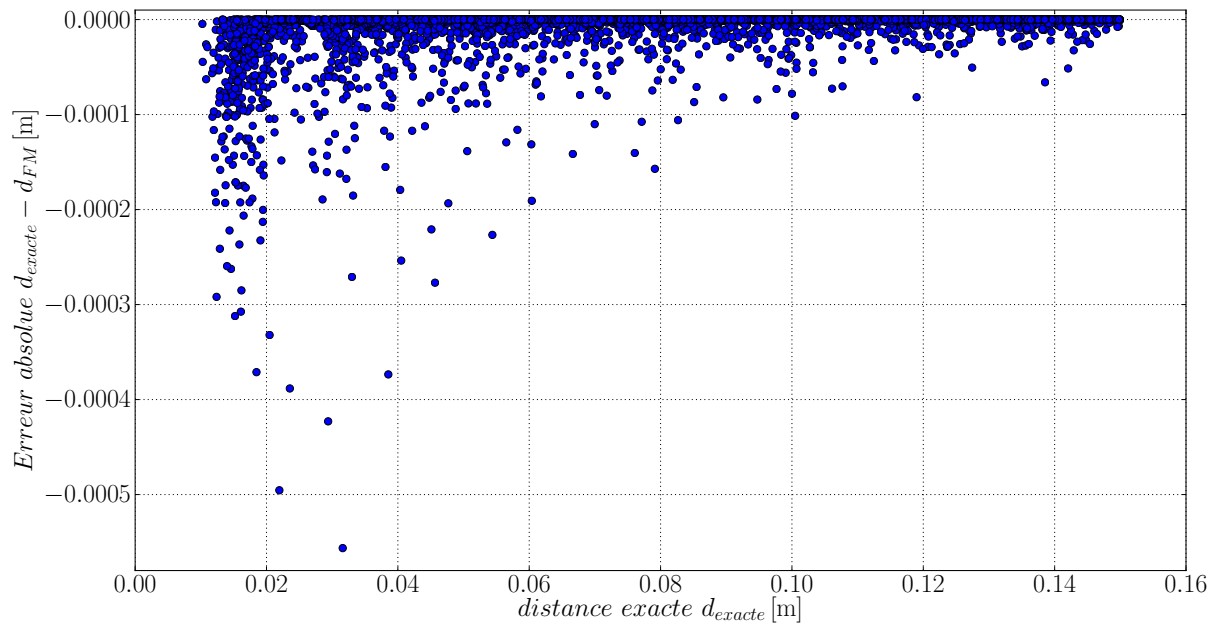


FIGURE 4.19: Pour l'ensemble des noeuds appartenant au halo autour du processeur cible, signalés par des points bleus (6308 points au total), l'erreur signée commise $d_{exacte} - d_{FM}$ est tracée en fonction de la distance exacte à l'interface.

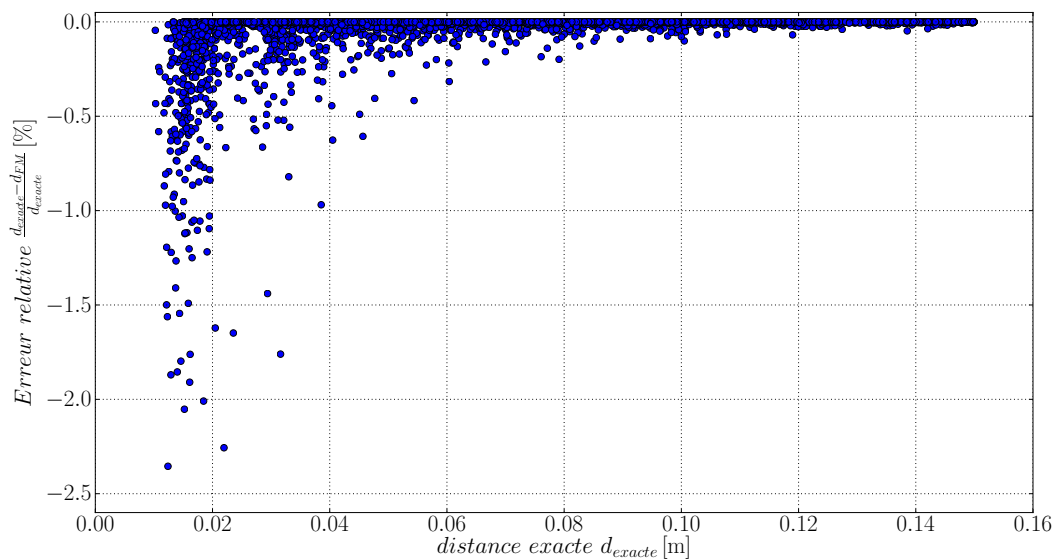


FIGURE 4.20: L'erreur signée relative $\frac{d_{exacte} - d_{FM}}{d_{exacte}}$ en % est tracée en fonction de la distance exacte à l'interface.

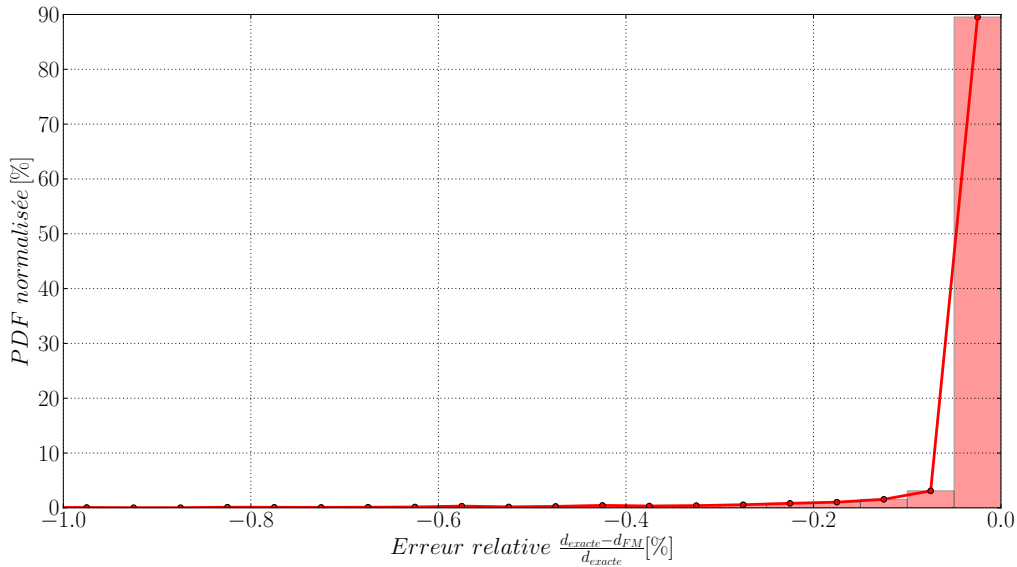


FIGURE 4.21: La PDF normalisée de l'erreur signée relative $\frac{d_{exacte}-d_{FM}}{d_{exacte}}$ en % est représentée en considérant des intervalles de 0.05%.

4.4.2 Influence de la taille des listes

Pour une quantité identique de marqueurs utilisés pour quadriller l'interface, la taille des listes de marqueurs sur chaque noeud peut être modifiée. Sans influence sur l'erreur due à la discrétisation imparfaite de l'interface, cette taille possède une influence sur les erreurs dues à la propagation. On se propose donc ici de mesurer l'impact de la modification de la taille de ces listes pour un nombre de 60 marqueurs par face, donc une discrétisation identique. Les tailles de liste à l'étude sont de 1, 10, 30, 60, 100, et 120 éléments par liste. Les résultats sous forme de nuages de points, un point par noeud du halo, sont visibles sur la figure 4.23 pour l'erreur absolue, et la figure 4.24 pour l'erreur relative. Ils sont ensuite synthétisés sur les figures 4.25 et 4.26. Pour ces deux dernières figures, on classe les 6308 noeuds du halo en 14 groupes. Le n ième groupe est composé des noeuds i situés à une distance exacte $d_{exacte,i}$ de l'interface telle que $i\Delta x \leq d_{exacte,i} < (i+1)\Delta x$. Dans chaque groupe sont cumulés N noeuds. Sur chaque figure :

- En haut, on représente l'erreur maximum dans chaque groupe : $-\max(|\text{erreur}_i|)$, où erreur_i représente l'erreur au noeud i .
- En bas, on représente l'erreur moyenne dans chaque groupe $\frac{1}{N} \sum_{i \in N} (\text{erreur}_i)$.

On effectue ces calculs à partir de l'erreur absolue pour tracer la figure 4.25, alors que l'erreur relative est utilisée sur la figure 4.26.

On y observe une évolution monotone de la qualité de la prédiction : globalement, l'erreur semble devenir de plus en plus faible à mesure que la taille des listes est augmentée. À noter cependant que pour les noeuds situés à une distance entre Δx et $2\Delta x$ de l'interface, la taille des listes semble avoir peu d'influence sur la qualité de la prédiction, ce qui est particulièrement visible sur les erreurs moyennes. Cela peut s'expliquer par le fait que les noeuds de la première couche de cellules sont en moyenne insensibles aux mécanismes de propagation des listes de marqueurs, puisqu'ils voient directement les marqueurs disposés sur l'interface. Ces noeuds n'ont besoin que d'un marqueur pour estimer avec une bonne précision

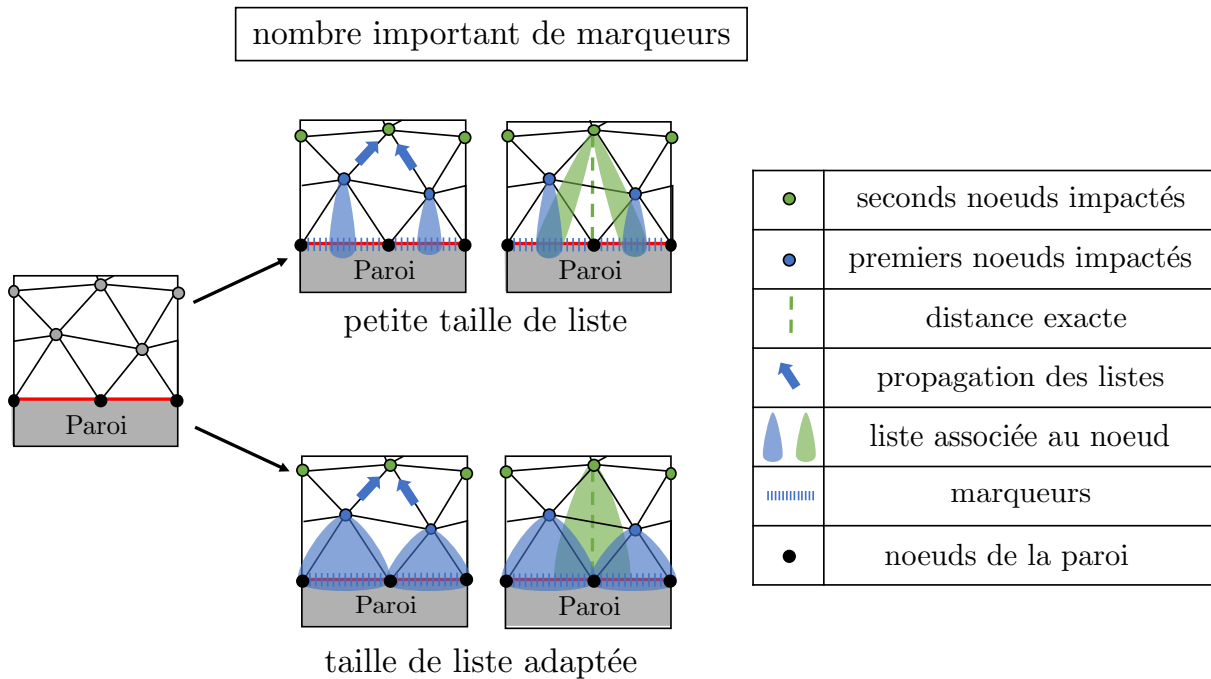


FIGURE 4.22: Illustration de la nécessité d'adapter la taille de liste au nombre de marqueurs utilisés. Pour un nombre important de marqueurs générés sur l'interface, on compare un cas où la taille de liste employée est trop petite, puis un cas où elle est adaptée.

leur distance à l'interface, et celui-ci sera forcément présent dans leur liste, même si celle-ci possède une taille minimale. L'erreur moyenne illustrée sur la figure 4.25 montre que les couches de cellules au-delà de $\sim 2\Delta x$ sont au contraire particulièrement impactées par la taille des listes. Ces différentes observations sont schématisées sur la figure 4.22 : dans le cas limite où la taille des listes est très petite devant le nombre de marqueurs utilisés par face de l'interface, les premiers noeuds impactés (noeuds de la première couche) ne stockeront dans leur liste que les quelques marqueurs dont ils sont le plus proche. En revanche, la distance pour les noeuds de la seconde couche est uniquement basée sur la propagation des listes des noeuds de la première couche. Il en résulte une incapacité des noeuds de la seconde couche à prédire correctement leur distance à l'interface, puisque l'information nécessaire a été perdue dès la première étape de propagation. On fait alors apparaître des erreurs liées aux mécanismes de propagation. À l'inverse, si la taille des listes est adaptée au nombre de marqueurs générés, l'information propagée de proche en proche permet effectivement aux noeuds lointains de calculer cette distance de façon précise. Il est ainsi fondamental que la taille des listes soit adaptée à la quantité de marqueurs, de façon à ce que l'intégralité des marqueurs générés soient présents parmi les listes des noeuds de la première couche. Pour cette partie de l'étude, l'erreur relative maximale observable se situe entre -10 et -2.5% , tandis que l'erreur relative moyenne reste confinée à moins de 2% en valeur absolue.

L'effet de l'augmentation de la taille des listes sur l'erreur relative moyenne devient négligeable au-delà de 60 éléments par liste. À partir de 30 éléments par liste, l'évolution de l'erreur relative moyenne est monotone. Celle-ci tend vers l'allure de la courbe de la figure 4.17 montrant l'influence des erreurs de discrétisation, ce qui permet de postuler que l'augmentation de la taille des listes a pour effet de réduire l'erreur due aux mécanismes de propagation.

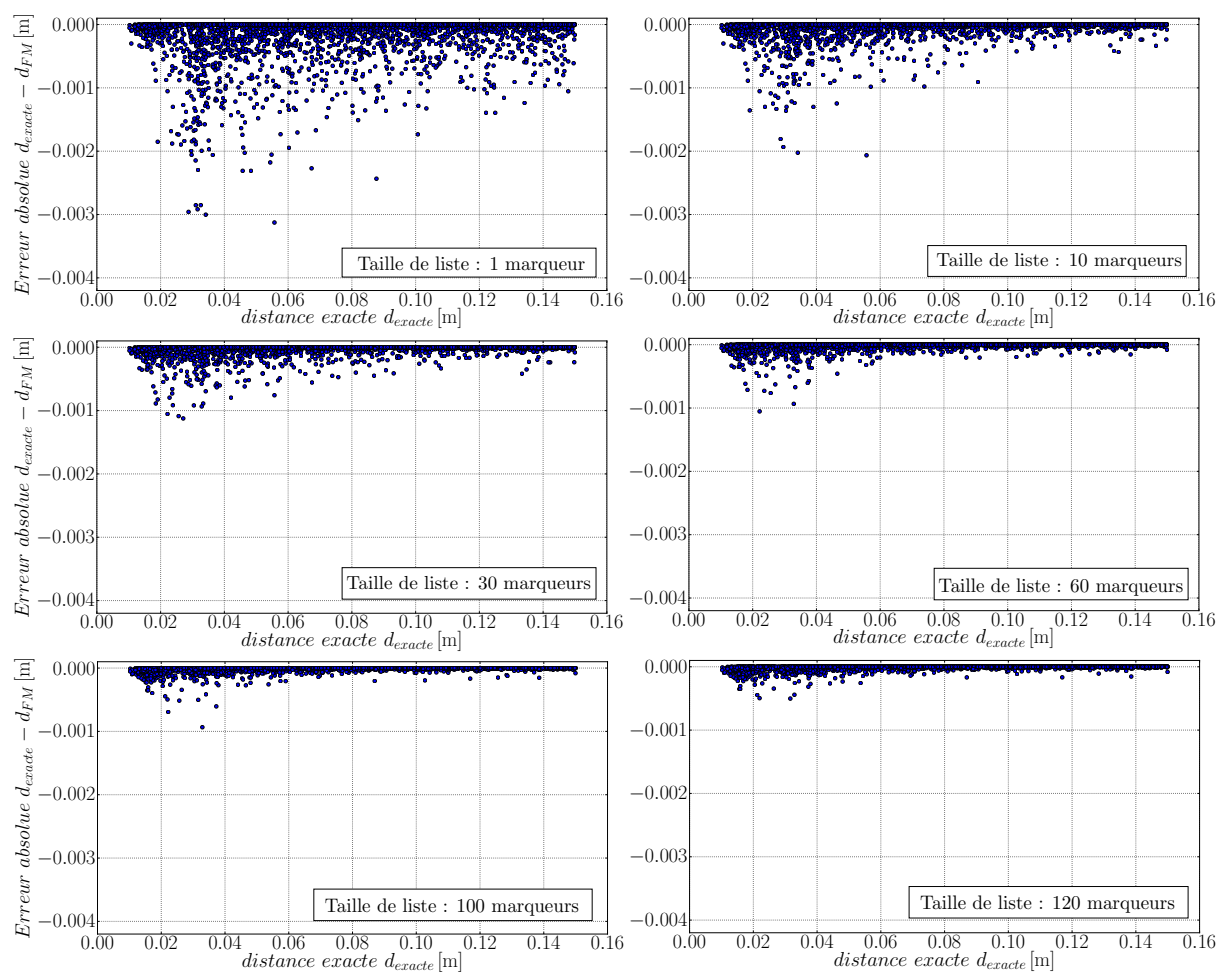


FIGURE 4.23: Premier test : pour un même nombre de marqueurs générés par face pour la méthode de fast marching, ici 60, on augmente la taille de liste de marqueurs stockées aux noeuds. L'erreur signée absolue $d_{exacte} - d_{FM}$ est représentée pour des tailles de liste de 1, 10, 30, 60, 100, et 120.

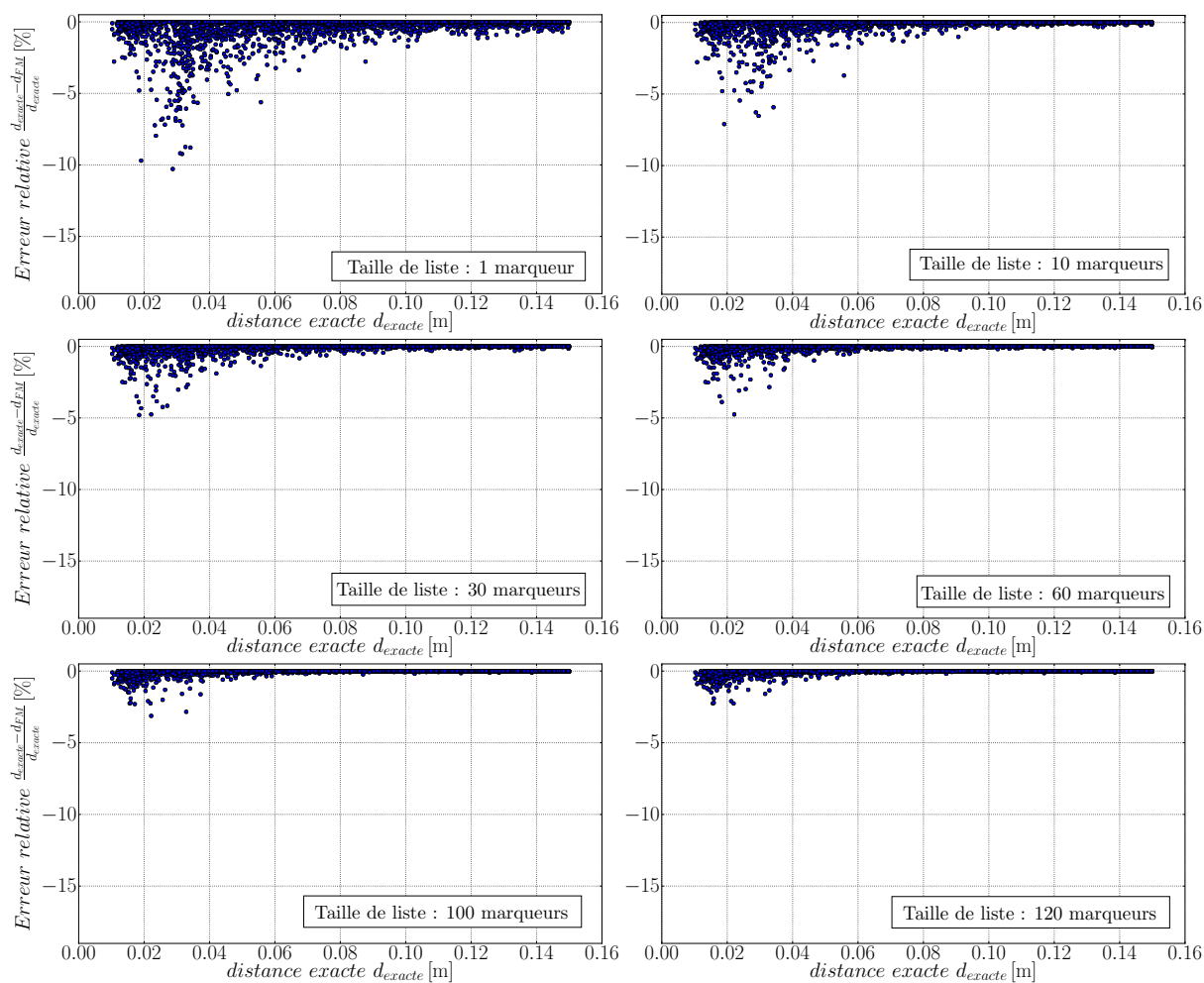


FIGURE 4.24: Premier test : pour un même nombre de marqueurs générés par face pour la méthode de fast marching, ici 60, on augmente la taille de liste de marqueurs stockées aux noeuds. L'erreur signée relative $\frac{d_{exact} - d_{FM}}{d_{exact}}$ est représentée pour des tailles de liste de 1, 10, 30, 60, 100, et 120.

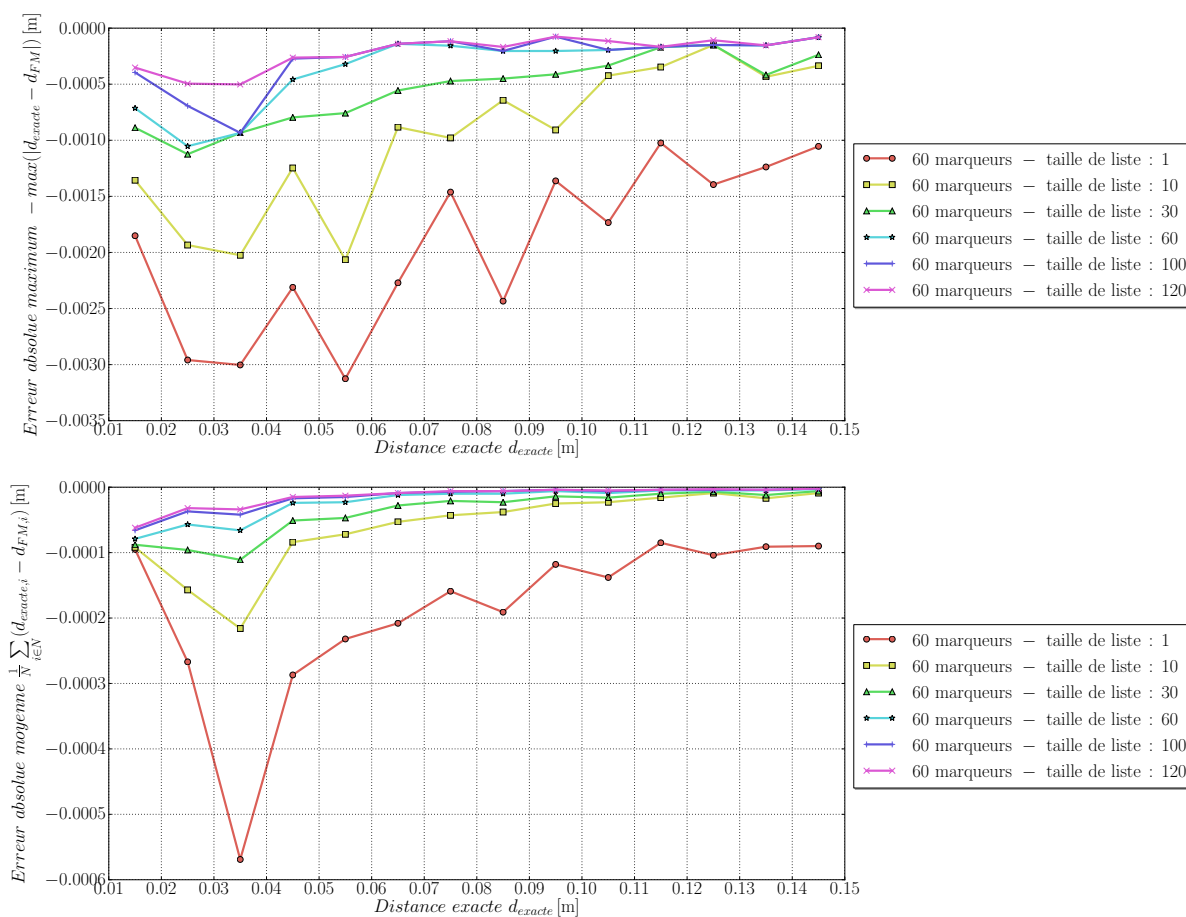


FIGURE 4.25: Premier test : pour un même nombre de marqueurs générés pour la méthode de fast marching, ici 60, et une taille de liste variable, on classe les 6308 noeuds du halo en 14 groupes. Le n ième groupe est composé des noeuds i situés à une distance exacte $d_{exacte,i}$ de l'interface telle que $i\Delta x \leq d_{exacte,i} < (i+1)\Delta x$. Dans chaque groupe sont cumulés N noeuds. En haut, on représente l'erreur absolue maximum dans chaque groupe $-\max(|d_{exacte,i} - d_{FM,i}|)$. En bas, on représente l'erreur moyenne dans chaque groupe $\frac{1}{N} \sum_{i \in N} (d_{exacte,i} - d_{FM,i})$.

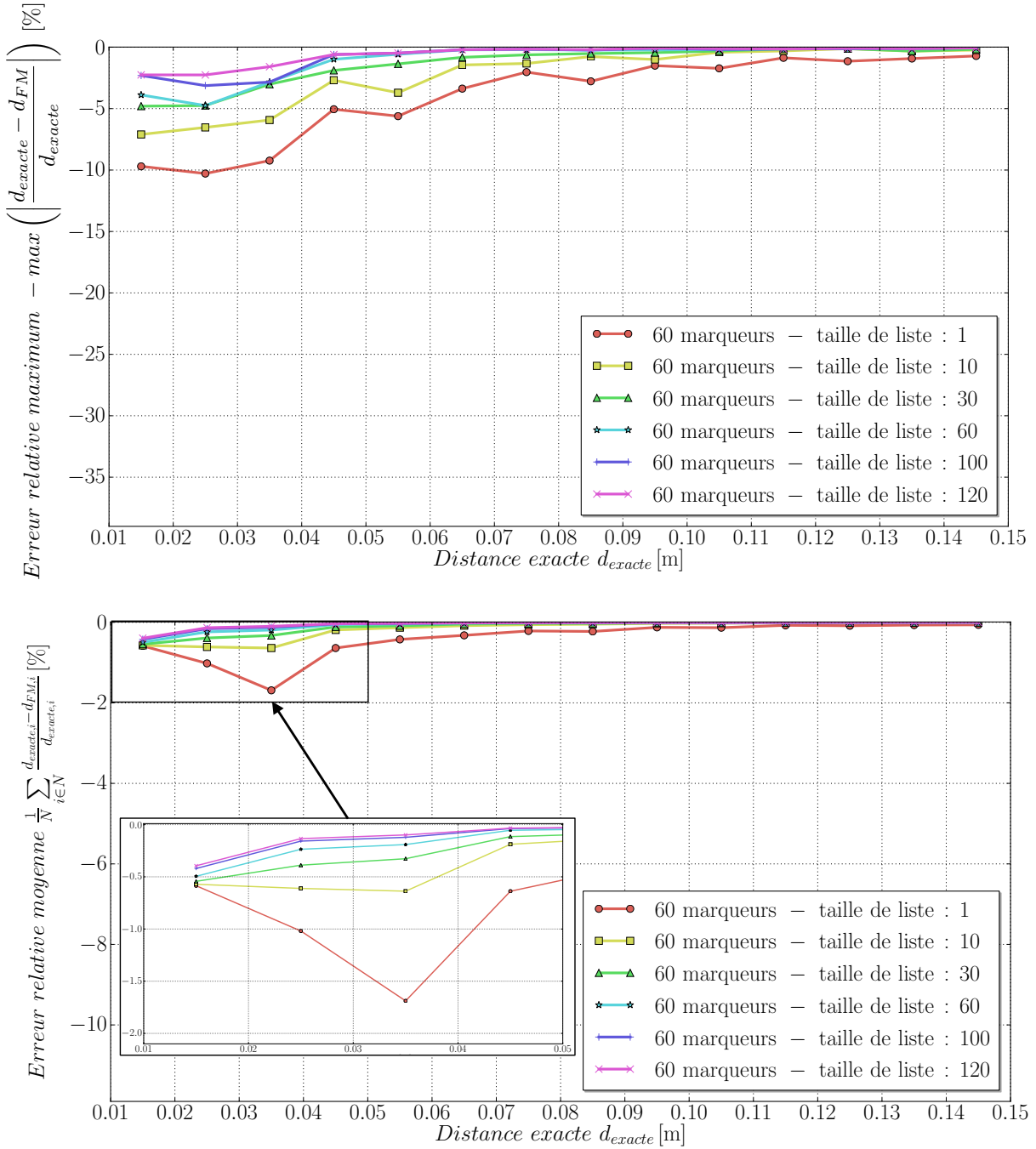


FIGURE 4.26: Premier test : pour un même nombre de marqueurs générés pour la méthode de fast marching, ici 60, et une taille de liste variable, on classe les 6308 noeuds du halo en 14 groupes. Le n ième groupe est composé des noeuds i situés à une distance exacte $d_{exacte,i}$ de l'interface telle que $i\Delta x \leq d_{exacte,i} < (i + 1)\Delta x$. Dans chaque groupe sont cumulés N noeuds. En haut, on représente l'erreur relative maximum dans chaque groupe $-\max\left(\frac{d_{exacte} - d_{FM}}{d_{exacte}}\right)$. En bas, on représente l'erreur moyenne dans chaque groupe $\frac{1}{N} \sum_{i \in N} \frac{d_{exacte,i} - d_{FM,i}}{d_{exacte,i}}$.

4.4.3 Influence du nombre de marqueurs

Outre l'augmentation de la taille des listes de marqueurs sur chaque noeud, le nombre de marqueurs utilisés pour quadriller l'interface peut également faire l'objet d'une modification. Comme vu précédemment, augmenter la quantité de marqueurs permet de réduire statistiquement Δm (voir figure 4.17), donc d'améliorer la précision de la mesure de distance. On se propose donc dans un second test de mesurer l'impact de l'augmentation du nombre de marqueurs par face, pour une taille de liste identique de 60 éléments par liste. Les quantités de marqueurs à l'étude sont de 1, 10, 30, 60, 100, et 140 marqueurs par face, avec un nombre également croissant de marqueurs par paire. Les résultats sous forme de nuages de points, un point par noeud du halo, sont visibles sur la figure 4.27 pour l'erreur absolue, et la figure 4.28 pour l'erreur relative. Ils sont ensuite synthétisés par les figures 4.29 et 4.30. Pour chacune de ces figures, on classe les 6308 noeuds du halo en 14 groupes, comme précédemment. Sur la figure 4.29, l'erreur absolue est représentée, tandis que l'erreur relative est tracée sur la figure 4.30.

On observe dans un premier temps que pour des nombres de marqueurs très faibles (1, 10), la figure 4.30 montre des allures de courbes rappelant celles de la figure 4.17. Ceci tend à montrer que pour

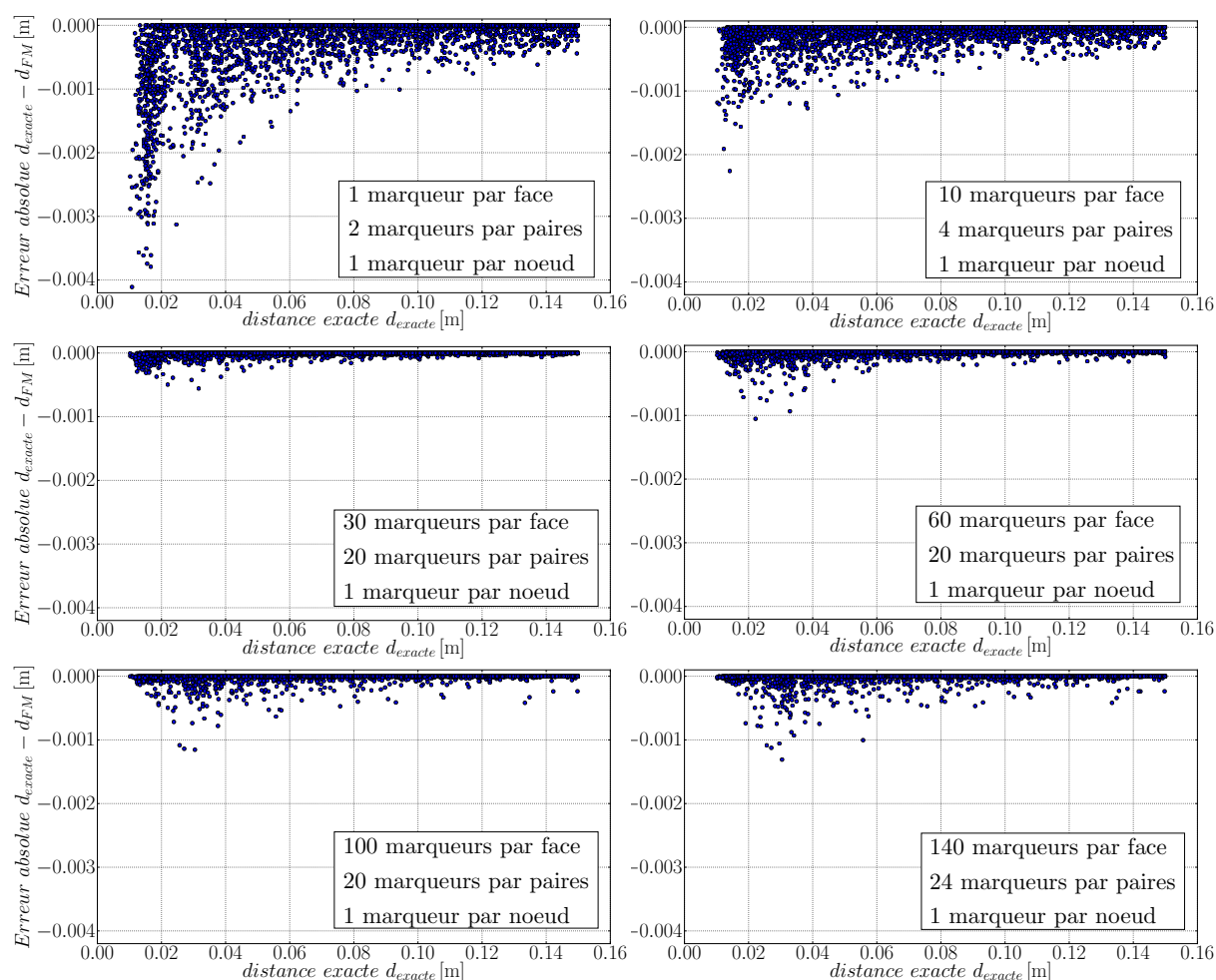


FIGURE 4.27: Second test : pour une même taille de liste stockée aux noeuds pour la méthode de fast marching, ici 60, on augmente la quantité de marqueurs générés sur l'interface. L'erreur signée absolue $d_{exacte} - d_{FM}$ est représentée pour des nombres de marqueurs de 1, 10, 30, 60, 100, et 140 par face.

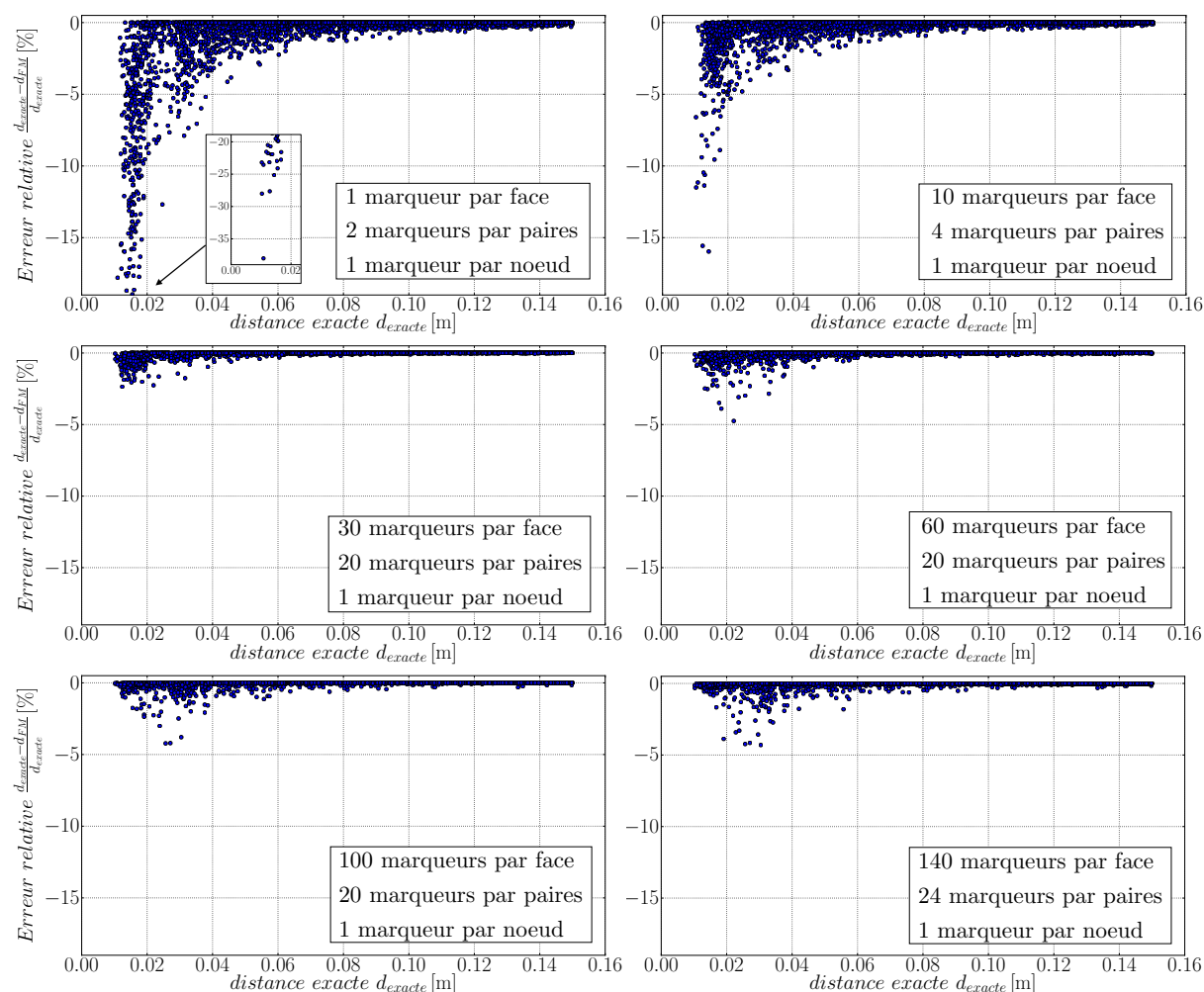


FIGURE 4.28: Second test : pour une même taille de liste stockée aux noeuds pour la méthode de fast marching, ici 60, on augmente la quantité de marqueurs générés sur l'interface. L'erreur signée relative $\frac{d_{exact} - d_{FM}}{d_{exact}}$ est représentée pour des nombres de marqueurs de 1, 10, 30, 60, 100, et 140 par face.

ces régimes, c'est bien l'erreur de discrétisation qui prévaut. En effet, les listes, comportant 60 éléments pour ce test, possèdent des tailles largement suffisantes pour satisfaire le critère mis en lumière sur la figure 4.22. La qualité de la prédiction moyenne augmente de façon monotone avec le nombre de marqueurs pour les noeuds les plus proches de l'interface. Là encore, ceci était attendu puisqu'il a déjà été montré que ces noeuds sont uniquement sensibles à la qualité de la discrétisation. En revanche, contrairement au cas précédent, l'évolution de la qualité de la prédiction pour les noeuds plus lointains n'est pas monotone : les plus faibles valeurs des erreurs maximales et moyennes sont obtenues pour une quantité de 30 marqueurs par face. Il est possible qu'au-delà de ce nombre, le mécanisme de propagation conduise à l'apparition des erreurs montrées sur la figure 4.22, dues à une quantité de marqueurs trop importante compte tenu de la taille des listes.

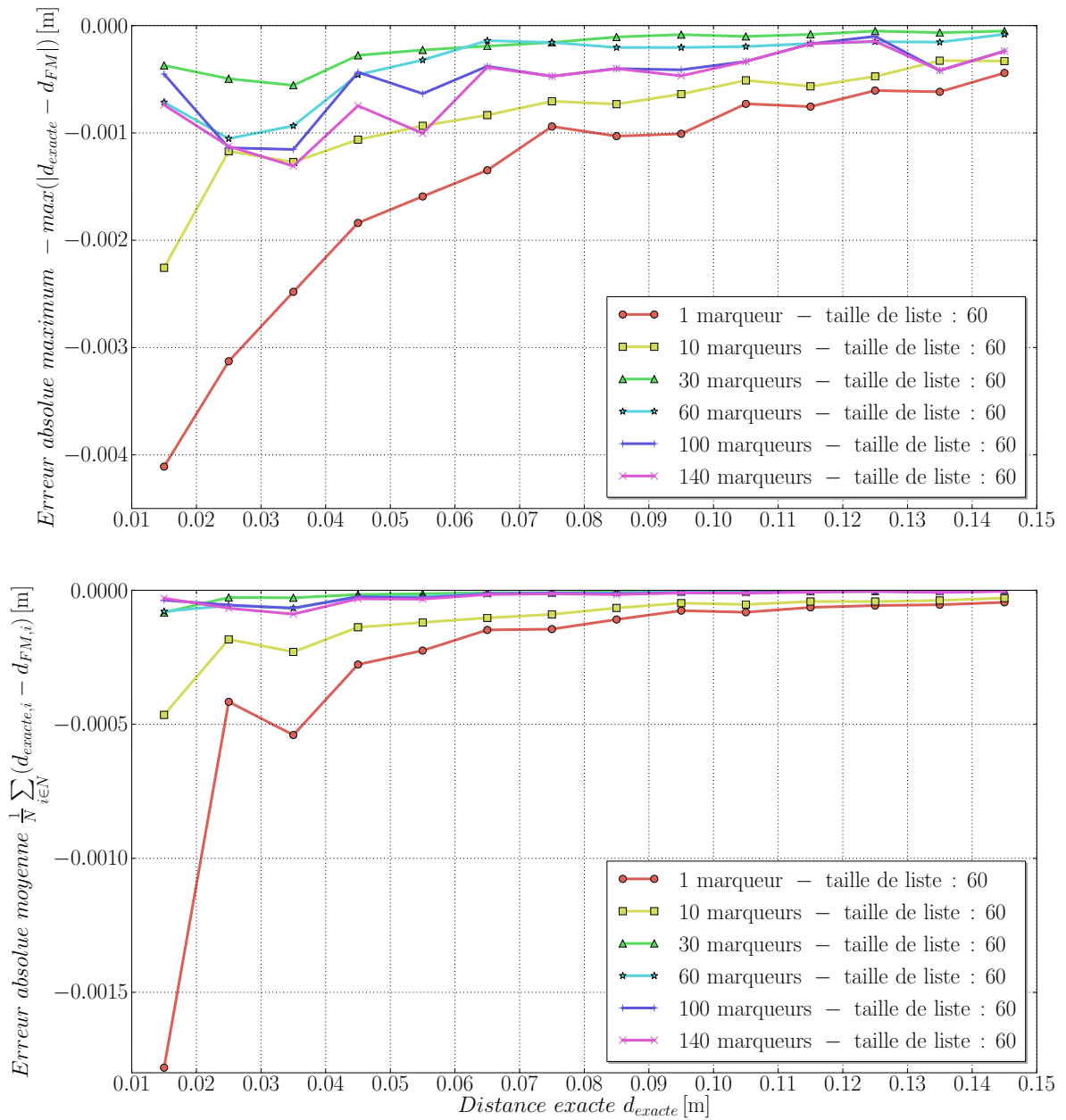


FIGURE 4.29: Second test : pour une même taille de liste stockée aux noeuds pour la méthode de fast marching, ici 60, et un nombre de marqueurs générés variable, on classe les 6308 noeuds du halo en 14 groupes. Le n ième groupe est composé des noeuds i situés à une distance exacte $d_{exacte,i}$ de l'interface telle que $i\Delta x \leq d_{exacte,i} < (i+1)\Delta x$. Dans chaque groupe sont cumulés N noeuds. En haut, on représente l'erreur absolue maximum dans chaque groupe $-\max(|d_{exacte,i} - d_{FM,i}|)$. En bas, on représente l'erreur moyenne dans chaque groupe $\frac{1}{N} \sum_{i \in N} (d_{exacte,i} - d_{FM,i})$.

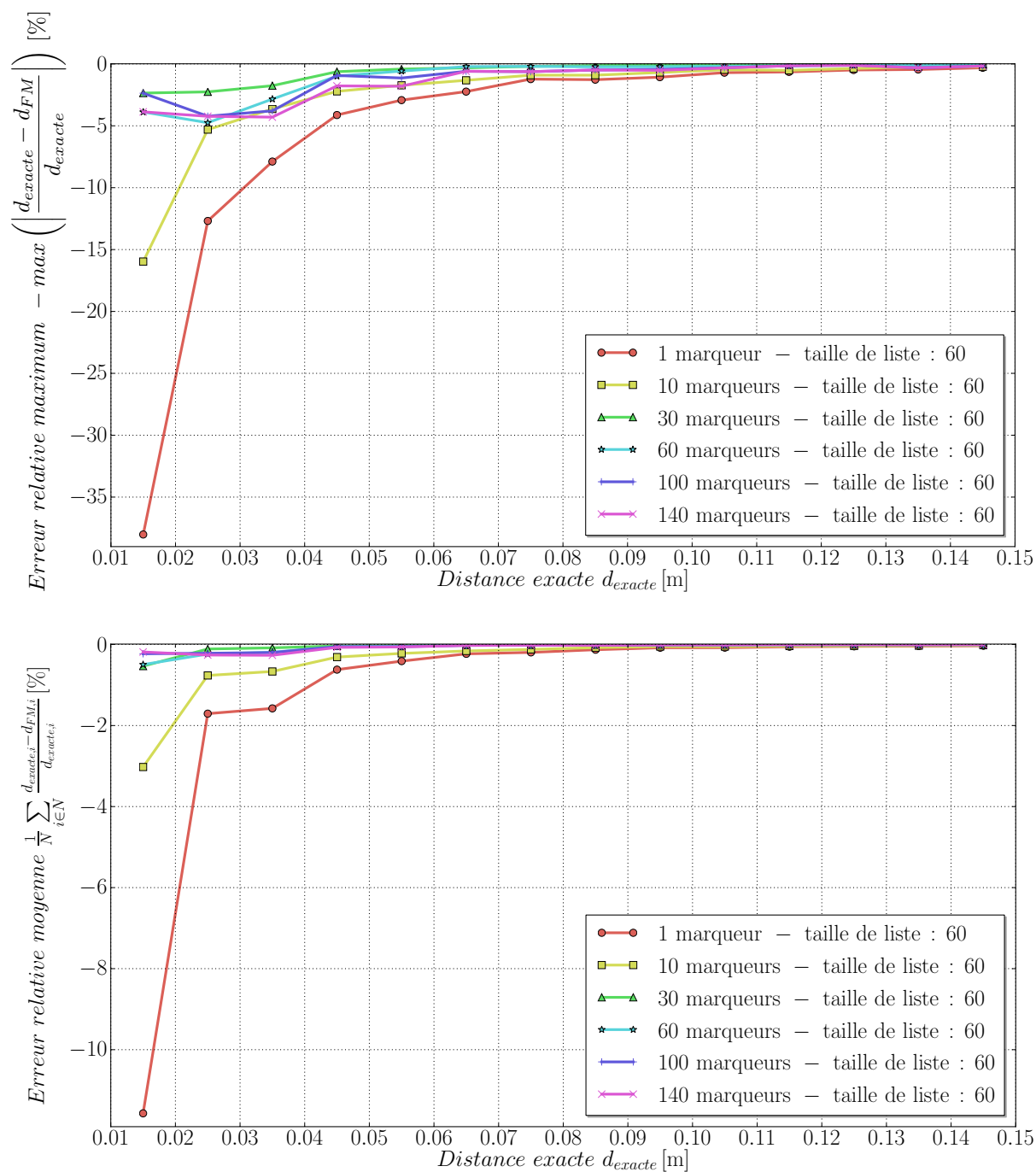


FIGURE 4.30: Second test : pour une même taille de liste stockée aux noeuds pour la méthode de fast marching, ici 60, et un nombre de marqueurs générés variable, on classe les 6308 noeuds du halo en 14 groupes. Le n ième groupe est composé des noeuds i situés à une distance exacte $d_{exacte,i}$ de l'interface telle que $i\Delta x \leq d_{exacte,i} < (i+1)\Delta x$. Dans chaque groupe sont cumulés N noeuds. En haut, on représente l'erreur relative maximum dans chaque groupe $-\max \left(\left| \frac{d_{exacte,i} - d_{FM,i}}{d_{exacte,i}} \right| \right)$. En bas, on représente l'erreur moyenne dans chaque groupe $\frac{1}{N} \sum_{i \in N} \frac{d_{exacte,i} - d_{FM,i}}{d_{exacte,i}}$.

4.4.4 Conclusion de l'étude paramétrique.

En conclusion, cette étude valide l'implémentation de la méthode de fast marching pour estimer la distance à l'interface d'un processeur. Les erreurs commises sont maintenues à un niveau faiblement négatif pour des quantités raisonnables de marqueurs générés sur l'interface et de taille de liste stockée aux noeuds. Deux principaux types d'erreur ont été mis à jour lors de l'étude paramétrique :

- l'erreur de discrétisation est générée par la représentation de l'interface par les marqueurs. Ceux-ci sont disposés aléatoirement sur ses faces, arêtes et noeuds dans des quantités qui peuvent varier. L'augmentation du nombre de marqueurs permet de réduire cette erreur, puisqu'elle favorise la probabilité de trouver un marqueur près du point de l'interface le plus proche du noeud considéré.
- L'erreur de propagation est due au fait que la plupart des noeuds n'ont pas directement accès aux marqueurs disposés sur l'interface. Au lieu de ça, les coordonnées des marqueurs sont propagées des premières couches de cellules jusqu'aux plus lointaines, et il est fondamental que les noeuds lointains aient connaissance des marqueurs les plus proches de leur projeté. Au cours de la propagation, certains marqueurs peuvent être oubliés, ce qui vient limiter la qualité de la prédiction. Le nombre de marqueurs qu'un noeud peut simultanément connaître, *i.e.* la taille des listes de marqueurs, est ainsi l'un des critères les plus importants.

Dans la section 4.4.2 on a montré qu'une augmentation de la taille des listes s'accompagne invariablement d'une amélioration de la prédiction de la distance à l'interface, bien qu'au-delà d'une certaine taille l'amélioration est moins visible. En moyenne, les noeuds de la première couche, *i.e.* les plus proches de l'interface, sont peu sensibles à l'augmentation de la taille des listes. Ce comportement était prévisible puisque ceux-ci sont les seuls à bénéficier d'un accès direct aux marqueurs générés, ainsi ils ne relèvent d'aucun mécanisme de propagation. De la même façon, les noeuds les plus lointains voient leur erreur tendre vers 0. En revanche, les noeuds des couches intermédiaires, *i.e.* vérifiant $2\Delta x \lesssim d_{exacte} \lesssim 5\Delta x$, sont très influencés par l'augmentation de la taille des listes. La figure 4.22 illustre un phénomène pouvant expliquer ces observations, et fait apparaître le besoin d'adapter la taille des listes au nombre de marqueurs utilisés. Ceci est fondamental pour assurer que tous les marqueurs générés sur l'interface ne soient pas "oubliés" lors de la propagation. La section 4.4.3 a permis de montrer un nombre de marqueurs très petit devant la taille des listes permettait de supprimer l'erreur de propagation. En effet dans ce cadre, les listes sont assez grandes pour que leur taille ne vienne pas limiter le nombre de marqueurs connus par chaque noeud, et chaque marqueur généré est bien propagé. Seule l'erreur de discrétisation, liée à la quantité de marqueurs, est alors visible, et les profils obtenus rappellent ceux de la figure 4.17. En augmentant progressivement le nombre de marqueurs, on observe une amélioration monotone de la prédiction pour les noeuds les plus proches de l'interface, ce qui confirme que ceux-ci sont majoritairement tributaires de l'erreur de discrétisation. Néanmoins, comme expliqué précédemment, les noeuds des couches intermédiaires sont sensibles à l'erreur de propagation, qui se manifeste lorsque les listes sont trop petites pour contenir une quantité suffisante de marqueurs. Il en résulte pour ces noeuds la présence d'un optimum en terme de nombre de marqueurs (pour une taille de liste fixée). Au-delà de cet optimum, l'augmentation de ce nombre provoque l'augmentation de l'erreur de propagation. Il serait intéressant de compléter cette analyse par un test permettant de vérifier que cet optimum est directement lié à la taille des listes de marqueurs.

Toutes les données traitées sont issues d'un test basé sur une configuration de complexité réaliste, où les domaines de calcul des processeurs sont automatiquement définis par un outil de partitionnement de

maillage. Les deux paramètres étudiés, à savoir la quantité de marqueurs utilisés pour décrire l'interface, et la taille des listes de marqueurs stockés aux noeuds, sont adimensionnés. Par conséquent, on considère que les conclusions tirées de cette étude restent valables dans la majorité des cas. Celles-ci sont les suivantes : les noeuds des couches les plus proches de l'interface, *i.e.* pour lesquels $d_{exacte} \lesssim 6\Delta x$, sont les plus sensibles aux erreurs de propagation et de discrétisation. Lors d'une simulation, pour minimiser l'erreur commise lors de l'estimation de la distance à l'interface, on peut se servir de l'ordre de grandeur du ratio $r_p/\Delta x$, r_p étant le rayon d'une particule. Pour $r_p/\Delta x \lesssim 1$, ce qui est vérifié dans toutes les configurations étudiées dans ces travaux, il est intéressant de travailler avec un grand nombre de marqueurs, tandis que la taille des listes revêt une importance moindre. Au contraire, si $r_p/\Delta x$ peut atteindre des valeurs plus importantes, il est nécessaire d'augmenter la taille des listes, ce qui résultera en une diminution de l'erreur. Cette augmentation doit se faire conjointement avec l'augmentation de la quantité de marqueurs à partir d'un certain seuil, afin de limiter l'accroissement de l'erreur de propagation. Notons que l'augmentation du nombre de marqueurs ne provoque pas de surconsommation de mémoire, car comme expliqué dans la section 3.2.2, ceux-ci sont générés face après face (de l'interface) et bufferisés, donc ils ne sont pas tous stockés en mémoire de façon simultanée. L'augmentation des tailles de liste est consommatrice de mémoire, cependant la création de halo n'est nécessaire que lors des changements de partitionnement de maillage. Ces listes sont donc désallouées dès l'identification des halos terminée.

En conclusion, au regard de cette étude, il semble raisonnable d'utiliser un nombre de marqueurs de l'ordre de 30 par face et une taille de listes de l'ordre de 60. Dans ces conditions, une marge de sécurité de 5% appliquée à la taille du halo prescrite est suffisante pour assurer l'identification de l'ensemble des cellules désirées.

Chapitre 5

Validations

Ce chapitre vise à confronter le code avec différents cas réels issus de la littérature, pour la plupart accompagnés de données expérimentales. L'ensemble des développements réalisés est mis à profit au travers de ces cas parfois anisothermes, mettant en jeu des parois complexes sur plusieurs centaines ou milliers de processeurs. La dernière configuration modélisée constitue un pas vers la simulation d'un lit fluidisé réactif contenant plus de 50 millions de particules mettant en jeu la combustion de gaz naturel.

Sommaire

5.1	Sablier	213
5.2	Lit fluidisé quasi-2D anisotherme	215
5.2.1	Configuration	215
5.2.2	Différents modes de transferts de chaleur	217
5.2.3	Résultats	223
5.3	Lit fluidisé circulant (CFB) isotherme	235
5.3.1	Configuration	235
5.3.2	Spécificités de la partie cyclone	237
5.3.3	Résultats	242
5.4	Lit fluidisé isotherme de Birmingham	248
5.4.1	Configuration	248
5.4.2	Obtention de statistiques	251
5.4.3	Résultats	254
5.5	Lit fluidisé réactif du LGC	257
5.5.1	Configuration	257
5.5.2	Résolution du front de flamme	259
5.5.3	Influence du schéma cinétique	260
5.5.4	Test préliminaire à petite échelle	263
5.5.5	Résultats sur le lit à l'échelle	265
5.5.6	Conclusion	273

5.1 Sablier

On se propose d'abord d'étudier un cas sec simple dans une géométrie complexe. Des simulations numériques sont mises en oeuvre afin de mesurer le flux massique de solide W à travers l'orifice de diamètre D_0 d'un sablier maillé avec des tétraèdres, pour six valeurs de diamètres de particules allant de 7.5% à 15% D_0 . Aucune phase gazeuse n'est modélisée au cours des tests, les grains tombent donc dans le vide. Les résultats sont comparés aux prédictions de la loi empirique de Beverloo [34], fréquemment rencontrée dans l'étude de la vidange des silos et déjà discutée dans cet exposé. On rappelle ici son expression :

$$W = C\rho_p\sqrt{g}(D_0 - kd_p)^{5/2}, \quad (5.1)$$

où C et k sont des coefficients empiriques que nous allons déterminer pour cette configuration. Le domaine de calcul est illustré sur la figure 5.1, avec le positionnement initial des grains.

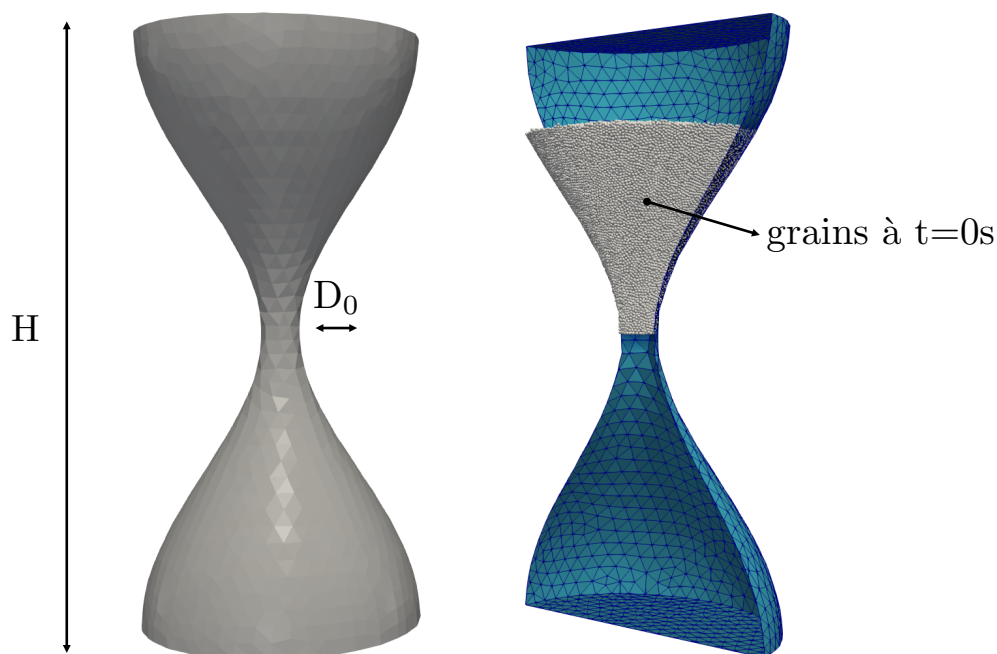


FIGURE 5.1: Visualisation du sablier simulé avec YALES2 et de ses dimensions ; H étant la hauteur et D_0 le diamètre de l'orifice à travers lequel chutent les grains. À droite, positionnement des grains à l'instant initial.

La figure 5.2 montre l'aspect typique que revêt le débit de particules à travers l'orifice du sablier au cours du temps. Y est représenté le débit instantané calculé sur des durées d'échantillonnage d'une milliseconde durant les premiers instants de la vidange. Démarrant à une valeur nulle à l'instant initial, ce débit instantané se met rapidement à osciller autour d'une valeur moyenne après un court régime transitoire d'environ 0.025s. Ce débit moyen, calculé à partir des valeurs instantanées pour $t > 0.05s$, est d'environ 173 particules par milliseconde. L'observation de ce débit moyen est une manifestation directe de l'effet Janssen déjà discuté (voir section 1.1.2) : le débit de solide à travers une réduction de section ne dépend pas de la hauteur de solide dans la partie haute du réservoir. En effet, contrairement au

comportement des liquides, des chaînes de force entre les grains apparaissent, et celles-ci ont davantage tendance à solliciter les parois latérales de l'enceinte.

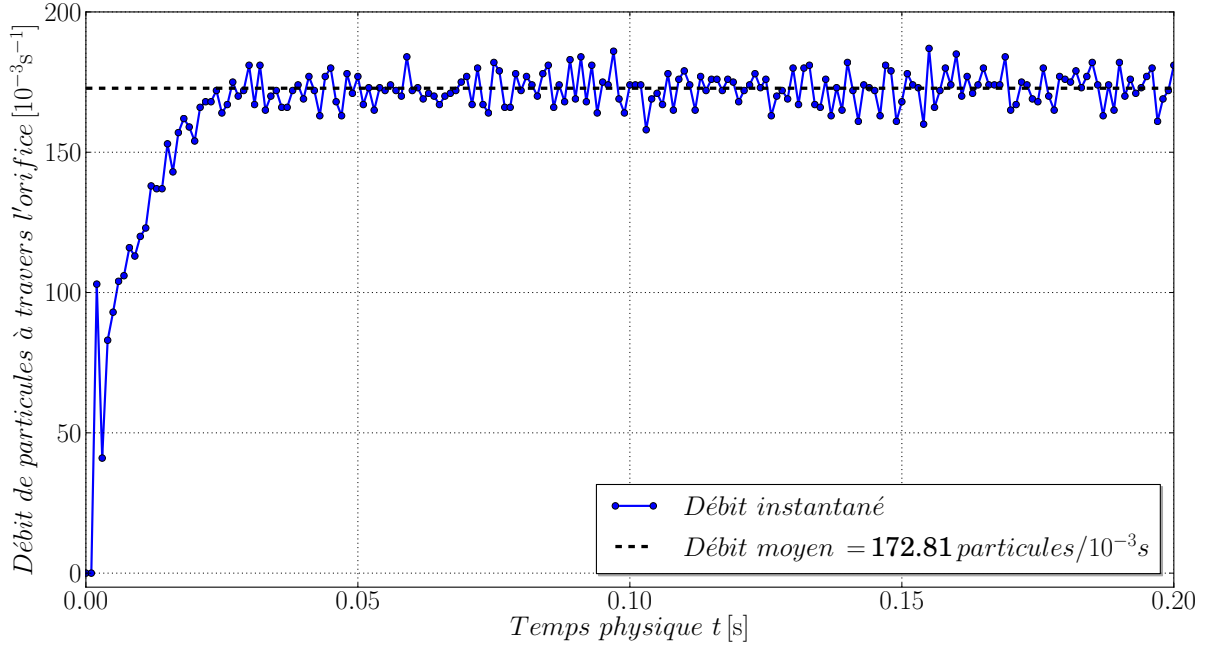


FIGURE 5.2: Évolution temporelle du débit de particules à travers l'orifice du sablier durant les premiers instants de la vidange. Partant d'une valeur nulle, le débit instantané rejoint rapidement un régime oscillant autour d'un débit moyen, témoin de l'effet Janssen. Le débit instantané est calculé en comptant les particules qui passent l'orifice sur une fenêtre temporelle d'une milliseconde. Le débit moyen est calculé pour $t > 0.05 \text{s}$. Le cas illustré correspond à un ratio $d_p \sim 7.5\% D_0$.

Afin de déterminer la valeur du paramètre k , qui dépend notamment de l'aspect du goulot d'étranglement et de la forme des grains, on fixe la valeur du paramètre C à une valeur classique de 0.55 [34]. L'extraction de k est réalisée en réécrivant la loi de Beverloo sous la forme suivante :

$$\frac{1}{D_0} \left(\frac{W}{C \rho_p \sqrt{g}} \right)^{2/5} = 1 - k \frac{d_p}{D_0}. \quad (5.2)$$

Les résultats sont obtenus après vidange complète de la partie haute du sablier pour les six diamètres de grains considérés, et sont issus de la mesure du temps nécessaire à la vidange. Les résultats numériques visibles sur la figure 5.3 exhibent un bon accord pour une valeur $k \approx 1.18$. Cette valeur semble cohérente avec les valeurs trouvées dans la littérature par Mills *et al.* [205] pour différentes configurations de réservoir.

Les paramètres utilisés pour ces simulations sont présentés dans le tableau 5.1. La valeur de e_n a été choisie très faible afin de rapidement amortir les rebonds des grains dans la partie basse du sablier.

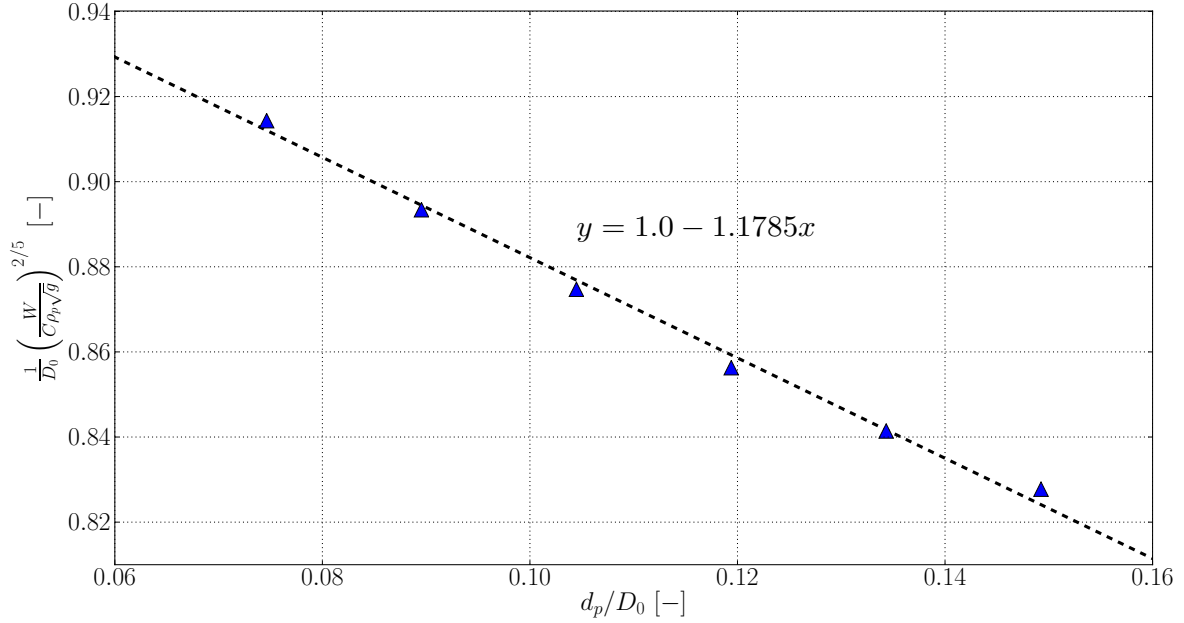


FIGURE 5.3: Flux massique adimensionné de solide à travers l’orifice du sablier obtenu pour six diamètres de particules (\blacktriangle) comparé avec la loi de Beverloo avec $C = 0.55$ (- - -). La valeur de $k \approx 1.18$ est extraite de la pente (voir équation 5.2).

TABLE 5.1: Valeurs numériques utilisées pour la simulation du sablier.

Propriété fixée	Valeur numérique	Unité
ρ_p	2500	$[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$
d_p	7.5 - 15	$[\%D_0]$
μ_d	0.5	$[-]$
e_n	0.4	$[-]$

Propriété du sablier	Valeur numérique	Unité
hauteur H	0.02	$[\text{m}]$
diamètre de l’orifice D_0	0.00134	$[\text{m}]$
diamètre maximal D_{max}	0.0096	$[\text{m}]$

5.2 Lit fluidisé quasi-2D anisotherme

On se propose maintenant d’étudier une configuration de lit fluidisé dense anisotherme dans une géométrie simple. La configuration choisie est celle expérimentée par Patil *et al.* [226] (publication originale), ayant également fait l’objet de simulations DEM-CFD par Patil *et al.* [227] et Lichtenegger *et al.* [179]. Les diagnostics optiques mis en place pour l’expérimentation sont discutés dans la publication originale, et quelques-uns ont été brièvement présentés dans ce manuscrit (voir section 1.2.4).

5.2.1 Configuration

La figure 5.4 schématise le dispositif expérimental et présente une vue du domaine de calcul utilisé pour la modélisation numérique. L’enceinte est un parallélépipède de dimensions $8 \times 1.5 \times 125\text{cm}^3$

dans laquelle des particules en verre de 1mm de diamètre, à une température moyenne initiale de 363K, sont refroidies par un courant d'air injecté à une température de 293K. Différents chargements de solide et différentes vitesses d'injection du gaz ont été testés lors des expériences, et chaque cas est récapitulé dans le tableau 5.2. Dans ce tableau sont données les valeurs des vitesses en fût vide, qui sont donc égales à $90\%U_{in}$, une buse, en anglais "nozzle", (ici, une surface sans injection) occupant 10% de la surface d'injection. Les deux chargements de solide correspondent à des masses totales de 75 et 125g, soit un nombre de particules de 57296 et 95493 respectivement, compte tenu de leurs propriétés, rassemblées dans le tableau 5.3 avec celles du gaz injecté.

Pour les simulations numériques, Patil *et al.* [227] et Lichtenegger *et al.* [179] utilisent un maillage plutôt grossier dont la résolution est choisie identique à la fenêtre d'interrogation utilisée pour la technique de DIA/PIV employée lors des expériences. Ce maillage consiste en une grille cartésienne de $35 \times 6 \times 110$ éléments quasiment carrés, un élément étant de taille $2.28 \times 2.28 \times 2.5\text{mm}^3$. La buse, qui durant les expérimentations consistait en une plaque circulaire sans injection d'air, est modélisée par une surface rectangulaire la plus proche possible en terme d'aire dans les simulations numériques. 5×4 faces de cellules appartenant à la surface d'injection sont utilisées.

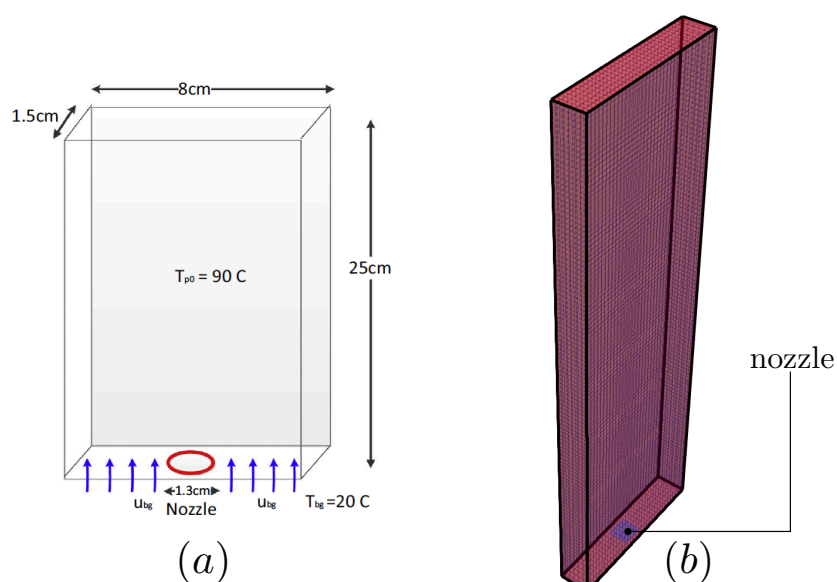


FIGURE 5.4: (a) Schéma du dispositif expérimental issu de [227]. Une buse circulaire (cercle rouge) occupe 10% de la surface d'injection du gaz, au centre. Cette buse ne constitue qu'une paroi et la totalité du débit gazeux est injecté par le restant de la surface d'injection. (b) Domaine de calcul utilisé pour les simulations numériques.

Les nombres caractéristiques correspondant à cette configuration sont $Re_p \sim 60 - 100$ et $Nu_p \sim 20$, ce qui donne un coefficient de transfert de chaleur gaz-particule $h_{fp} \sim 500\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$. Un aperçu de l'évolution temporelle des températures des particules dans le cas 1a est visible sur la figure 5.5.

TABLE 5.2: Nomenclature des cas investigués dans les expérimentations de Patil *et al.* [226].

Nom du cas	Chargement solide [g]	Vitesse de fluide en fût vide [m.s ⁻¹]
1a	75	1.2
1b	75	1.54
1c	75	1.71
2a	125	1.2
2b	125	1.54

TABLE 5.3: Valeurs numériques utilisées dans les expérimentations de Patil *et al.* [226].

Propriété du fluide en entrée	Valeur numérique	Unité
T_{in}	293	[K]
ρ	1.18	[kg.m ⁻³]
C_p	1010	[J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]
μ	2×10^{-5}	[Pa.s]

Propriété fixée	Valeur numérique	Unité
$T_p(t = 0)$	363	[K]
ρ_p	2500	[kg.m ⁻³]
$C_{p,p}$	840	[J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]
d_p	0.001	[m]
μ_d particule-particule	0.1	[-]
μ_d particule-paroi	0.4	[-]
e_n	0.97	[-]
k_n	200	[N.m ⁻¹]
Δt_p	$T_C/10$	[-]

5.2.2 Différents modes de transferts de chaleur

Hormis les transferts de chaleur gaz-particules, cette configuration abrite d'autres mécanismes de transferts d'énergie, notamment :

- les particules échangent de façon diffusive de l'énergie durant les contacts, entre elles et avec les parois. L'analyse de Patil *et al.* [227] montre que ces flux sont négligeables par rapport aux autres modes de transfert.
- Les transferts radiatifs sont également négligeables au vu des faibles températures (< 400K) atteintes durant l'expérience.
- Les transferts convectifs gaz-parois revêtent cependant une importance capitale pour retrouver les résultats expérimentaux, comme il sera montré par la suite.

Plusieurs problèmes se posent pour modéliser les transferts convectifs gaz-parois. Lors de l'expérimentation menée par Patil *et al.* [226], trois parois latérales sur quatre sont en aluminium. La dernière, utilisée pour la visualisation, est en verre saphir. Ces matériaux possèdent des propriétés thermiques différentes. De plus, la taille de maille utilisée ($\sim 2\text{mm}$) interdit une description suffisante de la couche limite thermique sur laquelle les véritables échanges thermiques gaz-parois ont lieu. Son épaisseur caractéristique est estimée aux alentours de 0.1mm par Patil *et al.* [227]. Cette couche limite thermique est sujette à un

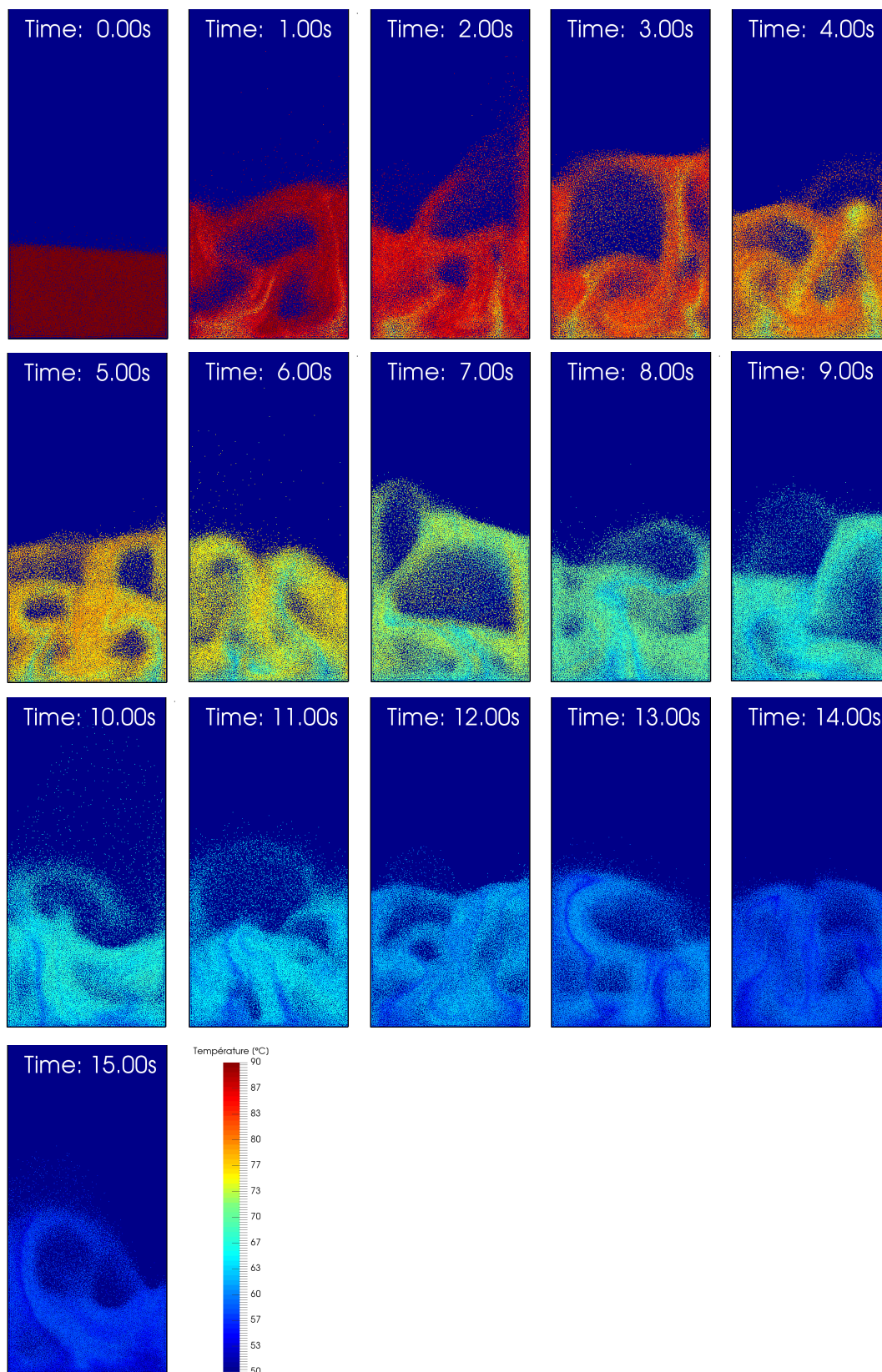


FIGURE 5.5: Instantanés du cas 1a de 0 à 15s. Les particules sont colorées par leur température.

vigoureux mélange et est régulièrement perturbée par la présence et le mouvement des particules proches des parois. Seule une simulation DNS pourrait permettre d'obtenir les caractéristiques de ce fin film. Finalement, le protocole suivi par Patil *et al.* [227] pour modéliser l'ensemble des phénomènes thermiques non-résolus (majoritairement les transferts gaz-parois), consiste à prendre en compte une densité de flux thermique (condition de Neumann) sur les conditions limites de type mur du domaine, de la forme :

$$Q_{ext} = h_w(T_w - T_{@w}), \quad (5.3)$$

où h_w est un coefficient de transfert de chaleur gaz-paroi, T_w la température "exterieure" du mur fixée à 293K, et $T_{@w}$ la température du gaz en contact avec la paroi. Q_{ext} correspond au flux perdu par le gaz en contact avec la paroi froide. L'ordre de grandeur du coefficient h_w est d'abord évalué en utilisant une corrélation de la littérature à partir du nombre de Nusselt associé aux transferts avec la paroi. En se conformant aux schémas numériques du code employé, mettant en jeu une grille décalée ("staggered grid"), Patil *et al.* [227] appliquent à Q_{ext} un facteur correcteur censé prendre en compte l'épaisseur de couche limite thermique. Ensuite, plusieurs valeurs de h_w sont testés numériquement, jusqu'à ce qu'une valeur satisfasse les résultats expérimentaux de taux de refroidissement de la phase solide. Patil *et al.* [227] vérifient que la valeur $h_w = 350\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ fournit un bon accord pour tous les cas expérimentés.

Lors de leurs simulations dans les mêmes conditions, Lichtenegger *et al.* [179] trouvent des résultats encore meilleurs pour cette valeur de h_w dans les cas 1a et 2b, en utilisant l'outil CFDEM coupling [121]. Une grille staggered est également utilisée. Là encore, sur la même configuration, Lu *et al.* [186] utilisent le logiciel DEM-CFD MFIX-DEM [123] et retrouvent les résultats expérimentaux du cas 3a, cette fois en imposant directement une température constante T_w (condition de Dirichlet) au niveau des parois. Toujours à partir de la même configuration expérimentale, mais cette fois en prenant en compte des réactions chimiques exothermiques au niveau des particules, Li *et al.* [178] abordent également le problème des transferts thermiques pour leurs simulations DEM-CFD. Cependant, ils trouvent que l'approche de Patil *et al.* [227] pour le calcul de h_w ne fournit qu'une valeur trop faible pour expliquer les observations expérimentales, et utilisent une autre méthode pour l'obtenir. En définitive, la prise en compte des transferts de chaleur gaz-paroi est complexe et semble dépendre des méthodes numériques employées. Dans le code YALES2, la densité (surfaccique) de flux Q_{ext} est directement prise en compte dans l'équation de transport de l'enthalpie sensible, tel qu'illustré sur la figure 5.6.

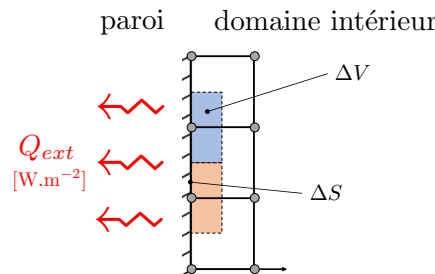


FIGURE 5.6: Traitement numérique utilisé dans le code YALES2 pour les conditions limites thermiques de type Neumann. ΔV est le volume de contrôle associé aux noeuds de la paroi. ΔS est la surface de ΔV en contact avec la paroi. Le résidu prenant part au bilan d'enthalpie sur les volumes de contrôle de la paroi s'écrit $Q_{ext}\Delta S/\Delta V$.

On montre sur la figure 5.7 l'évolution temporelle de la température moyenne des particules \bar{T}_p pour des simulations où $Q_{ext} = 0$, c'est-à-dire en conditions adiabatiques pour le gaz. Les résultats comparés sont ceux obtenus par YALES2 et issus de la publication de Patil *et al.* [227], pour les cas 1a et 1b. Un premier constat est que le refroidissement moyen de la phase solide observé expérimentalement n'est reproduit par aucun code en conditions adiabatiques, d'où la nécessité de prendre en compte les pertes de chaleur aux parois. Deuxièmement, des résultats similaires sont mis à jour dans les deux codes dans le cas 1a. Cependant, bien que les deux codes y prédisent un refroidissement accru du solide, des écarts apparaissent dans le cas 1b, de l'ordre de 14%, calculé à partir de $(\Delta\bar{T}_p|_{patil} - \Delta\bar{T}_p|_{yales2})/\Delta\bar{T}_p|_{patil}$, où $\Delta\bar{T}_p|_{patil} = [\bar{T}_p(t = 9s) - \bar{T}_p(t = 0)]|_{patil}$. Le refroidissement prédit des particules est en moyenne plus rapide pour Patil *et al.* [227]. Les causes de cet écart ne sont pas identifiables de façon immédiate. Parmi les différences majeures existant entre les deux codes comparés, on trouve :

1. la loi de traînée sur les particules,
2. le modèle de collision employé,
3. le fait que le code utilisé par Patil *et al.* [227] permette aux particules d'échanger de l'énergie au cours des chocs avec d'autres particules,
4. et avec les parois.

Les arguments 1 et 2 ne sont vraisemblablement pas en mesure d'expliquer l'écart observé. L'argument 3 quant à lui n'est pas censé avoir de réelle conséquence sur la moyenne, la diffusion de chaleur entre particules n'ayant pas d'influence directe sur cette grandeur, et ces transferts ayant été démontrés comme négligeables dans l'étude de Patil *et al.* [226]. Finalement, les échanges de chaleur particules-parois pourraient expliquer le meilleur refroidissement observé dans les simulations de Patil *et al.* [227]. Notons que la publication de Patil *et al.* [227] ne mentionne aucun procédé de filtrage des quantités projetées sur la grille eulérienne, et ne précise pas la méthode d'interpolation utilisée. La faible résolution du maillage pourrait rendre ces facteurs déterminant pour expliquer les écarts observés. Lors des simulations YALES2, une seule opération de filtrage est utilisée, d'après la méthode décrite dans la section 2.5.3. Enfin, précisons que la corrélation de Gunn [127] pour le calcul de Nu_p a été utilisée dans les deux codes, ainsi que des conditions aux limites de type murs non-glissants pour le gaz. Enfin, après discussion avec l'auteur de la publication originale, le flux Q_{ext} a bien été appliqué sur les quatre parois latérales lors des simulations numériques.

Finalement, le même processus que Patil *et al.* [227] est utilisé dans ces travaux ; à savoir que différentes valeurs de h_w sont étudiées sur chacun des cas, où est relevée l'évolution temporelle de \bar{T}_p . On sélectionne alors une valeur de h_w qui permette de retrouver les résultats expérimentaux associés. Sur la figure 5.8, on peut visualiser l'évolution temporelle de \bar{T}_p pour les cas 1a, 1b et 1c. Les courbes comparent les résultats expérimentaux, les résultats issus des simulations de Patil *et al.* [227] avec $h_w = 350\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$, et ceux obtenus avec YALES2 pour $h_w = 70\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$. Cette valeur du coefficient de transfert de chaleur gaz-paroi permet de retrouver un accord satisfaisant avec l'expérience. On retrouve notamment le fait que l'augmentation de la vitesse d'entrée permet d'accroître les échanges entre la phase solide et la phase gazeuse, donc d'augmenter l'efficacité du refroidissement des particules. La valeur de $h_w = 70\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ est donc retenue pour toute la suite des comparaisons sur les cas 1a, 1b et 1c. De la même façon, sur la figure 5.9 on représente l'évolution temporelle de \bar{T}_p pour les cas 2a et 2b. Les courbes comparent les résultats expérimentaux, les résultats issus des simulations de Patil *et al.* [227] avec $h_w = 350\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$, et ceux obtenus avec YALES2 pour $h_w = 120\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$. Cette

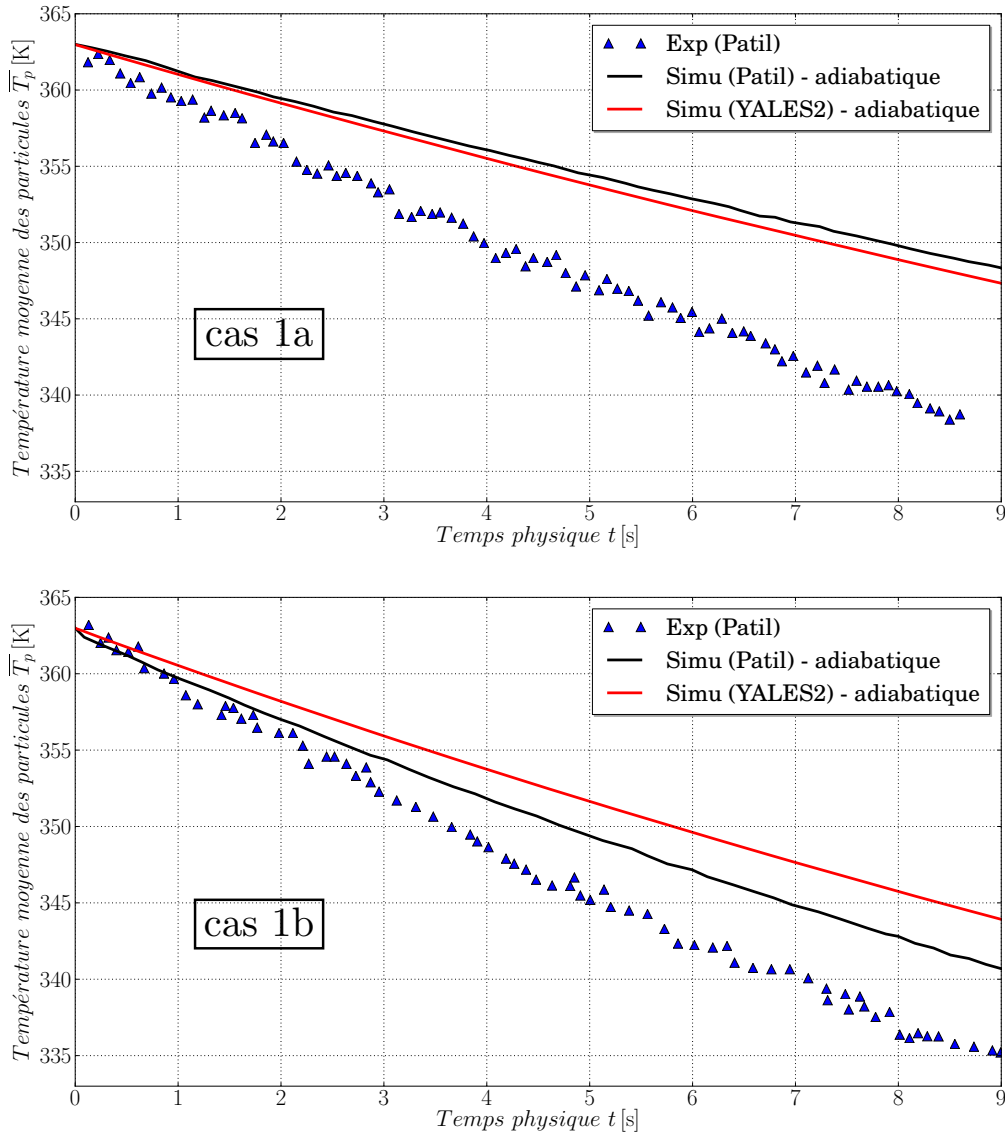


FIGURE 5.7: Évolution de la température moyenne des particules en configuration adiabatique ($Q_{ext} = 0$) pour les cas 1a (en haut) et 1b (en bas). Comparaison entre les valeurs expérimentales, puis issues des simulations de Patil *et al.* [227] et obtenues avec YALES2.

valeur différente du coefficient de transfert de chaleur gaz-paroi permet de retrouver un accord satisfaisant avec l'expérience. Il n'est *a priori* pas surprenant qu'une valeur plus grande de h_w soit nécessaire dans les cas 2a et 2b, qui contiennent quasiment 70% de particules supplémentaires, cette augmentation se reflétant d'ailleurs sur celle de h_w . Le fait que Patil *et al.* [227] utilisent la même valeur de h_w dans tous les cas induit nécessairement qu'une saturation du gaz est atteinte. Dans ce régime, la valeur de h_w n'importe plus car la force motrice du transfert $T_w - T_{@w}$ tend vers une valeur nulle. Cette saturation n'a pas été observée dans les simulations effectuées. Enfin, notons que le choix des valeurs de h_w ne prend pas en compte les variations de vitesses d'injection.

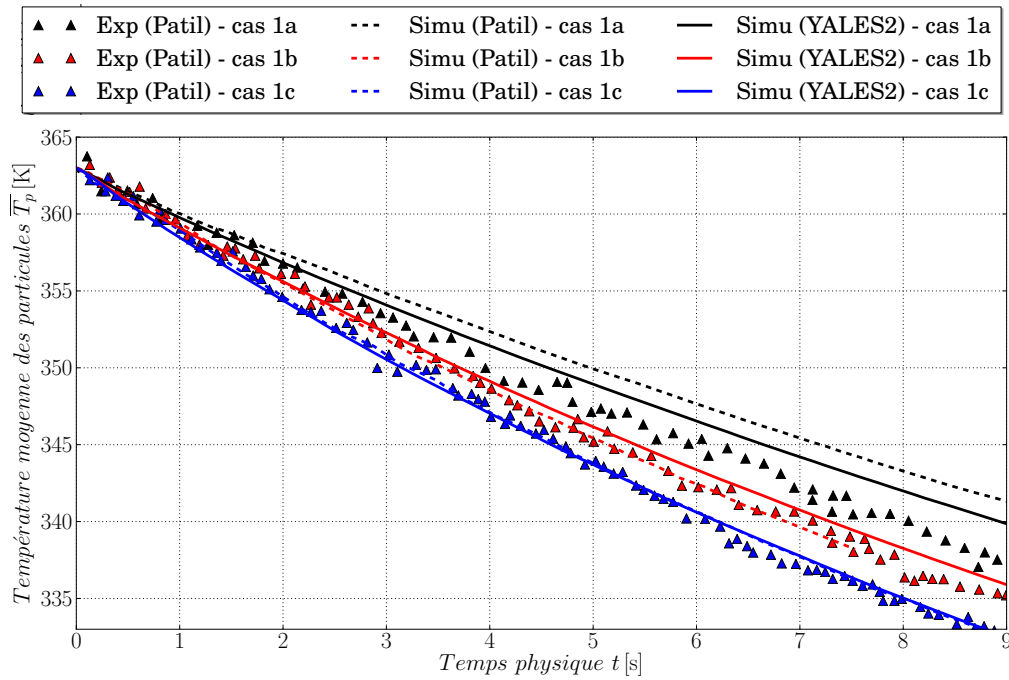


FIGURE 5.8: Évolution de la température moyenne des particules en configuration non-adiabatique pour les cas 1a, 1b et 1c. Comparaison entre les valeurs expérimentales, puis issues des simulations de Patil *et al.* [227] avec $h_w = 350\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ et obtenues avec YALES2 pour $h_w = 70\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$. Un accord satisfaisant est atteint pour cette dernière valeur de h_w .

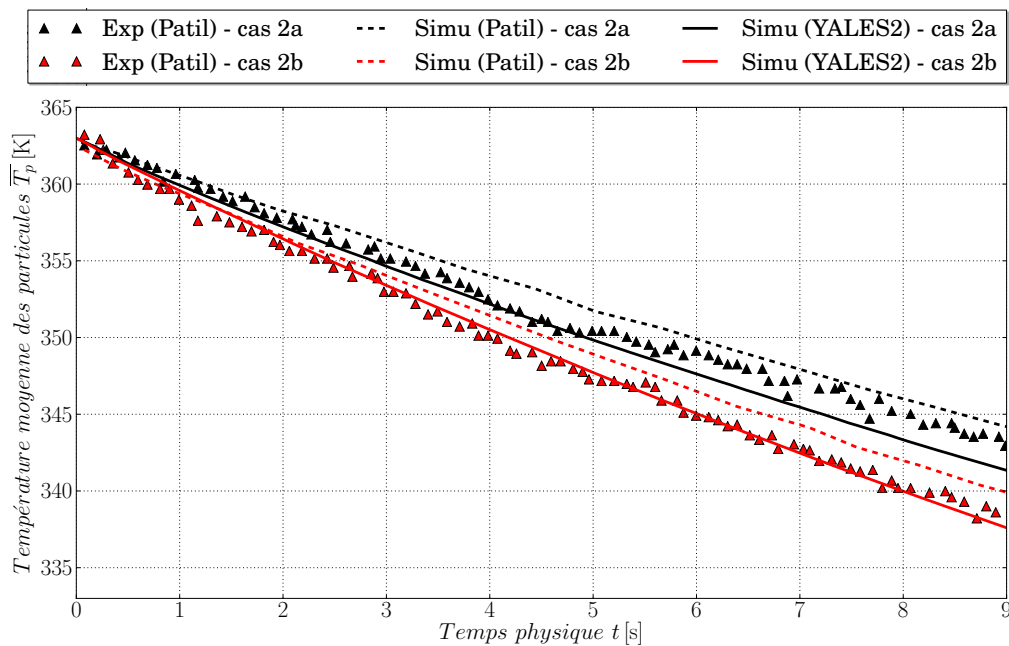


FIGURE 5.9: Évolution de la température moyenne des particules en configuration non-adiabatique pour les cas 2a et 2b. Comparaison entre les valeurs expérimentales, puis issues des simulations de Patil *et al.* [227] avec $h_w = 350\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ et obtenues avec YALES2 pour $h_w = 120\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$. Un accord satisfaisant est atteint pour cette dernière valeur de h_w .

5.2.3 Résultats

Après avoir sélectionné des valeurs de $h_w = 70\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ pour les cas 1a, 1b, et 1c, et de $h_w = 120\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ pour les cas 2a et 2b, on effectue d'autres comparaisons avec les résultats expérimentaux.

On représente d'abord sur la figure 5.10 la distribution des températures des particules à trois instants de la simulation ; $t = 1, 5$ et 10s , pour le cas 1a. Une comparaison est effectuée entre les résultats expérimentaux de Patil *et al.* [227], les résultats de simulation de Lichtenegger *et al.* [179], et ceux obtenus avec YALES2. Concernant les résultats issus de simulations numériques, la PDF normalisée est obtenue à partir de classes de températures de 1K . Les résultats expérimentaux montrent la présence systématique d'un pic de température. La distribution des températures autour de ce pic est hétérogène : pour les valeurs de température supérieures, le profil est très abrupt. Au contraire, la majorité de la population est localisée dans la plage de température inférieure à la température du pic. De plus, les points expérimentaux montrent que la plage de distribution des particules est de plus en plus étroite à mesure que les particules refroidissent. Tous ces phénomènes sont dus à la réduction de la force motrice des transferts thermiques $\overline{T}_p(t) - T_{in}$ [226] au cours du temps. L'ensemble de ces comportements est globalement bien représenté par les simulations numériques réalisées avec YALES2, malgré un léger décalage systématique de la prévision du pic de température, qui pourrait également provenir d'un manque de précision dans le déclenchement de la mesure expérimentale. La hauteur de ce pic souffre également d'imprécisions. Ces dernières proviennent probablement de la résolution du maillage dans le cadre de la DEM. La prise de moyenne à l'échelle des mailles (plus généralement de la taille de filtre) propre à ce formalisme implique que les particules au sein de chacune d'entre elles "voient" le même fluide. Or ce sont les microstructures inaccessibles à la DEM, qui font que l'environnement de chaque particule est singulier, qui permettent de retrouver la dispersion des comportements locaux. Ce fait a pu être vérifié lors de comparaisons avec des simulations de type PRS dans le cas des coefficients de transfert de chaleur gaz-particule [99], et a déjà été évoqué lors de la description du modèle de traînée (voir section 2.4.1). Notons que les simulations numériques montrent toutes deux des tendances très proches.

Afin de se conformer aux expérimentations et aux simulations suivantes menées par Patil *et al.* [226] [227], on construit pour certaines variables $\Phi_p(t)$ définies au niveau des particules un champ $\Phi(C, t)$ défini aux centres des cellules C . La construction de ce champ, qui correspond à une moyenne dans chaque cellule, s'écrit en fonction des valeurs particulières :

$$\Phi(C, t) = \frac{1}{N_p(C, t)} \sum_{p \in C} \Phi_p(t), \quad (5.4)$$

où $N_p(C, t)$ est la quantité instantanée de particules p localisées dans la cellule de maillage C , donnée par :

$$N_p(C, t) = \sum_{p \in C} 1. \quad (5.5)$$

Si $N_p(C, t)$ a une valeur nulle dans une cellule, $\Phi(C, t)$ prend également une valeur nulle. Pour n'ajouter que des contributions de variables extensives, la fraction volumique de solide dans chaque cellule est calculée comme suit :

$$\varepsilon_p(C, t) = \frac{N_p(C, t)V_p}{V_C}, \quad (5.6)$$

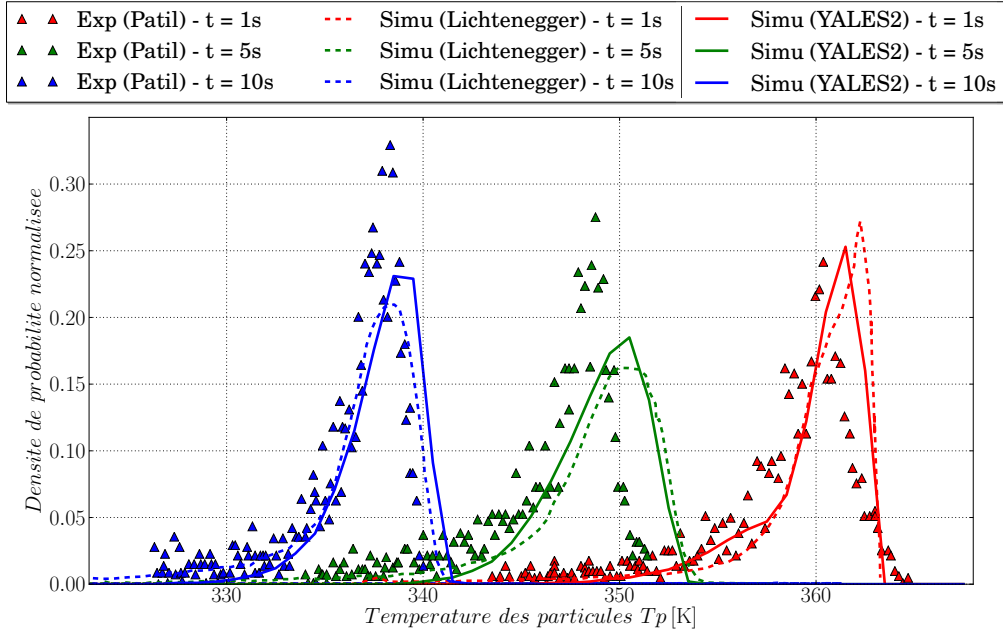


FIGURE 5.10: PDF normalisée des températures de particules à trois instants de la simulation; $t = 1, 5$ et $10s$ pour le cas 1a. Sont comparés les résultats expérimentaux de Patil *et al.* [227], les résultats de simulation de Lichtenegger *et al.* [179], et ceux obtenus avec YALES2.

V_C étant le volume de la cellule C . On construit ainsi les champs instantanés aux cellules : $\varepsilon_p(C, t)$, $\varepsilon_p(C, t)u_p(C, t)$ et $\Gamma_p(C, t)$. $\Gamma_p(C, t)$ correspond à une température réduite de solide telle que :

$$\Gamma_p(C, t) = \frac{T_p(C, t) - \overline{T}_p^\varepsilon(t)}{\overline{T}_p^\varepsilon(t) - T_{in}}, \quad (5.7)$$

où $T_p(C, t)$ est la température de solide dans la cellule C , obtenue grâce à l'équation 5.4. Sa moyenne spatiale pondérée par $\varepsilon_p(C, t)$ est notée $\overline{T}_p^\varepsilon(t)$ et est calculée par :

$$\overline{T}_p^\varepsilon(t) = \frac{1}{\sum_C \varepsilon_p(C, t)} \sum_C \varepsilon_p(C, t) T_p(C, t). \quad (5.8)$$

Les grandeurs spatiales $\langle \varepsilon_p(C) \rangle$, $\langle \varepsilon_p(C)u_p(C) \rangle$ et $\langle \Gamma_p(C) \rangle$, ou plus simplement $\langle \varepsilon_p \rangle$, $\langle \varepsilon_p u_p \rangle$ et $\langle \Gamma_p \rangle$, correspondent respectivement aux moyennes temporelles de ε_p , $\varepsilon_p u_p$ et Γ_p . La moyenne temporelle d'un champ $\Phi(C, t)$ défini aux cellules est calculée par :

$$\langle \Phi(C) \rangle = \frac{1}{N_t} \sum_{N_t} \Phi(C, t), \quad (5.9)$$

où N_t correspond au nombre d'instantanés utilisés. Pour se conformer aux expérimentations de Patil *et al.* [226], la valeur de N_t est fixée à 150. Tous les champs moyens montrés dans cette section étant calculés sur 15s de simulation, cela correspond à un échantillonnage de 10 images par seconde. Une moyenne temporelle de $\Gamma_p(C, t)$ est donnée par la formule suivante, résultant de sa pondération par la fraction volumique de solide locale :

$$\langle \Gamma_p(C) \rangle = \frac{1}{\sum_{N_t} \varepsilon_p(C, t)} \sum_{N_t} \varepsilon_p(C, t) \Gamma_p(C, t). \quad (5.10)$$

Le choix de l'expression de $\Gamma_p(C, t)$ trouve sa justification dans le fait que lorsque le lit de particules descend à la température d'entrée du gaz T_{in} , il n'y a plus d'hétérogénéités de température solide. Lorsque le lit refroidit, on s'attend à ce que la déviation de température solide soit proportionnelle à la force motrice des transferts thermiques $\overline{T}_p^\varepsilon(t) - T_{in}$ [226]. Ainsi, on s'attend à ce que la quantité $\Gamma_p(C, t)$ soit quasiment indépendante du temps, et sa moyenne temporelle a donc un sens.

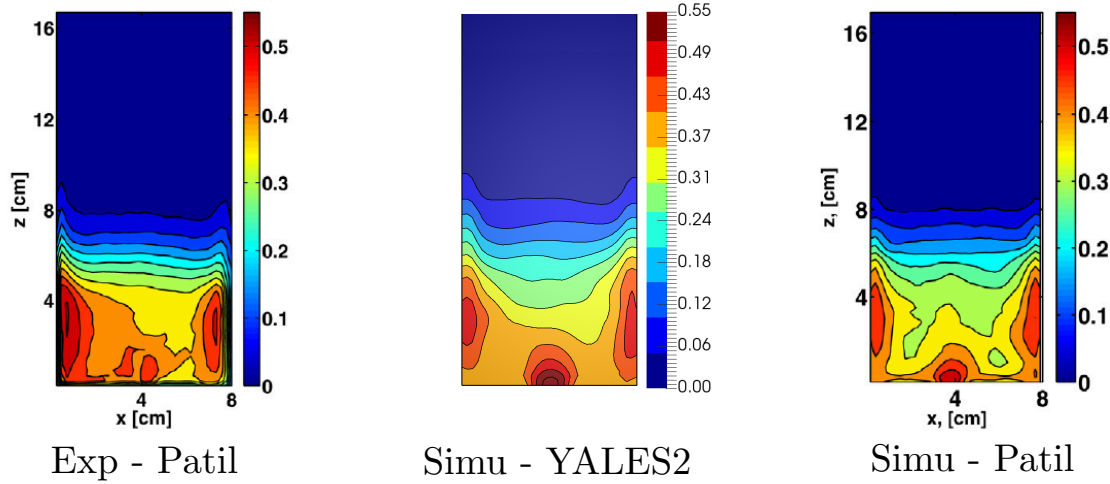
Des coupes transversales (obtenues à $y = 0.0075\text{m}$) des moyennes temporelles $\langle \varepsilon_p(C) \rangle$, $\langle \varepsilon_p(C)u_p(C) \rangle$ et $\langle \Gamma_p(C) \rangle$ prises sur 15s sont respectivement représentées pour chacun des cas 1a, 1b et 1c sur les figures 5.11, 5.12 et 5.13. Pour les cas 1a et 1c, les résultats expérimentaux issus de Patil *et al.* [226] et de simulations de Patil *et al.* [227] sont confrontés aux résultats de simulations obtenus avec YALES2. Pour le cas 1b, seuls les résultats expérimentaux de Patil *et al.* [226] sont disponibles. Bien qu'elles ne soient pas rigoureusement identiques, les échelles de couleur employées pour les comparaisons ont été choisies de façon à reproduire le plus fidèlement possible celles issues des publications originales.

Les fractions volumiques de solide moyennes $\langle \varepsilon_p(C) \rangle$ des figures 5.11, 5.12 et 5.13 montrent une reproduction qualitativement fidèle des expérimentations. On observe trois zones de concentration préférentielle de solide. La première se situe au-dessus de la buse, et est due au fait qu'à cet endroit il y a peu de courant gazeux pour emporter le solide. Il s'agit d'une zone d'accumulation. Elle est plus concentrée en solide dans le cas des simulations numériques, notamment dans les cas 1a et 1b. Les deux autres correspondent aux zones proches des parois, dues aux recirculations qui font retomber les particules le long de ces dernières. Le solide ne s'y accumule pas, mais y circule en grande quantité. Dans la direction verticale, pour le cas 1a, les valeurs de fraction volumique de solide se stratifient jusqu'à une hauteur d'environ 8cm (au centre) pour l'expérience, contre environ 9cm pour nos simulations. Dans le cas 1b, l'augmentation de la vitesse d'entrée provoque une élévation moyenne du solide. Ici, on en rencontre jusqu'à environ 9cm dans les expériences, et environ 10cm pour les simulations. Cette légère surestimation de la hauteur maximale à laquelle on trouve du solide est à peu près identique dans le cas 1c. Les hauteurs différentes constatées dans les simulations numériques de Patil *et al.* [227] peuvent être dues au choix de la force de traînée.

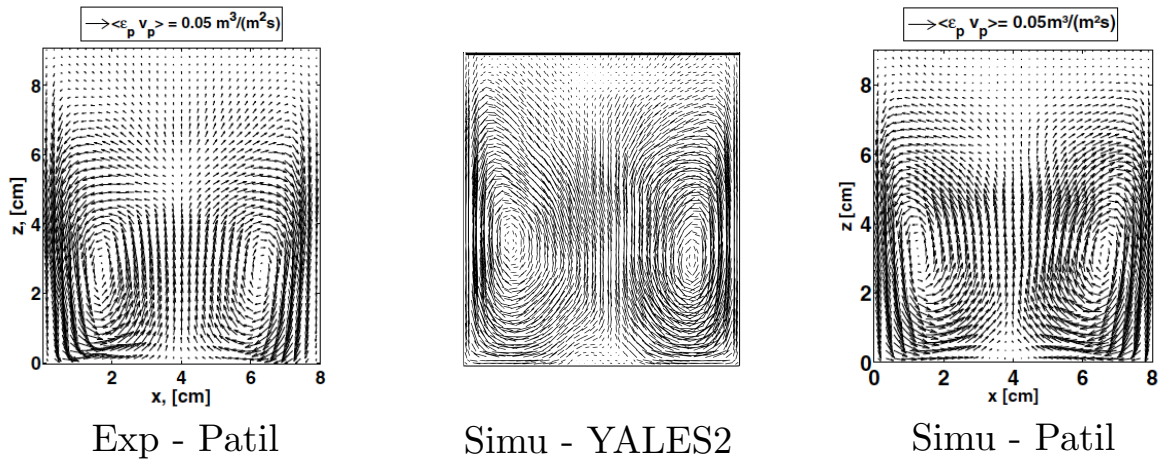
Les champs moyens de flux massiques de solide $\langle \varepsilon_p(C)u_p(C) \rangle$ des figures 5.11, 5.12 et 5.13 montrent eux aussi une comparaison assez bonne avec les résultats expérimentaux. La localisation des deux boucles de recirculation est retrouvée, révélant une élévation du solide dans la région centrale et une chute au niveau des parois. Il existe cependant quelques disparités quant à leur aspect, notamment au niveau de la hauteur caractéristique des structures. Celle-ci semble légèrement plus importante dans les simulations. L'élongation verticale de ces structures tourbillonnaires avec l'augmentation de la vitesse d'entrée du gaz observée expérimentalement semble également visible sur les simulations numériques réalisées avec YALES2.

Les écarts observables les plus importants sont ceux concernant les champs moyens de température réduite des figures 5.11, 5.12 et 5.13. C'est au niveau du bas du réacteur qu'on observe les valeurs les plus faibles pour $\langle \Gamma_p(C) \rangle$, et plus particulièrement au niveau de la buse. Ceci indique que dans cette zone, les particules ont en moyenne une température plus basse que les autres particules. Ce comportement, que l'on peut corrélérer avec l'entrée du gaz frais par le bas du réacteur, est qualitativement reproduit par les simulations. Par corrélation avec les champs moyens de flux massiques de solide $\langle \varepsilon_p(C)u_p(C) \rangle$, on peut aussi expliquer cette zone froide au-dessus de la buse par le fait que le gaz entrant, donc le plus froid, est probablement dirigé vers le centre du réacteur en raison des boucles de recirculation des parti-

Fraction volumique de solide moyenne $\langle \varepsilon_p \rangle$



Flux de solide moyen $\langle \varepsilon_p u_p \rangle$



Température réduite $\langle \Gamma_p \rangle$

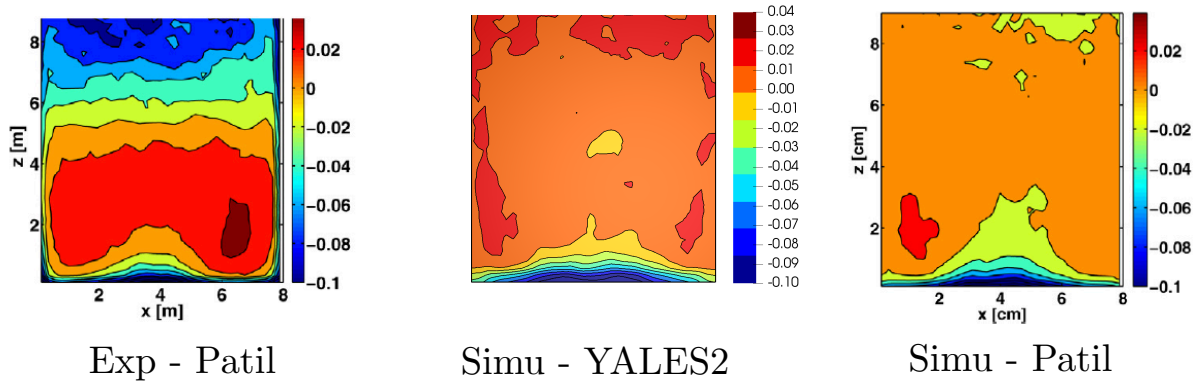
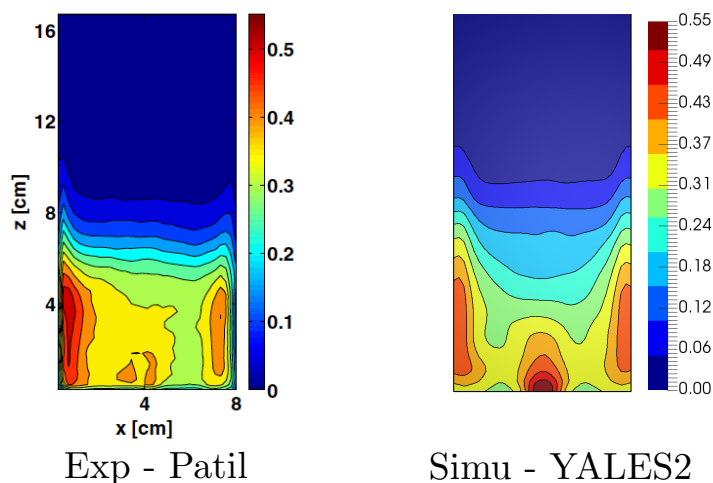
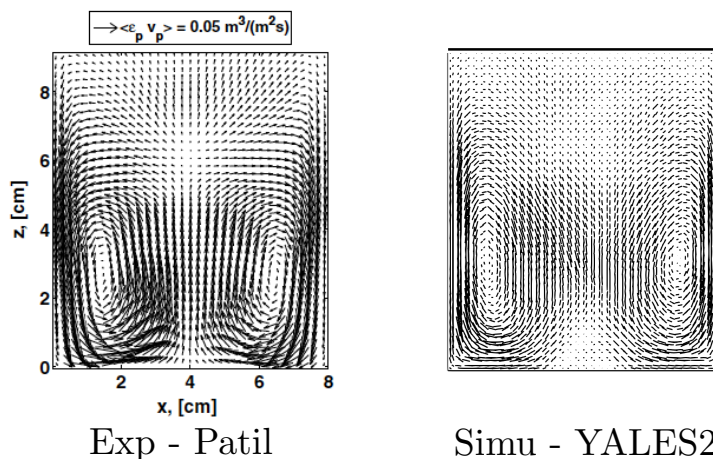


FIGURE 5.11: Coupes transversales des moyennes temporelles prises sur 15s $\langle \varepsilon_p(C) \rangle$, $\langle \varepsilon_p(C)u_p(C) \rangle$ et $\langle \Gamma_p(C) \rangle$ pour le cas 1a. Les résultats de Patil *et al.* sont issus de [227].

Fraction volumique de solide moyenne $\langle \varepsilon_p \rangle$



Flux de solide moyen $\langle \varepsilon_p u_p \rangle$



Température réduite $\langle \Gamma_p \rangle$

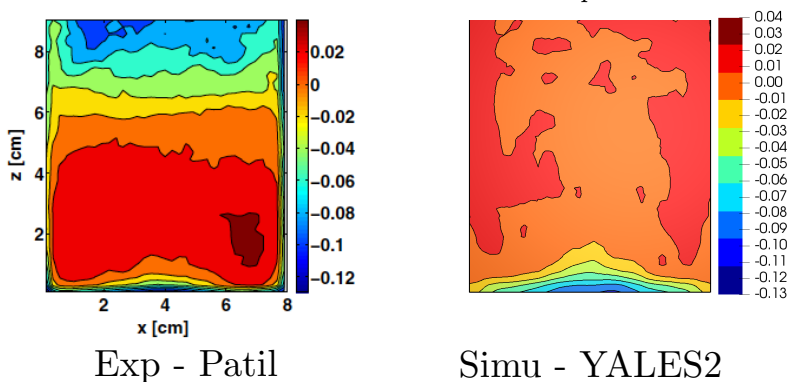
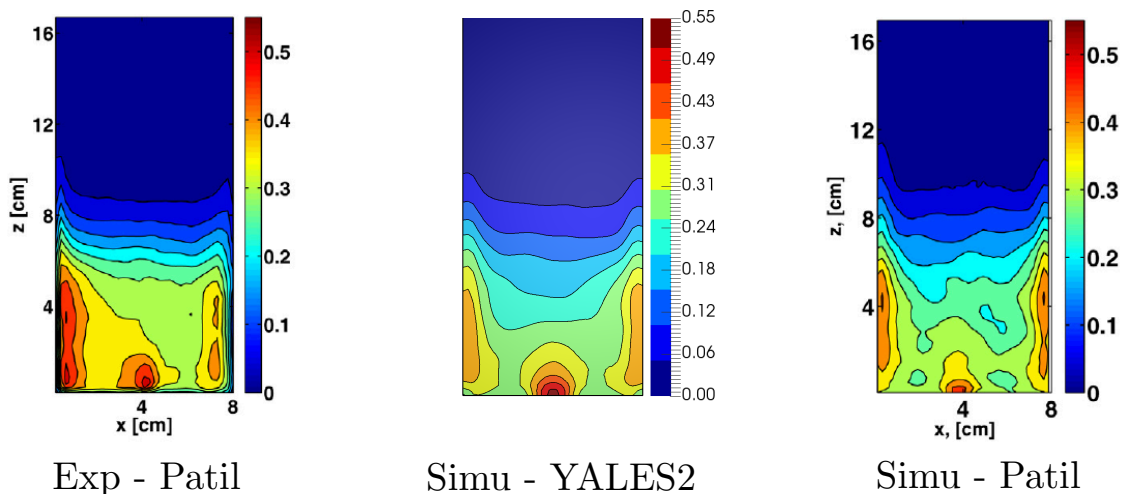
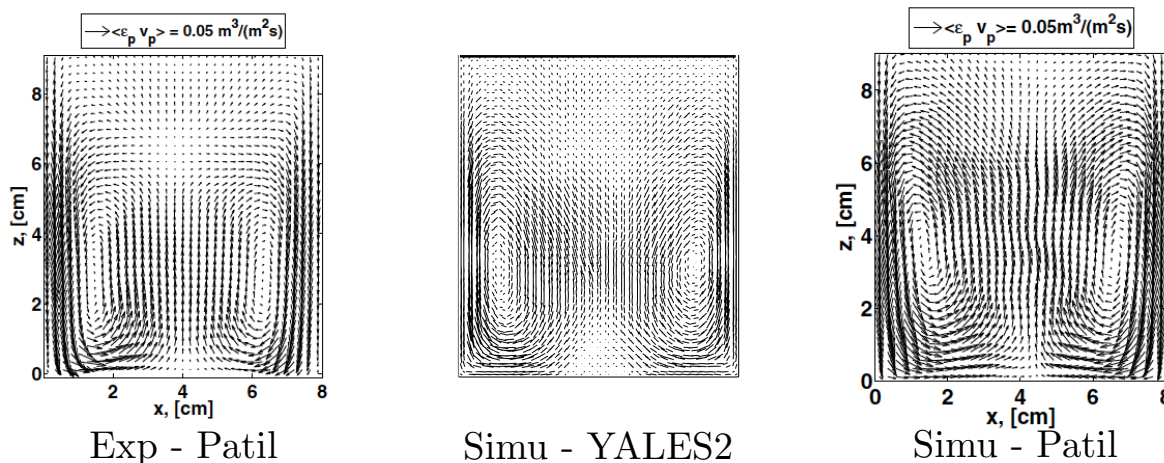


FIGURE 5.12: Coupes transversales des moyennes temporelles prises sur 15s $\langle \varepsilon_p(C) \rangle$, $\langle \varepsilon_p(C)u_p(C) \rangle$ et $\langle \Gamma_p(C) \rangle$ pour le cas 1b. Les résultats de Patil *et al.* sont issus de [226].

Fraction volumique de solide moyenne $\langle \varepsilon_p \rangle$



Flux de solide moyen $\langle \varepsilon_p u_p \rangle$



Température réduite $\langle \Gamma_p \rangle$

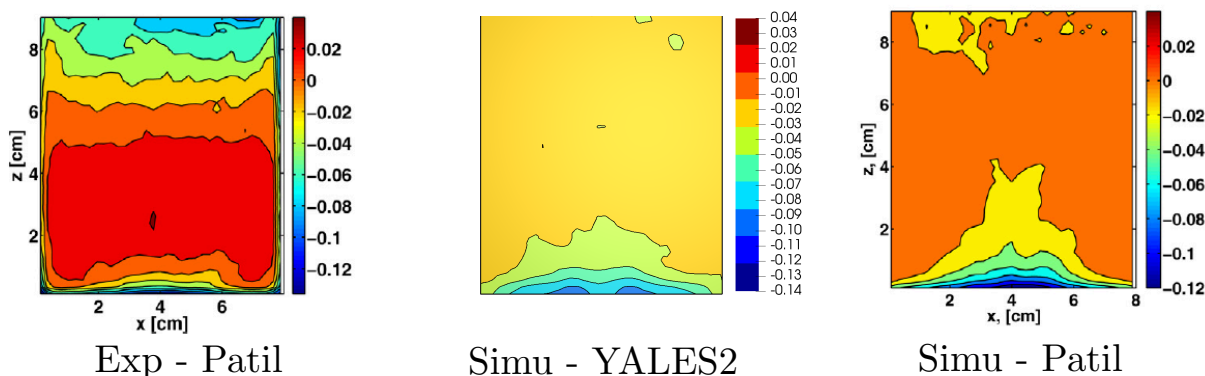


FIGURE 5.13: Coupes transversales des moyennes temporelles prises sur 15s $\langle \varepsilon_p(C) \rangle$, $\langle \varepsilon_p(C)u_p(C) \rangle$ et $\langle \Gamma_p(C) \rangle$ pour le cas 1c. Les résultats de Patil *et al.* sont issus de [227].

cules. Les forts taux de mélange provoquent une augmentation rapide de $\langle \Gamma_p(C) \rangle$ dans la direction verticale. Au cœur du lit ($z \lesssim 5\text{cm}$), la température locale est proche de la moyenne, ou légèrement plus élevée : $\langle \Gamma_p(C) \rangle$ vaut environ 0.02 expérimentalement, contre environ 0.01 dans les simulations, et ce dans les trois cas 1a, 1b et 1c. Les différences entre les résultats obtenus expérimentalement et par simulations numériques sont particulièrement frappantes dans la partie haute du lit. Dans le premier cas, on observe distinctement une baisse de $\langle \Gamma_p(C) \rangle$ en montant dans le réacteur, alors que les simulations montrent un champ plutôt uniforme dans cette zone. Selon Patil *et al.* [227], des erreurs de mesures du rayonnement infrarouge dans les zones diluées causées par des vitesses de particules élevées peuvent expliquer les résultats expérimentaux.

Les flux solides moyens dans la direction z verticale notés $\langle \varepsilon_p(C)u_{p,z}(C) \rangle$ obtenus à $z = 0.023\text{m}$ sont représentés sur la figure 5.14 pour les cas 1a, 1b et 1c. En ce qui concerne YALES2, les résultats numériques sont obtenus en moyennant les valeurs de $\langle \varepsilon_p(C)u_{p,z}(C) \rangle$ calculées sur l'intégralité de la section rectangulaire du réacteur, c'est-à-dire pour six valeurs de y . Ces six valeurs correspondent aux six cellules présentes dans la direction y . L'altitude $z = 0.023\text{m}$ choisie pour les mesures correspond à la hauteur caractéristique des boucles de recirculation observées expérimentalement.

En premier lieu, les courbes obtenues montrent un flux de solide positif dans la région centrale, correspondant à une ascension des particules. Les flux sont négatifs près des parois, témoignant de leur chute. Les résultats numériques trahissent des écarts de prédiction, qui se réduisent au fur et à mesure de l'augmentation de la vitesse d'injection du gaz. Dans le cas 1a, où la vitesse d'injection est la plus faible, la surestimation du flux ascendant au centre du réacteur est probablement due à celle de la fraction volumique de solide visible sur la figure 5.11. Pour les cas 1b et 1c, la comparaison quantitative de ces flux verticaux est acceptable dans la région centrale. Les différences comportementales les plus importantes apparaissent près des parois, où les flux descendants sont systématiquement surestimés (en valeur absolue) par les simulations. Expérimentalement, le flux de solide diminue lorsqu'on s'éloigne de la région centrale pour atteindre des valeurs négatives. À une distance d'environ 3 – 4 cellules de la paroi, celui-ci se stabilise puis remonte pour tendre vers une valeur nulle au niveau des cellules de la paroi. Les simulations parviennent à retrouver partiellement cette remontée locale du flux, cependant la position du point d'inflexion n'est pas reproduite. Plusieurs causes sont identifiables. La première est la surestimation de la fraction volumique de solide dans les cellules situées sur la paroi à l'altitude considérée de la part des simulations numériques. En effet, une analyse attentive des résultats expérimentaux des figures 5.11, 5.12 et 5.13 révèle une diminution de celle-ci au niveau de la paroi. Par ailleurs, cette diminution est régulièrement plus forte au niveau de la paroi droite, ce qui pourrait indiquer des imprécisions locales de mesure expérimentale. Il est également possible que les particules s'éloignent physiquement de la paroi, et que les simulations ne puissent en rendre compte. La rugosité de la paroi, qui n'est pas prise compte dans les simulations, peut expliquer ce comportement, qui empêche les particules de glisser indéfiniment et à tendance à les ramener vers le centre de l'enceinte. Des détails sur l'influence de la rugosité de paroi ont été abordés dans la section 2.7.3. Le fait que les particules ne sont pas parfaitement sphériques et possèdent une forte vitesse tangentielle de collision proches de la paroi pourrait constituer une autre cause de ce phénomène, en provoquant une forte sensibilité au modèle de friction employé. En étudiant un lit pulsé, Goniva *et al.* [122] ont d'ailleurs montré que la prise en compte de cette non-sphéricité, au travers l'implémentation d'un modèle de friction plus élaboré, permettait de retrouver cette remontée du flux de solide dans les régions proches parois. Patil *et al.* [227] attribuent les dissymétries observées expérimentalement à des inhomogénéités dans la vitesse du gaz au niveau de la plaque d'in-

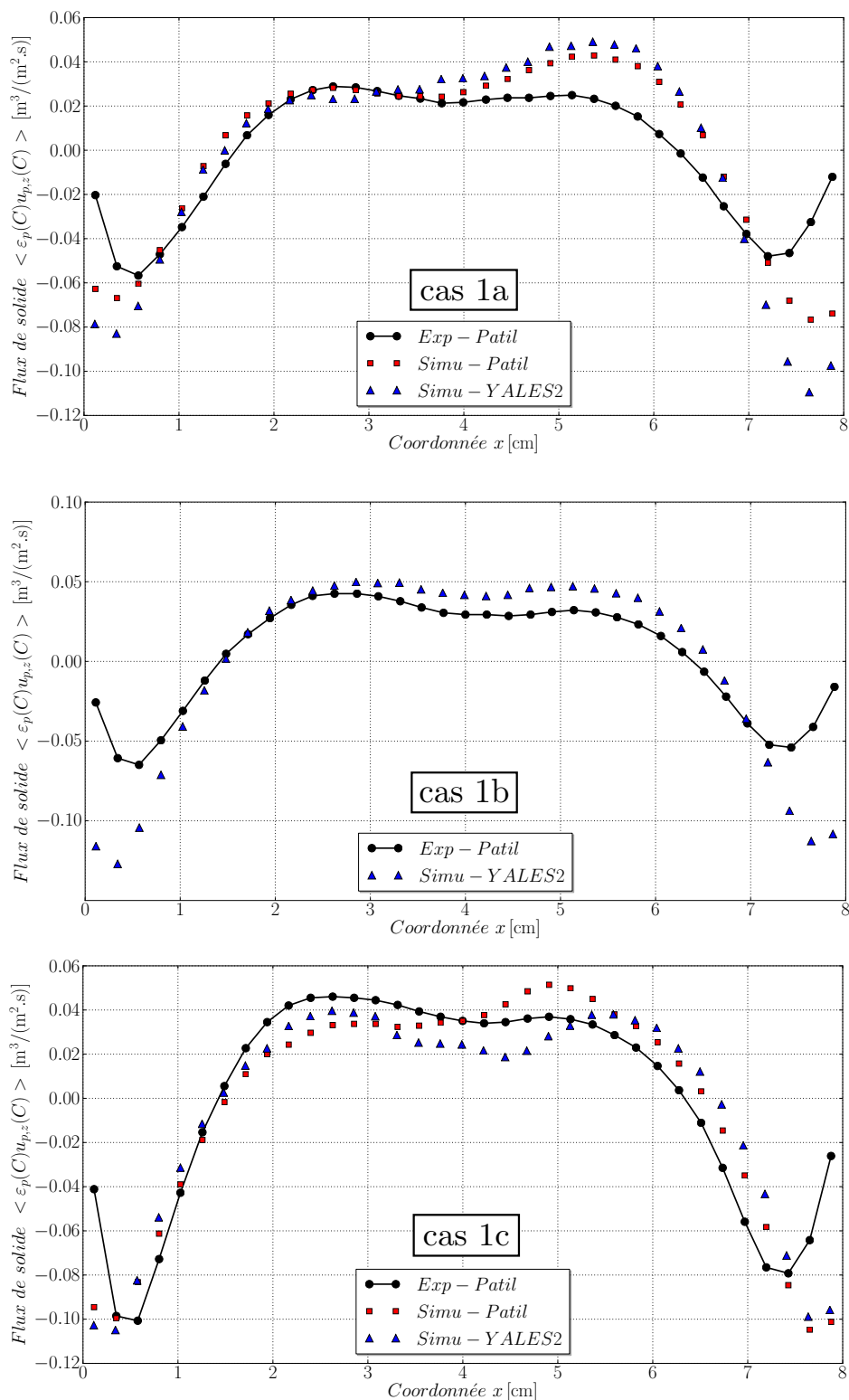


FIGURE 5.14: Flux solides moyens dans la direction verticale $\langle \varepsilon_p(C)u_{p,z}(C) \rangle$ obtenus à $z = 0.023\text{m}$ pour les cas 1a (haut), 1b (milieu) et 1c (bas). Les résultats de Patil *et al.* sont issus de [227] et [226].

jection, et celles observées sur les simulations par la discrétisation temporelle employée pour le calcul des moyennes temporelles.

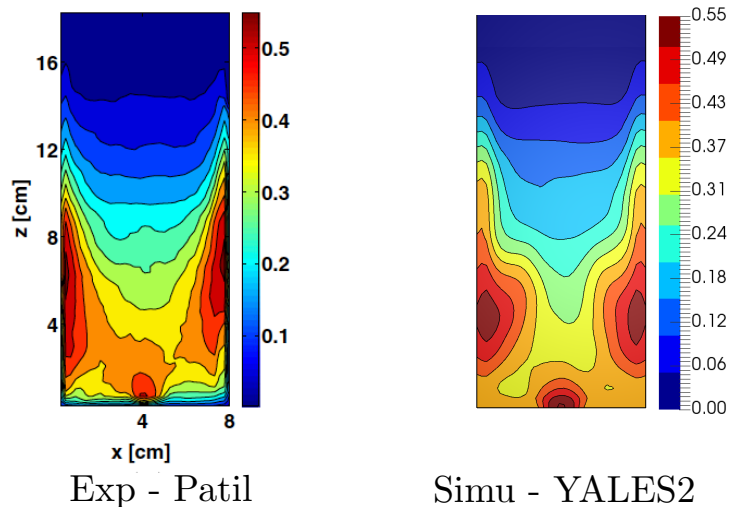
Les mêmes coupes transversales ($y = 0.0075\text{m}$) des moyennes temporelles $\langle \varepsilon_p(C) \rangle$, $\langle \varepsilon_p(C)u_p(C) \rangle$ et $\langle \Gamma_p(C) \rangle$ sont respectivement représentées pour les cas *2a* et *2b* sur les figures 5.15 et 5.16. Pour le cas *2b*, les résultats expérimentaux issus de Patil *et al.* [226] et de simulations de Patil *et al.* [227] sont confrontés aux résultats de simulations obtenus avec YALES2. Pour le cas *2a*, seuls les résultats expérimentaux de Patil *et al.* [226] sont disponibles.

Là encore, le champ moyen de fraction volumique de solide est globalement bien reproduit par les simulations numériques, notamment en ce qui concerne la hauteur maximale à laquelle on rencontre encore des particules au centre du réacteur, estimable à environ 14cm. L'aspect des zones de concentrations préférentielles latérales est cependant quelque peu différent. Les expérimentations montrent des formes plus allongées, et étendues sur une plage d'altitude plus importante que les simulations numériques. Notons que les résultats expérimentaux présentent souvent une asymétrie plus forte que les résultats numériques, attribuable à la distribution non-uniforme du gaz à l'injection [227]. En ce qui concerne les flux solides $\langle \varepsilon_p(C)u_p(C) \rangle$, les simulations montrent des similarités avec l'expérience dans le positionnement des boucles de recirculation latérales, bien que celles-ci semblent plus allongées pour les premières. Là encore, les écarts les plus importants se rencontrent dans la comparaison de la température réduite $\langle \Gamma_p(C) \rangle$.

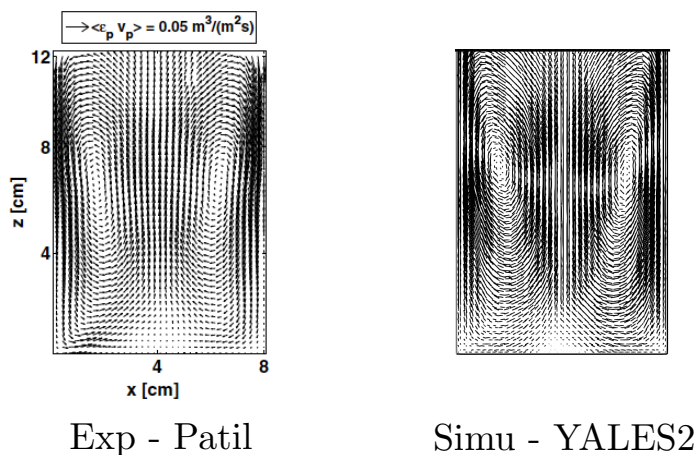
Les flux solides moyens dans la direction z verticale notés $\langle \varepsilon_p(C)u_{p,z}(C) \rangle$ obtenus à $z = 0.023\text{m}$ sont représentés sur la figure 5.17 pour les cas *2a* et *2b*.

Les simulations numériques font état de flux relativement équivalents entre les cas *2a* et *2b*, avec un maximum atteint au centre du domaine valant $0.05\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ et un minimum estimable à environ $-0.06 - -0.07\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ près des parois. Les résultats expérimentaux témoignent au contraire d'un changement de comportement plus drastique lors de l'augmentation de la vitesse d'injection du gaz. Les flux au centre y passent de 0.04 à $0.07\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, tandis qu'en proche paroi ils sont multipliés par un facteur 2, avec une remontée brutale au niveau de la paroi. Le profil de flux solide possède ainsi un aspect "en cloche" beaucoup plus prononcé dans le cas *2b* que dans le cas *2a*, et le second est bien mieux reproduit par les simulations. Ce changement d'aspect ne semble pas explicable de façon triviale, et n'était pas observable sur les cas *1a* et *1b* (voir figure 5.14), pour lesquels la vitesse d'injection du gaz était identique.

Fraction volumique de solide moyenne $\langle \varepsilon_p \rangle$



Flux de solide moyen $\langle \varepsilon_p u_p \rangle$



Température réduite $\langle \Gamma_p \rangle$

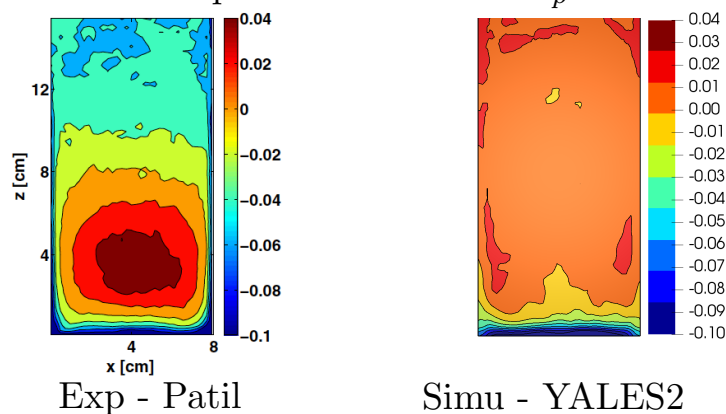
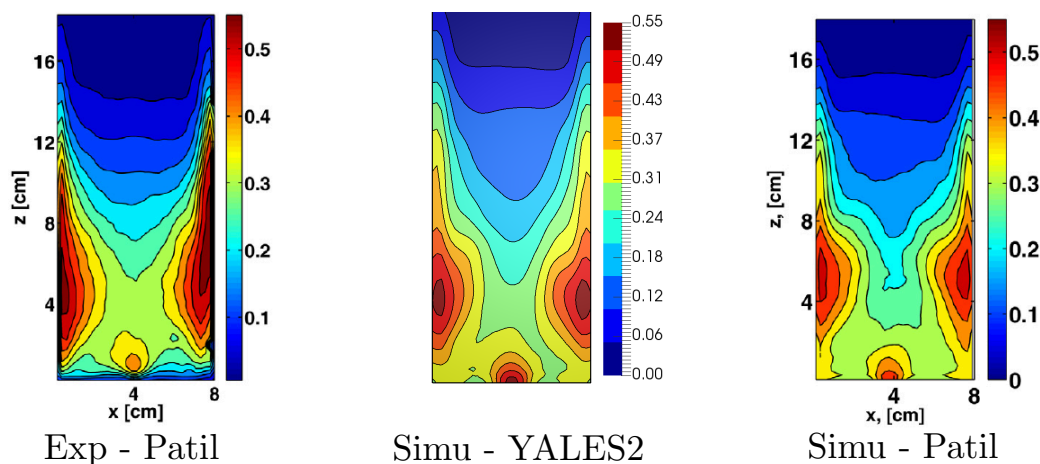
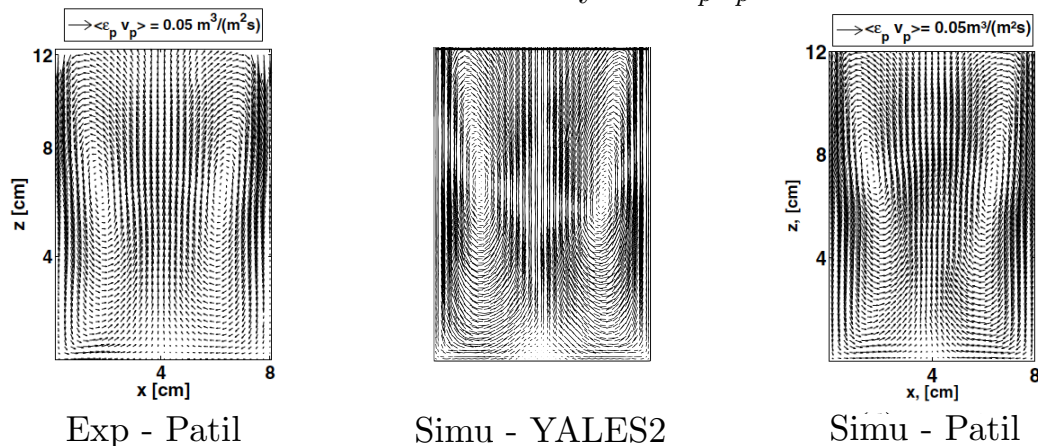


FIGURE 5.15: Coupes transversales des moyennes temporelles prises sur 15s $\langle \varepsilon_p(C) \rangle$, $\langle \varepsilon_p(C)u_p(C) \rangle$ et $\langle \Gamma_p(C) \rangle$ pour le cas 2a. Les résultats de Patil *et al.* sont issus de [226].

Fraction volumique de solide moyenne $\langle \varepsilon_p \rangle$



Flux de solide moyen $\langle \varepsilon_p u_p \rangle$



Température réduite $\langle \Gamma_p \rangle$

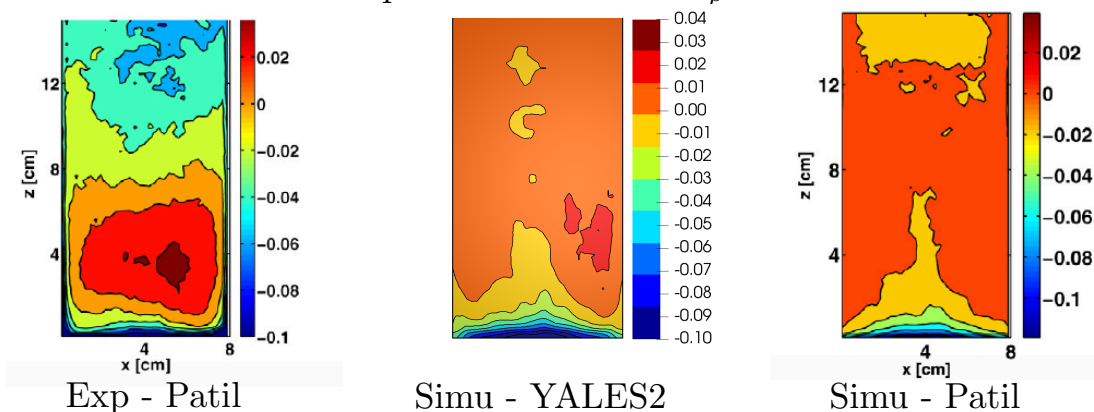


FIGURE 5.16: Coupes transversales des moyennes temporelles prises sur 15s $\langle \varepsilon_p(C) \rangle$, $\langle \varepsilon_p(C)u_p(C) \rangle$ et $\langle \Gamma_p(C) \rangle$ pour le cas 2b. Les résultats de Patil *et al.* sont issus de [226].

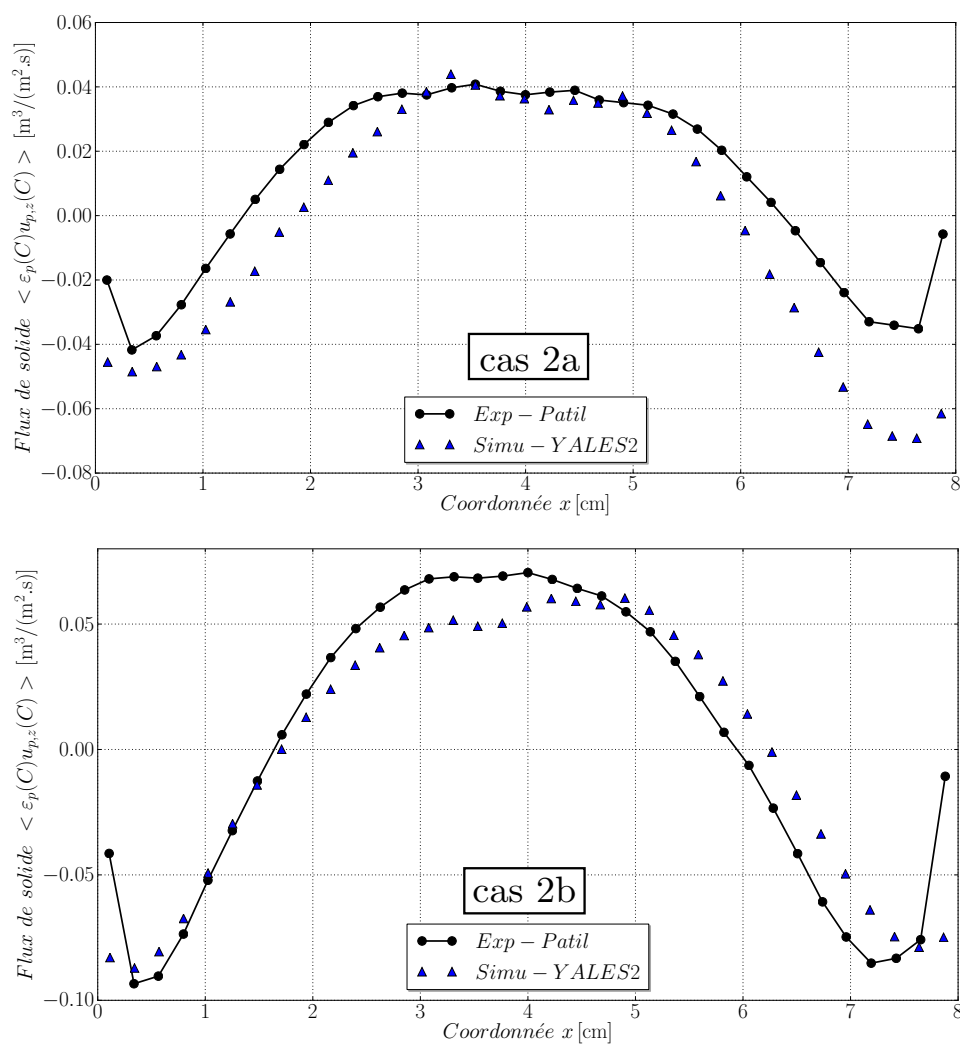


FIGURE 5.17: Flux solides moyens dans la direction verticale $\langle \varepsilon_p(C)u_{p,z}(C) \rangle$ obtenus à $z = 0.023\text{m}$ pour les cas 2a (haut) et 2b (bas). Les résultats de Patil *et al.* sont issus de [227] et [226].

5.3 Lit fluidisé circulant (CFB) isotherme

Les lits fluidisés circulants sont utilisés dans l'industrie pour de nombreuses opérations nécessitant des contacts fluide-particules importants, telles que la gazéification et la combustion de biomasse, ou le craquage catalytique. Leur dimensionnement ainsi que l'optimisation de leurs performances passe nécessairement par l'étude de la partie hydrodynamique. Cependant, peu de travaux numériques se sont consacrés à des lits fluidisés circulants 3D avec une boucle de recirculation complète, et l'objectif habituel de la DEM reste généralement de n'en simuler que certains composants clés [63]. On pourra néanmoins citer les travaux numériques de Chu & Yu [59] sur un système complet contenant 20000 particules. Le domaine de calcul y est maillé de façon explicite à l'aide d'hexaèdres. Les travaux de Xu *et al.* [329] quant à eux mettent en relation des données collectées expérimentalement avec des résultats de simulations numériques effectuées grâce au logiciel MFIX-DEM [123] (outil de CFD-DEM). Plus d'un million de particules sont alors modélisées de façon discrète. Dans cette partie de l'exposé, on s'attache à la reproduction de ces simulations avec le solveur granulaire du code YALES2. La géométrie présentée, quelque peu complexe, a gracieusement été fournie par Dr. Tingwen Li, développeur du code MFIX-DEM et co-auteur de la publication de Xu *et al.* [329].

5.3.1 Configuration

Le montage expérimental et un schéma explicatif issus de la publication originale sont représentés sur la figure 5.18, ainsi que la géométrie et le maillage utilisés dans ces travaux sur la figure 5.19.

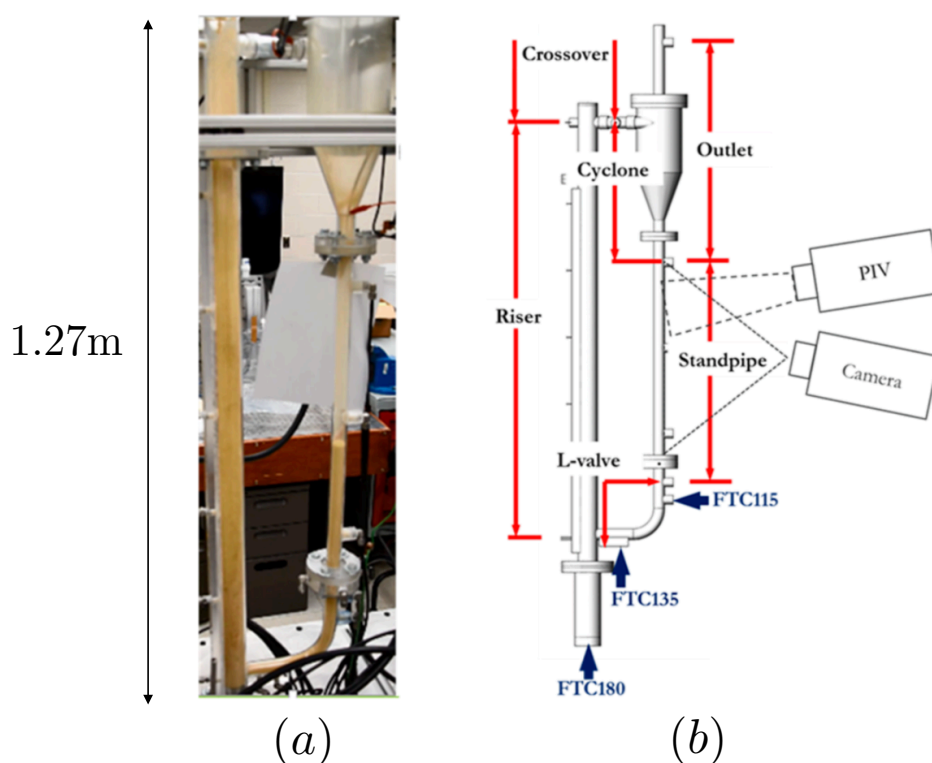


FIGURE 5.18: Montage (a) et schéma (b) expérimentaux pour le lit fluidisé circulant. Issu de Xu *et al.* [329].

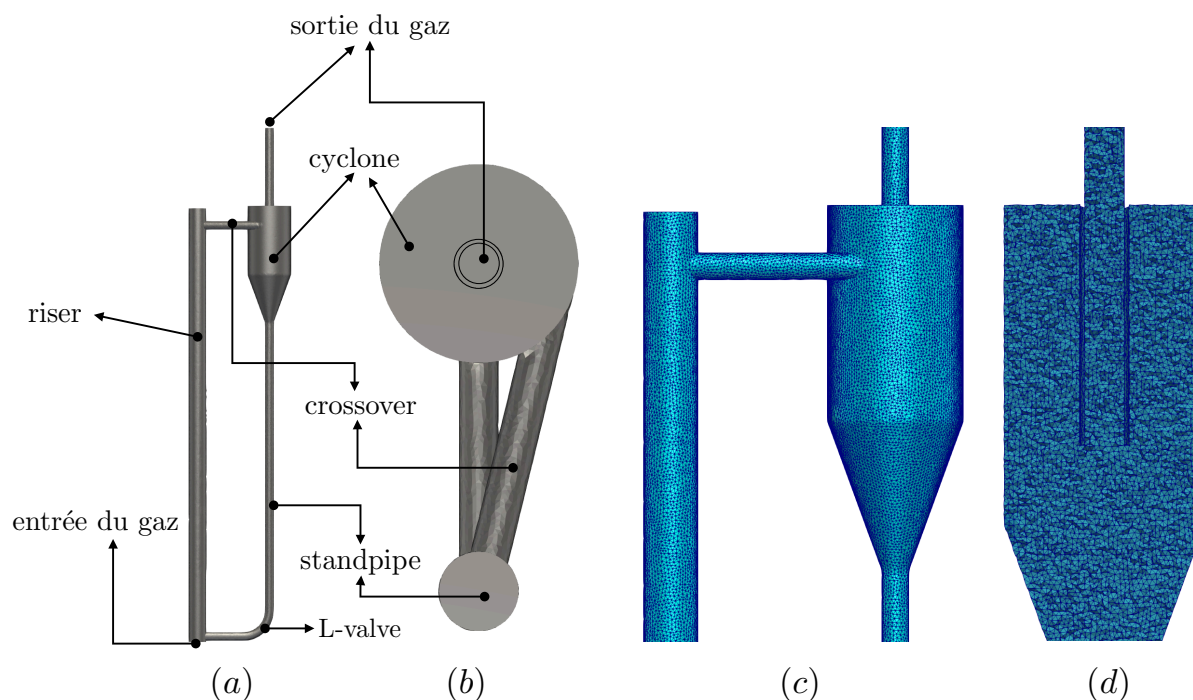


FIGURE 5.19: Géométrie complète du lit fluidisé circulant. Vue de côté (a) et vue du dessus (b) avec annotations. À droite, maillage de la partie haute de l'installation utilisé dans ces travaux (c). Une coupe transversale du cyclone révèle l'allure du tube de sortie du gaz (d).

La colonne (riser) a une hauteur de 1.27m et les diamètres du cyclone, du riser et du standpipe sont respectivement de 127mm, 50.8mm, et 25.4mm. La hauteur total est de 1.5m. Les parois du montage sont transparentes et des capteurs de pression sont disposés dans les différents composants du montage (voir figure 5.18). Le système fonctionne de la façon suivante : une masse totale de 350g de billes de polyéthylène haute-densité (en anglais high-density polyethylene ou "HDPE") est disposée dans le riser. Celles-ci ont un diamètre de $871\mu\text{m}$ et une densité de $863\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$, et sont donc au nombre de 1172207. Le gaz, ici de l'air dans les conditions normales de température et de pression, entre par l'injection primaire notée FTC180 sur la figure 5.18, dans la partie basse du montage. Le débit massique d'air en entrée est de $5.9\text{g}\cdot\text{s}^{-1}$, ce qui équivaut à environ 12 fois la vitesse minimum de fluidisation des billes. Le nombre de Reynolds particulaire Re_p vaut approximativement 150. À noter que ce débit correspond au cas 2 traité par Xu *et al.* [329], dont les travaux rassemblent trois cas. Sous l'effet de la traînée, les particules sont fluidisées dans le riser, et une partie peut le quitter pour s'introduire dans le pont, ou crossover. Elles sont alors introduites avec le gaz de façon tangentielle dans le cyclone (voir figure 5.19 (c)), ce qui permet la mise en rotation du milieu. Sous l'effet centrifuge, ces particules expérimentent des contacts répétés avec les parois du cyclone, ce qui a pour effet de leur faire perdre de la quantité de mouvement par friction. Lorsque leur énergie cinétique a assez décru, elles chutent sous l'effet de la gravitation dans le standpipe. Le gaz quant à lui sort majoritairement par le tube dont l'entrée est plongée au centre du cyclone, afin de minimiser la sortie de particule (voir figure 5.19 (d)). Les particules séjournent un certain temps dans le standpipe sous un arrangement compact, le gaz n'y circulant que très peu. La fenêtre de capture de la caméra visuelle et de la caméra PIV utilisées lors des expérimentations se situe au niveau du standpipe (voir figure 5.18). La recirculation des particules vers le riser est assurée par une jambe de retour (L-valve) située dans la partie basse du montage. Au niveau du coude, deux injecteurs

secondaires, notés FTC135 et FTC115 sur la figure 5.18, permettent l'entrée de gaz supplémentaire. Dans l'expérience menée par Xu *et al.* [329], 3% du débit total de gaz entrant est injecté par ces deux valves réunies. Elles n'ont cependant pas été représentées dans les simulations réalisées avec YALES2.

5.3.2 Spécificités de la partie cyclone

Le riser étant constitué d'un lit fluidisé simple, on se concentre dans cette partie à une analyse de la partie cyclone du montage. La trajectoire des particules entrant dans ce composant est régie par un équilibre ; principalement entre la force de gravité ayant tendance à faire chuter les particules, la traînée les entraînant majoritairement dans un mouvement de rotation autour de l'axe de symétrie du cyclone, et les forces de collision. L'écoulement étant assez dilué dans le cyclone, des simulations ont montré que les collisions avec les parois jouent un rôle prépondérant dans le mouvement des particules. L'objectif est ici de décrire ces différents effets. Ceux-ci peuvent être à l'origine d'un blocage des particules dans un mouvement perpétuel de révolution dans le cyclone, observé lors des premières simulations.

5.3.2.1 Influence de la traînée

La physique à l'oeuvre dans le cyclone est complexe : les fortes vitesses de gaz en sortie du crossover provoquent une traînée importante entraînant les particules dans un mouvement de révolution à une vitesse tangentielle élevée ($\approx 1 - 2 \text{m.s}^{-1}$). Un puissant vortex est présent de façon permanente au centre du cyclone [125][141], conduisant à une importante vitesse ascendante de gaz le long de son axe de symétrie, et à des gradients de vitesse important sur son diamètre, visibles sur la figure 5.20.

En terme de magnitude, la vitesse orthoradiale est la plus élevée. Les contours montrent un cisaillement particulièrement marqué en proche paroi, où la vitesse orthoradiale passe brutalement de 0 (condition de non-glissement sur les noeuds de la paroi) à 6 voire 8m.s^{-1} sur les trois ou quatre premières couches de noeuds. Ce phénomène est de plus en plus marqué à mesure que les particules descendent dans le cyclone, et aura donc tendance à favoriser la révolution de ces dernières. La vitesse radiale montre des valeurs plutôt faibles en comparaison, de plus en plus négatives (donc orientée vers l'intérieur du cyclone) durant la descente. Ceci est en partie dû à la forme conique du cyclone dans sa partie basse. La composante radiale de la vitesse du gaz a donc tendance à éloigner les particules des parois. Sa composante verticale quant à elle montre un fort courant ascendant au centre, et un courant plutôt descendant en proche paroi, ce qui favorise la chute des particules. Les particules en mouvement dans le cyclone montrent des nombres de Reynolds inférieurs à 100, pouvant monter à quelques centaines pour celles qui viennent de jaillir du crossover. Le temps de relaxation moyen pour la traînée $\tau_{p,drag}$ (voir équation 2.154) vaut environ 0.5s dans les conditions de l'écoulement proche paroi. Au vu des fortes vitesses de gaz, les gradients captés sont probablement tributaires de la résolution spatiale du maillage, et les couches limites ne sont pas suffisamment bien résolues. Une étude préliminaire sans particule avec un maillage plus raffiné permettrait sans doute de révéler des gradients de vitesse encore plus importants.

5.3.2.2 Influence des impacts particule-paroi

Les forces de collision particules-paroi ont d'abord un effet normal (par rapport au plan tangent de la paroi). Celui-ci est décrit par la figure 5.21(a) et a tendance à favoriser la remontée des particules dans le cône si l'angle normal d'impact est supérieur à $\beta \approx 70^\circ$. Sur la figure, on considère une particule qui s'apprête à entrer en collision avec la paroi avec une certaine direction d'impact. Il apparaît que si la particule impacte la paroi en provenance de la zone rouge, la composante normale de la collision la

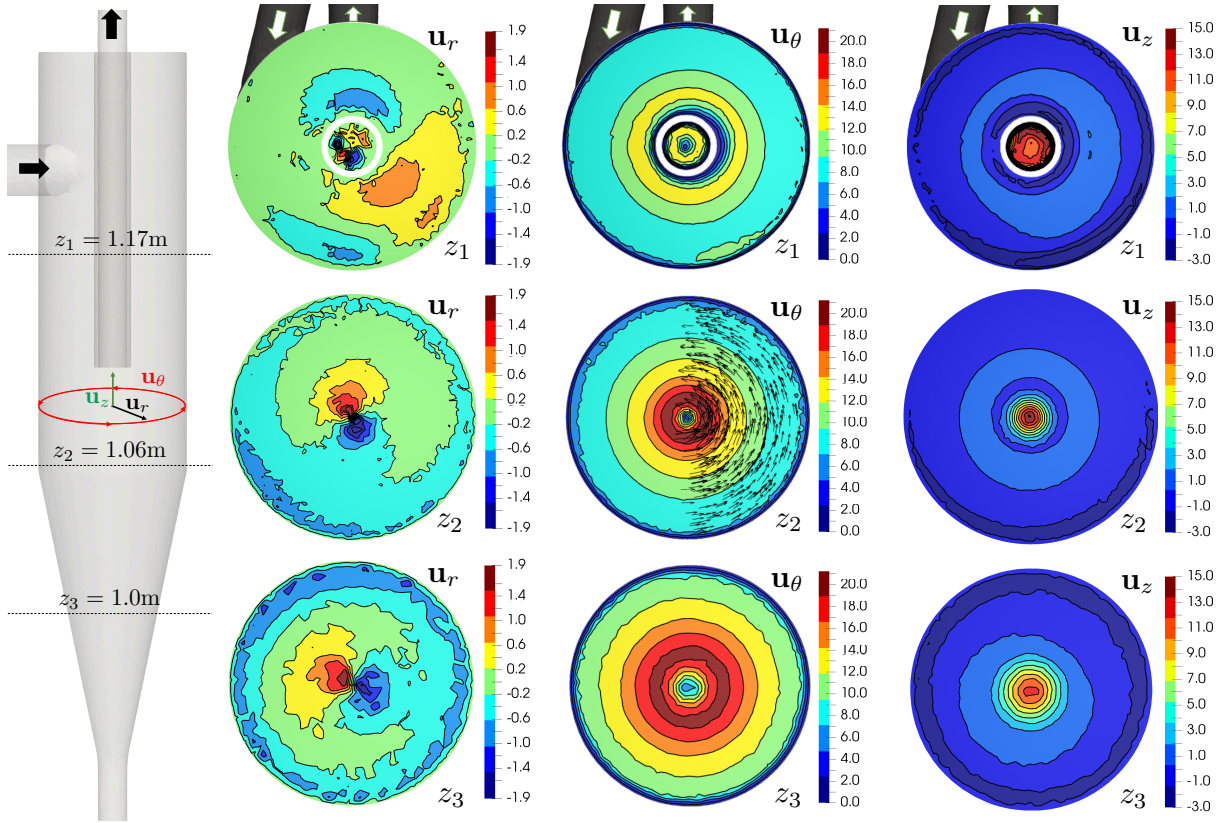


FIGURE 5.20: Coupes montrant les champs moyens de vitesse radiale \mathbf{u}_r (à gauche), orthoradiale \mathbf{u}_θ (au centre) et verticale \mathbf{u}_z (à droite) de gaz dans le cyclone, à différentes altitudes notées z_1 , z_2 , et z_3 .

repoussera au-dessus de la direction horizontale, favorisant sa remontée dans le cyclone. Si au contraire elle provient de la zone verte, la composante normale la renverra sous la direction horizontale. L'angle limite β entre ces deux zones vaut environ 70° . De façon systématique, cet effet a également tendance à éloigner les particules de la paroi dans la direction radiale, augmentant leur probabilité d'entrer dans des zones où la vitesse de gaz est accrue (voir paragraphe précédent).

L'effet tangentiel des impacts (voir figure 5.21(b)) agit dans le plan de la paroi en contact et sa direction s'oppose à la vitesse de glissement. C'est en grande partie sur cet effet tangentiel, prenant en considération les phénomènes de nature frictionnelle, que repose la perte d'énergie cinétique des particules, conduisant à leur chute.

La figure 5.22 montre une situation hypothétique où une particule est entrée dans un mouvement de rotation infini à une vitesse orthoradiale supposée constante $\mathbf{u}_{p,\theta}$. En projetant la force de gravité et la force due à l'effet centrifuge sur l'axe de déplacement de l'orbite, l'hypothèse d'équilibre à une altitude z donnée permet d'obtenir la condition suivante :

$$\|\mathbf{u}_{p,\theta}(z)\| = \sqrt{\frac{R(z)\|\mathbf{g}\|}{\tan \alpha}}, \tag{5.11}$$

où $R(z)$ représente le rayon du cyclone à l'altitude z . Ce calcul donne une vitesse d'équilibre limite $\mathbf{u}_{p,\theta}^{lim} \sim 1.3\text{m.s}^{-1}$ à une altitude correspondant au grand diamètre de la partie conique du cyclone (altitude z_2 sur la figure 5.20). Ceci montre que si une particule se met à tourner à une vitesse au moins égale

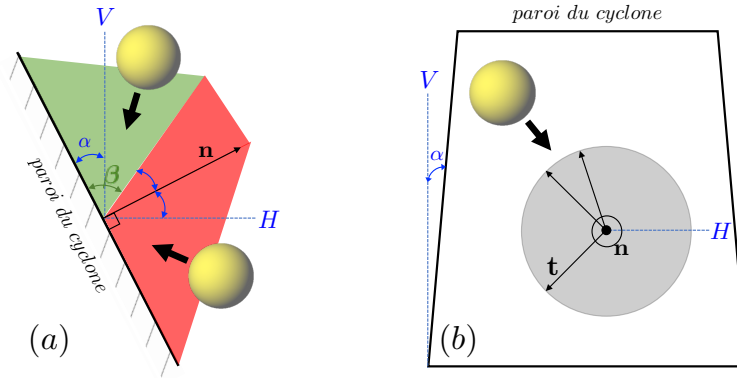


FIGURE 5.21: Représentation 2D d’une portion de la partie conique du cyclone. L’angle formé avec la verticale α est d’environ 20° . (a) Effet normal : la normale à la paroi \mathbf{n} est représentée, accompagnée des directions verticale V et horizontale H . Celui-ci a tendance à favoriser la remontée des particules dans le cône si l’angle normal d’impact est supérieur à $\beta \approx 70^\circ$. (b) Effet tangential : la friction prend place dans un plan orthogonal au vecteur normal et agit comme un frein sur la vitesse de glissement du point de contact. Le vecteur \mathbf{t} porteur de la force de friction possède donc une direction opposée à la vitesse de glissement.

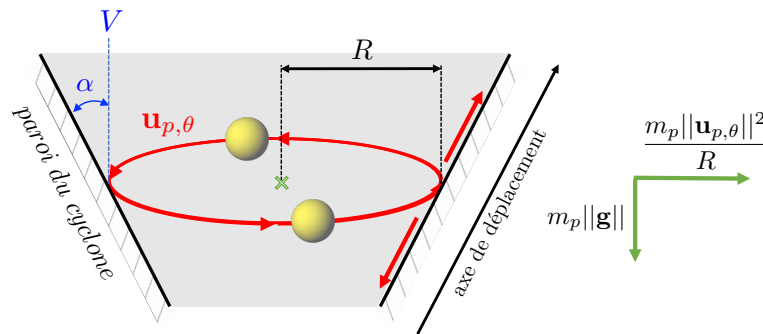


FIGURE 5.22: Représentation d’une particule à l’équilibre tournant indéfiniment dans la partie conique du cyclone à une vitesse $\mathbf{u}_{p,\theta}$.

à celle-ci, alors la gravité seule ne permet pas de la faire descendre de cet orbite. En réalité, de telles situations d’équilibre sont effectivement observables dans les simulations en l’absence de phénomènes frictionnels, pour des vitesses de particules équivalentes. En d’autres termes, au-delà de $\mathbf{u}_{p,\theta}^{lim}$, la friction est le principal mécanisme permettant de réduire la vitesse orthoradiale des particules, phénomène aboutissant à leur chute. Enfin, les expérimentations menées sur cette configuration ne montrent aucun phénomène de blocage des particules dans le cyclone [329], ainsi la force de gravité et la friction doivent effectivement suffire à les faire chuter.

Les modèles de friction implémentés, à savoir le glissement Coulombien et l’amortissement visqueux (voir Section 2.2.2), ont tous deux pour conséquence de faire tendre la vitesse de glissement vers 0 [319], comme il a été observé dans la Section 4.1.1. Pour le premier, il s’agit d’une limitation numérique dû aux oscillations du vecteur de collision tangentiel \mathbf{t}_{ab} lors de l’inversion du signe de la vitesse de glissement, et pour le second d’une limitation intrinsèque. Cette situation correspond à un cas de roulement sans glissement, où la vitesse de translation du point de contact est équilibrée par sa vitesse de rotation autour

du centre de la particule. Les particules en contact, afin de rouler sans glisser, se mette alors à entrer en rotation de façon à équilibrer la vitesse de translation au point de contact. Bien qu'aucune donnée expérimentale n'ait pu être trouvée sur le régime de friction des particules à l'intérieur du cyclone, rien n'indique que ce régime de roulement soit à privilégier. Le caractère majoritairement tangentiel des contacts, illustré sur la figure 5.23, laisse davantage présager que les forces de friction sont effectivement limitées par la branche Coulombienne, d'où une situation plus probable de glissement sans roulement. On a finalement recours à un modèle de friction de roulement (voir Section 2.2.2), qui a pour objectif de diminuer la vitesse de rotation des particules au cours d'un contact, et donc leur vitesse de translation lorsque la vitesse de glissement s'approche de 0.

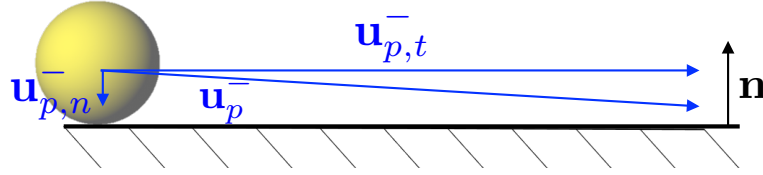


FIGURE 5.23: Schéma à l'échelle représentant les composantes normale $\mathbf{u}_{p,n}^{-}$ et tangentielle $\mathbf{u}_{p,t}^{-}$ des vitesses d'impact \mathbf{u}_p^{-} moyennées sur un tour de cyclone. La proportion $\mathbf{u}_{p,n}^{-}/\mathbf{u}_{p,t}^{-}$ est d'environ 5%. Les vitesses mesurées sont issues d'une particule en situation d'équilibre dans le cyclone, avec $e_n = 0.9$.

Rappelons qu'afin de quantifier la propension des particules à se rapprocher de la paroi au fur et à mesure des contacts, il est possible de comparer les angles pré et post collision (mesurés par rapport au plan tangent à la paroi). Il apparaît que sous la seule influence des forces de collision, la condition sine qua non pour qu'une particule se rapproche de la paroi à la suite d'un contact s'écrit :

$$\frac{\|\mathbf{u}_{p,n}^{+}\|}{\|\mathbf{u}_{p,t}^{+}\|} < \frac{\|\mathbf{u}_{p,n}^{-}\|}{\|\mathbf{u}_{p,t}^{-}\|}. \quad (5.12)$$

Par définition, on a $\|\mathbf{u}_{p,n}^{+}\| = e_n \|\mathbf{u}_{p,n}^{-}\|$ et $\|\mathbf{u}_{p,t}^{+}\| = e_t \|\mathbf{u}_{p,t}^{-}\|$, ce qui conduit à :

$$\frac{e_n}{e_t} < 1. \quad (5.13)$$

Ce résultat montre qu'augmenter la friction n'est raisonnable que si e_t est maintenu supérieur à e_n . En effet dans un cas où $e_t \ll e_n$, la particule risque de s'approcher du centre du cyclone et de se faire entraîner hors du domaine par le vortex, ou dans une moindre mesure de subir une violente accélération due aux fortes vitesses de fluide dans cette zone.

5.3.2.3 Mise en évidence d'une pseudo-rugosité de paroi

Une analyse fine des contacts particules-paroi indique qu'en réalité celles-ci n'effectuent qu'un nombre fini de contacts par tour de cyclone, que l'on note $N_{rebonds}$. Pour les particules à l'équilibre à l'altitude z_2 (voir figure 5.20) à la vitesse de rotation $\mathbf{u}_{p,\theta} \sim \mathbf{u}_{p,\theta}^{lim}$, un nombre moyen de $N_{rebonds} \approx 30$ collisions par tour a été observé. Le temps de contact caractéristique pour un rebond idéal est donné par la relation 2.41 et vaut dans le cas présent $T_C \sim 1.7 \times 10^{-4}$ s, ce qui porte le temps total de collision sur un tour à $\sum T_C = N_{rebonds} \times T_C \sim 5 \times 10^{-3}$ s. Or ces particules effectuent un tour de cyclone en un temps $T_{cycle} \sim 0.3$ s, d'où $\sum T_C/T_{cycle} \sim 0.02$. Finalement, une particule à l'équilibre passe en moyenne moins de 2% de son temps en contact avec la paroi.

En l'absence de données expérimentales, il est difficile d'estimer la qualité de cette prédiction. Cependant, des tests ont montré qu'une méthode dite "exacte" de représentation géométrique du cylindre aboutissait nécessairement à des contacts continus des particules sur la paroi, c'est-à-dire $\sum T_C/T_{cycle} \rightarrow 1$. Cette méthode "exacte" consiste à remplacer le traitement classique des parois complexes présenté dans la section 2.3 (traitement par face), par une méthode analytique prenant en compte l'équation décrivant la géométrie du cyclone (une partie cylindrique + une partie conique). Cette dernière s'affranchit donc de toute discrétisation spatiale de la géométrie (facétisation), qui apparaît parfaitement lisse aux yeux des particules. Dans le cas du traitement par face, on met ainsi en lumière une forme de pseudo-rugosité de paroi due à la facétisation de la géométrie. Des simulations ont montré que les principaux concepts de la rugosité, explorés dans la section 2.7.3 dans le cas des parois planes, étaient également à l'oeuvre sur les parois du cyclone. Ceux-ci comportent notamment l'observation de coefficients de restitution apparents supérieurs à 1, de transferts d'énergie entre les composantes tangentielle et normale de la vitesse au cours du contact, et finalement d'un éloignement de la paroi causé par une impossibilité d'y glisser indéfiniment.

Le temps moyen de vol T_V , que l'on définit comme le temps moyen entre deux collisions consécutives sur la paroi, soit :

$$T_V = \frac{T_{cycle} - \sum T_C}{N_{rebonds}}, \quad (5.14)$$

peut donc être estimé à 1.0×10^{-2} s. Ce temps est deux ordres de grandeur plus petit que le temps de relaxation moyen pour la traînée $\tau_{p,drag}$ calculé dans le paragraphe 5.3.2.1. Ainsi sur un temps de vol, la particule n'a pas le temps de se mettre en équilibre avec le gaz. Cependant, ces temps de vol peuvent être suffisants pour réaccélérer une particule, comme l'illustre la figure 5.24, pour laquelle on a relevé la vitesse orthoradiale lors de chaque contact avec la paroi. Y sont visibles les phases de contact, durant lesquelles la particule décélère légèrement, avant d'être entraînée à une vitesse supérieure par le fluide lors des phases de vol, durant lesquelles la particule n'est plus en contact avec la paroi. Pour ce cas, la perte de vitesse due à la friction ne compense pas le gain de vitesse causé par la traînée.

Afin d'isoler la contribution de cette pseudo-rugosité à la faible valeur du temps effectif de contact entre les particules et la paroi du cyclone, un programme calculant la trajectoire d'une unique particule ponctuelle lancée à l'intérieur d'un cercle de même dimension que le diamètre du cyclone est créé. Pour modéliser les faces vues par les particules dans le cyclone original, le cercle est représenté par un polygone irrégulier de 120 côtés (voir figure 5.25 en haut). Une méthode sphères dures est utilisée. Aucune force n'est comptabilisée hormis la force normale de collision (pas de friction). On observe alors le nombre de contacts effectués par tour de cyclone, en fonction de la valeur du coefficient de restitution normal particule-paroi (voir figure 5.25 en bas).

Une influence fondamentale de ce paramètre est avérée. Pour $e_n = 0.9$ et $e_n = 0.8$, Le nombre de contacts par tour est variable, et oscille respectivement autour de 30 (soit $\sim 25\%$ du nombre de faces) et 50 ($\sim 40\%$ du nombre de faces) contacts/tour environ. En diminuant encore la valeur de e_n , la fraction de faces contactées par tour augmente de façon monotone jusqu'à atteindre $\sim 93\%$, et devient stationnaire. Des pourcentages analogues ont été mis en évidence pour des qualités supérieures de tessellation, c'est-à-dire avec des polygones comportant davantage de côtés. Sans constituer une preuve mathématique, ces observations tendent à montrer qu'il existe une limite géométrique pour le rapport $\sum T_C/T_{cycle}$, justifiant l'emploi d'une valeur moindre du coefficient de restitution normal des contacts particule-paroi dans le cyclone. Il a été vérifié avec ce même programme sphères dures dans un cas

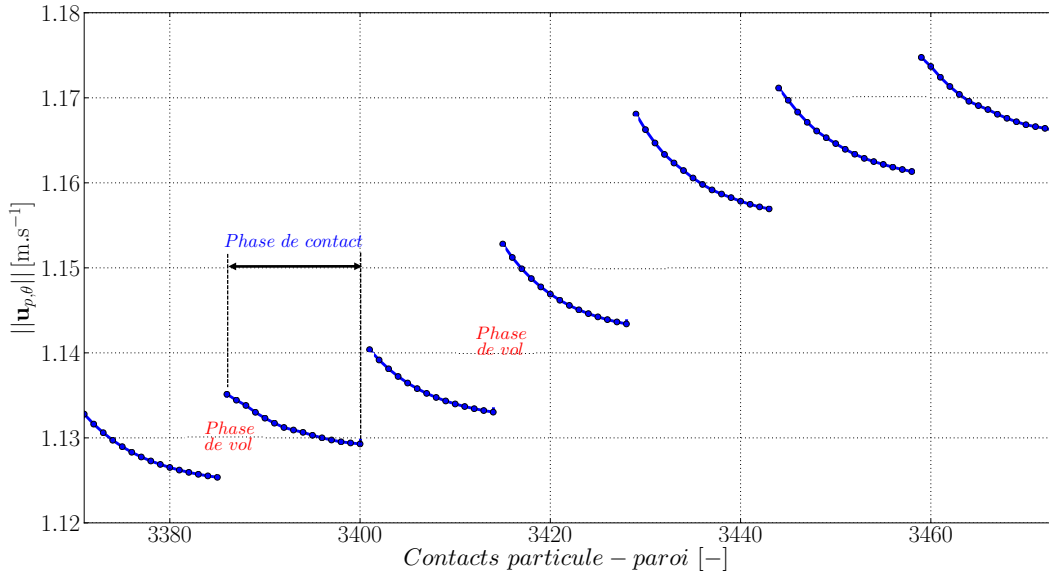


FIGURE 5.24: Évolution de la vitesse azimutale d'une particule en équilibre au cours de sa révolution dans le cyclone, relevée au moment des contacts avec la paroi. Les discontinuités témoignent de l'existence de phases de vol, durant lesquelles la particule n'est plus en contact avec la paroi.

idéal où le cercle est représenté de façon exacte que la particule ponctuelle voit son nombre de contacts par tour tendre vers l'infini. Lors de la simulation complète, pour $e_n = 0.9$, on observe en moyenne $\sum T_C/T_{cycle} \sim 2\%$. En prenant $e_n = 0.5$, le nombre de contacts effectués sur un tour de cyclone est porté à une moyenne de 120, et le quotient atteint alors $\sum T_C/T_{cycle} \sim 7\%$. Cette dernière valeur a été jugée suffisante et a été adoptée lors des simulations.

5.3.3 Résultats

Les simulations présentées dans cette partie ont été effectuées sur un maillage uniforme body-fitted comprenant 1.5M de tétraèdres réalisé grâce à l'outil d'adaptation de maillage du code YALES2. En moyenne, le volume d'un tétraèdre vaut environ $12V_p$. Le maillage principalement utilisé par Xu *et al.* [329] comprenait 1M d'hexaèdres utilisés pour mailler le parallélépipède englobant la géométrie, une méthode cut-cell pour les frontières immergées étant utilisée pour leurs simulations. Les paramètres utilisés pour ces simulations sont présentés dans le tableau 5.4, qui comporte également les spécificités de la partie cyclone décrites dans la section précédente. Les parois sont choisies non glissantes pour le gaz. Les statistiques expérimentales sont acquises après 10s pour assurer l'installation d'un régime pseudo-stationnaire, défini comme le temps nécessaire à la stabilisation des différents signaux de pression et de la hauteur de particules dans le standpipe. Les simulations effectuées par Xu *et al.* [329] sont initialisées durant 10s de temps physique, puis les données statistiques sont extraites durant les 15s suivantes. La méthode utilisée pour les simulations réalisées avec YALES2 est la même. Le coefficient de traînée dans l'expression des forces hydrodynamiques appliquées aux particules est calculé grâce au modèle de Huilin & Gidaspow (voir équation 2.108).

La figure 5.26 montre la fraction volumique de fluide moyenne le long du riser et les lignes de courant associées à la vitesse moyenne des particules dans l'intégralité du système. Ces dernières indiquent que

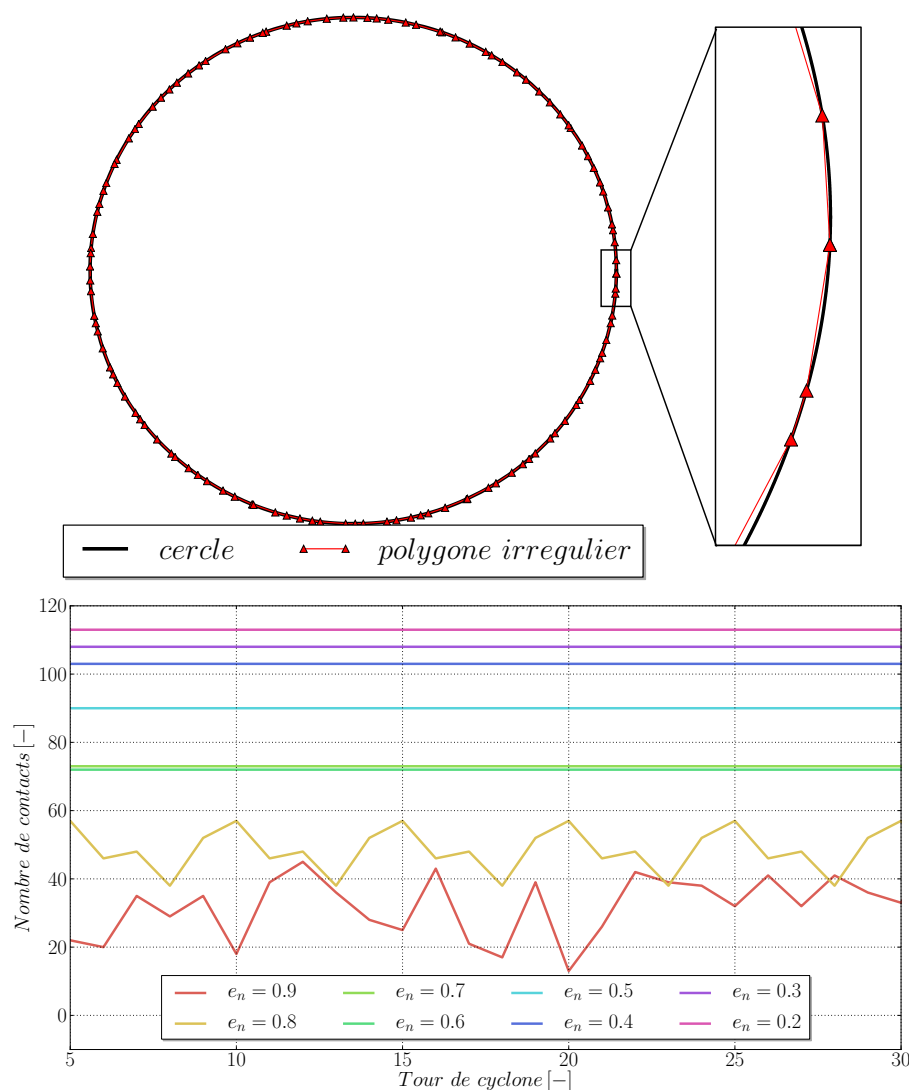


FIGURE 5.25: En haut : représentation du polygone irrégulier de 120 côtés servant à modéliser une section du cyclone. En bas : influence de la valeur du coefficient de restitution normal sur le nombre de contacts par tour de cyclone effectué par la particule.

la méthodologie adoptée pour modéliser la partie cyclone permet en effet la chute des particules. Est également visible la structure annulaire typique adoptée par le profil de vitesse moyenne verticale des particules dans le riser, exhibant un maximum au centre du canal, et des vitesses négatives près des parois. À l'inverse, la fraction volumique de solide est maximum près des parois, et minimum au centre du canal. La vitesse moyenne d'ascension des particules quasiment nulle au niveau du crossover montre que la modélisation actuelle laisse présager un faible débit de solide passant dans le cyclone.

Les résultats obtenus avec les simulations sont comparés avec différents post-traitements expérimentaux et numériques réalisés par Xu *et al.* [329]. Dans leurs travaux, les auteurs montrent l'influence du choix du modèle de traînée sur la qualité des simulations comparée à l'expérience. Quatre modèles sont comparés, dont un modèle proche de celui de Huilin & Gidaspow (voir équation 2.108). Notons que les données récoltées par Xu *et al.* [329] pour les quatre modèles testés sont très hétérogènes, et que les meilleurs résultats ont été obtenus avec le modèle de Hill-Koch-Ladd [136] dérivé de simulations DNS.

TABLE 5.4: Valeurs numériques utilisées pour la simulation du lit fluidisé circulant.

Propriété relatives aux particules	Valeur numérique	Unité
N_p	1172207	[-]
d_p	871×10^{-6}	[m]
ρ_p	863	[kg.m ⁻³]
μ_d	0.1	[-]
e_n	0.9	[-]
k_n	100	[N.m ⁻¹]

Spécifiques aux contacts particule-paroi dans le cyclone	Valeur numérique	Unité
μ_r	2×10^{-4}	[m]
e_n	0.5	[-]

Propriétés du gaz	Valeur numérique	Unité
ρ	1.2	[kg.m ⁻³]
μ	1.8×10^{-5}	[kg.m ⁻¹ .s ⁻¹]
U_{in}	$\sim 12U_{mf}$	[m.s ⁻¹]

Ces hétérogénéités s'expliquent par le fait que différentes modèles de traînée conduisent à différents entraînements de solide dans le riser.

La figure 5.27 montre le profil vertical moyen de fraction volumique de solide dans le riser. Les résultats des simulations numériques de YALES2 sont comparés avec ceux de MFIX [329] pour deux modèles de traînée. Ceux-ci montrent un accord qualitatif, avec une concentration de solide maximum en bas du riser, et décroissante au cours de l'ascension. Le solide s'accumule de façon légèrement plus importante en bas du riser dans le cas de YALES2 et diminue plus rapidement avec la hauteur. Le modèle Hill-Koch-Ladd [136] (ou HKL) prédit un entraînement plus important des particules, avec une valeur de $\langle \varepsilon_p \rangle_t \approx 0.035$ au niveau de l'entrée du crossover. Il permet donc une amélioration de la fluidisation.

La figure 5.28 compare les flux massiques instantanés de solide en sortie du cyclone. Il s'agit d'un paramètre critique pour le dimensionnement des unités industrielles, généralement imposé comme condition limite dans les calculs où seul le riser est simulé. Il apparaît qu'expérimentalement, ce flux n'est jamais nul, les particules sortent donc du cyclone de façon permanente. Ce flux est mal capturé par les codes de calcul lors de l'utilisation du modèle de Gidaspow pour la traînée, et nos simulations ne montrent qu'un flux discontinu de solide. Le faible entraînement de solide à l'altitude du crossover pour ce modèle mis en évidence sur la figure 5.27 est à mettre en cause.

La hauteur de solide instantanée dans le standpipe, où celui-ci s'accumule après sa sortie du cyclone, est représentée sur la figure 5.29. Là encore, les simulations peinent à reproduire la hauteur obtenue expérimentalement et montrent un écart caractéristique d'une dizaine de centimètres. Cet écart semble également lié à la mauvaise prédiction de l'entraînement du solide en haut du riser et à la plus faible quantité de particules sortant du cyclone.

Enfin, les pertes de charge au travers des principaux composants du montage sont visibles sur la figure 5.30. Celle-ci est convenablement décrite par les simulations dans le riser et le crossover. Cependant, des écarts très importants apparaissent ailleurs, notamment au travers du cyclone et de la L-valve. En l'absence de données de vitesse de gaz, il est difficile de comprendre ces écarts, qui peuvent prove-

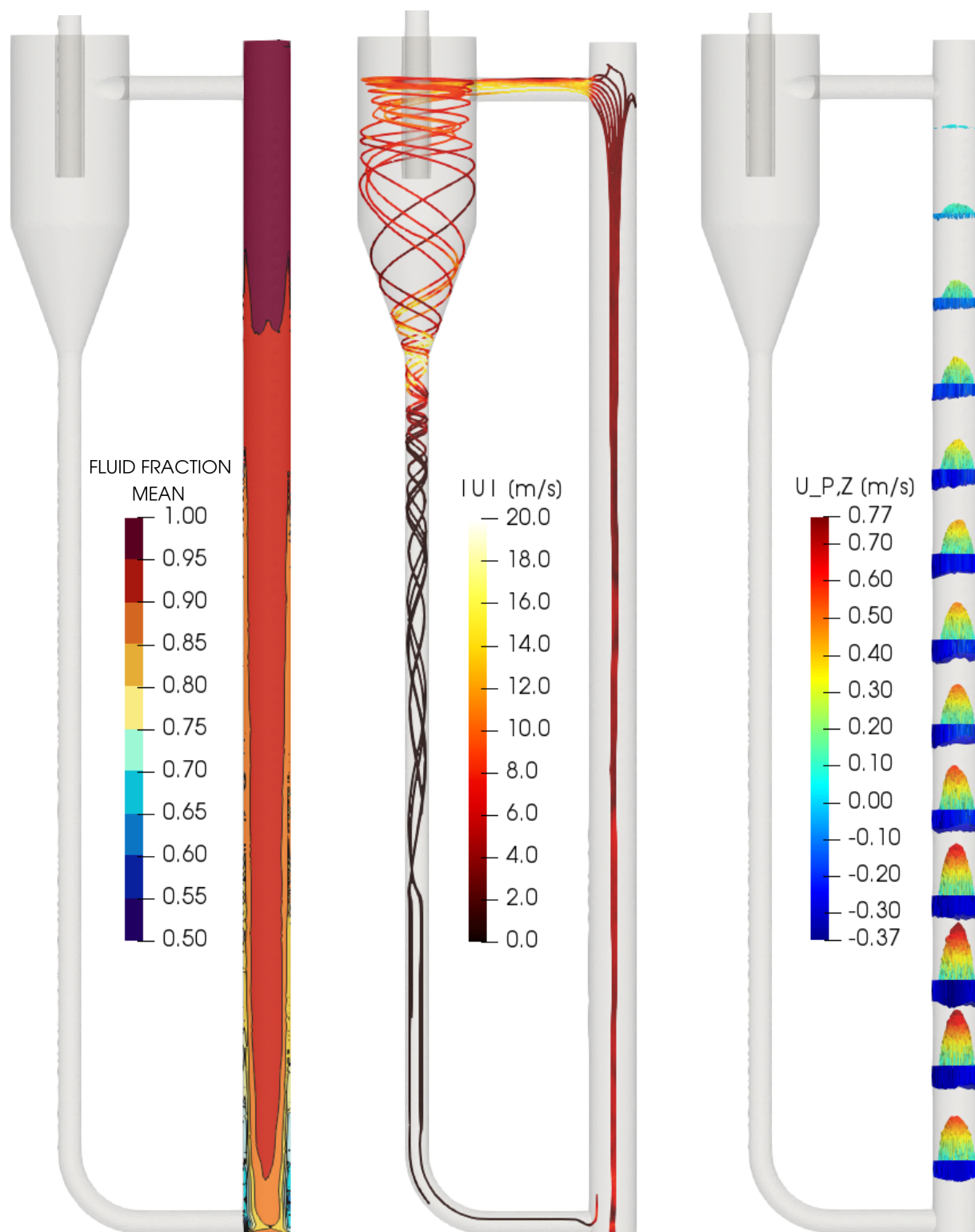


FIGURE 5.26: À gauche : champ moyen de fraction volumique de fluide dans le riser. Au centre : lignes de courant associées à la vitesse moyenne des particules et colorées par la vitesse de gaz. À droite : vecteurs de vitesse verticale moyenne des particules dessinés à différentes altitudes dans le riser, montrant une structure annulaire typique.

nir ou de différences de vitesse de gaz ou du couplage avec les particules. Précisément au niveau de la L-valve, nos simulations prédisent des vitesses de gaz quasiment nulles sans doute causées par l'absence des vannes secondaires présentes dans le montage expérimental (voir section 5.3.1).

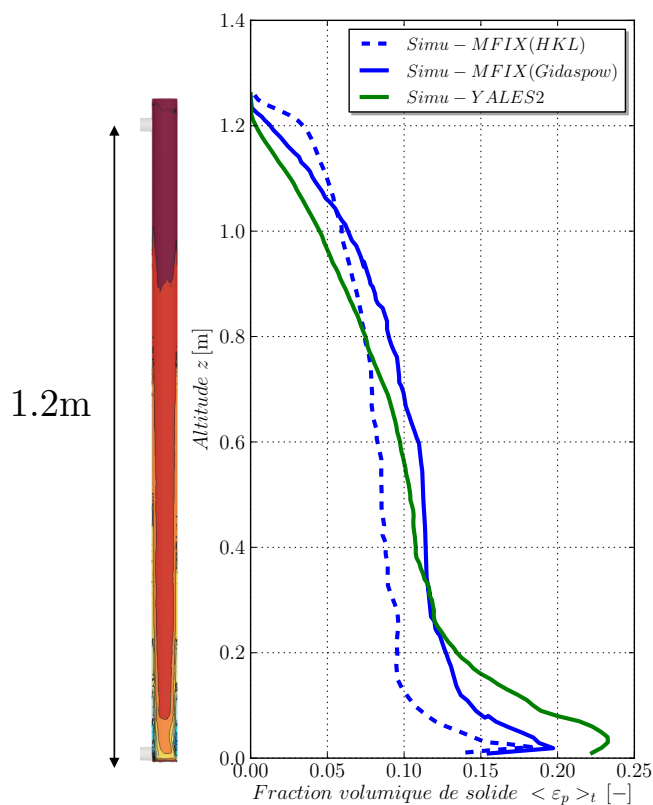


FIGURE 5.27: Fraction moyenne de solide le long du riser.

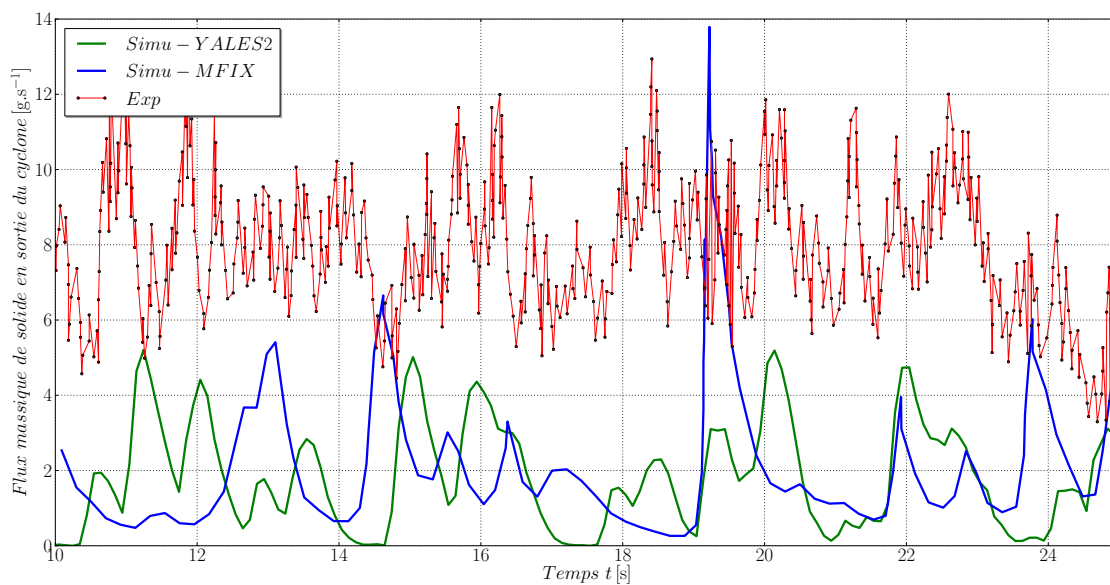


FIGURE 5.28: Flux massique instantané de solide en sortie du cyclone.

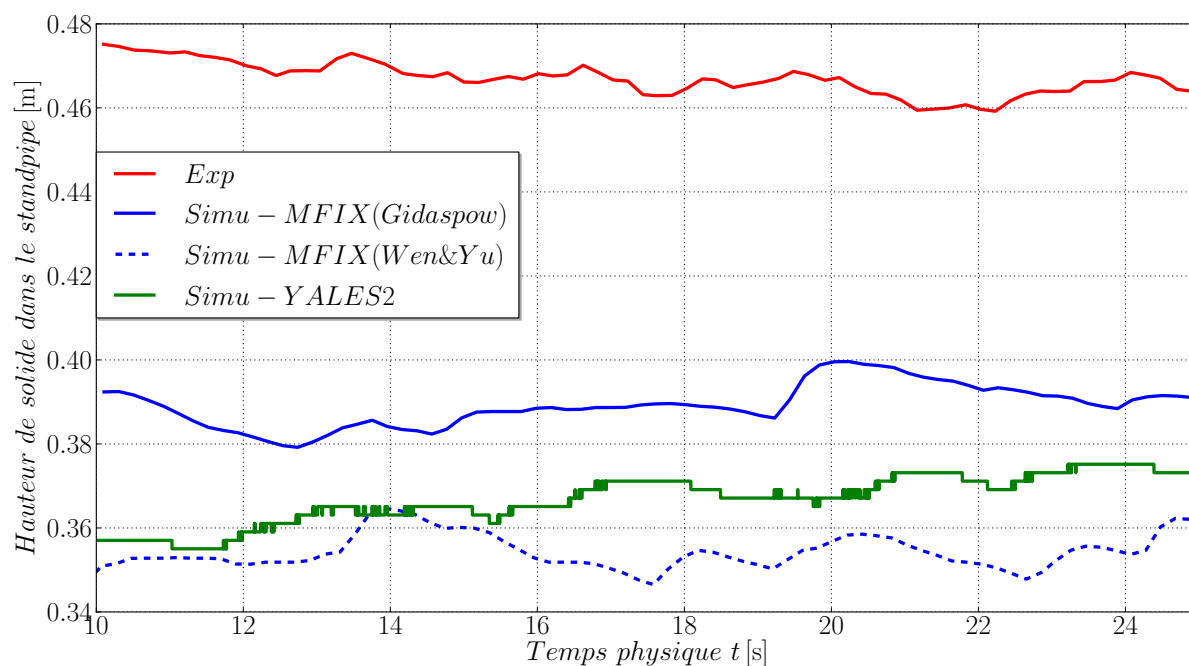


FIGURE 5.29: Hauteur de solide instantanée dans le standpipe.

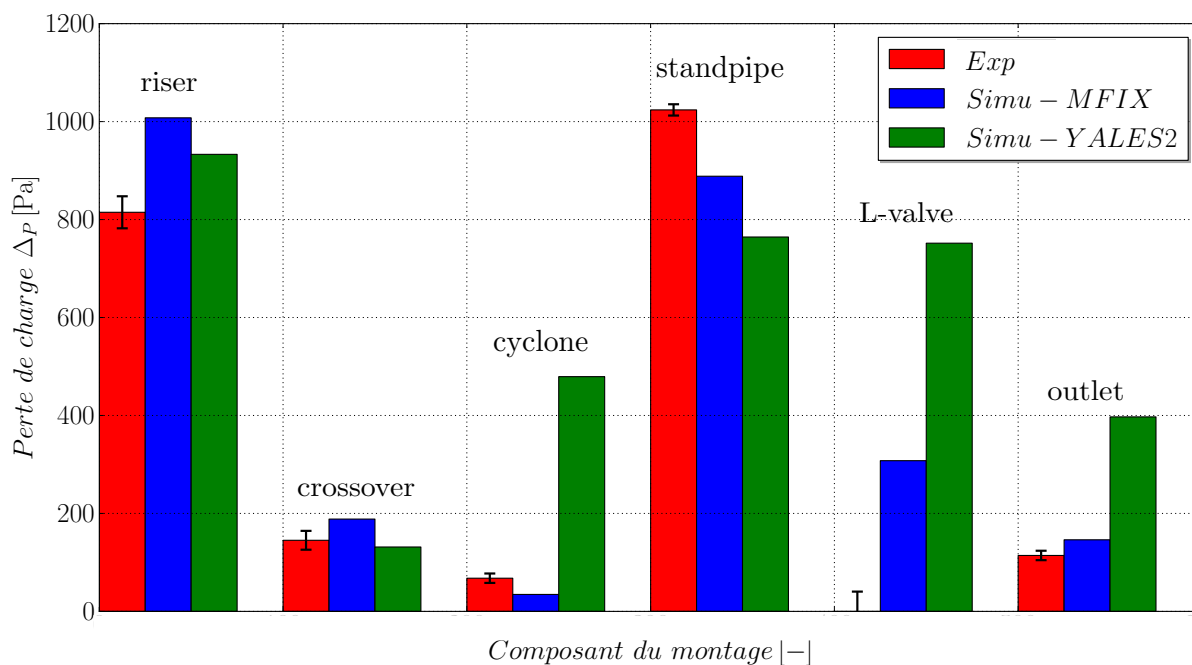


FIGURE 5.30: Perte de charge moyenne au travers des différents composants du montage (voir figure 5.18(b)).

5.4 Lit fluidisé isotherme de Birmingham

On étudie dans cette section un lit fluidisé isotherme de laboratoire.

5.4.1 Configuration

La configuration présentée dans cette section correspond au lit fluidisé dense isotherme expérimenté à l'Université de Birmingham [102]. Il s'agit d'un réacteur de laboratoire pressurisé présentant une symétrie axiale, composé d'une colonne cylindrique de rayon interne $R = 77\text{mm}$ s'élargissant jusqu'à un rayon interne de 127mm . La distance verticale entre la grille de distribution horizontale du gaz et le haut de la cheminée de sortie, correspondant au domaine de calcul, est de 1.75m . De l'azote est injecté par la grille de distribution avec une vitesse en fût vide U_{in} de $0.32\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, soit environ $3U_{mf}$, et la pression dans le lit est fixée à 12bar . La phase solide est quasiment monodisperse et présente un diamètre moyen de $875\mu\text{m}$ pour une masse volumique de $740\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$. Environ 9.6M de particules (soit $m_s = 2.5\text{kg}$ de solide) sont présentes dans le réacteur. Des détails supplémentaires peuvent être trouvés dans [102]. Le montage expérimental ainsi que le domaine de calcul sont schématisés sur la figure 5.31. Le maillage employé rassemble 3.7M de tétraèdres et se compose de deux zones ; une zone raffinée dans la partie basse du réacteur, avec une taille de maille moyenne de 1.85mm , et une zone maillée plus grossièrement dans la partie haute, avec une taille de maille moyenne de 3.9mm . Les paramètres numériques utilisés dans les simulations sont résumés dans le tableau 5.5.

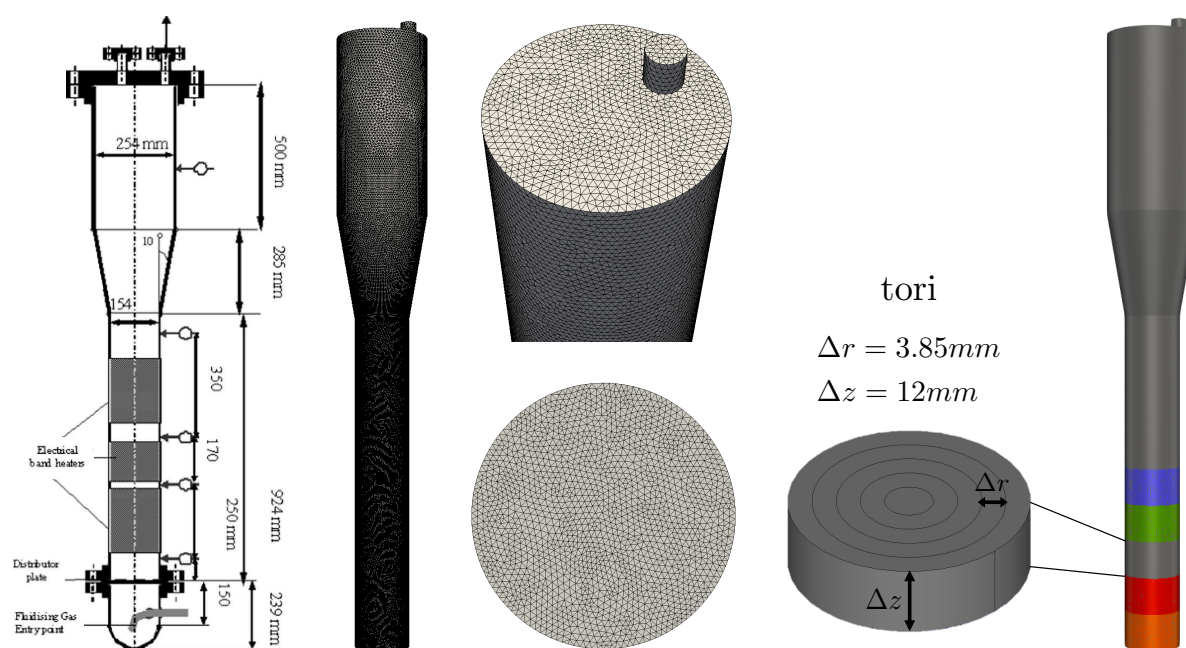


FIGURE 5.31: Lit fluidisé de laboratoire expérimenté à Birmingham. À gauche, montage expérimental issu de [102]. Au centre, vue de face du domaine de calcul maillé avec 3.7M tétraèdres, prenant en compte les éléments du système au-dessus de la grille de distribution, pour une hauteur totale de 1.75m . En haut, vue de haut montrant la cheminée. En bas, grille de distribution du gaz. À droite, décomposition du domaine en tores concentriques utilisée pour les statistiques.

Des images issues des simulations numériques correspondant aux premiers instants de la simulation dans la partie basse du domaine sont visibles sur les figures 5.32 et 5.33.

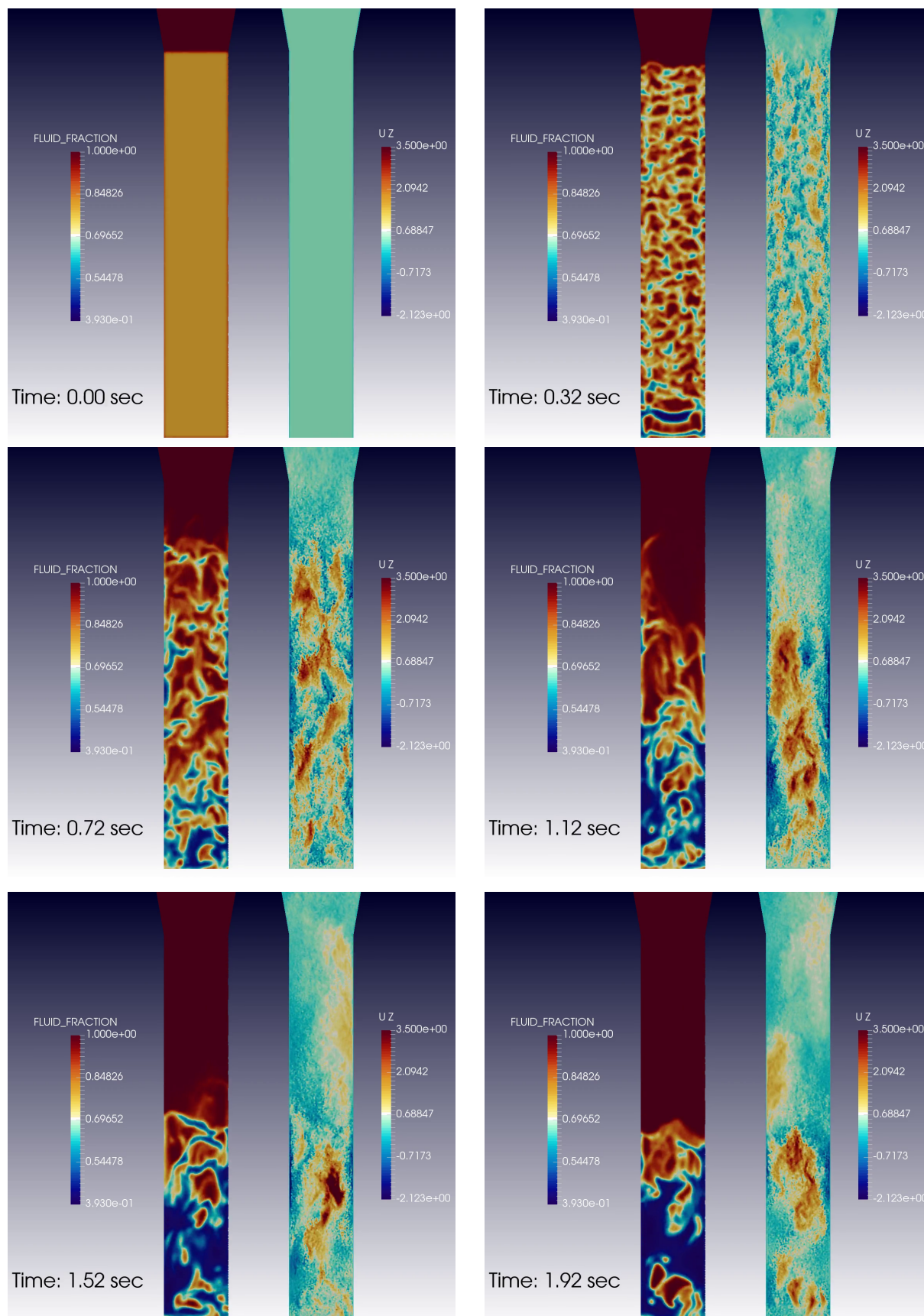


FIGURE 5.32: Premiers instants de la simulation numérique du lit fluidisé de Birmingham. À gauche, coupe montrant la fraction volumique de fluide. À droite, coupe montrant la vitesse verticale du gaz.

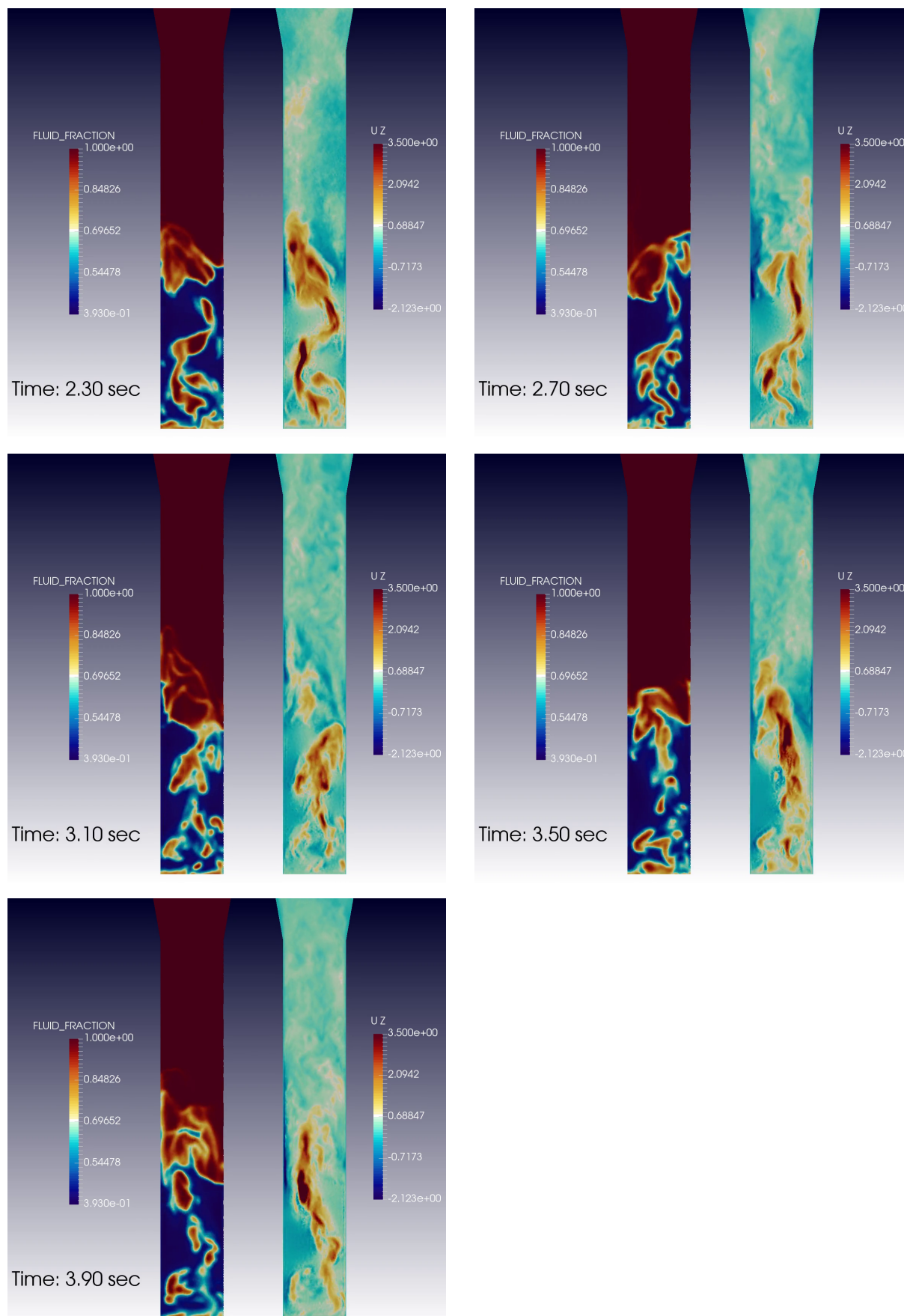


FIGURE 5.33: Premiers instants de la simulation numérique du lit fluidisé de Birmingham. À gauche, coupe montrant la fraction volumique de fluide. À droite, coupe montrant la vitesse verticale du gaz.

TABLE 5.5: Paramètres numériques utilisés pour les simulations du lit fluidisé de Birmingham.

Propriété relatives aux particules	Valeur numérique	Unité
N_p	9631313	[–]
d_p	875×10^{-6}	[m]
ρ_p	740	[kg.m ⁻³]
μ	0.3	[–]
e_n	0.9	[–]
k_n	100	[N.m ⁻¹]
Δt_p	$T_C/10$	[s]

Propriétés du gaz	Valeur numérique	Unité
ρ	13.595	[kg.m ⁻³]
μ	1.8×10^{-5}	[kg.m ⁻¹ .s ⁻¹]
U_{in}	0.32	[m.s ⁻¹]
P_0	12	[bar]
CFL	0.4	[–]
<i>Fourier</i>	0.1	[–]
CL	murs non-glissants	[–]

5.4.2 Obtention de statistiques

Les expérimentations originales menées sur le lit fluidisé de Birmingham duraient 240s, les 120 dernières secondes étant utilisées pour effectuer des statistiques. Pour les simulations présentées, 20s de temps physique sont utilisées, les 10 dernières secondes étant utilisées pour les statistiques. Afin de vérifier que les principales caractéristiques du lit ont atteint un état pseudo-convergé sur les 10 premières secondes, on observe l'évolution temporelle de la hauteur de lit sur la figure 5.34, et de la perte de charge à travers tout le système sur la figure 5.35. Ces deux profils montrent que la hauteur de lit se stabilise autour de sa valeur moyenne atteignant $\sim 0.47\text{m}$, et que la perte de charge se stabilise autour de sa moyenne de $\sim 1677\text{Pa}$. À titre informatif, le poids moyen du lit sans prendre en compte les contraintes pariétales donné par la relation :

$$\Delta P \approx (m_s + \varepsilon \rho V_{total}) \frac{\|\mathbf{g}\|}{S_{inlet}}, \quad (5.15)$$

avec S_{inlet} la section de la partie cylindrique basse, V_{total} le volume total du système, et ε la valeur moyenne de la fraction volumique de fluide dans le système, prédit une valeur de $\sim 1575\text{Pa}$. Les deux profils confirment dans une certaine mesure la convergence des principales grandeurs du lit. Il est important de noter que pour atteindre une convergence des grandeurs statistiques d'ordres plus élevés, des temps de simulations plus longs sont nécessaires.

Dans le but d'opérer quelques comparaisons avec le formalisme Euler-Euler, qui a déjà été utilisé pour des simulations du lit fluidisé de Birmingham [102], les quantités physiques liées aux particules doivent être projetées sur la grille Eulérienne dans les simulations Euler-Lagrange. On note $N_p(C, t)$ la quantité instantanée de particules localisées (grâce à leur centre) dans la cellule de maillage C de volume V_C . On la définit :

$$N_p(C, t) = \sum_{p \in C} 1. \quad (5.16)$$

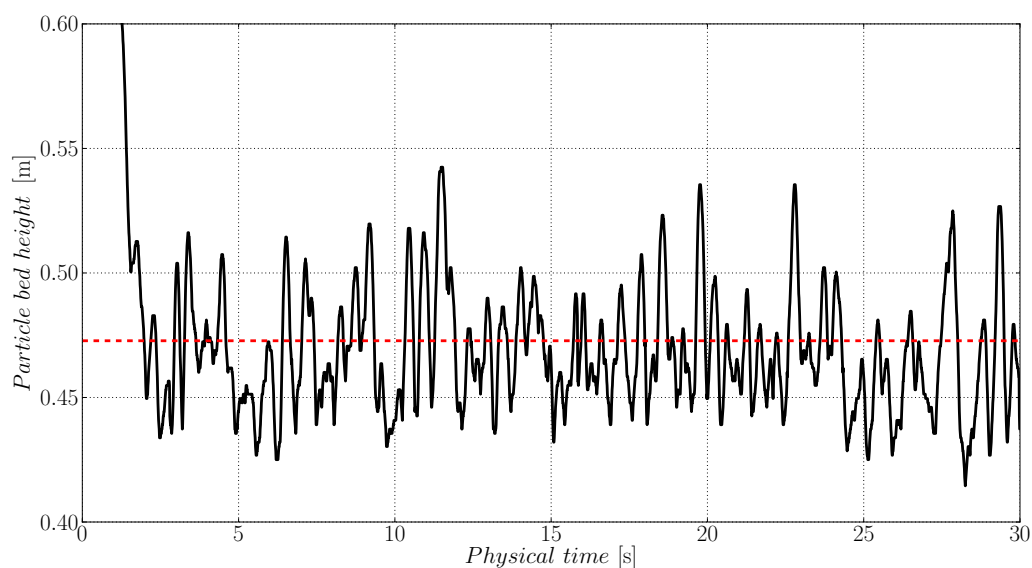


FIGURE 5.34: Évolution temporelle de l'expansion du lit fluidisé (—) mesurée au cours de la simulation et sa moyenne temporelle (- - -). La hauteur de lit instantanée est extraite à partir de la hauteur du 99ème centile des particules. La moyenne temporelle vaut environ 0.47m. À l'instant initial, les particules sont organisées à la manière d'un réseau cubique simple.

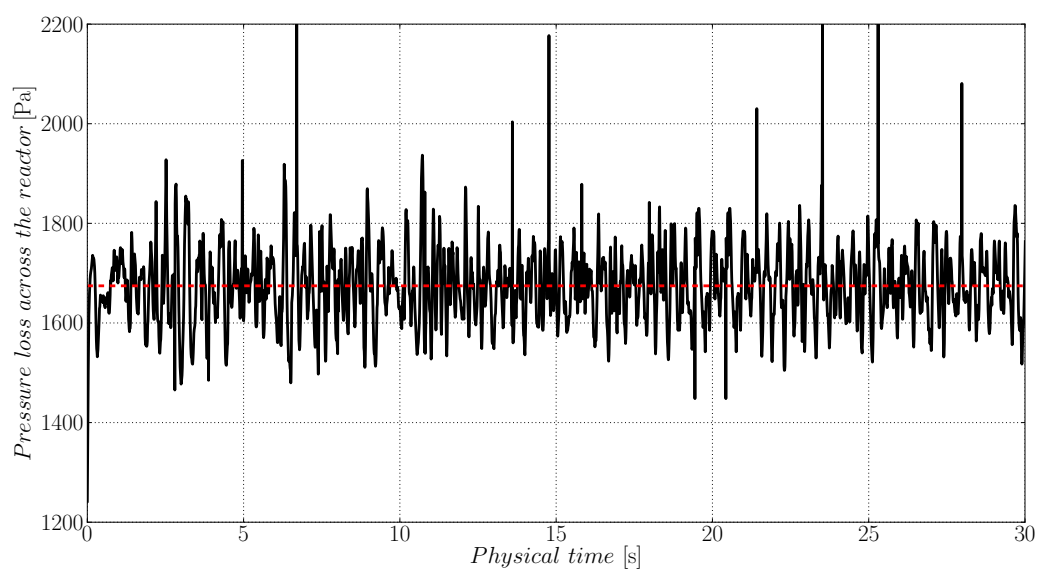


FIGURE 5.35: Évolution temporelle de la perte de charge (—) mesurée au cours de la simulation et sa moyenne temporelle (- - -). Cette perte de charge est mesurée entre l'entrée et la sortie du gaz. Sa moyenne vaut environ 1677Pa. À l'instant initial, les particules sont organisées à la manière d'un réseau cubique simple.

La fraction volumique de solide et la vitesse de solide en C sont définies par :

$$\varepsilon_p(C, t) = \frac{N_p(C, t)V_p}{V_C} \quad \text{et} \quad \mathbf{u}_p(C, t) = \frac{1}{N_p(C, t)} \sum_{p \in C} \mathbf{u}_p. \quad (5.17)$$

Dans les cellules où $N_p(C, t) = 0$, $\mathbf{u}_p(C, t)$ est fixée à 0. La moyenne temporelle prise sur un temps T de la fraction volumique et la vitesse de solide sont alors données par :

$$\langle \varepsilon_p(C) \rangle_{T=} = \frac{\sum_T \varepsilon_p(C, t) \Delta t}{\sum_T \Delta t} \quad \text{et} \quad \langle \mathbf{u}_p(C) \rangle_{T=} = \frac{\sum_T \mathbf{u}_p(C, t) N_p(C, t) \Delta t}{\sum_T N_p(C, t) \Delta t}. \quad (5.18)$$

De la même façon, dans le cas où $\sum_T N_p(C, t) \Delta t$ est nul, $\langle \mathbf{u}_p(C) \rangle_{T=}$ est fixée à 0. Finalement, la moyenne temporelle de la variance de la vitesse de solide prise sur un temps T est écrite :

$$\langle \mathbf{u}'_p \mathbf{u}'_p(C) \rangle_{T=} = \frac{\sum_T \mathbf{u}_p(C, t) \mathbf{u}_p(C, t) N_p(C, t) \Delta t}{\sum_T N_p(C, t) \Delta t} - \langle \mathbf{u}_p(C) \rangle_{T=} \langle \mathbf{u}_p(C) \rangle_{T=}. \quad (5.19)$$

Dans les cas où $\sum_T N_p(C, t) \Delta t = 0$, $\langle \mathbf{u}'_p \mathbf{u}'_p(C) \rangle_{T=} = 0$. En raison de l'axisymétrie de la géométrie, les moyennes spatiales des variables moyennées temporellement peuvent être réalisées dans la direction azimutale. Pour ce faire, on décompose la partie basse du réacteur en un ensemble de tores. Une fois les champs moyennés dans le temps calculés au sein des cellules du maillage, les moyennes spatiales sont calculées en sommant les contributions des cellules dont le centre appartient à un tore spécifique. Chaque tore possède une hauteur $\Delta z = 12\text{mm}$ et une différence entre ses rayons interne et externe $\Delta r = 3.85\text{mm}$, comme annoté sur la figure 5.31. Ces dimensions ont été proposées et validées par Fede *et al.* [102], afin de garantir une occurrence d'évènements propice à la capture de l'information spatiale. Appelons moyenne torique la moyenne spatiale dans chaque tore. Dans chaque tore, on calcule :

$$\langle N_p(\text{tore}) \rangle_{T=} = \sum_{C \in \text{tore}} \sum_T N_p(C, t) \Delta t. \quad (5.20)$$

Ensuite, les moyennes toriques des moyennes temporelles de la fraction volumique et de la vitesse verticale de solide sont :

$$\langle \varepsilon_p(\text{tore}) \rangle_{T=} = \frac{\sum_{C \in \text{tore}} \langle \varepsilon_p(C) \rangle_{T=} \sum_T N_p(C, t) \Delta t}{\langle N_p(\text{tore}) \rangle_{T=}} \quad (5.21)$$

et

$$\langle u_{p,z}(\text{tore}) \rangle_{T=} = \frac{\sum_{C \in \text{tore}} \langle u_{p,z}(C) \rangle_{T=} \sum_T N_p(C, t) \Delta t}{\langle N_p(\text{tore}) \rangle_{T=}}. \quad (5.22)$$

Dans le cas où $\langle N_p(\text{tore}) \rangle_{T=}$ est nul, $\langle \varepsilon_p(\text{tore}) \rangle_{T=}$ et $\langle u_{p,z}(\text{tore}) \rangle_{T=}$ sont eux-aussi mis à 0. Finalement, la moyenne torique de la moyenne temporelle de la variance de la vitesse de solide est :

$$\langle u'_{p,z} u'_{p,z}(\text{tore}) \rangle_{T=} = \frac{\sum_{C \in \text{tore}} \langle u'_{p,z} u'_{p,z}(C) \rangle_{T=} \sum_T N_p(C, t) \Delta t}{\langle N_p(\text{tore}) \rangle_{T=}}. \quad (5.23)$$

Si $\langle N_p(\text{tore}) \rangle_{T=} = 0$, alors $\langle u'_{p,z} u'_{p,z}(\text{tore}) \rangle_{T=}$ est aussi fixé à 0. Il convient de passer en coordonnées cylindriques pour calculer les moyennes toriques de certaines quantités relatives à la vitesse. Cette étape n'est pas décrite ici, car seules des composantes verticales seront montrées. Les statistiques suivantes sont calculées à partir de champs instantanés pris toutes les 10 itérations fluides.

5.4.3 Résultats

La figure 5.36 montre le profil radial de la moyenne temporelle de la fraction volumique de solide $\langle \varepsilon_p(tore) \rangle_T$ mesurée dans le tore situé à $z = 3.45R$. Le profil montre un minimum au centre du réacteur. Le maximum n'est pas localisé à l'endroit exact de la paroi, mais à une certaine distance de cette dernière, ce qui est un comportement typique lorsqu'une condition de non-glissement y est employée pour la phase fluide.

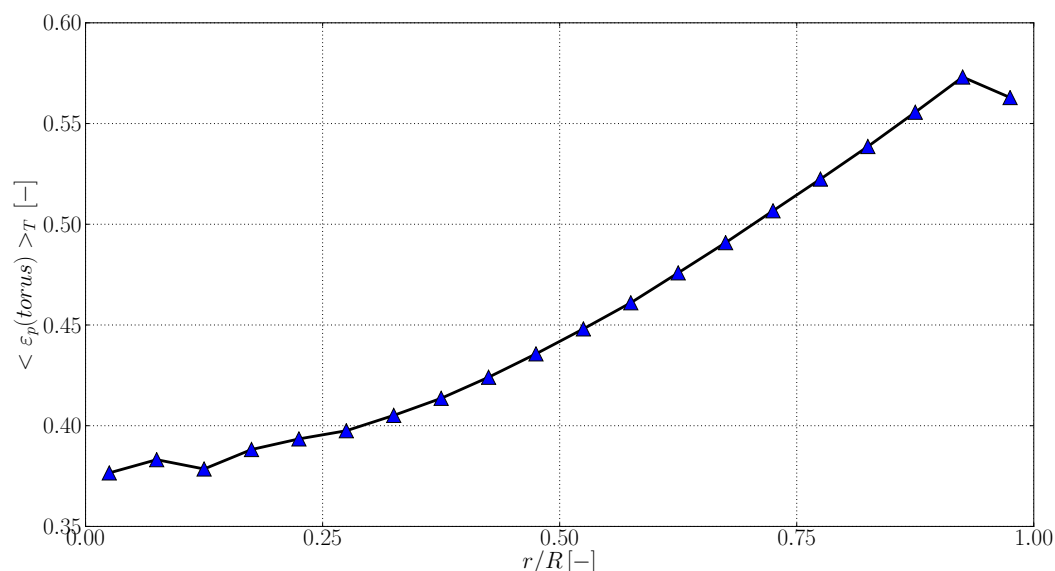


FIGURE 5.36: Profil radial de la moyenne temporelle de la fraction volumique de solide $\langle \varepsilon_p(tore) \rangle_T$ mesurée dans le tore situé à $z = 3.45R$ (\blacktriangle).

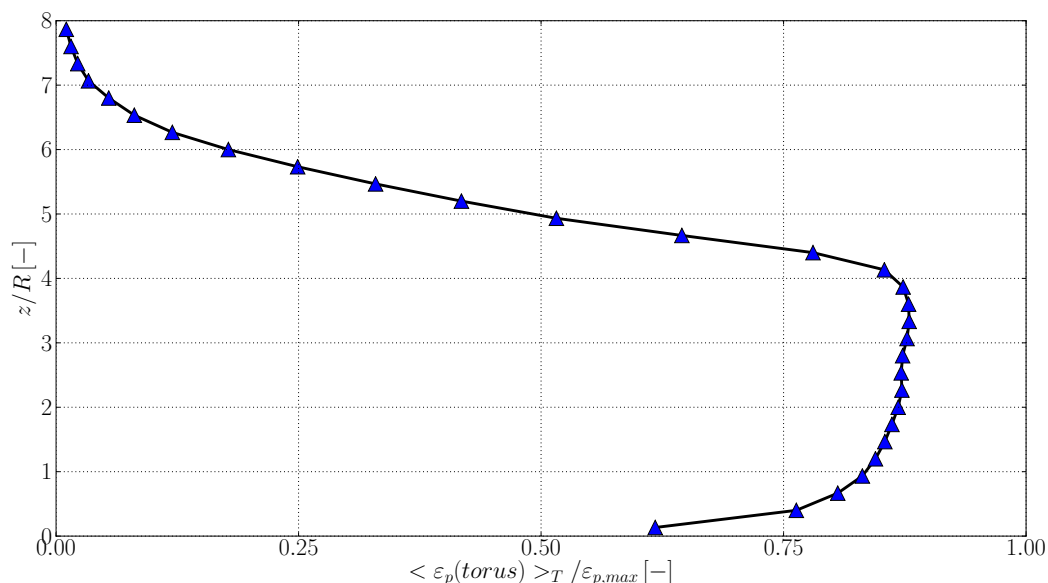


FIGURE 5.37: Distribution verticale de la moyenne temporelle de la fraction volumique de solide $\langle \varepsilon_p(tore) \rangle_T$ mesurée à la paroi (\blacktriangle). Le procédé de normalisation identique à celui de Fede *et al.* [102], avec une fraction volumique de solide maximum prise à $\varepsilon_{p,max} = 0.64$.

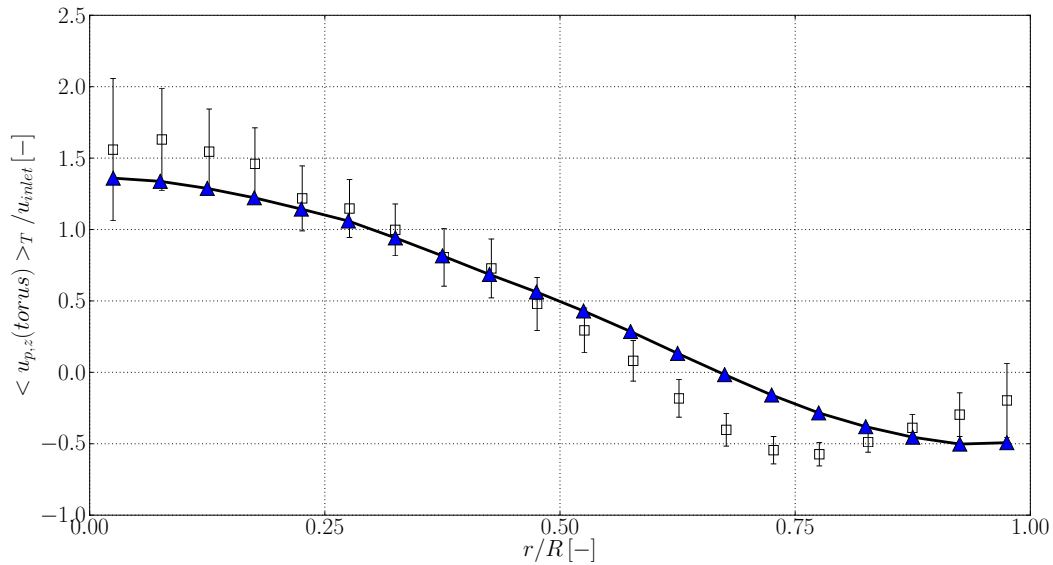


FIGURE 5.38: Profil radial de la moyenne temporelle de la vitesse verticale de solide, normalisée par la vitesse de fluidisation dans le tore situé à $z = 3.45R$ (▲), comparé aux valeurs expérimentales issues de [102] avec barres d'erreur (□).

La figure 5.37 montre la distribution verticale de la moyenne temporelle de la fraction volumique de solide $\langle \varepsilon_p(tore) \rangle_T$ mesurée à la paroi, *i.e.* prise dans les tores bordant la paroi. La fraction volumique de solide augmente de façon abrupte entre la grille de fluidisation et $z \approx 1.5R$. Elle atteint ensuite une valeur relativement uniforme dans la zone $1.5R \leq z \leq 4R$. Enfin, pour $z \geq 4R$, elle descend rapidement vers 0.

Le profil radial de la moyenne temporelle de la vitesse verticale de solide, normalisée par la vitesse de fluidisation dans le tore situé à $z = 3.45R$ est visible sur la figure 5.38, pour lequel des données expérimentales sont disponibles [102]. Au centre du réacteur, l'expérience exhibe une vitesse verticale moyenne positive pour $0 \leq r \leq 0.6R$, dont le maximum atteint $\approx 1.6U_{in}$. Au-delà de $0.6R$, une vitesse de solide descendante est observée. Le maximum de cette vitesse de descente est rencontré à $r \approx 0.75R$ et atteint $\approx 0.6U_{in}$. À partir de $r \approx 0.75R$, la vitesse de descente diminue pour finalement être mesurée quasiment nulle à la paroi. Les prédictions sont en bon accord avec les expérimentations au centre du réacteur, mais en proche paroi la vitesse descendante de solide est surestimée par les simulations numériques, qui ne parviennent pas à reproduire le changement de pente. Ce dernier problème a également été reporté par Fede *et al.* [102] lors de simulations Euler-Euler menées sur la même configuration. Il a été montré qu'il pouvait être traité en prenant en compte la rugosité de paroi, qui dans la réalité empêche les particules de glisser indéfiniment le long des murs, comme il a été décrit dans la section 2.7.3. Il s'ensuit que celles-ci sont systématiquement renvoyées dans la direction du cœur de l'écoulement, ce qui peut être à l'origine de ce minimum de vitesse descendante à un rayon légèrement éloigné de la paroi.

La variance de la vitesse verticale de solide prise dans le tore à $z = 3.45R$ et visible sur la figure 5.39 est un indicateur du mouvement fluctuant du solide à grande échelle. On peut observer que les fluctuations de la vitesse moyenne verticale de solide sont globalement plus fortes que la vitesse de fluidisation. En s'approchant de la paroi, la condition de non-glissement amortit linéairement les fluctuations de vitesse de solide, et leur minimum est atteint au niveau de la paroi.

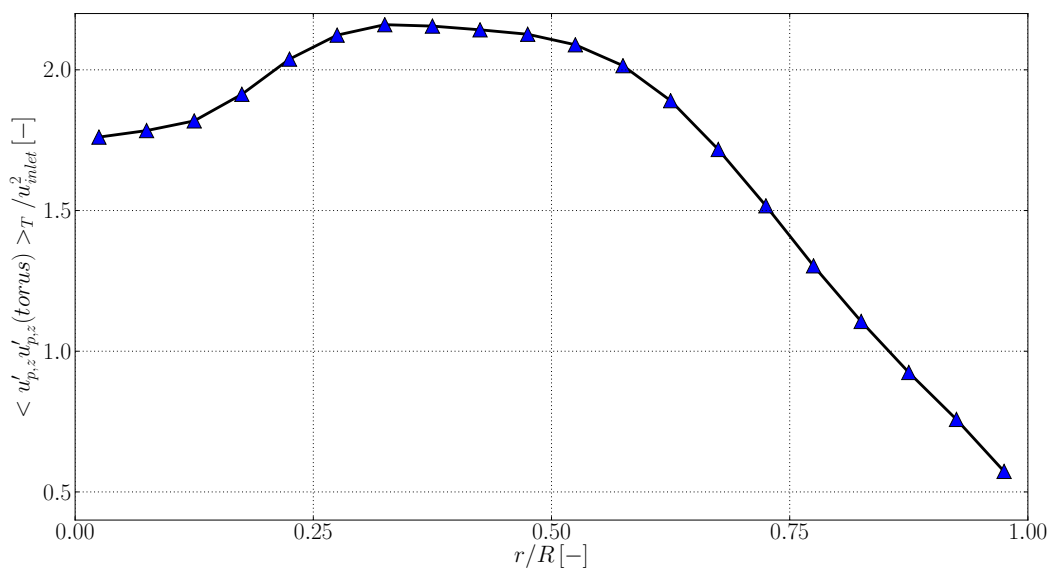


FIGURE 5.39: Profil radial de la variance de la vitesse verticale de solide normalisée par le carré de la vitesse de fluidisation, prise dans le tore à $z = 3.45R$ (\blacktriangle).

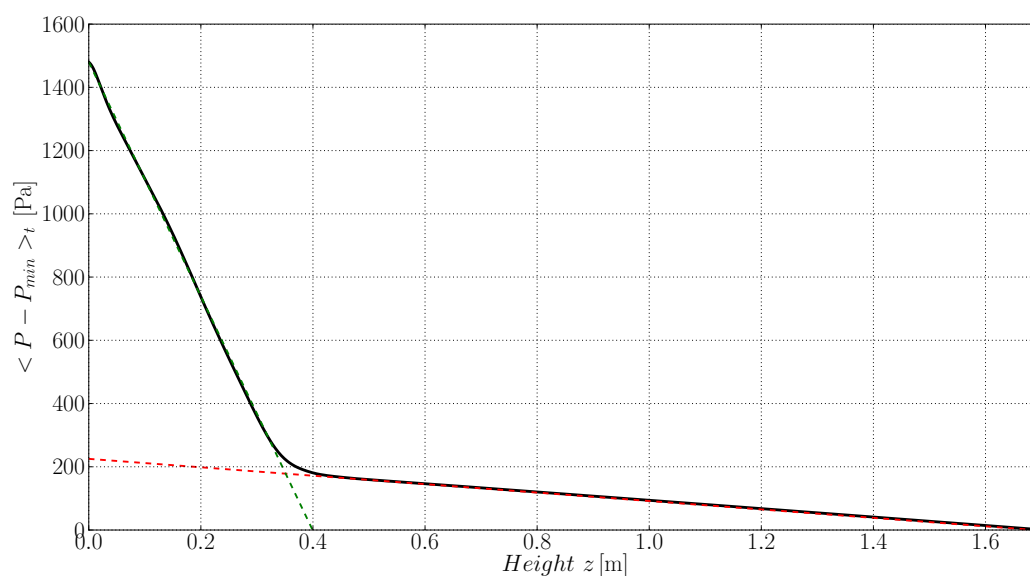


FIGURE 5.40: Profil de la moyenne temporelle de la pression moins la pression minimum, toutes deux prises sur l'axe de symétrie du cylindre (—). La perte de charge au travers un lit de particules de fraction volumique de fluide $\varepsilon = 0.66$ donnée par la corrélation d'Ergun est représentée (-.-), ainsi que la perte de charge donnée par la loi hydrostatique (- - -). Ces deux dernières courbes sont arbitrairement placées à des ordonnées permettant de faciliter l'identification avec la courbe issue des simulations. Lors des simulations, la fraction volumique moyenne mesurée dans le lit était de ≈ 0.62 .

Le profil de la moyenne temporelle de la pression au travers du réacteur est décrit sur la figure 5.40. Conformément à nos attentes, le profil exhibe deux pentes bien distinctes : pour les altitudes les plus basses, la pente correspond à l'évolution de la pression au travers un lit de particules empilées avec une

certainne compacité, décrite par l'équation d'Ergun (voir section 1.2.2), tandis que seul le gaz contribue à la perte de charge dans la partie haute. Le changement de pente se produit à une altitude située entre 0.35 et 0.4m, ce qui est plus bas que la hauteur de lit moyenne affichée par la figure 5.34. Ceci tient probablement au fait de la définition employée pour la hauteur de lit (hauteur du 99ème centile des particules), qui prend en compte les particules assez hautes, et pour laquelle il n'y a pas de consensus dans la littérature. Parfois, cette hauteur est précisément tirée du profil vertical de fraction volumique ou de perte de charge.

5.5 Lit fluidisé réactif du LGC

5.5.1 Configuration

On s'intéresse ici à la modélisation d'un lit fluidisé réactif expérimenté au Laboratoire de Génie Chimique de Toulouse (LGC). Le montage expérimental ainsi que le domaine de calcul sont schématisés sur la figure 5.41. Il s'agit d'un réacteur de géométrie cylindrique d'environ 1.92m de hauteur. La section basse du réacteur possède un rayon interne de $R = 90\text{mm}$. Cette section s'élargit jusqu'à un rayon interne de 180mm. La phase solide est constituée de grains de sable de densité $2650\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$, qui sont chimiquement inertes. Dans un lit fluidisé réactif classique, cette phase inerte peut servir à agiter le milieu afin de l'homogénéiser, mais également de volant thermique dans les systèmes de type FCC. De l'air est injecté en bas du réacteur, tandis qu'une injection de gaz naturel à 97% de méthane est ajoutée au niveau de la boîte à vent. Combustible et comburant sont donc prémélangés au moment de franchir la grille d'injection sur laquelle reposent les particules. Le mélange, pauvre en méthane, entre en combustion dans le réacteur, provoquant des interactions hydrodynamiques et thermiques complexes avec la phase solide, selon la réaction globale suivante :



L'influence de différents paramètres a été quantifiée au cours des différentes expérimentations menées sur cette installation, notamment par Dounit *et al.* [85] et Dounit *et al.* [84], telle que la vitesse d'injection du mélange entrant, sa richesse, le diamètre moyen des grains, ainsi que la masse de solide introduite. Le réacteur est muni de capteurs de pression, de température et d'extracteurs d'échantillons gazeux, permettant grâce à divers analyseurs de remonter à la composition locale du mélange. Ces capteurs sont régulièrement disposés sur l'axe de symétrie du réacteur entre 50 et 1300mm au-dessus de la grille d'injection. La partie basse du réacteur est réfrigérée par un courant d'air circulant dans une double coque, dont le débit est régulé par une vanne pneumatique. Un système PID relié équipé d'un thermocouple localisé à 150mm au-dessus de la grille contrôle lui-même la valve. La température fournie par ce thermocouple est assimilée à la température moyenne dans le lit, que l'on note T_{bed} . Ce système de régulation permet donc de fonctionner "à température de lit" constante.

Au travers des différents tests effectués, il apparaît qu'il existe une température de lit critique, notée T_{crit} , qui détermine le régime de combustion dans le réacteur. Dans le cas où $T_{bed} < T_{crit}$, la conversion du méthane a majoritairement lieu au-dessus du lit de particules, dans la région "diluée" (en anglais "freeboard"), tandis que pour $T_{bed} > T_{crit}$, la conversion du méthane prend place dans la région dense, là où résident la majorité des particules. Cette température a été estimée expérimentalement à environ 800–850°C [85], soit $\sim 1073\text{K}$ (notons que la température de fusion du sable peut-être estimée aux alentours

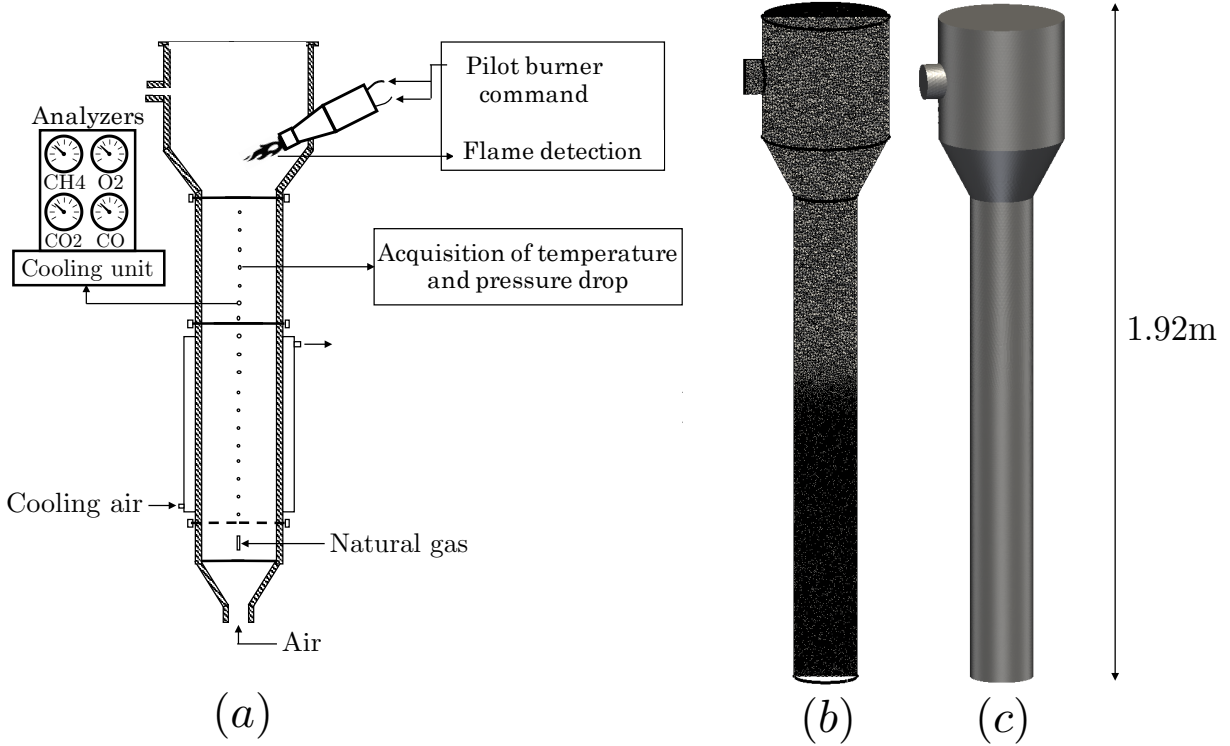


FIGURE 5.41: Lit fluidisé de laboratoire expérimenté au LGC. À gauche, schéma du montage expérimental adapté de [85]. À droite, vue de face de la géométrie du domaine de calcul et du maillage contenant 32.6M tétraèdres, prenant en compte les éléments du système au-dessus de la grille de distribution, pour une hauteur totale de 1.92m.

de 1800K). Elle est le fruit d'un équilibre thermique complexe entre l'énergie libérée par la combustion du méthane (température d'auto-inflammation dans l'air estimable à $\sim 813\text{K}$), et l'énergie échangée avec les particules solides plus froides. L'augmentation progressive de T_{bed} produit une descente de la zone de flamme vers le lit de particules, comme illustré sur la figure 5.42. Au-delà de 900°C soit 1173K , la conversion du méthane dans le lit est totale [85]. Cette configuration a également fait l'objet de simulations numériques dans le formalisme Euler-Euler par Hamidouche *et al.* [129].

Parmi les différents jeux de paramètres explorés par Dounit *et al.* [85] et Dounit *et al.* [84], le cas sélectionné pour être étudié avec YALES2 est détaillé dans le tableau 5.6. Notre objectif est ici de retrouver la température critique T_{crit} issue des observations expérimentales. On procède en réalisant deux simulations, la première pour $T_{bed} = 1173\text{K} > T_{crit}$, et la seconde pour $T_{bed} = 973\text{K} < T_{crit}$.

Nous formulons l'hypothèse forte que le maintien de T_{bed} à une valeur fixée constante, réalisé en pratique grâce à la circulation d'air froid dans une double enveloppe [85], revient à considérer que ce flux d'air froid Q_{ext} équilibre parfaitement le flux échangé par une particule avec son environnement Q_F :

$$m_p C_{p,p} \frac{dT_p}{dt} = Q_F + Q_{ext} = 0, \quad (5.25)$$

c'est-à-dire à fixer la température des particules dans nos simulations. Ainsi, dans ces simulations, la température des particules est fixée à T_{bed} au coeur du domaine, et est échelonnée de 300K à T_{bed} sur 10cm dans la partie basse du réacteur. Outre la simplification de modélisation apportée par cette technique, elle permet également de se passer d'un temps de convergence vis-à-vis de la phase solide avec les

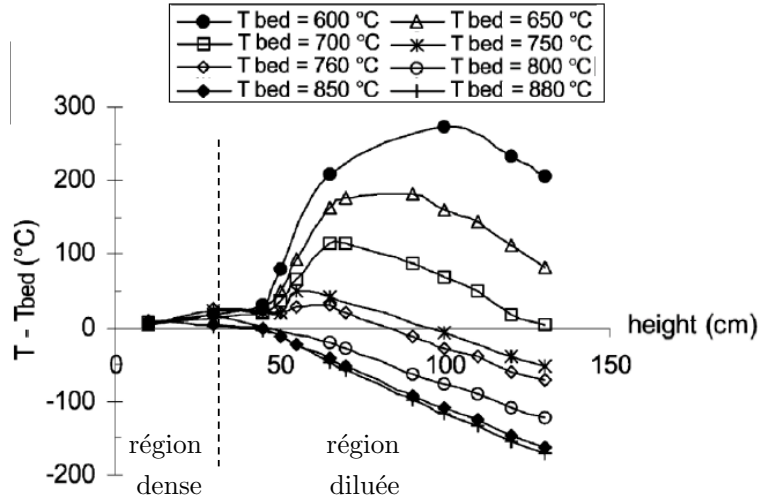


FIGURE 5.42: Profil axial de la différence entre la température locale et T_{bed} , pour différentes valeurs de T_{bed} . L'augmentation progressive de T_{bed} produit une descente de la zone de flamme vers le lit de particules. Graphique obtenu avec des particules de diamètre $350\mu\text{m}$, issu de Dounit *et al.* [85].

TABLE 5.6: Paramètres du cas en cours d'étude pour le lit fluidisé du LGC.

Paramètre	Valeur numérique	Unité
Nombre de particules	$\sim 52\text{M}$	[—]
d_p	550	$[\mu\text{m}]$
Masse totale de solide	12	[kg]
Richesse	0.83	[—]
U_{in}	$0.165 = 2U_{mf}$ des particules de $350\mu\text{m}$ à 20°C	$[\text{m}\cdot\text{s}^{-1}]$
T_{bed}	973 et 1173	[K]

phénomènes thermiques. À cause de l'inertie thermique des grains de sable, ce temps pourrait en effet prendre de grandes valeurs. Notons qu'expérimentalement, l'apport d'énergie est probablement dû à la seule combustion du mélange, ce qui induit de longues durées pour homogénéiser la température dans l'ensemble du lit, tandis que la circulation d'air froid sert à maîtriser les pertes thermiques.

5.5.2 Résolution du front de flamme

Le maillage employé sur la configuration finale rassemble 32.6M de tétraèdres divisés en deux zones. La première zone se situe dans la partie basse du réacteur, $0 \leq z \leq 0.8\text{m}$, où les mailles sont quasi uniformes et ont une taille caractéristique de $\Delta x \approx 1\text{mm}$. La seconde constitue la partie haute du réacteur, $z \geq 0.8\text{m}$, occupée par des mailles uniformes de taille caractéristique de $\Delta x \approx 2\text{mm}$. Les particules se situent majoritairement dans la première zone, où le ratio $\Delta x/d_p$ vaut environ 2. La résolution du maillage étant limitée par la taille des particules, il est impossible de résoudre un front de flamme avec suffisamment de précision sans traitement spécifique. L'épaisseur de flamme d'un mélange air/gaz naturel est de l'ordre de $500\mu\text{m}$ à la richesse prescrite [29], donc la combustion se produit majoritairement en sous-maille. L'une des options pour contourner ce problème consiste à utiliser une approche de flamme épaissie de type TFLES (pour "Thickened Flame for Large Eddy Simulation") en suivant la formulation de Colin *et al.* [68]. Initialement dérivée pour les cas prémélangés, cette formulation permet de dila-

ter le front de flamme sur une certaine épaisseur correspondant à un certain nombre de noeuds, tout en conservant sa vitesse de propagation. La formulation dynamique du modèle TFLES consiste à apporter la modification suivante à l'équation de transport des espèces chimiques :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon \bar{\rho} \tilde{Y}_k) + \nabla \cdot (\varepsilon \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_k) = \nabla \cdot \left(\varepsilon \left[\bar{\rho} D_k \mathcal{E} \mathcal{F} + (1 - \Omega) \frac{\mu_t}{Sc_{k,t}} \right] \nabla \tilde{Y}_k \right) + \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{F}} \bar{\omega}_k. \quad (5.26)$$

\mathcal{F} est le facteur d'épaississement, \mathcal{E} le facteur d'efficacité, et Ω est le capteur de flamme. Le facteur d'épaississement a pour rôle d'augmenter la diffusion de l'espèce, tout en réduisant son terme source, ce qui garantit la conservation du taux de dégagement de chaleur. \mathcal{F} est choisi constant dans le front de flamme, tel que :

$$\mathcal{F} = 1 + \Omega(\mathcal{F}_{max} - 1). \quad (5.27)$$

Le capteur de flamme Ω assure l'identification des noeuds contenus dans le front de flamme pour la version dynamique de TFLES. Pour sa définition, on introduit une variable de progrès notée \tilde{c} telle que :

$$\tilde{c} = \tilde{Y}_{CO} + \tilde{Y}_{CO_2}, \quad (5.28)$$

dont le terme source est :

$$\bar{\omega}_c = \bar{\omega}_{CO} + \bar{\omega}_{CO_2}. \quad (5.29)$$

Ce terme source a une valeur maximale notée $\max(\bar{\omega}_c)$, préalablement mesurée sur des flammes 1D. La valeur nodale au temps t du capteur de flamme notée $\Omega(x, t)$ est alors définie de la manière suivante :

$$\Omega(x, t) = \begin{cases} 1 & \text{si } \bar{\omega}_c \geq 10\% \max(\bar{\omega}_c), \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (5.30)$$

Enfin, le facteur d'efficacité est introduit afin de corriger l'erreur générée par l'épaississement du front de flamme, car celui-ci modifie l'interaction flamme-turbulence. En effet, épaissir artificiellement le front de flamme conduit à une perte de la surface de flamme. \mathcal{E} correspond donc à un facteur de plissement de sous-maille destiné à augmenter la vitesse de flamme turbulente pour compenser cette perte. La figure 5.43 schématise le principe de la flamme épaissie. Dans nos simulations, on utilise $\mathcal{E} = 1$, car là où un front de flamme se propage librement, sa vitesse reste majoritairement dictée par celle d'agitation du lit.

5.5.3 Influence du schéma cinétique

Dans cette étude, la combustion du méthane dans l'air est modélisée grâce à trois schémas cinétiques de type Arrhénius : les schémas de Dryer & Glassman [87] et de Franzelli *et al.* [108] (BFER) présentent des mécanismes à 2 étapes mettant en jeu 6 espèces chimiques. Le schéma GRI 3.0 de Smith *et al.* [271] comporte 325 réactions et 53 espèces transportées. Ce dernier schéma étant le plus détaillé, il sert ici de référence. L'objectif du premier test préliminaire est de quantifier l'impact du mécanisme chimique sur la modélisation du lit fluidisé réactif. Il consiste en un lit 1D statique de 80 particules fixes de diamètre $550\mu\text{m}$ et arrangées en un réseau cubique simple. La grille eulérienne comporte une seule cellule dans les deux directions transversales périodiques et 400 cellules dans la direction de l'écoulement. La hauteur de maille est prise égale au diamètre des particules, tandis que leurs dimensions transversales constituent des paramètres variables afin d'ajuster la valeur de la fraction volumique de fluide, et ainsi

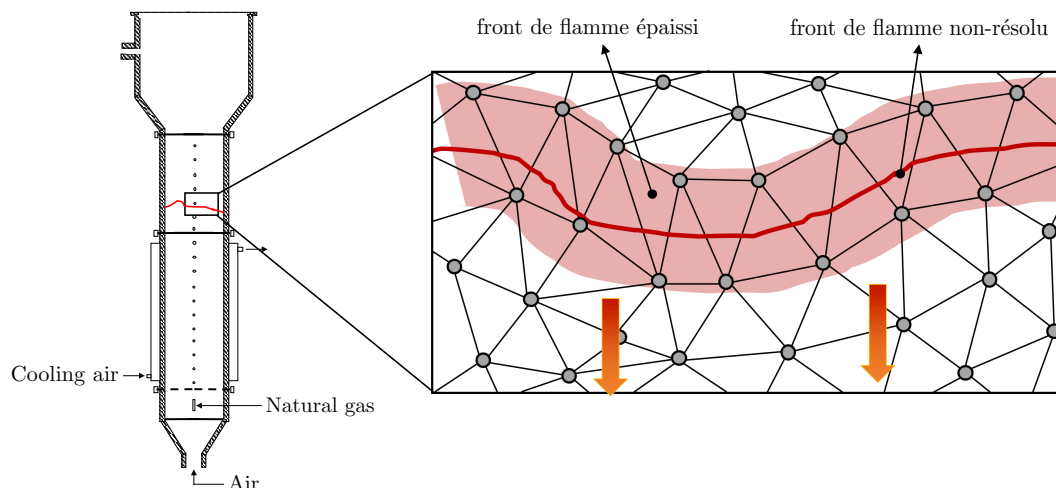


FIGURE 5.43: Schématisation du principe de l'épaississement de flamme. Le front de flamme, qui ne peut être résolu directement sur le maillage, est épaissi de façon à être capté sur plusieurs noeuds, ici simplement sur une maille.

pouvoir étudier l'influence de ce paramètre. Un prémélange air/gaz naturel pauvre est injecté dans ce lit statique à une vitesse $U_{in} = S_L/5$, S_L étant la vitesse de flamme estimée dans cette configuration. La richesse est identique à celle du lit fluidisé du LGC ciblé, soit $\phi = 0.83$. L'allumage du mélange est effectué en chauffant les particules à haute température. Les particules sont ensuite refroidies jusqu'à atteindre la température de consigne T_{bed} . Lorsque l'état stationnaire est atteint, deux situations peuvent être observées : soit une flamme prémélangée se stabilise au-dessus du lit de particules, soit la conversion du méthane est effectuée dans le lit parmi les particules. Ces deux mécanismes peuvent être identifiés en localisant le taux de conversion maximum du méthane $\max(|\dot{\omega}_{CH_4}|)$. Dans cette partie, le facteur \mathcal{F}_{max} présent dans l'équation 5.26 est fixé à 10. Ce cas test est illustré sur la figure 5.44 avec deux positions types pour la zone de réaction en régime stationnaire, ici repérable sur les profils de température et de la fraction massique de méthane Y_{CH_4} .

La figure 5.45 présente les cartes de stabilité de chaque schéma cinétique investigué obtenues à partir du cas test 1D de la figure 5.44, pour différentes valeurs de la fraction volumique de fluide $\varepsilon \in [0.476; \sim 1]$ et de $T_{bed} \in [600^\circ\text{C}; 1100^\circ\text{C}]$. Une simulation est lancée pour chaque couple (ε, T_{bed}) et chaque mécanisme cinétique. Une fois un régime stationnaire atteint, la hauteur à laquelle $\max(|\dot{\omega}_{CH_4}|)$ est localisé est relevée et comparée à la hauteur de lit. Il est alors possible de savoir si la zone de réaction associée est située au-dessus ou bien dans du lit de particules. La température critique expérimentale est plutôt bien reproduite par le schéma cinétique GRI 3.0 sur une large gamme de valeurs de ε . On observe que l'augmentation de ε , donc la diminution du taux de solide, facilite la migration de la zone majoritaire de réaction à l'intérieur du lit, qui se produit à des températures de plus en plus basses. Ceci confirme le fait que les particules ont un rôle de puits thermique dans cette configuration. Pour des valeurs de $\varepsilon > 0.97$, la flamme peut se stabiliser à l'intérieur du lit pour n'importe quelle valeur de T_{bed} , ce qui indique que même pour des températures inférieures à la température critique, une zone de réaction pourrait éventuellement apparaître dans les bulles formées dans le lit, si celles-ci sont assez vides. Le schéma cinétique de Dryer & Glassman reproduit assez fidèlement ces tendances, et présente un coût de calcul bien plus abordable. Cependant, il apparaît clairement que le schéma BFER ne parvient pas

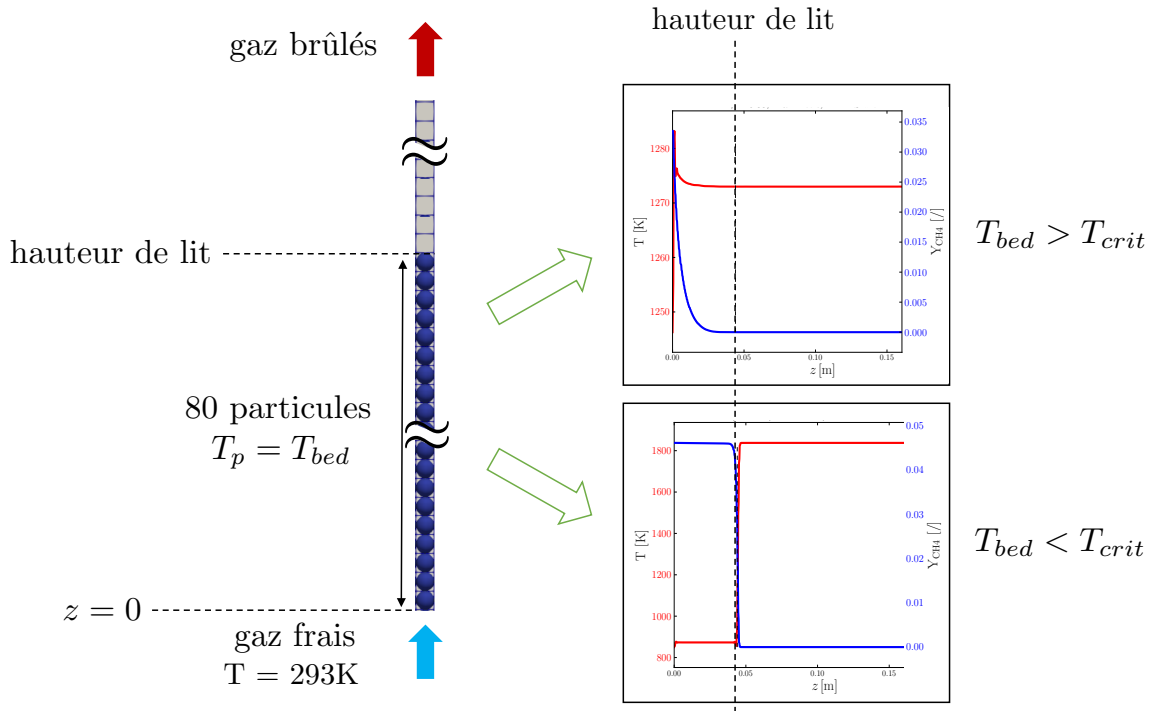
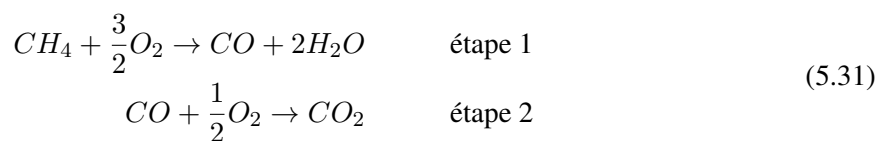
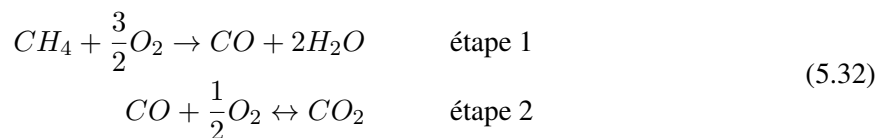


FIGURE 5.44: Présentation du cas test 1D pour la validation de la méthodologie employée. Lit statique de particules sur la gauche, à une fraction volumique de fluide et une température fixées. Sur la droite, deux positions typiques pour la zone de réaction : en haut, pour $T_{bed} > T_{crit}$, les profils de température de gaz T et de fraction massique de méthane Y_{CH_4} indiquent que la zone de réaction est située dans le lit de particules. En bas, pour $T_{bed} < T_{crit}$, les profils indiquent que le front de flamme est situé au-dessus du lit.

représenter le comportement attendu. Pour une température de 750°C , la flamme est systématiquement localisée parmi les particules, même pour les configurations les plus denses. Le mécanisme cinétique du schéma de Dryer & Glassman s’écrit :



tandis que celui du schéma BFER suit, où la seconde réaction est cette fois-ci réversible :



La cause des erreurs commises par le schéma BFER dans la reproduction de T_{crit} pourrait être l’énergie d’activation de la première réaction. Celle-ci vaut 35.5kcal.mol^{-1} dans le cas du BFER, contre 48.4kcal.mol^{-1} pour Dryer & Glassman. Ainsi, une énergie moindre suffit au BFER pour amorcer la conversion du méthane, qui donne des zones de réaction progressant trop rapidement vers le lit de particules. Le BFER est en effet un schéma écrit pour retrouver une bonne vitesse de flamme, et non adapté aux problèmes d’auto-allumage. En conclusion, ce test nous permet de valider le choix du schéma cinétique de Dryer & Glassman pour la suite de l’étude.

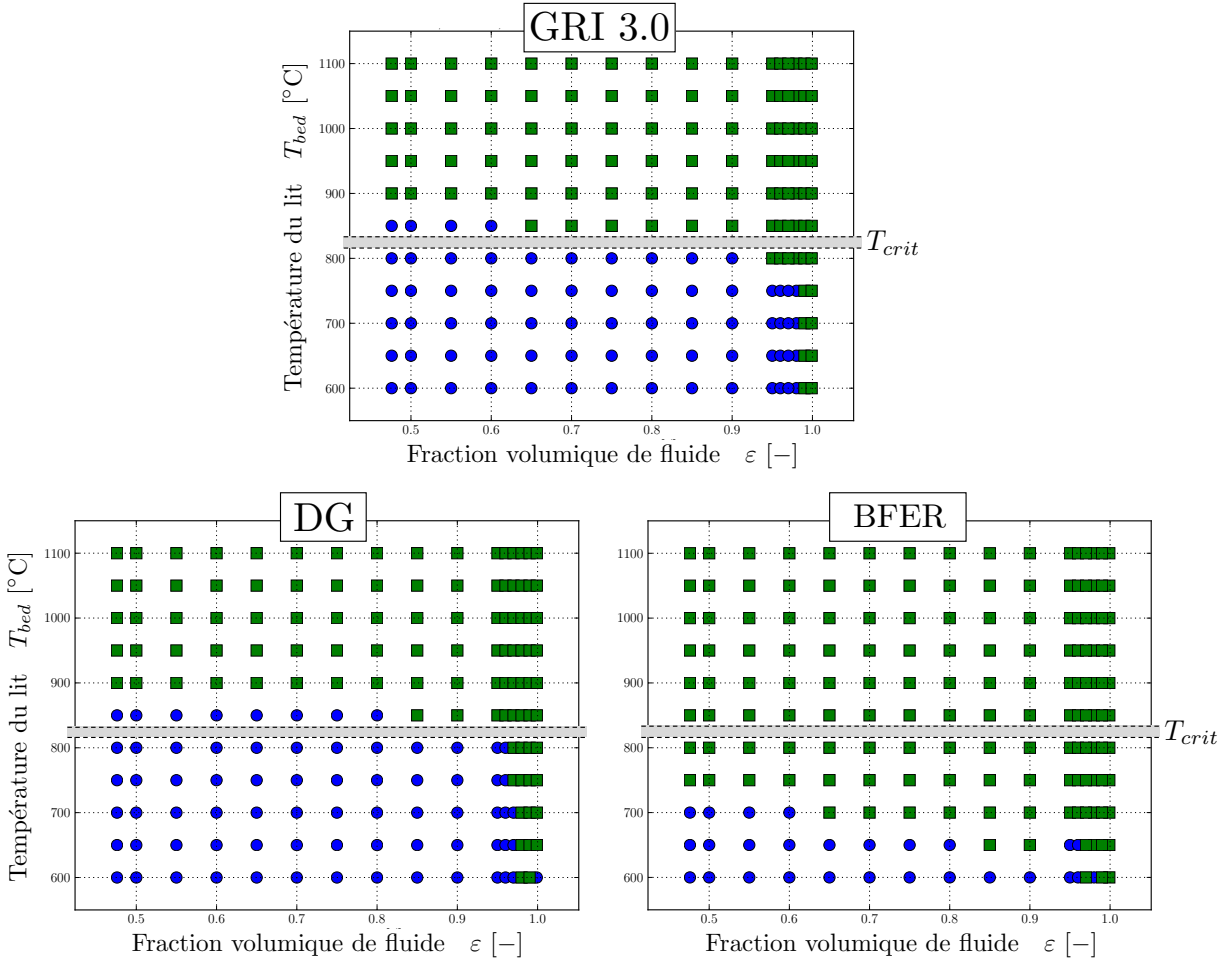


FIGURE 5.45: Carte de stabilité de chaque schéma cinétique investigué obtenue à partir du cas statique 1D, pour différentes valeurs de la fraction volumique de fluide ε et de T_{bed} . ● indique que la zone de réaction majoritaire est située au-dessus du lit de particules, et ■ indique qu'elle est située dans le lit. La température critique expérimentale est également représentée.

5.5.4 Test préliminaire à petite échelle

La méthodologie mise en place est d'abord testée sur une configuration plus simple et moins coûteuse consistant en un cylindre simple de 25cm de haut pour une section de 7.5cm de diamètre maillé avec 9M de tétraèdres. La configuration correspond à une mise à échelle du cas réel du lit du LGC. Pour ce cas on utilise 1.7M de particules de diamètre $550\mu\text{m}$. Le schéma cinétique de Dryer & Glassman est employé, ainsi que la stratégie d'épaississement de front de flamme. La figure 5.46 montre des champs instantanés de fraction massique de méthane Y_{CH_4} et de température du gaz T pour deux températures de lit fixe T_{bed} , la première à 700°C inférieure à T_{crit} , la seconde à 850°C , de l'ordre de T_{crit} . Les résultats illustrés par le cas $T_{bed} = 700^\circ\text{C}$ montrent un front de flamme se propageant au-dessus du lit de particules, associé à un fort gradient de Y_{CH_4} dans cette zone de réaction. La température du gaz y monte à 2100K. Au contraire, pour $T_{bed} = 850^\circ\text{C}$, la zone de réaction est plus diffuse et occupe également l'espace dense du lit. Le gradient de Y_{CH_4} est réparti dans tout le lit et donc moins fort, tandis que la température maximum ne monte qu'à environ 1800K (sur coupe montrée). La figure 5.47 montre les profils moyens sur l'axe du cylindre de la différence de température $T - T_{bed}$, de fraction massique

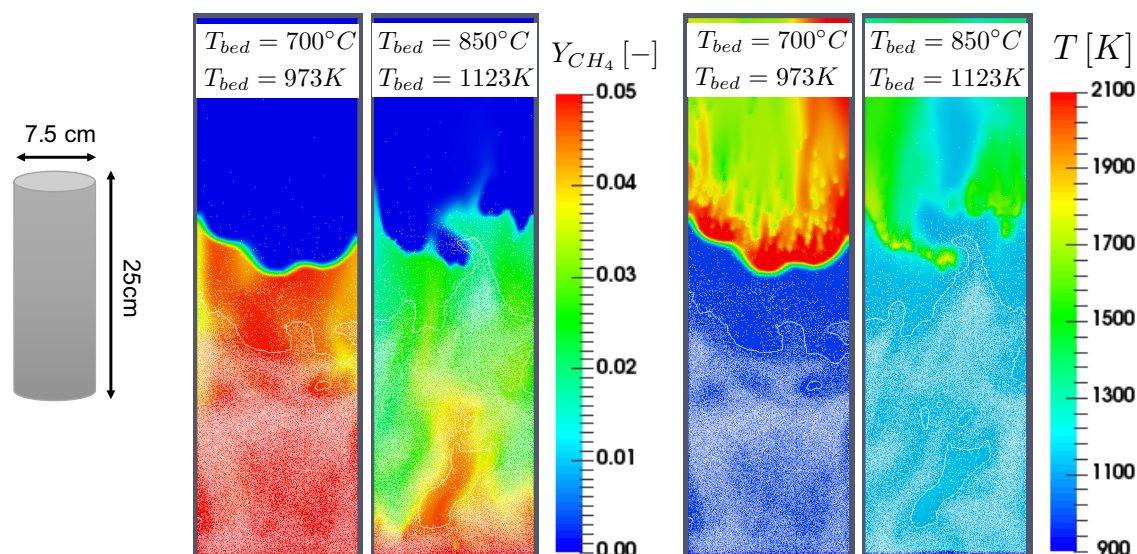


FIGURE 5.46: Champs instantanés de fraction massique de méthane Y_{CH_4} et de température du gaz T pour deux températures de lit fixe

des principales espèces chimiques Y_K , ainsi que la PDF de terme source de méthane $|\dot{\omega}_{CH_4}|$ conditionnée par la fraction volumique locale ε pour deux températures de lit fixe T_{bed} , la première à 700°C inférieure à T_{crit} , la seconde à 850°C de l'ordre de T_{crit} , obtenus du cas petite échelle avec 9M de particules. Pour $T_{bed} = 700^\circ\text{C}$, l'augmentation de température est plus franche que pour $T_{bed} = 850^\circ\text{C}$ au-dessus du lit, ce qui montre la zone de réaction est majoritairement située au-dessus du lit dans le premier cas. Ceci correspond à la tendance observée expérimentalement sur le lit fluidisé du LGC grandeur nature visible sur la figure 5.42. Ce déplacement de la zone majoritaire de réaction à l'intérieur du lit pour $T_{bed} = 850^\circ\text{C}$ se retrouve sur le profil vertical des espèces majoritaires. Pour cette température, les profils montrent une consommation du méthane et du dioxygène et une production de dioxyde carbone à l'intérieur du lit, trahissant la présence de zones réactives en son sein. Au contraire, pour $T_{bed} = 700^\circ\text{C}$, les profils restent stables à l'intérieur du lit, pour évoluer de façon abrupte au-dessus de ce dernier. Enfin, la PDF de terme source de méthane $|\dot{\omega}_{CH_4}|$ conditionnée par la fraction volumique locale ε montre qu'à $T_{bed} = 700^\circ\text{C}$, la totalité de la conversion de méthane a lieu dans les zones parfaitement diluées ($\varepsilon \rightarrow 1$). En revanche, pour $T_{bed} = 850^\circ\text{C}$, il est intéressant de constater que malgré la présence d'un maximum de terme source dans les zones parfaitement diluées, celui-ci est également réparti dans les zones plus densément peuplées. Il devient non nul dès les compactions proches de la close packing limit ($\varepsilon \approx 0.4$), puis augmente quasi linéairement jusqu'à $\varepsilon \approx 0.7$. Pour $0.7 \leq \varepsilon < 1$, ce qui peut correspondre aux valeurs rencontrées dans les bulles en ascension dans le lit, $|\dot{\omega}_{CH_4}|$ est quasiment constant. Ceci nous offre les premiers renseignements sur le type de régime de combustion rencontré pour les températures supérieures à la température critique : la conversion de méthane semble se faire de manière homogène dans les zones denses, avec un terme source faible mais dans un volume important, mais également dans les zones de vide correspondant sans doute aux bulles, avec un terme source plus important mais dans des volumes plus faibles.

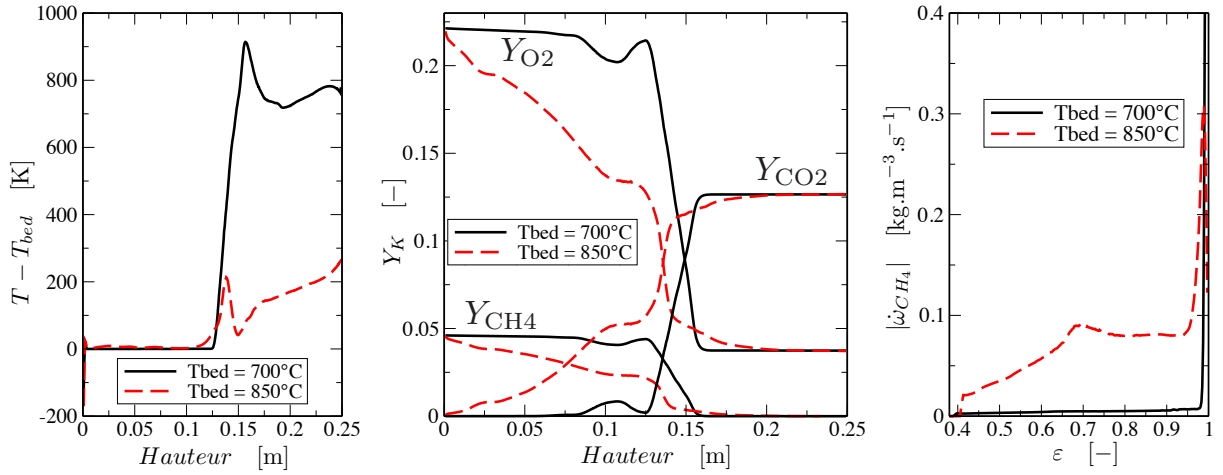


FIGURE 5.47: Profils moyens sur l'axe du cylindre de la différence de température $T - T_{bed}$, de fraction massique des principales espèces chimiques Y_K , et PDF de terme source de méthane $|\dot{\omega}_{CH_4}|$ conditionnée par la fraction volumique locale ε pour deux températures de lit fixe T_{bed}

5.5.5 Résultats sur le lit à l'échelle

Cette partie se focalise sur la simulation du lit fluidisé réactif du LGC, dont la configuration a été détaillée dans la section 5.5.1. Le maillage employé rassemble 32.6M de tétraèdres divisés en deux zones. La première zone se situe dans la partie basse du réacteur, $0 \leq z \leq 0.8\text{m}$, où les mailles sont quasi uniformes et ont une taille caractéristique de $\Delta x \approx 1\text{mm}$. La seconde constitue la partie haute du réacteur, $z \geq 0.8\text{m}$, occupée par des mailles uniformes de taille caractéristique de $\Delta x \approx 2\text{mm}$. Les particules se situent dans la première zone, où le ratio $\Delta x/d_p$ vaut environ 2. L'opérateur de filtrage utilisé, décrit dans la section 2.5, permet de travailler avec une taille de filtre approximative de $\sim 2\Delta x$. La température des particules étant maintenue constante pour les raisons exposées en section 5.5.1, l'opérateur développé dans l'équation 2.128 peut être utilisé. Les paramètres numériques utilisés dans les simulations sont résumés dans le tableau 5.7. Les parois sont considérées comme non-glissantes et adiabatiques.

TABLE 5.7: Paramètres numériques utilisés pour les simulations du lit fluidisé du LGC.

Propriété relatives aux particules	Valeur numérique	Unité
N_p	51981485	[-]
μ particule-particule	0.1	[-]
μ particule-paroi	0.3	[-]
e_n	0.9	[-]
k_n	2000	[$\text{N}\cdot\text{m}^{-1}$]
Δt_p	$T_C/10$	[s]

Les figures 5.48 et 5.49 montrent des champs instantanés de vitesse de gaz, de fraction volumique de fluide, de terme source de méthane, de température et de fraction massique de méthane respectivement à $T_{bed} = 973\text{K}$ et $T_{bed} = 1173\text{K}$.

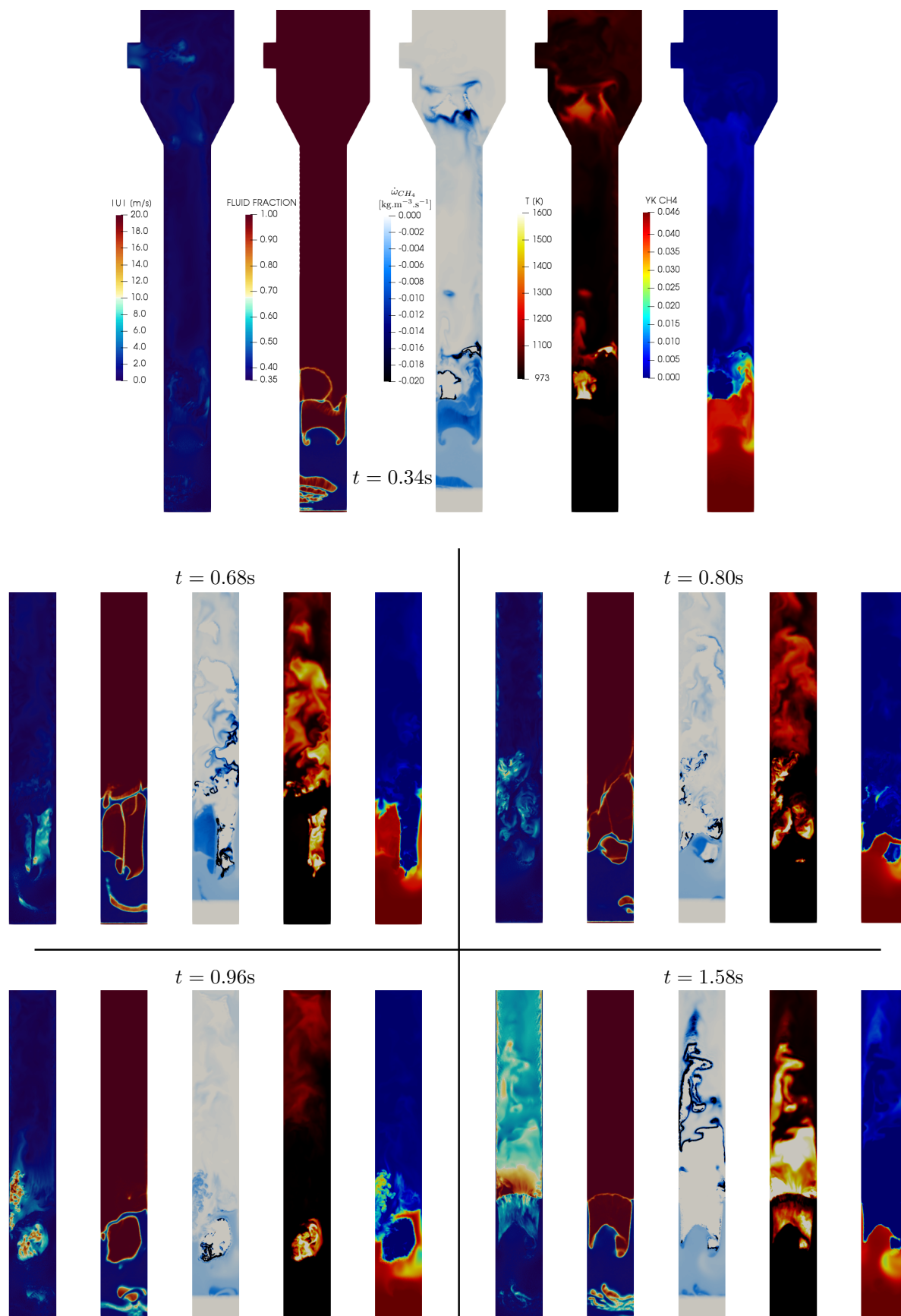


FIGURE 5.48: Champs instantanés pris à différents temps à $T_{bed} = 973K$. L'échelle de couleur pour le terme source de méthane est saturée.

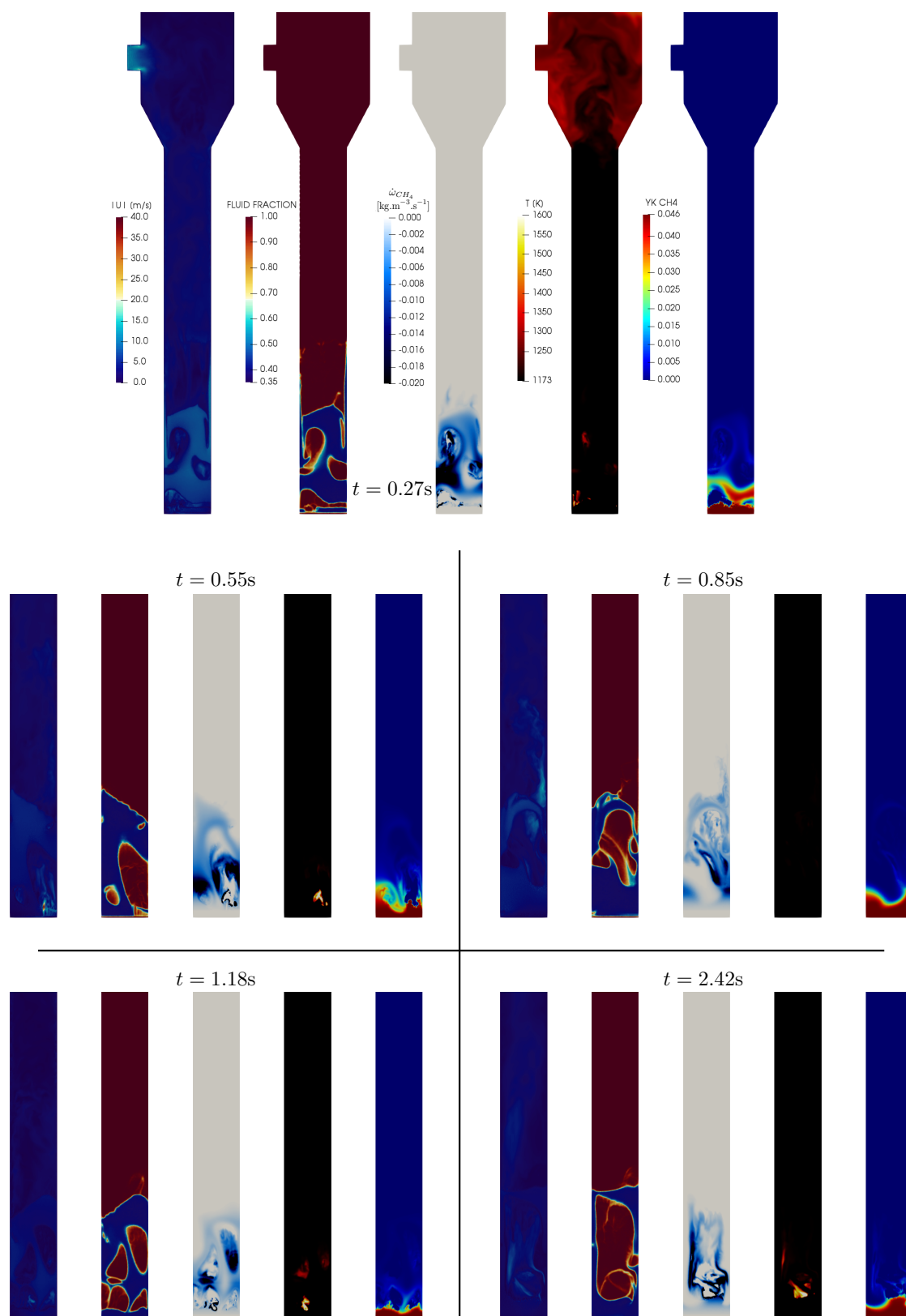


FIGURE 5.49: Champs instantanés pris à différents temps à $T_{bed} = 1173K$. L'échelle de couleur pour le terme source de méthane est saturée.

Les profils verticaux suivants ont été obtenus en réalisant des moyennes spatiales sur des disques intersectant le réacteur de façon transversale, à des hauteurs situées entre 5cm et 1m tous les 5cm. Ces opérations sont effectuées sur des champs moyennés temporellement sur 4 secondes. Les statistiques sont démarrées 5 secondes après la mise en fluidisation du lit. Il est possible d'estimer un majorant du temps de séjour du gaz à travers le lit à $\sim 2.4s$, en prenant en compte la vitesse de gaz à 300K en entrée et la hauteur caractéristique du lit, soit $\sim 40cm$. Le temps de séjour moyen est plus court car en réalité le gaz ne passe qu'à travers les bulles, donc à travers une section équivalente réduite. De plus, la dilatation thermique provoque l'accélération du gaz. Le champ moyen de vitesse de gaz dans le lit montre une vitesse d'ascension d'environ $1.5m.s^{-1}$, ce qui porte une estimation du temps de séjour moyen à $\sim 0.27s$. Une quinzaine de temps de séjour du gaz au travers du lit est ainsi comptabilisée dans les statistiques.

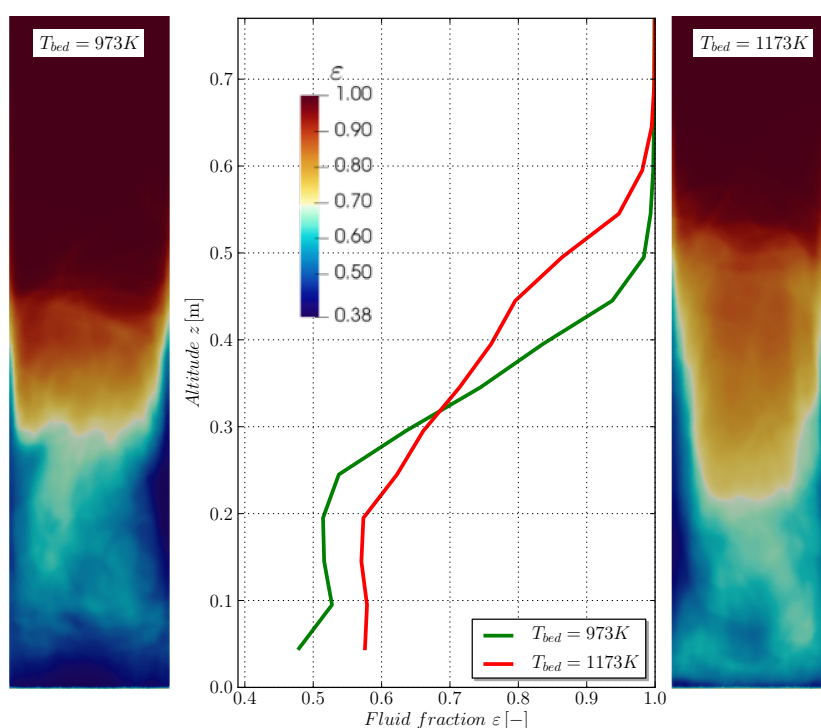


FIGURE 5.50: Coupes verticales du réacteur montrant la fraction volumique de fluide moyenne pour les deux températures de lit étudiées, et profils verticaux correspondants au centre.

La figure 5.50 montre deux coupes verticales du réacteur colorées par la fraction volumique de fluide moyenne pour différentes températures de lit. Au centre, on a tracé les profils verticaux correspondant. À 973K, la zone dense occupe les 30 premiers centimètres en bas du réacteur. Une zone de projection, marquée par des valeurs de fraction volumique de fluide intermédiaire, témoigne de l'éclatement des bulles. Au-dessus de 50cm, la présence de particules devient anecdotique. Le profil vertical obtenu à 973K est marqué par une fraction de vide quasi constante sous 25cm, et une décroissance linéaire rapide jusqu'à environ 50cm. À 1173K, du fait de la vitesse de fluide plus élevée due à une expansion thermique accrue, la variation du profil vertical est moins brutale. La zone dense occupe légèrement moins d'espace qu'à 973K, mais la zone de projection s'étale environ entre 20 et 60cm. L'augmentation de la hauteur de lit avec la température a été avérée expérimentalement sur des réacteurs au fonctionnement proche [20].

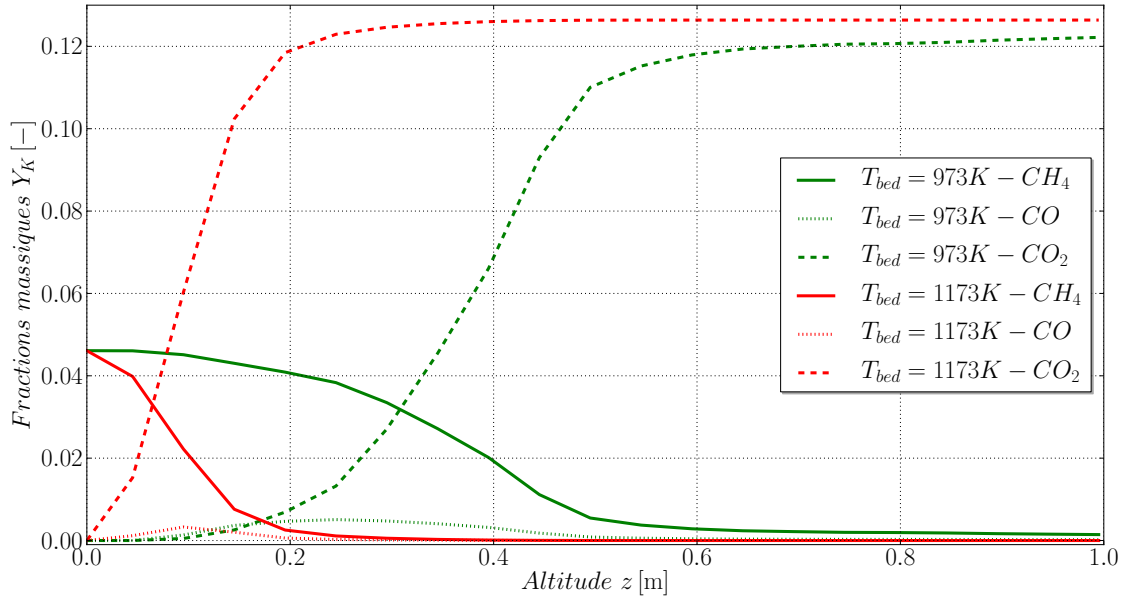


FIGURE 5.51: Profil vertical des fractions massiques moyennes de certaines espèces chimiques.

La figure 5.51 montre le profil vertical de fractions massiques de quelques espèces chimiques le long du réacteur. À 1173K, le méthane est quasiment totalement consommé dans les vingt premiers centimètres, dans la zone dense en particules. Le dioxyde de carbone est également produit en totalité dans la même zone. À 973K, à l'inverse, la fraction massique de méthane reste quasiment stable jusqu'à environ 20cm, puis la conversion s'initie rapidement. À environ 50cm, la baisse de la fraction massique de méthane montre un fort ralentissement, tout en se poursuivant jusqu'à 1m. Pour ces deux températures, on retrouve un aspect du profil de monoxyde de carbone dit "en cloche", mis en évidence expérimentalement [85], qui témoigne de la nature successive de la réaction de combustion du méthane. Néanmoins, le manque de détail du mécanisme cinétique de Dryer & Glassman [87] ne permet pas de reproduire la localisation moyenne du pic de CO , qui en réalité coïncide avec le pic de température. Ceci est dû au fait que la recombinaison du CO en CO_2 (voir mécanisme 5.31) est endothermique, et ne peut s'activer que lorsque la réaction 1 (exothermique) a permis de décomposer une quantité importante de CH_4 , donc d'accumuler de l'énergie thermique. Les profils exposés montrent bien un changement dans le régime de combustion de part et d'autre de la température critique.

Le profil vertical du taux de conversion du méthane, pour lequel des valeurs expérimentales sont disponibles à 973K [84] (Les barres d'erreur expérimentale ne figurent pas parmi les résultats), est visible sur la figure 5.52. Il est calculé comme suit :

$$\text{conversion en } \%(z) = 100.0 \times \frac{Y_{CH_4}(z=0) - Y_{CH_4}(z)}{Y_{CH_4}(z=0)}. \quad (5.33)$$

Les simulations montrent un accord qualitatif avec l'expérience. L'aspect du profil, et notamment la zone majoritaire de réaction, située aux alentours de 40cm dans la zone diluée, est convenablement reproduit. Néanmoins, on peut observer une sous-estimation globale de la conversion, qui expérimentalement montre une valeur supérieure à 99% dès 55cm, contre 92 – 93% dans la simulation. Notons que l'une des

difficultés inhérentes à cette mesure expérimentale est de figer l'ensemble des réactions dans les échantillons au moment de leur prélèvement *in situ*, car celles-ci pourraient se poursuivre avant analyse, et provoquer une légère surestimation de la conversion. Enfin, la bibliographie fait état d'une baisse du rendement de combustion en-dessous de la température critique [21], ce qui renforce la confiance accordée aux résultats numériques.

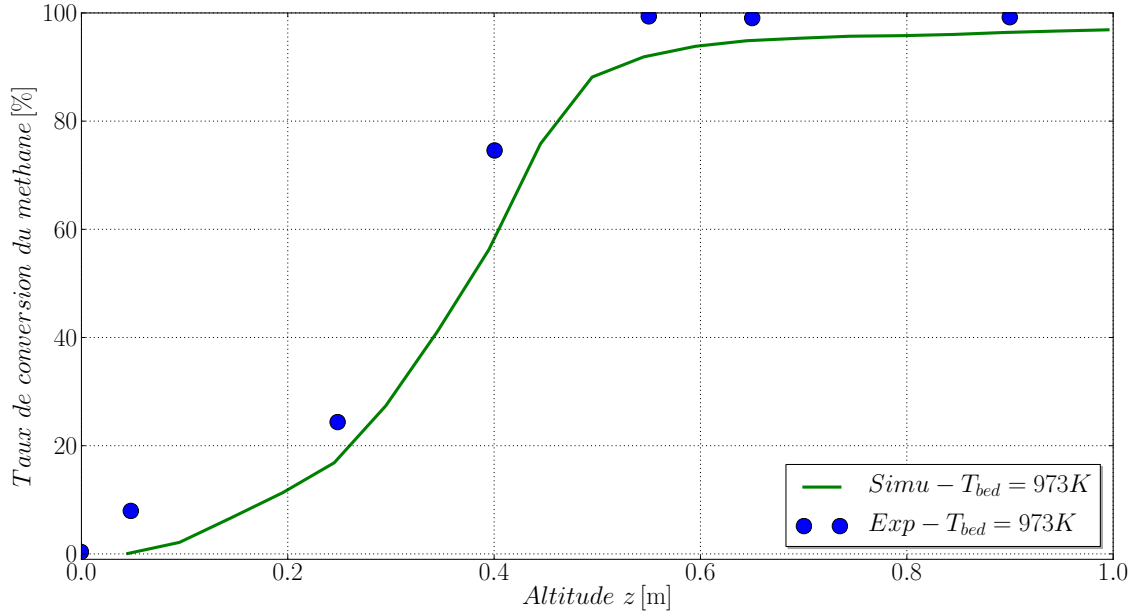


FIGURE 5.52: Profil vertical du taux de conversion moyen du méthane à $T_{bed} = 973K$.

Les profils verticaux de température, à laquelle on soustrait la température du lit T_{bed} , sont visibles sur la figure 5.53. À $1173K$, $T - T_{bed} < 10K$ montre que la combustion ayant lieu dans le lit se fait en moyenne à la température du lit. À l'inverse, à $973K$, l'écart de température montre un pic au-dessus de la zone dense ($> 30cm$), à une hauteur d'environ $80cm$, suggérant la présence de la zone de réaction principale. Le pic atteint $\approx 150K$ au-dessus de la température du lit, ce qui correspond à l'ordre de grandeur mis en lumière expérimentalement à cette température pour des particules de $350\mu m$ de diamètre (voir figure 5.42). Lors d'une augmentation de 350 à $550\mu m$ de diamètre particulaire, les travaux expérimentaux de Dounit *et al.* [84] montrent que la zone principale de réaction descend d'une dizaine de centimètre vers le lit, tout en conservant l'aspect du profil de conversion du méthane (voir figure 5.52), ce qui porte à croire que le pic de température ne devrait pas fondamentalement varier en intensité. Il semble difficile à reproduire dans le cas de simulations Euler-Euler [129].

Sur la figure 5.54, on représente la distribution moyenne normalisée de terme puits de CH_4 conditionnée par la fraction volumique de fluide pour les deux températures étudiées. Les valeurs correspondent à une moyenne de terme puits dans chaque classe de fraction volumique de fluide (intervalle de 0.05) pondérée par le pas de temps instantané et le volume de contrôle local : la population en % dans chaque classe est donnée par :

$$PDF(\dot{\omega}_{CH_4})|_{\varepsilon} = 100.0 \times \frac{\sum_{noeuds} \sum_{temps} \dot{\omega}_{CH_4}(t, i) \Delta t \Delta V_i}{\sum_{noeuds} \sum_{temps} \dot{\omega}_{CH_4}(t, i) \Delta t \Delta V_i} \Big|_{\varepsilon}, \quad (5.34)$$

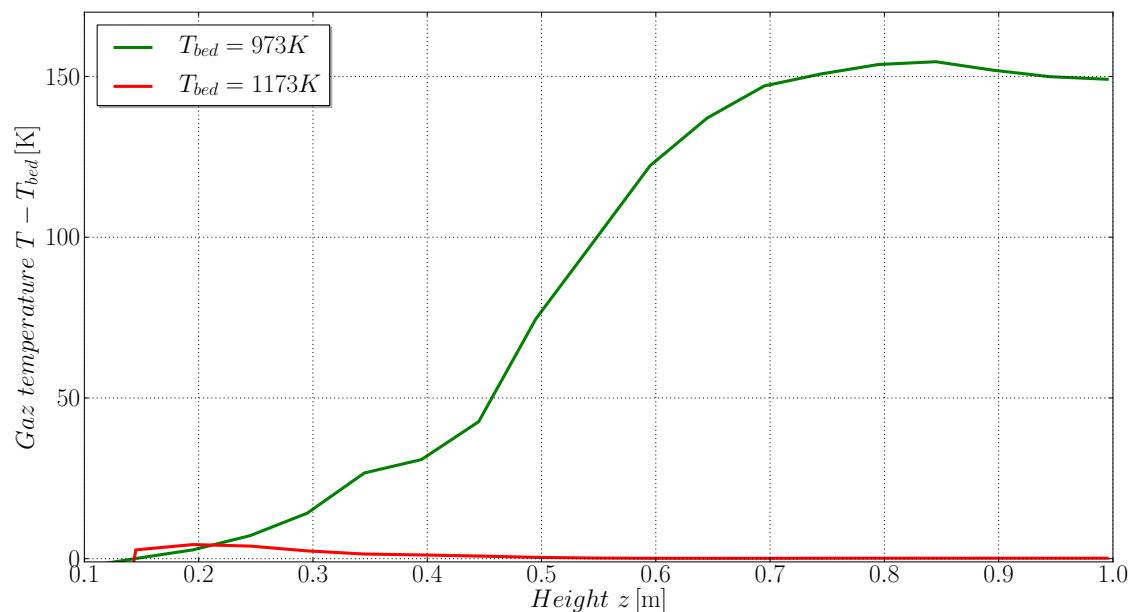


FIGURE 5.53: Profil vertical de l'écart de la température moyenne du gaz à celle du lit $T - T_{bed}$.

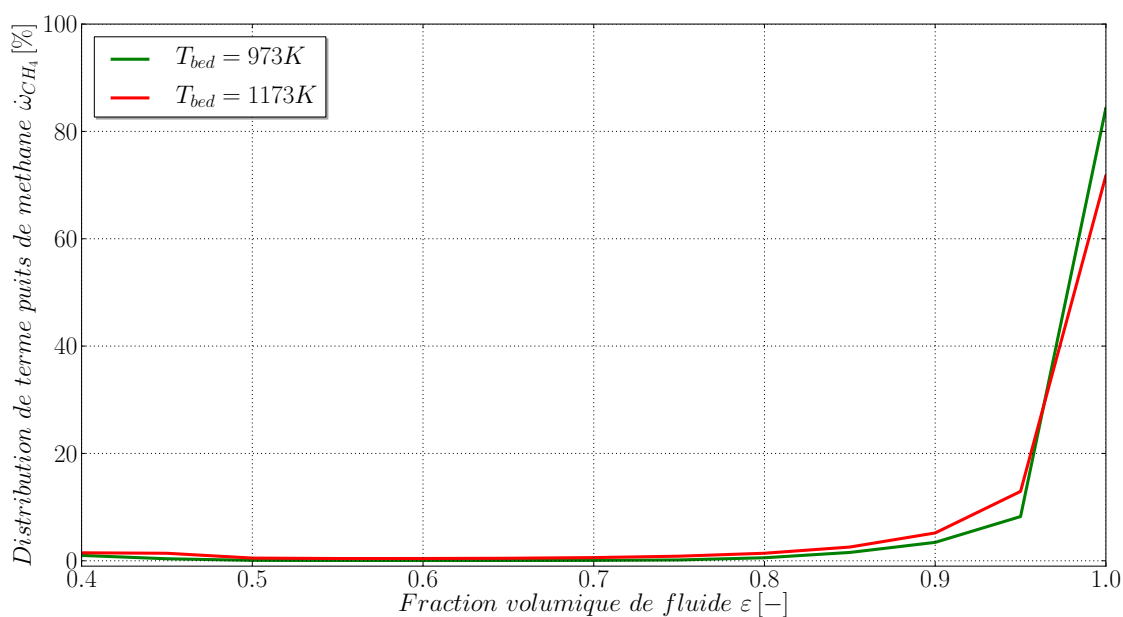


FIGURE 5.54: Distribution moyenne de terme puits de CH_4 conditionnée par la fraction volumique de fluide.

où $\dot{\omega}_{CH_4}(t, i)$ représente le terme puits de méthane au temps t au noeud i , et $|\epsilon$ signifie "au volume de contrôle de fraction volumique ϵ ". À 1173K comme à 973K, les zones majeures de réaction sont les zones diluées ($\epsilon > 0.8$). Au vu de la figure 5.51, cela semble indiquer que la combustion se produit majoritairement dans les bulles de la zone dense à 1173K. À 973K, 90% du terme source est rencontré dans les zones très diluées ($\epsilon > 0.95$). L'idée selon laquelle la zone de réaction majoritaire se situe au-dessus du lit de particules, développée par analyse de la figure 5.51, se trouve renforcée. Le fait que les fractions volumiques intermédiaires ($0.5 < \epsilon < 0.8$) soient peu représentées pourrait découler de leur

faible taux de présence dans le réacteur.

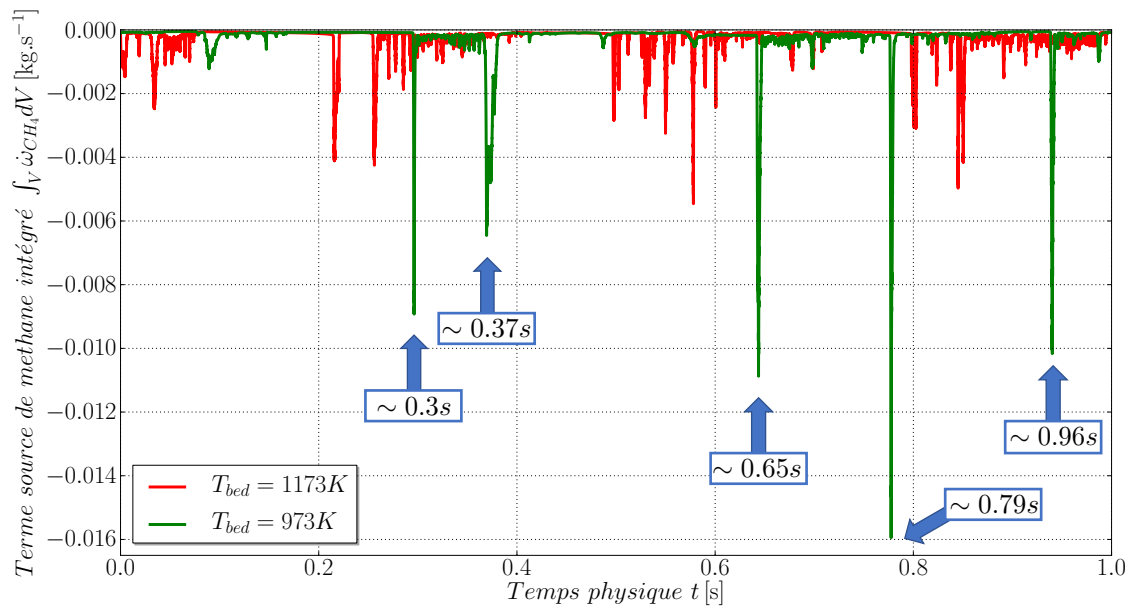


FIGURE 5.55: Évolution temporelle de l'intégrale volumique du terme puits de méthane $\int_V \dot{\omega}_{CH_4} dV$. Les évènements les plus violents, rencontrés à 973K, sont fléchés.

L'intégrale volumique du terme puits de méthane $\int_V \dot{\omega}_{CH_4} dV$ est représentée en fonction du temps sur la figure 5.55 et nous renseigne sur la masse de méthane consommée par unité de temps. Là encore, on distingue deux comportements distincts faisant écho aux deux régimes de combustion précédemment mis à jour. À 1173K, le terme source est majoritairement présent dans les bulles de la partie basse du lit. L'énergie thermique libérée par les particules est assez importante pour favoriser la combustion dans les petites zones de vide, ce qui provoque l'apparition de petits pics de $\int_V \dot{\omega}_{CH_4} dV$. À 973K, le régime est davantage intermittent. La combustion du méthane correspond à des évènements sporadiques violents qui ne se déclenchent que lorsque les bulles d'une certaine taille atteignent la surface du lit, après que le méthane s'y est accumulé sur un temps suffisamment long. Lorsque le front de flamme atteint les bords d'une bulle, celui-ci s'éteint. La figure 5.55 révèle cinq explosions, fléchées sur le graphique. Le comportement explosif des lits fluidisés réactifs lorsque $T_{bed} < T_{crit}$ est avéré expérimentalement [85][84]. Celui-ci donne lieu à des propriétés acoustiques caractéristiques qui peuvent servir de méthode de mesure expérimentale. Les travaux de Zukowski [340] ont notamment montré que l'amplitude des signaux acoustiques décroît avec l'augmentation de $T_{bed} \in [1023K; 1223K]$ en utilisant du gaz de pétrole liquéfié comme combustible. Une dépendance de la fréquence des explosions est également mise à jour avec T_{bed} : les faibles valeurs conduisent à un bruit intermittent ponctué de signaux intenses séparés par des périodes calmes (extinctions), tandis que pour de plus fortes valeurs de T_{bed} , un "sifflement" continu se fait entendre.

Durant les simulations à $T_{bed} = 973K$, il est possible d'observer la combustion dans des poches de gaz situées à des altitudes de l'ordre de 15 – 20cm, au cœur de la zone dense (< 30cm). Ce comportement est singulier en-dessous de la température critique, car on s'attend à ce que les zones de réaction se maintiennent au-dessus du lit de particules. La séquence d'images de la figure 5.56 montre cinq instants

de la simulation. Pour chaque instant, sont visibles la fraction volumique de fluide (à gauche) et le terme puits de méthane (au centre) sur une coupe verticale de réacteur, ainsi qu'un rendu volumique qualitatif en 3D de ce même terme source (à droite). Ce rendu volumique permet l'observation des poches de gaz où le terme puits est particulièrement fort. À $t = 0.010s$, le gaz s'enflamme dans une bulle, fléchée en rouge, dans la zone dense. Grâce au rendu volumique, on peut voir que c'est l'allumage de la partie supérieure d'une bulle de taille importante au-dessus de la zone dense, initié à $t = 0.0s$ et se propageant par la suite à l'intérieur de la bulle, d'abord dans sa partie supérieure ($t = 0.005s$) puis inférieure ($t = 0.010s$), qui provoque la descente du front de flamme au coeur du lit. Expérimentalement, cet effet a été observé et caractérisé par Baron *et al.* [20] lors de l'étude d'un lit fluidisé réactif fonctionnant avec un prémélange propane-air et des particules de sable. L'auteur cherchait à comprendre pourquoi les modèles cinétiques de la littérature peinent à reproduire l'allumage prématuré de certaines bulles, qui au cours de leur ascension s'enflamment, bien que le temps d'induction pour leur autoallumage soit plus important que leur temps de séjour dans le réacteur. Son étude conclue sur l'existence d'un régime de transition situé 100 à 200K sous la température critique, pour lequel la température du lit est suffisante pour que le front de flamme au-dessus du lit enflamme des bulles situées quelques centimètres plus bas, qui à leur tour peuvent enflammer d'autres bulles davantage en profondeur.

5.5.6 Conclusion

Afin de parvenir à simuler le lit fluidisé à l'échelle pilote du LGC dans un formalisme DEM-CFD, une stratégie d'épaississement du front de flamme a d'abord été mise en place. La résolution du maillage étant limitée par la taille des particules, on fait intervenir un modèle d'épaississement qui permet de résoudre le front de flamme sur une quantité suffisante de points. Des cartes de stabilité nous ont ensuite guidés vers le choix d'un mécanisme réduit à six espèces (chimie de type Arrhénius) reproduisant le comportement d'un mécanisme plus détaillé sur un lit 1D statique. Cette stratégie a été appliquée à un lit fluidisé de taille réduite pour arriver à des résultats qualitatifs satisfaisants sur la reproduction de la température critique. Finalement, le véritable lit, contenant 52M de particules, a pu être simulé. Deux simulations correspondant à des températures de lit situées sous et au-dessus de la température critique ont permis de mettre en évidence deux régimes de combustion distincts. Pour $T_{bed} < T_{crit}$, la majorité de la conversion du méthane a lieu au-dessus de la zone dense du lit, et lors de l'éclatement de bulles de gaz frais à sa surface lors d'épisodes très marqués, donc dans les zones faiblement peuplées en particules. Un pic de température est donc visible en moyenne 30 à 40cm au-dessus de la zone dense du lit. La combustion est incomplète. Pour $T_{bed} > T_{crit}$, la conversion est complète et a lieu à l'intérieur du lit, en majorité dans les bulles de gaz. Elle est davantage continue, avec des pics de consommation de gaz frais plus fréquents et moins intenses. Le lit montre un profil de température moyenne très homogène. L'expansion thermique résultante donne lieu à une augmentation de la hauteur de lit moyenne. L'ensemble des statistiques temporelles exposées permet de reproduire l'existence de la température critique T_{crit} du lit fluidisé du LGC mise en évidence expérimentalement, en montrant deux régimes de combustion bien distincts à $T_{bed} <$ et $> T_{crit}$. De nombreuses concordances qualitatives avec les expérimentations sont avérées. Ces statistiques ont été obtenues sur 2.5 secondes de temps physique après avoir fluidisé le lit durant 5 secondes. L'une des perspectives immédiates est donc de multiplier ce temps, afin d'assurer la convergence de ces statistiques. L'utilisation future d'un schéma cinétique plus complet pourrait également nous renseigner sur la présence de dérivées azotés.

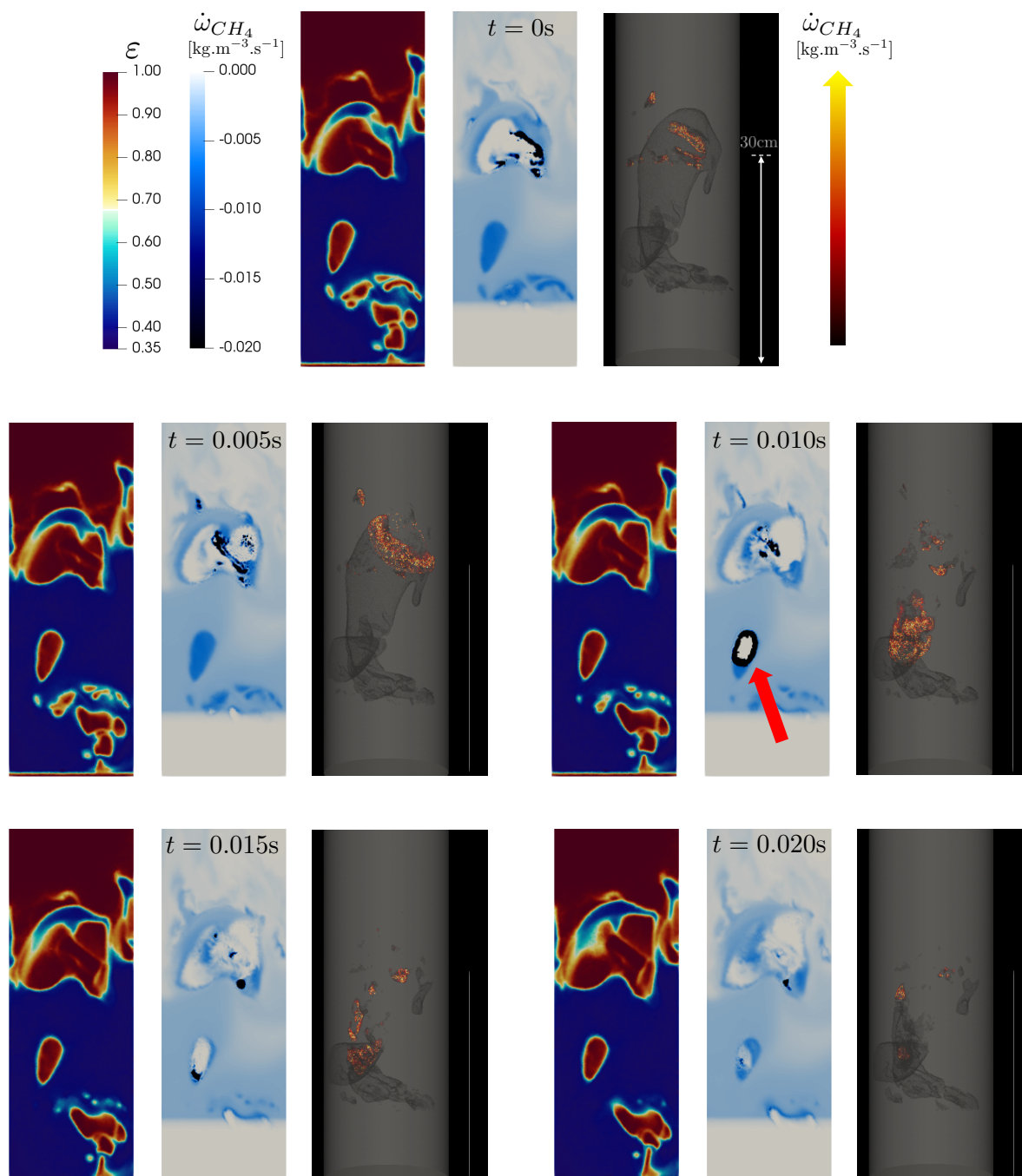


FIGURE 5.56: Séquence de cinq instantanés d’une simulation à $T_{bed} = 973\text{K}$ pris dans la partie basse du réacteur. Pour chaque instant, sont visibles la fraction volumique de fluide (à gauche) et le terme puits de méthane (au centre) sur une coupe vertical de réacteur, ainsi qu’un rendu volumique qualitatif en 3D de ce même terme source (à droite). À $t = 0.010\text{s}$, le gaz s’enflamme dans une bulle, fléchée en rouge, dans la zone dense.

Chapitre 6

Conclusions et perspectives

Ce dernier chapitre conclue sur l'apport global des travaux effectués durant cette thèse et offre une série de perspectives.

Sommaire

6.1 Conclusions	276
6.1.1 Caractère multiphysique du code	277
6.1.2 Géométrie complexe et calcul massivement parallèle	278
6.2 Perspectives	279
6.2.1 Aspects numériques	279
6.2.2 Vers la simulation de systèmes de plus en plus réalistes	280

6.1 Conclusions

Les écoulements granulaires sont parmi les plus présents dans notre environnement, représentent une économie particulièrement florissante dans l'industrie, et sont déterminants du point de vue environnemental. Leur nature est extrêmement variée et conduit à une impressionnante diversité de phénomènes physiques qui leurs sont propres, et que l'on retrouve à toutes les échelles spatiales et temporelles. Ces échelles vont de la collision des molécules dans les études *ab initio*, passent par la formation des dunes de sable dans le désert, les mécanismes de catalyse hétérogène dans les réacteurs chimiques, et vont jusqu'aux ceintures d'astéroïdes du système solaire. Ce caractère multiphysique et multi-échelle les rend particulièrement récalcitrants à l'étude, et notamment à l'analyse expérimentale. Dans ce contexte, la simulation numérique apparaît comme un outil complémentaire pour l'étude de tels systèmes, et permet de faciliter l'accès à de grandes quantités de grandeurs fondamentales. Comparée à l'expérimentation, la simulation numérique est une méthode émergente. D'une manière générale, celle-ci n'en est encore qu'au stade de la validation, c'est-à-dire que son objectif immédiat est de permettre de retrouver les observations expérimentales. Les efforts de la recherche dans ce sens la rendront un jour prédictive.

Dans le domaine du génie chimique, les écoulements granulaires sont présents dans des systèmes dont la taille peut aller jusqu'à plusieurs dizaines de mètres, ce qui donne cours à des phénomènes parfois hautement instationnaires et observables seulement à ces échelles. Selon le système étudié, ces phénomènes peuvent être de nature mécanique, hydrodynamique, thermique, chimique, électrique, etc. En revanche, l'origine de ces phénomènes repose systématiquement sur des échelles spatiales bien plus

fines, telle que l'interaction entre les grains. La première contrainte de taille tend à imposer l'utilisation de modèles à grande échelle pour une question de temps de retour et de coût, telles que les simulations de type Euler-Euler, tandis que la seconde nécessite l'intervention de modèles à petite échelle, telles que les simulations PRS, uniquement réalisables sur de petits systèmes. Pour faire le pont entre ces deux mondes et faciliter le transit de l'information entre les deux pratiques, un formalisme à méso-échelle est requis. Celui-ci ne se préoccupe pas des microéchelles de l'écoulement, cependant il est capable de prendre en considération les contacts discrets entre les particules et avec leur environnement. Le passage de l'information des modèles à méso-échelle vers ceux à macro-échelle est fondamental car ces derniers restent aujourd'hui la meilleure option pour simuler les systèmes de taille industrielle.

Dans ce cadre, le projet MORE4LESS rassemble trois acteurs majeurs dans le domaine de la mécanique des fluides, afin d'explorer et promouvoir cette transmission de savoir. La contribution des travaux effectués durant cette thèse consistait à créer au sein du code de calcul YALES2 développé au laboratoire CORIA (Rouen) un solveur capable de modéliser le comportement d'un lit fluidisé à l'échelle pilote, instrumenté au LGC (Toulouse). Ce lit vise à caractériser les différents régimes de combustion des réacteurs à conversion de gaz naturel pour la production de chaleur et d'électricité. Expérimentalement, deux régimes de combustion ont pu être isolés. Le premier est présent lorsque la température globale du lit est inférieure à une certaine température critique, et conduit à l'apparition d'un front de flamme au-dessus du lit. Le second se produit pour une température globale du lit supérieure à cette température critique, et provoque une conversion du méthane à l'intérieur du lit. L'identification des besoins liés à cette problématique met en jeu une capacité à simuler des lits fluidisés multi-physiques d'une part, et de permettre leur étude dans des géométries réalistes à grande échelle d'autre part, le tout dans un contexte non-structuré.

6.1.1 Caractère multiphysique du code

Le solveur granulaire implémenté dans YALES2 a premièrement permis l'étude de systèmes où la phase fluide est absente ou anecdotique. Le choix du formalisme sphères molles autorise l'étude de systèmes dilués mais également denses. Une illustration est la manifestation de l'effet Janssen observée lors de la vidange d'un sablier. Le solveur a également été éprouvé sur des tests d'impacts de billes sur des surfaces planes.

L'ajout d'une phase fluide, modélisée dans le cadre de la LES, a ensuite fait naître de nouvelles possibilités mais également de nouvelles problématiques, au nombre desquelles on compte le couplage de quantité de mouvement entre les phases fluide et solide. Des vérifications ont permis de valider cet aspect du code sur des configurations simples de lits fixes ou fluidisés isothermes, au travers l'étude de la perte de charge du fluide. Un lit fluidisé de laboratoire comportant environ 10M de particules instrumenté à l'Université de Birmingham a ensuite pu être simulé. Conjointement avec le laboratoire IMFT (Toulouse), où ce système a également fait l'objet de simulations à grande échelle grâce au code NEPTUNE, des comparaisons ont permis de valider certains aspects des deux codes de calcul. Des validations de YALES2 à partir de résultats de simulations au formalisme sphères dures dans des canaux en régime dilué ont également été effectuées à l'IMFT (n'apparaissent pas dans ce manuscrit).

Un couplage thermique entre les phases a par la suite été ajouté au code. Ce type de couplage peut s'avérer délicat. En effet, dans la phase fluide la température aura une influence sur sa masse volumique et sa vitesse, et une mauvaise prédiction peut rapidement aboutir à des instabilités. Deux méthodes de couplage ont été implémentées, comparées et validées sur des configurations canoniques de lits fixes en

régime stationnaire et transitoire, avec et sans convection. Un petit lit fluidisé réalisant le refroidissement de billes de verre chaudes par un courant d'air a été étudié, et a permis d'illustrer la capacité du code à simuler des systèmes anisothermes.

Enfin, le code a pu être éprouvé sur la configuration anisotherme réactive à l'échelle pilote du lit fluidisé du LGC. Cette simulation a dû faire l'objet d'une étape de validation d'un mécanisme cinétique de type Arrhénius capable de retrouver la température critique prédite expérimentalement, ainsi que d'une méthode d'épaississement du front de flamme. La méthodologie employée a effectivement permis l'observation de la température critique, ainsi que la mise en évidence de deux régimes de combustion distincts.

6.1.2 Géométrie complexe et calcul massivement parallèle

Afin de le confronter à des systèmes réalistes, c'est-à-dire mettant en jeu des géométries complexes de taille semi-industrielle et un nombre important de particules, le code a fait l'objet de nombreuses optimisations. En premier lieu, la capacité à simuler des géométries complexes, c'est-à-dire dans lesquelles on rencontre des parois non-planes, repose sur la résolution des contacts particules-paroi. L'algorithme implémenté est de type "feature-based", et utilise le concept de régions de Voronoi afin d'identifier le point de collision entre une particule et une paroi composée de faces, d'arêtes et de noeuds. Il s'agit d'un schéma "exhaustif", qui n'utilise aucune hypothèse ni sur l'évolution du système ni sur la quantité de contacts simultanés, ce qui améliore sa robustesse et son caractère générique. Enfin, il ne requiert aucun processus itératif. Afin de ne pas pénaliser le coût du calcul, des tests hiérarchiques sont réalisés en cours de simulation visant à isoler les particules susceptibles de heurter les parois, et pour chacune d'entre elles d'isoler les composants de la paroi les plus proches. Le premier de ces objectifs est atteint en identifiant les cellules du maillage les plus proches des parois. Pour évoluer dans un contexte non-structuré, ce halo de cellules est basé sur un calcul de distance exacte à la paroi, ce qui l'autorise à fonctionner même en cas de gradients importants de tailles de cellules. Un algorithme de tri spatial de type "sphere-tree" à deux niveaux permet ensuite d'isoler rapidement les faces de la paroi les plus proches de chaque particule. L'ensemble de ces méthodes a permis au code de simuler des domaines cylindriques, mais également plus complexes, tels qu'un lit transporté avec boucle complète de recirculation, mettant en jeu des tubes coudés, des jonctions de tubes, des parties coniques, etc.

La capacité du code à simuler des systèmes de taille semi-industrielle, comportant donc plusieurs millions de particules, passe nécessairement par l'ajout d'une couche de parallélisme. De façon préliminaire, la création d'une grille cartésienne de détection au sein du domaine de chaque processeur permet, via un algorithme de complexité linéaire vis-à-vis du nombre de particules, de détecter les partenaires potentiels de collision. Cette grille est construite de façon dynamique, et indépendamment sur chaque bloc en cas de domaines de processeurs disjoints. Le parallélisme évolue dans un paradigme de décomposition de domaine en mémoire distribuée de type MPI, et fait intervenir des particules fantômes, constituées des particules les plus proches des interfaces interprocesseurs. La détection de ces particules passe par la création d'un halo de cellules autour de ces interfaces, basé sur un critère de distance. La méthode est approchée et consiste à transporter les coordonnées de marqueurs générés sur l'interface vers les noeuds plus lointains pour calculer les distances. Les erreurs commises sur le calcul de ces distances ont fait l'objet d'une étude complète sur un cas réaliste qui a permis de valider l'utilisation de la méthode sur une large gamme de paramètres. Une fois les particules proches des interfaces isolées, celles-ci sont rassemblées dans de nouvelles structures de données. Les grandeurs utiles au calcul des forces de contact

sont alors packées dans un unique tableau constituant un message MPI. Finalement, la parallélisation du code ne requiert qu'un envoi/réception de message MPI par paire de processeurs, le tout réalisé dans un format non-bloquant favorisant le recouvrement travail/communication. Les influences de la technique de packing et du type de communication ont également fait l'objet d'une validation sur le lit fluidisé de Birmingham rassemblant plusieurs centaines de processeurs et 10M de particules. Sur la même configuration, des temps de retour de l'ordre d'une semaine pour obtenir 15 secondes de temps physique (soit environ trois temps de séjour) sont observés. Les performances parallèles du code montrent des scalabilités fortes de 82% sur 4000 processeurs dans des cas où les particules sont équiréparties.

Afin d'améliorer les performances du code dans les cas où la distribution des particules est très hétérogène parmi les processeurs, un algorithme de load balancing dynamique a également été implémenté dans YALES2. Il permet de redessiner automatiquement les contours des domaines des processeurs en fonction de la présence des particules au sein des groupes de cellules. Cette procédure de load balancing est lancée durant le calcul dès lors que l'algorithme détecte des hétérogénéités importantes dans la distribution de particules. Deux contraintes peuvent être utilisées pour définir les fonctions de coût qui serviront à déplacer les groupes de cellules : la première est basée sur la hauteur de lit et permet de définir une certaine proportion de processeurs qui seront présents sous cette dernière, c'est un critère purement géographique. La seconde est directement basée sur le nombre de particules par groupe de cellules, c'est donc un critère numérique. L'utilisation de ces deux critères repose principalement sur le type de système étudié et la physique rencontrée. Afin de diminuer l'empirisme de la méthode, ces deux critères peuvent être utilisés indépendamment, ou bien au contraire conjointement. Enfin, sa stabilité est accrue par l'emploi de mécanismes de relaxation progressive des contraintes prescrites si celles-ci sont trop difficiles à satisfaire. Des gains de 50% en temps de simulation ont été observés lors de l'utilisation de l'algorithme de load balancing dynamique sur le lit fluidisé de Birmingham comprenant 10M de particules.

6.2 Perspectives

L'ensemble des travaux effectués durant cette thèse laisse également percevoir de vastes perspectives d'amélioration.

6.2.1 Aspects numériques

Les opérateurs de filtrage fonctionnant de proche en proche sont particulièrement attractifs dans un cadre non-structuré. La récente bibliographie fait cependant état d'autres méthodes garantissant un caractère isotrope pour cet opérateur, telle que la mollification, qui sont en train de s'imposer comme standards sur maillages structurés. Il serait bénéfique à l'avenir d'investiguer de façon quantitative l'influence du choix de cet opérateur sur les résultats de simulation.

Au cours de ces travaux, on a également pu remarquer que les profils de vitesse de solide en proche paroi présentent de façon quasi systématique une surestimation importante. Il semble fondamental d'investiguer la question, qui pourrait mettre en lumière un manquement dans la modélisation adoptée. Les causes probables de ces erreurs pourraient se situer dans l'incapacité à capter correctement les couches limites fluides, qui seules sont descriptibles par des méthodes micro-échelles, la formulation des forces frictionnelles, ou encore la prise en compte de la non-sphéricité des particules ou de la rugosité de paroi.

Ce dernier point est actuellement en cours de caractérisation, en collaboration avec l'IMFT.

Enfin, les simulations tardives menées sur le lit fluidisé réactif du LGC n'ont pas permis de valider pleinement l'utilisation du modèle d'épaississement de front de flamme (TFLES). Ce modèle n'a pas été développé dans un contexte granulaire, par conséquent son utilisation dans un lit fluidisé doit rester sujette à caution. Il pourrait notamment être intéressant d'étudier l'interaction de particules avec un front de flamme, qui pourrait venir modifier leur plissement, favorisant leur extinction ou leur propagation selon les conditions de températures rencontrées. Une étude DNS semble toute indiquée dans ce cadre. L'influence de la présence des particules lors de l'utilisation du modèle de turbulence de Smagorinsky pourrait également faire l'objet d'une étude, car il est probable que les particules puissent augmenter ou diminuer la turbulence selon les échelles de tailles rencontrées.

6.2.2 Vers la simulation de systèmes de plus en plus réalistes

L'étude de certaines applications industrielles proches de celles étudiées dans ces travaux nécessite d'aller plus loin dans la modélisation, notamment à l'image des aspects cités ci-dessous.

La monodispersité des échantillons solides reste très peu probable dans les systèmes industriels, où des phénomènes de rupture peuvent faire varier la distribution des diamètres de particules, et provoquer des comportements insolites qu'il est nécessaire de prévoir. Par ailleurs, il est parfois simplement difficile de maîtriser cette distribution dans le solide initialement employé. L'hypothèse de particules sphériques semble également abusive, et à long terme pourrait faire l'objet d'une attention particulière. Les problématiques environnementales actuelles liées à la combustion de biomasse, par essence composée de particules de natures et de propriétés différentes, pourrait constituer une motivation supplémentaire dans ce sens.

Les couplages chimiques entre les phases fluide et solide deviennent incontournables lors de la simulation de réacteurs catalytiques, telles que celles présentes dans certaines unités de FCC. Leur implémentation apparaît donc comme la suite logique de ces travaux. Le savoir accumulé sur le couplage thermique pourrait composer une base solide pour démarrer dans ce domaine.

Le lit fluidisé réactif du LGC, comme les autres systèmes profitant de la combustion, de la pyrolyse, ou de toute autre réaction très exothermique, voit des flux radiatifs non-négligeables. Ceux-ci ne sont aujourd'hui pas pris en compte dans le code, ce qui en constitue déjà une limitation. La problématique environnementale encourage également l'étude de systèmes tels que les fours solaires. En parallèle, celle de systèmes de stockage d'énergie thermique à lit fixe serait également rendue possible par l'ajout de mécanismes de transferts thermiques conductifs particule-particule et particule-paroi. L'implémentation de transferts conductifs autoriserait en outre la simulation de systèmes à longs temps de contact tels que les fours rotatifs.

Liste des Figures

1.1	Exemple de garnissage vrac utilisé en génie des procédés dans les colonnes d'extraction ou d'absorption afin d'augmenter la quantité d'interface entre les phases désirées (source : http://ingenieurprocess.kazeo.com).	21
1.2	Trémie d'un silo quasi-2D rempli de particules photo-élastiques. Le réseau de forces de contact dites "en chaînes" entre les grains est colorisé. Une arche bouche l'ouverture en bas du silo. Issu de [26].	23
1.3	Schéma de principe d'une machine à cycle organique de Rankine (en anglais "Organic Rankine Cycle" (ORC)), qui utilise la cogénération pour produire à la fois de l'eau chaude et de l'électricité (source : http://wiki.zero-emissions.at).	25
1.4	Illustration de la diversité des milieux granulaires : adsorption micrométrique (a) (source : IFPEN), Le mont Agung en éruption en Indonésie en 2017 (b) (source : Sciences et Avenir), rides sur des dunes de sable au Sud de la Mauritanie (c) (source : philippecrochet.com), les dunes mouvantes de la comète Tchouri (d) (source : Sciences et Avenir), granules de bois vendus dans le commerce (e) (source : biofarmer.hu), talus formé par de la poudre utilisée en pharmaceutique (f) (source : agcce.com).	26
1.5	À gauche : schéma simplifié d'un cyclone, utilisant la force centrifuge pour effectuer une séparation mécanique des particules en suspension dans un gaz. Les particules sont entraînées vers la paroi, où elles perdent leur quantité de mouvement par friction, et finissent par chuter. Ce dispositif est fréquemment mis en oeuvre pour la décontamination de rejets gazeux dans l'atmosphère (source : wikipedia). À droite : cyclone implanté sur un site industriel (source : www.scheuch.com).	27
1.6	Illustration de différents régimes d'écoulement dans un lit de particules. De gauche à droite, la vitesse d'injection du fluide est augmentée. Pour une vitesse d'injection du fluide U_{in} faible, le lit est fixe et sa hauteur est notée h_m (a). Lorsque U_{in} est portée à la valeur de la vitesse minimum de fluidisation U_{mf} , les particules commencent à se mouvoir et la hauteur du lit, plus importante, est alors notée h_{mf} (b). Pour les valeurs de $U_{in} > U_{mf}$, on observe la formation de bulles conduisant à régime bouillonnant (régime de bullage, en anglais "bubbling") (c) où les bulles peuvent atteindre des tailles semblables au diamètre de l'enceinte, ce qui a pour effet de propulser de la matière solide à de hautes altitudes (écoulement en bouchons, en anglais "slugging") (d). Lorsque U_{in} dépasse la vitesse terminale des particules U_t , celles-ci peuvent quitter l'enceinte (e). On peut aussi observer des régimes de fluidisation dite turbulente lorsque $U_{in} \gg U_{mf}$ pour lesquelles les bulles de gaz laissent place à des structures lacunaires moins cohérentes. Adapté de [170].	28








1.7	Exemple d'installation mettant en jeu un lit fluidisé couplé à un cyclone, association très fréquente sur les sites industriels (source : lemondeetnous.cafe-sciences.org).	29
1.8	Schéma de principe des unités de craquage catalytique (reactor) et de régénération du catalyseur (catalyst regenerator). La réaction de craquage a lieu le long d'une colonne (riser) dans lequel le catalyseur s'élève. Le riser est associé à deux cyclones qui récoltent le produit fini (reactor product) et le catalyseur pollué par le coke (spent catalyst). Le catalyseur usagé est séparé des produits gazeux et envoyé vers l'unité de régénération où le coke à sa surface est brûlé dans un courant d'air, participant également à sa mise à haute température, avant d'être renvoyé vers le réacteur à lit fluidisé (source : nptel.ac.in).	30
1.9	Le diagramme empirique de Geldart [4] permet de classer les particules par leur capacité à se fluidiser en se basant sur leur diamètre d_p et sur la différence de leur masse volumique (notée ici ρ_s) avec celle de la phase gaz (notée ici ρ_f). Les points rouges correspondent à des cas étudiés lors de ces travaux de thèse. Issu de [266].	31
1.10	Le diagramme empirique de Reh [242] se base sur le diamètre des particules ainsi que la vitesse d'injection du gaz (tous deux adimensionnés) et permet d'identifier les régimes spécifiques de fluidisation des particules. Sont ici visibles en partie haute du diagramme les catégories A, B, C et D de la classification de Geldart [4] (voir figure 1.9). Les points rouges correspondent à des cas étudiés lors de ces travaux de thèse. Issu de [266].	32
1.11	Profil vertical caractéristique du gradient de pression moyenné temporellement au travers d'un lit de particules identiques en fonction de la vitesse d'injection du gaz. La pression varie linéairement dans un lit fixe, puis garde une valeur constante pour $U_{in} < U_{mf} < U_t$. Passée U_t (ici notée U_e) le lit est transporté et le gradient de pression diminue.	33
1.12	Représentation de la corrélation semi-empirique d'Ergun [95]. Les comportements asymptotiques des corrélations de Blake-Kozeny [37] pour les faibles Reynolds, et de Burke-Plummer [49] pour les hauts Reynolds, sont également visibles.	34
1.13	Représentation de la corrélation semi-empirique d'Ergun [95] en fonction de la hauteur dans le lit de particule pour différentes valeurs de fraction volumique de fluide.	35
1.14	Vitesse minimum de fluidisation issue de la corrélation semi-empirique d'Ergun [95] en fonction du diamètre des particules. Les valeurs choisies pour les paramètres physiques correspondent au cas classique de la fluidisation de billes de verre ($\rho_p = 2500\text{kg.m}^{-3}$) par de l'air à température ambiante ($\rho = 1.18\text{kg.m}^{-3}$, $\mu = 1.8 \times 10^{-5}\text{Pl}$) en empilement aléatoire compact ($\varepsilon_{mf} = 0.36$).	37
1.15	Différentes valeurs de coefficients de transfert de chaleur fournies par des corrélations pour un lit fluidisé de particules de polypropylène muni d'un tube horizontal. Issu de [14].	39
1.16	Différentes valeurs pour la prédiction de la rétention de gaz dans une colonne à bulles. Issu de [333].	40
1.17	Schéma simplifié du système de mesure de vitesse de particules par vélocimétrie laser à effet Doppler. Issu de [266].	41
1.18	Images instantanées d'un lit fluidisé quasi 2D anisotherme. A gauche : image donnée par une caméra rapide visuelle où le fond du système est noir et les particules grises. A droite : image infrarouge. Issu de [226].	42

- 1.19 Trajectoires de deux traceurs (particules de polyéthylène de $600\mu\text{m}$) suivies par la méthode de suivi de particules par émission de positrons (en anglais "Positron Emission Particle Tracking" ou PEPT) dans un réacteur de 15cm de diamètre. La colorisation indique le temps de séjour. Issu de [148]. 43
- 1.20 Tracé de surfaces 3D de vitesses de particules obtenues par résonance magnétique nucléaire du proton dans un lit fluidisé de grânes de coquelicot. À gauche, partie haute du lit, à droite, partie basse du lit. Une zone de recirculation annulaire est mise en évidence par les vitesses de particules ascensionnelles positives au centre du réacteur et négatives près des parois. Issu de [131]. 43
- 1.21 Images obtenues à partir de microscopie électronique à balayage (en anglais "Scanning Electron Microscopy" ou SEM). A gauche : billes de verre. A droite : grains de sable. La taille caractéristique des solides est ici de quelques dizaines à quelques centaines de microns. Issu de [327]. 44
- 1.22 Images 2D obtenues par photoélasticimétrie. Réponse de grains photoélastiques à un cisaillement de Couette avec un zoom (a). L'image est colorisée, si bien que les contraintes les plus fortes sont subies par les grains rouge brillant tandis que les grains bleu sombre supportent des forces plus faibles. Disques photoélastiques compressés de façon isotrope montrant un réseau de forces à chaînes courtes entrelacées (c) et anisotrope exhibant cette fois de longues chaînes de force (d). Issu de [26]. 45
- 1.23 Décomposition des trois grands types d'échelles pour la modélisation des milieux granulaires ; micro, méso et macro, rapportées à la gamme d'échelles physiques rencontrées. Adapté de [176]. 46
- 1.24 Schéma explicatif des méthodes IBM : représentation d'une particule immergée dans une grille Cartésienne grâce à un ensemble de marqueurs disposés à sa surface (à gauche), interpolation et extrapolation de quantités entre un marqueur et les noeuds de la grille (à droite). Issu de [293] 47
- 1.25 Maillage non-structuré 2D pour le fluide s'adaptant autour de la surface de particules. Issu de [43]. 47
- 1.26 Simulation transitoire d'une suspension de particules réalisée à l'aide du logiciel MFIX [123] dans le formalisme TFM montrant de nombreuses hétérogénéités de fraction volumique de solide. Les zones sombres sont les plus denses en particules. De gauche à droite, on raffine le maillage. Des structures de plus en plus fines sont exhibées. Issu de [147]. . . . 49
- 1.27 Échelles de modélisation fréquemment rencontrées pour la simulation des écoulements granulaires. 50
- 1.28 Différents degrés de couplage illustrés en fonction de la fraction volumique de solide. Plus cette dernière est importante, plus le libre parcours moyen des particules se rapproche de leur diamètre. Basé sur [92]. 51
- 1.29 Nombre de publications liées à la simulation de particules discrètes entre 1987 et 2007 calculé par l'outil Web of Science avec les mots clés suivants : discrete element method/model, distinct element method/model, discrete particle simulation/method/model, et granular dynamic simulation. Issu de [339]. 53

- 2.1 (a) Schéma représentatif de deux particules a et b en cours de collision dans le formalisme des sphères molles. La distance de recouvrement est notée δ_{ab} . Les vecteurs unitaires de la base sont indiqués par \mathbf{n}_{ab} et \mathbf{t}_{ab} . L'influence de la partie purement élastique de la force de contact normale et de son facteur d'amortissement sont respectivement signalées par k_n (ressort) et γ_n (amortisseur). (b) Évolution temporelle qualitative de la distance entre les particules a et b sous l'effet des forces de contact répulsives, en action durant le temps de contact, noté T_C 65
- 2.2 Exemples de surfaces complexes approximées à l'aide de "sphères engluées". Un grain de maïs [243] (a) et un chameau [27] (b). 74
- 2.3 Régions de Voronoi d'un noeud (vertex) convexe ($\mathcal{VR}(V)$), d'une paire (edge) convexe ($\mathcal{VR}(E)$), et d'une face ($\mathcal{VR}(F)$). 76
- 2.4 Les coordonnées du projeté P' , \mathbf{w} , sont exprimées dans le système de coordonnées barycentriques de la face F composée des points O , U et V en utilisant $\mathbf{w} = h\mathbf{u} + k\mathbf{v}$. \mathbf{u} et \mathbf{v} sont les vecteurs de la base, respectivement dirigés de O à U et de O à V . Quatre cas sont représentés. Tout à droite, le cas pour lequel $P' \in \mathcal{VR}(F)$ 77
- 2.5 Sur la gauche, les normales à $\mathcal{VR}(V)$, nommées \mathbf{v}_1 , \mathbf{v}_2 et \mathbf{v}_3 sont tracées avec les vecteurs associés à la particule en approche \mathbf{p}_1 , \mathbf{p}_2 et \mathbf{p}_3 , servant au calcul des produits scalaires. Sur la droite, les normales à $\mathcal{VR}(E)$, nommées \mathbf{e}_1 , \mathbf{e}_2 , \mathbf{e}_3 et \mathbf{e}_4 sont tracées avec les vecteurs associés à la particule en approche \mathbf{p}_1 , \mathbf{p}_2 et \mathbf{p}_4 . \mathbf{p}_3 est identique à \mathbf{p}_2 . 78
- 2.6 À gauche : cas classique concave. La particule recouvre les faces F_1 , F_2 et l'edge E dans les zones en rouge pâle. L'algorithme implémenté détectera que $P \in \mathcal{VR}(F_1)$, $P \in \mathcal{VR}(F_2)$ mais $P \notin \mathcal{VR}(E)$. Ainsi, les forces de répulsion ne seront calculées qu'à partir de F_1 et F_2 bien que la particule recouvre également E . À droite, cas indéfini présentant des zones convexes et concaves, mettant en jeu un angle $> 180^\circ$ (—) et un angle $< 180^\circ$ (—). La particule recouvre tous les edges ainsi que le vertex V . L'algorithme détectera que $P \in \mathcal{VR}(E_1)$, $P \in \mathcal{VR}(E_2)$ mais $P \notin \mathcal{VR}(V)$, $P \notin \mathcal{VR}(E_3)$ et $P \notin \mathcal{VR}(E_4)$. Ainsi, les forces de répulsion sur la particule seront seulement calculées pour E_1 et E_2 79
- 2.7 Une particule de rayon r_p dont le centre a pour coordonnées \mathbf{x}_p est représentée en contact (ici de façon exagérée) avec un vertex (à gauche), un edge (au centre) et une face (à droite). Les vecteurs normaux unitaires considérés pour le calcul des forces de collision sont respectivement indiqués par \mathbf{n}_{pV} , \mathbf{n}_{pE} et \mathbf{n}_{pF} . Les distances de recouvrement sont respectivement indiquées par δ_{pV} , δ_{pE} et δ_{pF} . Pour ces trois éléments géométriques, la méthode utilisée considère le contact de la même façon qu'avec les plans en rouge pâle, orthogonaux aux vecteurs normaux représentés et contenant ces éléments. 81
- 2.8 Distance de recouvrement (en haut) et vitesse normale (en bas) adimensionnalisées en fonction d'un temps adimensionnalisé au cours d'un contact non-amorti particule-face (\blacktriangle), particule-edge (\blacksquare) et particule-vertex (\bullet). L'intégration temporelle est réalisée à l'aide d'un schéma numérique RK2 avec $\Delta t_p = T_C/100$. Comparaison avec les résultats analytiques (—). 82
- 2.9 Domaine cylindrique maillé avec des tétraèdres. Un Boundary Face Group (BFG) et sa Bounding Sphere (BSBFG) sont représentés avec des couleurs bleutées. Des Bounding Sphere of Faces (BSF) sont visibles en couleur orangée. 83

- 2.10 Illustration de deux cas de contacts non-déTECTABLES sans traitement parallèle spécifique, ici exagérés pour l'exemple. Le centre de la particule réside dans la cellule verte contenue dans le domaine de calcul du processeur #1. À gauche, à cause d'un rétrécissement local de la géométrie, les mailles sont déformées, et atteignent localement une taille plus petite que celle de la particule. Celle-ci est en train de collisionner la paroi de droite, localisée sur le processeur #0. À droite, un cas beaucoup plus courant car indépendant du maillage employé : au niveau de l'interface de deux processeurs et de la paroi, le point de contact entre la particule et la paroi est située sur un autre processeur. 85
- 2.11 Diagramme définitif de la procédure suivie par une particule p pour traiter les contacts avec les parois complexes. ■ : initialisation et sortie. ■ : sélection spatiale. ■ : détecteur de non-collision. ■ : tests des \mathcal{VR} . ■ : résolution du contact. 87
- 2.12 Illustration de la valeur du coefficient de traînée C_D pour un cylindre et une sphère lisses en fonction du nombre de Reynolds. Issu de [215]. 90
- 2.13 Représentation des coefficients de traînée donnés par les relations d'Ergun, de Wen & Yu, et de Huilin & Gidaspow pour une particule localisée dans un environnement avec une fraction volumique de fluide $\varepsilon_{@p}$ non unitaire à $Re_p = 100$. À titre indicatif, le coefficient de traînée donné par la relation de Schiller & Naumann pour une particule isolée est également illustré. 92
- 2.14 Comparaisons de contours de la fraction volumique de fluide instantanée obtenus de façon expérimentale (a), puis de façon numérique en utilisant différentes lois de traînées : Syamlal-O'Brien ajusté (b), Syamlal-O'Brien (c), Arastoopour (d), Gibilaro (e), Hill-Koch-Ladd (f), Zhang-Reese (g), Richardson-Zaki (h), RUC (i), Di Felice ajustée (j), Di Felice (k), Wen-Yu (l) et Gidaspow (m). Issu de [96]. 93
- 2.15 Le Buckau était équipé de deux rotors Flettner. Rebaptisé Baden-Baden, il traversa l'Atlantique et rallia New York le 9 mai 1926. Il était également équipé d'un moteur auxiliaire permettant son déplacement en l'absence de vent. 94
- 2.16 Prépondérance des différents régimes de transferts de chaleur en lits fluidisés. Diagramme tracé pour un mélange air/sable. T_b est ici la température du lit. Adapté de [106]. 96
- 2.17 Représentation 2D de six cellules (SC_i) autour d'un noeud central i_1 . Une particule p localisée dans la cellule C (■) se déplace vers une cellule voisine (■). ● : noeud du maillage. --- : volume de contrôle du noeud i_1 (ΔV_1). $\omega_{p,i}^C$: poids d'interpolation de la particule p dans C au noeud i 97
- 2.18 Représentation 2D d'une particule p dans un triangle composé des points i_1, i_2, i_3 et délimité par les surfaces S_1, S_2 et S_3 . Les vecteurs \mathbf{p}_i lient le centre de la face S_i et de p . Les vecteurs \mathbf{S}_i sont les normales à S_i , ont comme norme l'aire de S_i et sont dirigés vers l'extérieur. Le poids d'interpolation de la particule au noeud i est noté $\omega_{p,i}$ et vaut
$$\omega_{p,i} = \frac{\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{S}_i}{\sum_i \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{S}_i}. 98$$
- 2.19 Schéma simplifié sur maillage cartésien 2D d'une particule en rotation dans le sens trigonométrique au milieu d'une cellule formée de quatre noeuds. Les directions des vecteurs vitesses de fluide résultant du couplage sont dessinés à droite. 100

- 2.20 Schéma simplifié sur maillage cartésien 3D d'une particule en rotation dans le plan \mathcal{P} au milieu d'une cellule C . \mathcal{P} passe donc par l'équateur de la particule. Le moment hydrodynamique de la particule noté \mathcal{M}_D est orthogonal à \mathcal{P} , par définition. Le centre de la particule est noté P . On indique également deux vecteurs, l'un liant P au noeud i , l'autre liant P à l'intersection i' . Le moment renvoyé au noeud i est noté \mathcal{M}_i 101
- 2.21 Phénomène de précession observé à différents instants sur un champ fluide 3D soumis à l'effet d'une particule immobile en rotation au centre d'une cellule. La particule tourne avec une vitesse angulaire fixe portée par l'axe z avec un nombre de Reynolds de rotation supérieur à 1, et tourne donc dans le plan xy . Pour chaque instant sont visibles trois coupes passant par le centre de la particule ; afin d'observer les composantes de la vitesse fluide \mathbf{u}_x (à gauche), \mathbf{u}_y (à droite), et \mathbf{u}_z (au centre). Chaque composante est colorée selon son intensité, positive ou négative. On voit que pour \mathbf{u}_z , un phénomène instationnaire apparaît qui conduit à la précession de \mathbf{u}_z autour de l'axe z 102
- 2.22 À gauche : représentation 2D d'un maillage non-structuré. \bullet : noeuds du maillage. Les volumes de contrôles associés aux noeuds i_1 (■), i_2 (■), i_3 (■), i_4 (■), i_5 (■), i_6 (■), i_7 (■) sont dessinés. Le volume de contrôle ΔV_{i_1} du noeud i_1 est formé des volumes V_{23} , V_{34} , V_{45} , V_{56} , V_{67} et V_{72} . À droite : représentation 3D d'un maillage cartésien régulier. \bullet : noeud i_1 . \bullet : Noeuds au Centre des Faces (NCF). \bullet : Noeuds au Milieu des Paires (NMP). \bullet : Noeuds des Coins (NC). 103
- 2.23 Évolution temporelle de la distance de recouvrement $\delta_{ab}(t)$ adimensionnée par sa valeur maximum en fonction du temps adimensionné par le temps de contact T_C . Sont comparés le calcul analytique et les résultats donnés par les méthodes numériques RK2 et velocity-Verlet. Le cas illustré correspond à $T_C/\Delta t_p = n = 10$ et $e_n = 0.8$ 109
- 2.24 Évolution temporelle de la vitesse $u_{ab,n}(t)$ adimensionnée par sa valeur initiale en fonction du temps adimensionné par le temps de contact T_C . Sont comparés le calcul analytique et les résultats donnés par les méthodes numériques RK2 et velocity-Verlet. Le cas illustré correspond à $T_C/\Delta t_p = n = 10$ et $e_n = 0.8$ 109
- 2.25 Erreur absolue maximum obtenue pendant l'avancement temporel de la position en fonction de la qualité de la discrétisation du temps de contact. Comparaison des méthodes de RK2 et de velocity-Verlet pour trois valeurs du coefficient normal de restitution e_n 110
- 2.26 Erreur absolue maximum obtenue pendant l'avancement temporel de la vitesse en fonction de la qualité de la discrétisation du temps de contact. Comparaison des méthodes de RK2 et de velocity-Verlet pour trois valeurs du coefficient normal de restitution e_n 110
- 2.27 Erreur relative obtenue sur la vitesse post-collision $u_{ab,n}^{T_C}$ par rapport à sa valeur analytique $u_{ab,n}^{T_C,exacte}$ en fonction du premier overlap détecté, exprimé comme un pourcentage de la valeur maximum observable $u_{ab,n}^0 \Delta t_p$. Simulation mettant en jeu le schéma RK2, pour $e_n = 0.9$ et $n = 15$ 111
- 2.28 Comportement observé à divers instants lors d'une fluidisation avec prise en compte d'une grille fictive uniquement vue par les particules. Le fluide n'est pas représenté et les particules sont colorées par la fraction volumique de fluide locale. À gauche, un terme de perte de charge additionnelle est ajouté dans la zone située sous la grille. À droite, aucune perte de charge n'est ajoutée. L'apparition de chemins préférentiels empruntés par le fluide conduit à un envol des particules et une mauvaise fluidisation. 119

- 2.29 Périodicités sur un cas simple 2D cartésien. Le domaine rectangulaire est réparti sur deux processeurs proc #0 et proc #1 dont les frontières sont en trait noir épais. Les quatre parois X_0 , X_1 , Y_0 et Y_1 , sont périodiques deux à deux, tel que X_0 et X_1 sont liées, et Y_0 et Y_1 sont liées. Une particule est dessinée. Les cellules sont coloriées lorsque les particules qui y sont localisées doivent subir une ou plusieurs transformation(s) périodique(s) : les particules situées dans les cellules  doivent subir la transformation associée à X_0 . De même, les cellules  sont associées à X_1 , les cellules  à Y_0 , et les cellules  à Y_1 . Les particules situées dans les cellules constituées de deux couleurs doivent subir les deux transformations associées. Le même code couleur, mais avec des couleurs plus claires, est utilisé pour représenter les cellules fictives après avoir subies les transformations nécessaires. À gauche, les transformations pour le proc #0, à droite pour le proc #1. 120
- 2.30 Mécanisme d'identification des cellules pour la prise en compte des périodicités. Le cas présenté correspond à une intersection de deux parois périodiques numérotées 2 et 4 (l'autre paroi avec laquelle chacune d'elles partage une périodicité n'est pas dessinée). 121
- 2.31 Lit fluidisé quasi 2D pour lequel les parois latérales sont périodiques deux à deux. Seules les particules sont visibles, et sont coloriées par la fraction volumique de fluide locale. Au centre, le domaine de calcul considéré, entouré par deux répliques virtuelles dûes aux périodicités. 122
- 2.32 (a) Image obtenu par SEM de la rugosité (ici importante) d'un tube d'acier. Issu de [304]. (b) Photographie de la rugosité, faible (à gauche) ou forte (à droite) d'une plaque d'acier inoxydable. Issu de [276]. 123
- 2.33 Comparaison de profils radiaux de moyenne temporelle de vitesse verticale de solide (normalisée) sur une section du lit fluidisé (réacteur cylindrique) expérimenté à l'Université de Birmingham [102] obtenus avec un formalisme Euler-Euler. À gauche, condition de non-glissement appliqué à la phase solide, équivalent à un certain modèle de rugosité. À droite, condition de glissement sans rugosité. Qualitativement, on observe que l'ajout d'un modèle de rugosité permet d'améliorer sensiblement le profil moyen de vitesse solide en proche paroi, là où sans rugosité le flux solide est surestimé le long de la paroi. Les points expérimentaux sont signalés par des carrés vides avec des marges d'erreur. Issu de [103]. 123
- 2.34 Représentation de la rugosité pariétale d'après le concept de mur virtuel, incliné d'un angle virtuel γ [303]. La normale pour ce mur virtuel est \mathbf{n}_γ . La vitesse et l'angle d'incidence avant et après le contact sont respectivement notés \mathbf{u}_p^- et α^- , et \mathbf{u}_p^+ et α^+ . Adapté de [163]. 124
- 3.1 Méthode de recherche des partenaires potentiels de collision dans un cas 2D.  : noeuds de la grille. — : grille cartésienne superposée. La particule ciblée p est située dans la cellule centrale (). Les autres particules localisées dans cette cellule ou dans les cellules adjacentes () sont identifiées comme ses partenaires potentiels de collision. 129
- 3.2 (a) Configuration 2D utilisée par Munjiza & Andrews [214]. Le diamètre des particules est ici noté D . L'espacement entre les centres de deux particules consécutives vaut D dans la direction x , et $2D$ dans la direction y . (b) Configuration cubique simple utilisée pour le second test. L'espacement entre deux centres consécutifs vaut D dans toutes les directions. 132

- 3.3 (a) Résultats obtenus avec YALES2 sur la configuration présentée sur la figure 3.2(a). Un coût linéaire est observé, avec un coefficient de détermination valant $R^2 \approx 0.998$. (b) Résultats obtenus avec YALES2 sur la configuration cubique simple de la figure 3.2(b). Un coût linéaire est également observé, avec un coefficient de détermination valant $R^2 \approx 0.999$. Les temps CPU relevés correspondent à 10 opérations de détection et stockage des partenaires potentiels de collision. Les unités utilisées sont identiques à la publication originale de Munjiza & Andrews [214]. 133
- 3.4 Double décomposition de domaine (DDD). Les éléments grisés participent aux communications intérieures et extérieures du domaine des processeurs. Ceux repassés en noir participent uniquement aux communications extérieures. Issu de [211]. 135
- 3.5 Communicateurs interne (INTCOMM) et externe (EXTCOMM) correspondant à la figure 3.4. 135
- 3.6 Marquage d'une couche de cellules (■) à l'interface entre deux domaines de processeurs. À gauche, sur maillage non-structuré, la particule p rouge n'est pas identifiée comme appartenant au halo. À droite, sur maillage régulier, une couche de cellules est un critère suffisant pour identifier les particules fantômes. 136
- 3.7 Algorithme de type fast-marching. La distance instruite d_{min} correspond naturellement au rayon de la particule p . Un élément ou un noeud coloré signifie qu'il est marqué. Les marqueurs sont générés sur la frontière du processeur #1. ■ : éléments et noeuds de niveau 0. ■ : éléments et noeuds de niveau 1. Ici, certains de ces noeuds vérifient $d \leq d_{min}$. ■ : éléments et noeuds de niveau 1 marqués lors de la seconde propagation des listes. Tous ces noeuds sont à une distance suffisante. Les éléments colorés définissent alors le halo autour du processeur #1. 138
- 3.8 Cas dégénéré pouvant apparaître sur les maillages non-structurés : la liste initiale du noeud posant problème ne contient pas les marqueurs les plus proches de l'interface. Le problème est résolu en fusionnant sa liste avec celle du noeud adjacent. 139
- 3.9 Marquage de couches d'éléments (■) suivant une instruction de distance à l'interface de deux domaines de processeurs. À gauche, sur le maillage structuré, les particules p sont maintenant toutes deux identifiables. À droite, sur le maillage régulier, on obtient les mêmes résultats. 139
- 3.10 Cas classique où la distance entre un noeud et un marqueur est calculée au travers l'interface d'un processeur tiers. 140
- 3.11 Actualisation parallèle des listes pour l'algorithme de fast-marching. 141
- 3.12 Structure améliorée des communicateurs, contenant les Particle EXTERNAL COMMunicators (PTEXTCOMMs), et les ghost ParTicle GRouPS (GHOST PTGRPS). 142
- 3.13 Halo de cellules du processeur #1 (■). Les processeurs voisins prenant part à ce halo sont de rang #2, #3, #4, #5 et #6. Ainsi, ces processeurs devront envoyer au processeur #1 une copie de leurs particules contenues dans ce halo, qui formeront les particules fantômes du processeur #1. 143
- 3.14 Mesure de la latence globale sur le supercalculateur Curie pour un "ping pong" test dans trois configurations réseaux différentes : ●-● : communications intra-noeud intra-socket, ●-● : communications intra-noeud extra-socket, ●-● : communications extra-noeud. . . . 144

- 3.15 Illustration du packing. Avant le packing, un PTEXTCOMM contient deux PGTS. Chaque PGTS est composé d'un tableau pour chaque donnée associée aux particules. Le packing consiste à grouper les tableaux nécessaires dans un unique vecteur afin de simplifier la gestion des communications MPI. 145
- 3.16 Distribution du nombre de messages MPI en fonction de la taille des messages pour deux stratégies de communication : ●● : sans packing, ●● : avec packing. Les résultats sont issus de 30 itérations effectuées sur le lit fluidisé de Birmingham sur 512 processeurs. Les sommes sous chaque courbe correspondent au nombre total de messages envoyés. . . 146
- 3.17 Coût en terme de temps CPU des opérations de packing (■■) et d'unpacking (●●) avec sélection préliminaire des données échangées, et du packing (■■) et unpacking (●●) sans sélection des données, en fonction du nombre de PGTSs traités. 147
- 3.18 Temps théorique maximum passé dans les communications en fonction de la taille des messages pour deux stratégies : ●● : sans packing, et ●● : avec packing. À titre indicatif, on représente également le cas avec packing sans prise en compte du coût des opérations de packing/unpacking (---). Les résultats sont issus de 30 itérations effectuées sur le lit fluidisé de Birmingham sur 512 processeurs. Les sommes sous chaque courbe correspondent au coût total engendré. 148
- 3.19 Organigramme de l'algorithme asynchrone pour le traitement des particules fantômes avec packing/unpacking des données du halo et le recouvrement travail/communication. Étapes relatives à l'échange des tailles de pack (■) et des packs eux-mêmes (■). 150
- 3.20 Courbe de speed-up obtenue sur le cas factice. 152
- 3.21 Répartition des temps CPU des routines les plus coûteuses exprimés en pourcentages de la boucle temporelle globale. 152
- 3.22 Courbe de scale-up obtenue sur le cas factice. 154
- 3.23 Courbe de speed-up obtenue sur le cas du lit fluidisé de Birmingham. 155
- 3.24 Configuration cylindrique élémentaire. Les particules sont statiques au fond du cylindre. Le partitionnement classique sur quatre processeurs, ici colorés, correspond au cas sans répartition de charge (load balancing). Dans ce cas, la phase solide entière est localisée dans le domaine de calcul d'un unique processeur. À droite, le cas avec load balancing montre que la charge solide est maintenant répartie sur trois processeurs (le dernier étant caché derrière). 156
- 3.25 (a) À gauche, position instantanée des particules. À droite, domaine de calcul des 10 processeurs ; obtenus sans puis avec load balancing, avec une fonction de coût dépendant uniquement de la quantité de particules par processeur. (b) distribution du nombre de particules (en %) par processeur dans les cas sans load balancing et avec load balancing pour $pt_weight = 2$. Le load balancing idéal correspond à un nombre identique de particules sur chaque processeur. La taille des classes est de 2% du nombre total de particules. (c) Influence de pt_weight sur la distribution de particules. 159
- 3.26 Vues de côté du lit fluidisé de Birmingham. À gauche, champ instantané de fraction volumique de fluide. À droite, contour des domaines attribués à chaque processeur pour des partitionnements sur 192 processeurs ; obtenus sans load balancing (partitionnement classique) et avec load balancing, où environ 85% des processeurs sont maintenant utilisés dans la zone dense du lit. 161

3.27	Temps physique atteint pour des simulations de 24h sur le lit fluidisé de Birmingham sur divers nombres de processeurs sans utilisation du load balancing (▲), et avec utilisation du load balancing suivant la double contrainte (●). Pour ces tests, le pas de temps particulaire maximum était de $\Delta t_p = T_C/6$	164
3.28	Distribution du nombre de particules (en %) par processeur dans les cas sans load balancing et avec load balancing double contrainte (prescriptions : 85% des processeurs sous la hauteur de lit et $pt_weight = 1$), moyennée sur 1s de temps physique. Le test est mené sur le cas de Birmingham lancé sur 256 processeurs. Le load balancing idéal, correspondant à un nombre identique de particules sur chaque processeur, est également indiqué. La taille des classes est de 0.1% du nombre total de particules, soit ~ 10000 particules.	164
4.1	Schéma annoté du test d'une particule heurtant une plaque plane. La vitesse de la particule, sa composante tangentielle, sa vitesse de rotation et son angle d'impact pré-collisions sont respectivement notés \mathbf{u}_p^- , $\mathbf{u}_{p,t}^-$, ω_p^- et α^- . Les grandeurs post-collisions sont indicées $^+$. \mathbf{n} est le vecteur normal à la paroi.	167
4.2	Comparaison des résultats entre l'expérience menée par Di Renzo & Di Maio [82] (▲) et les simulations YALES2(●) utilisant le modèle de friction statique coulombienne. On observe pour différents angles d'impact ; l'angle de rebond (a), la vitesse angulaire (b), et le coefficient de restitution tangentielle (c) post-collision.	171
4.3	Comparaison des valeurs pour la perte de charge au travers un lit fixe prédites par la relation d'Ergun et obtenues par simulation numérique.	173
4.4	Comparaison des valeurs pour la perte de charge au travers un lit fluidisé prédites par la relation d'Ergun et obtenues par simulation numérique.	174
4.5	Comparaison des valeurs pour le moment hydrodynamique appliqué à une particule fixe en rotation pour divers Re_R obtenues par les corrélations issues de [185] et des simulations numériques.	175
4.6	Comparaison des résultats analytiques et issus de la simulation numérique pour le cas d'une particule immobile transférant de la chaleur avec les quatre noeuds du tétraèdre auquel elle appartient. Cas sans convection ni diffusion dans la phase gazeuse.	180
4.7	Comparaison des résultats analytiques et issus de la simulation numérique pour le cas d'une particule immobile transférant de la chaleur avec les quatre noeuds du tétraèdre auquel elle appartient. Cas sans convection ni diffusion dans la phase gazeuse.	182
4.8	Comparaison des résultats analytiques et issus de la simulation numérique pour le cas d'une particule immobile transférant de la chaleur avec un unique noeud j. Cas sans convection ni diffusion dans la phase gazeuse.	183
4.9	Cas de calcul utilisé pour la validation du code en situation stationnaire, puis couplée instationnaire (voir section suivante). Dans les deux cas, les particules sont fixes et empilées de façon cubique. Les parois sont glissantes afin de ne pas perturber l'écoulement vertical. Les températures du fluide et des particules sont initialisées à T_0 . Un cas grossier et un cas raffiné, dans lequel les nombres de mailles et de particules sont multipliés par 8, sont testés. Dans le cas stationnaire, la température des particules est fixée. Dans le cas couplé instationnaire, les températures du fluide et des particules évoluent en fonction de l'altitude z et du temps t , et seuls les transferts fluide-particules sont comptabilisés pour la phase solide.	184

- 4.10 Comparaison des températures de fluide adimensionnées T^* en fonction de la hauteur z fournies par le calcul analytique (équation 4.39) et par la simulation numérique, en régime stationnaire et pour des valeurs de vitesses d'entrée échelonnées de U_{mf} à $10U_{mf}$. Maillage grossier (en haut) et raffiné (en bas). 186
- 4.11 Comparaison des températures de fluide T en fonction de la hauteur z à différents instants t fournies par le calcul analytique (équation 4.65) et par la simulation numérique. Les données numériques en rouge symbolisent le cas grossier, tandis que les données numériques en bleu symbolisent le cas raffiné. 191
- 4.12 Comparaison des températures de solide T_p en fonction de la hauteur z à différents instants t fournies par le calcul analytique (équation 4.69) et par la simulation numérique. Les données numériques en rouge symbolisent le cas grossier, tandis que les données numériques en bleu symbolisent le cas raffiné. 191
- 4.13 Cas limite où $\theta_f \rightarrow 0$. Comparaison des températures de solide T_p en fonction de la hauteur z à différents instants t fournies par le calcul analytique (équation 4.70) et par la simulation numérique. Les données numériques en rouge symbolisent le cas grossier, tandis que les données numériques en bleu symbolisent le cas raffiné. Pour ce dernier cas, la plupart des marqueurs sont omis afin d'obtenir une meilleure visibilité. 192
- 4.14 Cas limite où $\theta_p \rightarrow 0$. Comparaison des températures de fluide T en fonction de la hauteur z à différents instants t fournies par le calcul analytique (équation 4.71) et par la simulation numérique. Aucune différence n'étant observable entre les résultats obtenus pour le cas grossier et le cas raffiné, un seul est représenté. 193
- 4.15 Le domaine de calcul cubique utilisé pour le test de validation de la méthode de fast marching est ici vu de côté. Les mailles contenues dans le domaine de calcul du processeur servant de cible sont représentées. A droite, le halo de cellules obtenu par la méthode de fast marching est coloré par la distance de chaque noeud à l'interface du processeur cible. 195
- 4.16 Aperçu en trois dimensions du domaine de calcul du processeur cible coloré arbitrairement, autour duquel est construit le halo. 195
- 4.17 À gauche : représentation de la distance exacte d_{exacte} entre un noeud et une portion d'interface plane, et approximation par fast marching d_{FM} . La distance entre le marqueur sélectionné et le projeté orthogonal du noeud sur l'interface est notée Δm . À droite : allure de la courbe d'erreur relative en fonction de la distance exacte pour trois valeurs de Δm , donnée par la relation 4.74. 197
- 4.18 Pour l'ensemble des noeuds appartenant au halo autour du processeur cible, signalés par des points bleus (6308 points au total), la distance obtenue par fast marching est tracée en fonction de la distance exacte à l'interface. 197
- 4.19 Pour l'ensemble des noeuds appartenant au halo autour du processeur cible, signalés par des points bleus (6308 points au total), l'erreur signée commise $d_{exacte} - d_{FM}$ est tracée en fonction de la distance exacte à l'interface. 198
- 4.20 L'erreur signée relative $\frac{d_{exacte} - d_{FM}}{d_{exacte}}$ en % est tracée en fonction de la distance exacte à l'interface. 198
- 4.21 La PDF normalisée de l'erreur signée relative $\frac{d_{exacte} - d_{FM}}{d_{exacte}}$ en % est représentée en considérant des intervalles de 0.05%. 199

- 4.22 Illustration de la nécessité d'adapter la taille de liste au nombre de marqueurs utilisés. Pour un nombre important de marqueurs générés sur l'interface, on compare un cas où la taille de liste employée est trop petite, puis un cas où elle est adaptée. 200
- 4.23 Premier test : pour un même nombre de marqueurs générés par face pour la méthode de fast marching, ici 60, on augmente la taille de liste de marqueurs stockées aux noeuds. L'erreur signée absolue $d_{exacte} - d_{FM}$ est représentée pour des tailles de liste de 1, 10, 30, 60, 100, et 120. 201
- 4.24 Premier test : pour un même nombre de marqueurs générés par face pour la méthode de fast marching, ici 60, on augmente la taille de liste de marqueurs stockées aux noeuds. L'erreur signée relative $\frac{d_{exacte}-d_{FM}}{d_{exacte}}$ est représentée pour des tailles de liste de 1, 10, 30, 60, 100, et 120. 202
- 4.25 Premier test : pour un même nombre de marqueurs générés pour la méthode de fast marching, ici 60, et une taille de liste variable, on classe les 6308 noeuds du halo en 14 groupes. Le n ième groupe est composé des noeuds i situés à une distance exacte $d_{exacte,i}$ de l'interface telle que $i\Delta x \leq d_{exacte,i} < (i+1)\Delta x$. Dans chaque groupe sont cumulés N noeuds. En haut, on représente l'erreur absolue maximum dans chaque groupe $-\max(|d_{exacte,i} - d_{FM,i}|)$. En bas, on représente l'erreur moyenne dans chaque groupe $\frac{1}{N} \sum_{i \in N} (d_{exacte,i} - d_{FM,i})$ 203
- 4.26 Premier test : pour un même nombre de marqueurs générés pour la méthode de fast marching, ici 60, et une taille de liste variable, on classe les 6308 noeuds du halo en 14 groupes. Le n ième groupe est composé des noeuds i situés à une distance exacte $d_{exacte,i}$ de l'interface telle que $i\Delta x \leq d_{exacte,i} < (i+1)\Delta x$. Dans chaque groupe sont cumulés N noeuds. En haut, on représente l'erreur relative maximum dans chaque groupe $-\max(|\frac{d_{exacte}-d_{FM}}{d_{exacte}}|)$. En bas, on représente l'erreur moyenne dans chaque groupe $\frac{1}{N} \sum_{i \in N} \frac{d_{exacte,i}-d_{FM,i}}{d_{exacte,i}}$. 204
- 4.27 Second test : pour une même taille de liste stockée aux noeuds pour la méthode de fast marching, ici 60, on augmente la quantité de marqueurs générés sur l'interface. L'erreur signée absolue $d_{exacte} - d_{FM}$ est représentée pour des nombres de marqueurs de 1, 10, 30, 60, 100, et 140 par face. 205
- 4.28 Second test : pour une même taille de liste stockée aux noeuds pour la méthode de fast marching, ici 60, on augmente la quantité de marqueurs générés sur l'interface. L'erreur signée relative $\frac{d_{exacte}-d_{FM}}{d_{exacte}}$ est représentée pour des nombres de marqueurs de 1, 10, 30, 60, 100, et 140 par face. 206
- 4.29 Second test : pour une même taille de liste stockée aux noeuds pour la méthode de fast marching, ici 60, et un nombre de marqueurs générés variable, on classe les 6308 noeuds du halo en 14 groupes. Le n ième groupe est composé des noeuds i situés à une distance exacte $d_{exacte,i}$ de l'interface telle que $i\Delta x \leq d_{exacte,i} < (i+1)\Delta x$. Dans chaque groupe sont cumulés N noeuds. En haut, on représente l'erreur absolue maximum dans chaque groupe $-\max(|d_{exacte,i} - d_{FM,i}|)$. En bas, on représente l'erreur moyenne dans chaque groupe $\frac{1}{N} \sum_{i \in N} (d_{exacte,i} - d_{FM,i})$ 207

- 4.30 Second test : pour une même taille de liste stockée aux noeuds pour la méthode de fast marching, ici 60, et un nombre de marqueurs générés variable, on classe les 6308 noeuds du halo en 14 groupes. Le n ième groupe est composé des noeuds i situés à une distance exacte $d_{exacte,i}$ de l'interface telle que $i\Delta x \leq d_{exacte,i} < (i+1)\Delta x$. Dans chaque groupe sont cumulés N noeuds. En haut, on représente l'erreur relative maximum dans chaque groupe $-\max \left(\left| \frac{d_{exacte,i} - d_{FM,i}}{d_{exacte,i}} \right| \right)$. En bas, on représente l'erreur moyenne dans chaque groupe $\frac{1}{N} \sum_{i \in N} \frac{d_{exacte,i} - d_{FM,i}}{d_{exacte,i}}$ 208
- 5.1 Visualisation du sablier simulé avec YALES2 et de ses dimensions ; H étant la hauteur et D_0 le diamètre de l'orifice à travers lequel chutent les grains. À droite, positionnement des grains à l'instant initial. 213
- 5.2 Évolution temporelle du débit de particules à travers l'orifice du sablier durant les premiers instants de la vidange. Partant d'une valeur nulle, le débit instantané rejoint rapidement un régime oscillant autour d'un débit moyen, témoin de l'effet Janssen. Le débit instantané est calculé en comptant les particules qui passent l'orifice sur une fenêtre temporelle d'une milliseconde. Le débit moyen est calculé pour $t > 0.05s$. Le cas illustré correspond à un ratio $d_p \sim 7.5\%D_0$ 214
- 5.3 Flux massique adimensionné de solide à travers l'orifice du sablier obtenu pour six diamètres de particules (\blacktriangle) comparé avec la loi de Beverloo avec $C = 0.55$ (- - -). La valeur de $k \approx 1.18$ est extraite de la pente (voir équation 5.2). 215
- 5.4 (a) Schéma du dispositif expérimental issu de [227]. Une buse circulaire (cercle rouge) occupe 10% de la surface d'injection du gaz, au centre. Cette buse ne constitue qu'une paroi et la totalité du débit gazeux est injecté par le restant de la surface d'injection. (b) Domaine de calcul utilisé pour les simulations numériques. 216
- 5.5 Instantanés du cas 1a de 0 à 15s. Les particules sont colorées par leur température. . . . 218
- 5.6 Traitement numérique utilisé dans le code YALES2 pour les conditions limites thermiques de type Neumann. ΔV est le volume de contrôle associé aux noeuds de la paroi. ΔS est la surface de ΔV en contact avec la paroi. Le résidu prenant part au bilan d'enthalpie sur les volumes de contrôle de la paroi s'écrit $Q_{ext}\Delta S/\Delta V$ 219
- 5.7 Évolution de la température moyenne des particules en configuration adiabatique ($Q_{ext} = 0$) pour les cas 1a (en haut) et 1b (en bas). Comparaison entre les valeurs expérimentales, puis issues des simulations de Patil *et al.* [227] et obtenues avec YALES2. 221
- 5.8 Évolution de la température moyenne des particules en configuration non-adiabatique pour les cas 1a, 1b et 1c. Comparaison entre les valeurs expérimentales, puis issues des simulations de Patil *et al.* [227] avec $h_w = 350W.m^{-2}.K^{-1}$ et obtenues avec YALES2 pour $h_w = 70W.m^{-2}.K^{-1}$. Un accord satisfaisant est atteint pour cette dernière valeur de h_w 222
- 5.9 Évolution de la température moyenne des particules en configuration non-adiabatique pour les cas 2a et 2b. Comparaison entre les valeurs expérimentales, puis issues des simulations de Patil *et al.* [227] avec $h_w = 350W.m^{-2}.K^{-1}$ et obtenues avec YALES2 pour $h_w = 120W.m^{-2}.K^{-1}$. Un accord satisfaisant est atteint pour cette dernière valeur de h_w 222

5.10	PDF normalisée des températures de particules à trois instants de la simulation ; $t = 1, 5$ et $10s$ pour le cas $1a$. Sont comparés les résultats expérimentaux de Patil <i>et al.</i> [227], les résultats de simulation de Lichtenegger <i>et al.</i> [179], et ceux obtenus avec YALES2.	224
5.11	Coupes transversales des moyennes temporelles prises sur $15s < \varepsilon_p(C) >$, $< \varepsilon_p(C)u_p(C) >$ et $< \Gamma_p(C) >$ pour le cas $1a$. Les résultats de Patil <i>et al.</i> sont issus de [227].	226
5.12	Coupes transversales des moyennes temporelles prises sur $15s < \varepsilon_p(C) >$, $< \varepsilon_p(C)u_p(C) >$ et $< \Gamma_p(C) >$ pour le cas $1b$. Les résultats de Patil <i>et al.</i> sont issus de [226].	227
5.13	Coupes transversales des moyennes temporelles prises sur $15s < \varepsilon_p(C) >$, $< \varepsilon_p(C)u_p(C) >$ et $< \Gamma_p(C) >$ pour le cas $1c$. Les résultats de Patil <i>et al.</i> sont issus de [227].	228
5.14	Flux solides moyens dans la direction verticale $< \varepsilon_p(C)u_{p,z}(C) >$ obtenus à $z = 0.023m$ pour les cas $1a$ (haut), $1b$ (milieu) et $1c$ (bas). Les résultats de Patil <i>et al.</i> sont issus de [227] et [226].	230
5.15	Coupes transversales des moyennes temporelles prises sur $15s < \varepsilon_p(C) >$, $< \varepsilon_p(C)u_p(C) >$ et $< \Gamma_p(C) >$ pour le cas $2a$. Les résultats de Patil <i>et al.</i> sont issus de [226].	232
5.16	Coupes transversales des moyennes temporelles prises sur $15s < \varepsilon_p(C) >$, $< \varepsilon_p(C)u_p(C) >$ et $< \Gamma_p(C) >$ pour le cas $2b$. Les résultats de Patil <i>et al.</i> sont issus de [226].	233
5.17	Flux solides moyens dans la direction verticale $< \varepsilon_p(C)u_{p,z}(C) >$ obtenus à $z = 0.023m$ pour les cas $2a$ (haut) et $2b$ (bas). Les résultats de Patil <i>et al.</i> sont issus de [227] et [226].	234
5.18	Montage (a) et schéma (b) expérimentaux pour le lit fluidisé circulant. Issu de Xu <i>et al.</i> [329].	235
5.19	Géométrie complète du lit fluidisé circulant. Vue de côté (a) et vue du dessus (b) avec annotations. À droite, maillage de la partie haute de l'installation utilisé dans ces travaux (c). Une coupe transversale du cyclone révèle l'allure du tube de sortie du gaz (d).	236
5.20	Coupes montrant les champs moyens de vitesse radiale \mathbf{u}_r (à gauche), orthoradiale \mathbf{u}_θ (au centre) et verticale \mathbf{u}_z (à droite) de gaz dans le cyclone, à différentes altitudes notées z_1, z_2 , et z_3	238
5.21	Représentation 2D d'une portion de la partie conique du cyclone. L'angle formé avec la verticale α est d'environ 20° . (a) Effet normal : la normale à la paroi \mathbf{n} est représentée, accompagnée des directions verticale V et horizontale H . Celui-ci a tendance à favoriser la remontée des particules dans le cône si l'angle normal d'impact est supérieur à $\beta \approx 70^\circ$. (b) Effet tangentiel : la friction prend place dans un plan orthogonal au vecteur normal et agit comme un frein sur la vitesse de glissement du point de contact. Le vecteur \mathbf{t} porteur de la force de friction possède donc une direction opposée à la vitesse de glissement.	239
5.22	Représentation d'une particule à l'équilibre tournant indéfiniment dans la partie conique du cyclone à une vitesse $\mathbf{u}_{p,\theta}$	239

5.23	Schéma à l'échelle représentant les composantes normale $\mathbf{u}_{p,n}^-$ et tangentielle $\mathbf{u}_{p,t}^-$ des vitesses d'impact \mathbf{u}_p^- moyennées sur un tour de cyclone. La proportion $\mathbf{u}_{p,n}^-/\mathbf{u}_{p,t}^-$ est d'environ 5%. Les vitesses mesurées sont issues d'une particule en situation d'équilibre dans le cyclone, avec $e_n = 0.9$	240
5.24	Évolution de la vitesse azimutale d'une particule en équilibre au cours de sa révolution dans le cyclone, relevée au moment des contacts avec la paroi. Les discontinuités témoignent de l'existence de phases de vol, durant lesquelles la particule n'est plus en contact avec la paroi.	242
5.25	En haut : représentation du polygone irrégulier de 120 côtés servant à modéliser une section du cyclone. En bas : influence de la valeur du coefficient de restitution normal sur le nombre de contacts par tour de cyclone effectué par la particule.	243
5.26	À gauche : champ moyen de fraction volumique de fluide dans le riser. Au centre : lignes de courant associées à la vitesse moyenne des particules et colorées par la vitesse de gaz. À droite : vecteurs de vitesse verticale moyenne des particules dessinés à différentes altitudes dans le riser, montrant une structure annulaire typique.	245
5.27	Fraction moyenne de solide le long du riser.	246
5.28	Flux massique instantané de solide en sortie du cyclone.	246
5.29	Hauteur de solide instantanée dans le standpipe.	247
5.30	Perte de charge moyenne au travers des différents composants du montage (voir figure 5.18(b)).	247
5.31	Lit fluidisé de laboratoire expérimenté à Birmingham. À gauche, montage expérimental issu de [102]. Au centre, vue de face du domaine de calcul maillé avec 3.7M tétraèdres, prenant en compte les éléments du système au-dessus de la grille de distribution, pour une hauteur totale de 1.75m. En haut, vue de haut montrant la cheminée. En bas, grille de distribution du gaz. À droite, décomposition du domaine en tores concentriques utilisée pour les statistiques.	248
5.32	Premiers instants de la simulation numérique du lit fluidisé de Birmingham. À gauche, coupe montrant la fraction volumique de fluide. À droite, coupe montrant la vitesse verticale du gaz.	249
5.33	Premiers instants de la simulation numérique du lit fluidisé de Birmingham. À gauche, coupe montrant la fraction volumique de fluide. À droite, coupe montrant la vitesse verticale du gaz.	250
5.34	Évolution temporelle de l'expansion du lit fluidisé (—) mesurée au cours de la simulation et sa moyenne temporelle (- - -). La hauteur de lit instantanée est extraite à partir de la hauteur du 99ème centile des particules. La moyenne temporelle vaut environ 0.47m. À l'instant initial, les particules sont organisées à la manière d'un réseau cubique simple.	252
5.35	Évolution temporelle de la perte de charge (—) mesurée au cours de la simulation et sa moyenne temporelle (- - -). Cette perte de charge est mesurée entre l'entrée et la sortie du gaz. Sa moyenne vaut environ 1677Pa. À l'instant initial, les particules sont organisées à la manière d'un réseau cubique simple.	252
5.36	Profil radial de la moyenne temporelle de la fraction volumique de solide $\langle \varepsilon_p(tore) \rangle_T$ mesurée dans le tore situé à $z = 3.45R$ (▲).	254

- 5.37 Distribution verticale de la moyenne temporelle de la fraction volumique de solide $\langle \varepsilon_p(\text{tore}) \rangle_T$ mesurée à la paroi (\blacktriangle). Le procédé de normalisation identique à celui de Fede *et al.* [102], avec une fraction volumique de solide maximum prise à $\varepsilon_{p,max} = 0.64$. 254
- 5.38 Profil radial de la moyenne temporelle de la vitesse verticale de solide, normalisée par la vitesse de fluidisation dans le tore situé à $z = 3.45R$ (\blacktriangle), comparé aux valeurs expérimentales issues de [102] avec barres d'erreur (\square). 255
- 5.39 Profil radial de la variance de la vitesse verticale de solide normalisée par le carré de la vitesse de fluidisation, prise dans le tore à $z = 3.45R$ (\blacktriangle). 256
- 5.40 Profil de la moyenne temporelle de la pression moins la pression minimum, toutes deux prises sur l'axe de symétrie du cylindre (---). La perte de charge au travers un lit de particules de fraction volumique de fluide $\varepsilon = 0.66$ donnée par la corrélation d'Ergun est représentée (- - -), ainsi que la perte de charge donnée par la loi hydrostatique (- - -). Ces deux dernières courbes sont arbitrairement placées à des ordonnées permettant de faciliter l'identification avec la courbe issue des simulations. Lors des simulations, la fraction volumique moyenne mesurée dans le lit était de ≈ 0.62 256
- 5.41 Lit fluidisé de laboratoire expérimenté au LGC. À gauche, schéma du montage expérimental adapté de [85]. À droite, vue de face de la géométrie du domaine de calcul et du maillage contenant 32.6M tétraèdres, prenant en compte les éléments du système au-dessus de la grille de distribution, pour une hauteur totale de 1.92m. 258
- 5.42 Profil axial de la différence entre la température locale et T_{bed} , pour différentes valeurs de T_{bed} . L'augmentation progressive de T_{bed} produit une descente de la zone de flamme vers le lit de particules. Graphique obtenu avec des particules de diamètre $350\mu\text{m}$, issu de Dounit *et al.* [85]. 259
- 5.43 Schématisation du principe de l'épaississement de flamme. Le front de flamme, qui ne peut être résolu directement sur le maillage, est épaissi de façon à être capté sur plusieurs noeuds, ici simplement sur une maille. 261
- 5.44 Présentation du cas test 1D pour la validation de la méthodologie employée. Lit statique de particules sur la gauche, à une fraction volumique de fluide et une température fixées. Sur la droite, deux positions typiques pour la zone de réaction : en haut, pour $T_{bed} > T_{crit}$, les profils de température de gaz T et de fraction massique de méthane Y_{CH_4} indiquent que la zone de réaction est située dans le lit de particules. En bas, pour $T_{bed} < T_{crit}$, les profils indiquent que le front de flamme est situé au-dessus du lit. 262
- 5.45 Carte de stabilité de chaque schéma cinétique investigué obtenue à partir du cas statique 1D, pour différentes valeurs de la fraction volumique de fluide ε et de T_{bed} . \bullet indique que la zone de réaction majoritaire est située au-dessus du lit de particules, et \blacksquare indique qu'elle est située dans le lit. La température critique expérimentale est également représentée. 263
- 5.46 Champs instantanés de fraction massique de méthane Y_{CH_4} et de température du gaz T pour deux températures de lit fixe 264
- 5.47 Profils moyens sur l'axe du cylindre de la différence de température $T - T_{bed}$, de fraction massique des principales espèces chimiques Y_K , et PDF de terme source de méthane $|\dot{\omega}_{CH_4}|$ conditionnée par la fraction volumique locale ε pour deux températures de lit fixe T_{bed} 265

- 5.48 Champs instantanés pris à différents temps à $T_{bed} = 973\text{K}$. L'échelle de couleur pour le terme source de méthane est saturée. 266
- 5.49 Champs instantanés pris à différents temps à $T_{bed} = 1173\text{K}$. L'échelle de couleur pour le terme source de méthane est saturée. 267
- 5.50 Coupes verticales du réacteur montrant la fraction volumique de fluide moyenne pour les deux températures de lit étudiées, et profils verticaux correspondants au centre. 268
- 5.51 Profil vertical des fractions massiques moyennes de certaines espèces chimiques. 269
- 5.52 Profil vertical du taux de conversion moyen du méthane à $T_{bed} = 973\text{K}$ 270
- 5.53 Profil vertical de l'écart de la température moyenne du gaz à celle du lit $T - T_{bed}$ 271
- 5.54 Distribution moyenne de terme puits de CH_4 conditionnée par la fraction volumique de fluide. 271
- 5.55 Évolution temporelle de l'intégrale volumique du terme puits de méthane $\int_V \dot{\omega}_{CH_4} dV$.
Les évènements les plus violents, rencontrés à 973K , sont fléchés. 272
- 5.56 Séquence de cinq instantanés d'une simulation à $T_{bed} = 973\text{K}$ pris dans la partie basse du réacteur. Pour chaque instant, sont visibles la fraction volumique de fluide (à gauche) et le terme puits de méthane (au centre) sur une coupe vertical de réacteur, ainsi qu'un rendu volumique qualitatif en 3D de ce même terme source (à droite). À $t = 0.010\text{s}$, le gaz s'enflamme dans une bulle, fléchée en rouge, dans la zone dense. 274

Liste des Tableaux

3.1	Influence de la méthode d'identification du halo sur le temps CPU.	141
3.2	Relevé des performances de speed-up sur le cas factice.	151
3.3	Relevé des performances de scale-up sur le cas factice.	154
3.4	Relevé des performances de speed-up sur le cas Birmingham.	155
4.1	Paramètres numériques utilisés pour les simulations.	168
4.2	Résultats obtenus pour différents contacts en condition de glissement.	169
4.3	Résultats obtenus pour différents contacts en condition de non-glissement.	169
4.4	Paramètres numériques issus de Di Renzo & Di Maio [82] utilisés pour les simulations.	170
4.5	Valeurs numériques utilisées pour la validation de la perte de charge en lit fixe.	172
4.6	Valeurs numériques utilisées pour la validation de la perte de charge en lit fluidisé.	173
4.7	Valeurs numériques utilisées pour la validation du moment hydrodynamique appliqué à une particule isolée en rotation.	175
4.8	Valeurs numériques utilisées pour la résolution du système matriciel.	179
4.9	Valeurs numériques utilisées pour le test.	185
4.10	Valeurs numériques utilisées pour la résolution des équations 4.65 et 4.69 dans le cas grossier.	190
4.11	Valeurs numériques utilisées pour la résolution du système 4.70 dans le cas grossier.	192
4.12	Valeurs numériques utilisées pour la résolution du système 4.71 dans le cas grossier.	193
5.1	Valeurs numériques utilisées pour la simulation du sablier.	215
5.2	Nomenclature des cas investigués dans les expérimentations de Patil <i>et al.</i> [226].	217
5.3	Valeurs numériques utilisées dans les expérimentations de Patil <i>et al.</i> [226].	217
5.4	Valeurs numériques utilisées pour la simulation du lit fluidisé circulant.	244
5.5	Paramètres numériques utilisés pour les simulations du lit fluidisé de Birmingham.	251
5.6	Paramètres du cas en cours d'étude pour le lit fluidisé du LGC.	259
5.7	Paramètres numériques utilisés pour les simulations du lit fluidisé du LGC.	265

Bibliographie

- [1] N° 15034 - 01/05/1982 - FRANCE - 29 - PONT-DE-BUIS-LES-QUIMERCH.
- [2] N° 17359 - 21/01/1997 - ETATS-UNIS - 00 - MARTINEZ.
- [3] N° 44675 - 14/05/2013 - FRANCE - 57 - FLORANGE.
- [4] *Gas fluidization technology*. Wiley, Chichester ; New York, 1986.
- [5] Mustapha Abbad. *Contribution sur les forces d'histoire exercées sur des inclusions solides ou uides à faibles nombres de Reynolds*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Lorraine - INPL, 2003.
- [6] J. Adánez, A. Abad, T. Mendiara, P. Gayán, L.F. de Diego, and F. García-Labiano. Chemical looping combustion of solid fuels. *Progress in Energy and Combustion Science*, 65 :6–66, March 2018.
- [7] French National Research Agency. The more4less project. <http://www.agence-nationale-recherche.fr/?Project=ANR-14-CE05-0042>, 2014.
- [8] Jun Ai, Jian-Fei Chen, J. Michael Rotter, and Jin Y. Ooi. Assessment of rolling resistance models in discrete element simulations. *Powder Technology*, 206(3) :269–282, January 2011.
- [9] G. Akiki, T. L. Jackson, and S. Balachandar. Force variation within arrays of monodisperse spherical particles. *Physical Review Fluids*, 1(4), August 2016.
- [10] G. Akiki, T. L. Jackson, and S. Balachandar. Pairwise interaction extended point-particle model for a random array of monodisperse spheres. *Journal of Fluid Mechanics*, 813 :882–928, February 2017.
- [11] B. J. Alder and T. E. Wainwright. Phase Transition for a Hard Sphere System. *The Journal of Chemical Physics*, 27(5) :pp. 1208–1209, November 1957.
- [12] M. P. Allen and D. J. Tildesley. *Computer simulation of liquids*. New york : Oxford university press edition, 1987.
- [13] Amit Amritkar, Surya Deb, and Danesh Tafti. Efficient parallel CFD-DEM simulations using OpenMP. *Journal of Computational Physics*, 256 :pp. 501–519, January 2014.
- [14] Amit Amritkar and Danesh Tafti. Heat transfer in fluidized bed - tube heat exchanger, August 2013.
- [15] Ryan Anderson, Liana Bates, Erick Johnson, and Jeffrey F. Morris. Packed bed thermal energy storage : A simplified experimentally validated model. *Journal of Energy Storage*, 4 :14–23, December 2015.
- [16] T. B. Anderson and Roy Jackson. Fluid Mechanical Description of Fluidized Beds. Equations of Motion. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 6(4) :527–539, November 1967.
- [17] A. Anzelius. Über Erwärmung vermittels durchströmender Medien. *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 6(4) :291–294, 1926.
- [18] R. A. Bagnold. Experiments on a gravity-free dispersion of large solid spheres in a newtonian fluid under shear. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 225(1160) :49–63, 1954.
- [19] Subhodeep Banerjee and Ramesh K. Agarwal. Transient Reacting Flow Simulation of Spouted Fluidized Bed for Coal-Direct Chemical Looping Combustion. *Journal of Thermal Science and Engineering Applications*, 7(2) :021016, June 2015.

- [20] Jerzy Baron, Elzbieta Maria Bulewicz, Jadwiga Zabaglo, and Witold Zukowski. Propagation of Reaction Between Bubbles with a Gas Burning in a Fluidised Bed. *Flow, Turbulence and Combustion*, 88(4) :479–502, June 2012.
- [21] A. P. Baskakov and K. E. Makhorin. Combustion of natural gas in fluidized beds. In *Inst. of Fuel Symposium Series No.1 : Fluidized Combustion Conf.*, volume 1, London, 1975.
- [22] A. B. Basset. On the Motion of a Sphere in a Viscous Liquid. *Philosophical Transactions of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 179(0) :43–63, January 1888.
- [23] Volker Becker, Thomas Schwager, and Thorsten Pöschel. Coefficient of tangential restitution for the linear dashpot model. *Physical Review E*, 77(1), January 2008.
- [24] F. P. Beer and E. R. Johnston Jr. *Mechanics for Engineers : Statics AND Dynamics*. McGraw-Hill Inc.,US, 1976.
- [25] S Beetham and Jesse Capecehatro. Data-driven closure framework for multiphase turbulence modeling, 2018.
- [26] R P Behringer, D Bi, B Chakraborty, A Clark, J Dijksman, J Ren, and J Zhang. Statistical properties of granular materials near jamming. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, 2014(6) :P06004, June 2014.
- [27] Nathan Bell, Yizhou Yu, and Peter J. Mucha. Particle-based simulation of granular materials. page 77. ACM Press, 2005.
- [28] Selvan Bellan, Nobuyuki Gokon, Koji Matsubara, Hyun Seok Cho, and Tatsuya Kodama. Numerical and experimental study on granular flow and heat transfer characteristics of directly-irradiated fluidized bed reactor for solar gasification. *International Journal of Hydrogen Energy*, 43(34) :16443–16457, August 2018.
- [29] Pierre Benard. *Analyse et amélioration d'une chambre de combustion centimétrique par simulations aux grandes échelles*. PhD thesis, Institut National des Sciences Appliquées de Rouen, 2015.
- [30] L. Bennani, H. Neau, C. Baudry, J. Laviéville, P. Fede, and O. Simonin. Numerical simulation of unsteady dense granular flows with rotating geometries. *Chemical Engineering Research and Design*, 120 :333–347, April 2017.
- [31] L. Bennani, P. Villedieu, M. Salaun, and P. Trontin. Numerical simulation and modeling of ice shedding : Process initiation. *Computers & Structures*, 142 :15–27, September 2014.
- [32] Michael Benson, Tomohiko Tanaka, and John K. Eaton. Effects of Wall Roughness on Particle Velocities in a Turbulent Channel Flow. *Journal of Fluids Engineering*, 127(2) :250, 2005.
- [33] Manuel Bernard. *Approche multi-échelle pour les écoulements fluide-particules*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2014.
- [34] W.A. Beverloo, H.A. Leniger, and J. van de Velde. The flow of granular solids through orifices. *Chemical Engineering Science*, 15(3-4) :260–269, September 1961.
- [35] G. A. Bird. *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*. Number 42 in Oxford engineering science series. Clarendon Press ; Oxford University Press, Oxford : New York, 1994.
- [36] Robert Byron Bird, Warren E. Stewart, and Edwin N. Lightfoot. *Transport phenomena*. Wiley, New York, rev. 2. edition, 2007.
- [37] F. C. Blake. The resistance of packing to fluid flow. *Transactions of the American Institute of Chemical Engineers*, 14 :415–421, 1922.
- [38] P. Boehling, G. Toschkoff, K. Knop, P. Kleinebudde, S. Just, A. Funke, H. Rehbaum, and J.G. Khinast. Analysis of large-scale tablet coating : Modeling, simulation and experiments. *European Journal of Pharmaceutical Sciences*, 90 :14–24, July 2016.
- [39] C.W. Boon, G.T. Houlsby, and S. Utili. A new algorithm for contact detection between convex polygonal and polyhedral particles in the discrete element method. *Computers and Geotechnics*, 44 :73–82, June 2012.

- [40] J. V. Boussinesq. Théorie de l'écoulement tourbillonnant. *Mémoire présenté par la division savante, Paris*, pages 23–46, 1877.
- [41] J. V. Boussinesq. Sur la résistance qu'oppose un fluide indéfini au repos, sans pesanteur, au mouvement varié d'une sphère solide qu'il mouille sur toute sa surface, quand les vitesses restent bien continues et assez faibles pour que leurs carrés et produits soient négligeables. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences*, 100 :935–937, 1885.
- [42] G. E. P. Box and Mervin E. Muller. A Note on the Generation of Random Normal Deviates. *The Annals of Mathematical Statistics*, 29(2) :610–611, June 1958.
- [43] Jorge Cécosar Bräcondle de Motta. *Simulation des écoulements turbulents avec des particules de taille finie en régime dense*. PhD Thesis, Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace, 2013.
- [44] L. Brendel and S. Dippel. Lasting Contacts in Molecular Dynamics Simulations. In H. J. Herrmann, J.-P. Hovi, and S. Luding, editors, *Physics of Dry Granular Media*, pages 313–318. Springer Netherlands, Dordrecht, 1998.
- [45] Stuart R. Brinkley. Heat Transfer between a Fluid and a Porous Solid Generating Heat. *Journal of Applied Physics*, 18(6) :582–585, June 1947.
- [46] Richard S. Brokaw. Approximate Formulas for the Viscosity and Thermal Conductivity of Gas Mixtures. *The Journal of Chemical Physics*, 29(2) :pp. 391–397, August 1958.
- [47] Steven L. Brown and Brian Y. Lattimer. Transient gas-to-particle heat transfer measurements in a spouted bed. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 44 :883–892, January 2013.
- [48] K.A. Buist, L.J.H. Seelen, N.G. Deen, J.T. Padding, and J.A.M. Kuipers. On an efficient hybrid soft and hard sphere collision integration scheme for DEM. *Chemical Engineering Science*, 153 :363–373, October 2016.
- [49] S. P. Burke and W. B. Plummer. Gas Flow through Packed Columns. *Industrial & Engineering Chemistry*, 20(11) :1196–1200, November 1928.
- [50] Jean-Paul Caltagirone and Stéphane Vincent. Sur une méthode de pénalisation tensorielle pour la résolution des équations de Navier-Stokes. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series IIB - Mechanics*, 329(8) :607–613, August 2001.
- [51] E. Calzavarini, R. Volk, M. Bourgoïn, E. LéVêQue, J.-F. Pinton, and F. Toschi. Acceleration statistics of finite-sized particles in turbulent flow : the role of Faxén forces. *Journal of Fluid Mechanics*, 630 :179, July 2009.
- [52] S. Cameron. Enhancing GJK : computing minimum and penetration distances between convex polyhedra. In *Proceedings of International Conference on Robotics and Automation*, volume 4, pages 3112–3117, Albuquerque, NM, USA, 1997. IEEE.
- [53] Charles S. Campbell and Christopher E. Brennen. Computer simulation of granular shear flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 151(-1) :167, February 1985.
- [54] Eduardo M. B. Campello. A description of rotations for DEM models of particle systems. *Computational Particle Mechanics*, 2(2) :109–125, June 2015.
- [55] Jesse Capecelatro. *A mesoscopic formalism for simulating particle-laden flows with applications in energy conversion processes*. PhD thesis, Cornell University, 2014.
- [56] Jesse Capecelatro and Olivier Desjardins. An Euler-Lagrange strategy for simulating particle-laden flows. *Journal of Computational Physics*, 238 :1–31, April 2013.
- [57] Jesse Capecelatro, Perrine Peplot, and Olivier Desjardins. Numerical investigation and modeling of reacting gas-solid flows in the presence of clusters. *Chemical Engineering Science*, 122 :403–415, January 2015.
- [58] Rajeevlochana G. Chittawadigi and Subir K. Saha. An analytical method to detect collision between cylinders using dual number algebra. In *Intelligent Robots and Systems (IROS), 2013 IEEE/RSJ International Conference on*, pages 5353–5358. IEEE, 2013.

- [59] K.W. Chu and A.B. Yu. Numerical simulation of complex particle-fluid flows. *Powder Technology*, 179(3) :104–114, January 2008.
- [60] Paul W. Cleary. Large scale industrial DEM modelling. *Engineering Computations*, 21(2/3/4) :169–204, March 2004.
- [61] Eric Climent and Martin R. Maxey. The force coupling method : A flexible approach for the simulation of particulate flows. *Theoretical Methods for Micro Scale Viscous Flows*, pages 1–21, 2009.
- [62] Eric Climent, Kyongmin Yeo, Martin R. Maxey, and George E. Karniadakis. Dynamic Self-Assembly of Spinning Particles. *Journal of Fluids Engineering*, 129(4) :379, 2007.
- [63] R. A. Cocco, W. D. Fullmer, P. Liu, and C. Hrenya. CFD-DEM : Modeling the Small to Understand the Large. *CEP magazine*, 2017.
- [64] Ray A. Cocco, S.B. Reddy Karri, Ted M. Knowlton, John Findlay, Thierry Gauthier, Jia Wei Chew, and Christine M. Hrenya. Intrusive probes in riser applications. *AIChE Journal*, 63(12) :5361–5374, December 2017.
- [65] T. P. Coffee. Kinetic mechanisms for premixed, laminar, steady state methane/air flames. *Combust flame*, 55 :161–170, 1984.
- [66] Jonathan D. Cohen, Ming C. Lin, Dinesh Manocha, and Madhav Ponamgi. I-COLLIDE : an interactive and exact collision detection system for large-scale environments. pages 189–ff. ACM Press, 1995.
- [67] Stephen Cole. The simulation of pneumatic transport within a pipe using a coupled DEM-CFD numerical method. 2007.
- [68] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinso. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Phys fluids*, 12 :1843–1863, 2000.
- [69] Nicolas Coppey. *Nanotubes de carbone décorés par CVD en lit fluidisé : Application en batterie lithium-ion*. PhD Thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse-INPT, 2013.
- [70] S. Corrsin and J. Lumley. On the equation of motion for a particle in turbulent fluid. *Applied Scientific Research*, 6(2-3) :114–116, March 1956.
- [71] B.J. Crewdson, A.L. Ormond, and R.M. Nedderman. Air-impeded discharge of fine particles from a hopper. *Powder Technology*, 16(2) :197–207, March 1977.
- [72] P. A. Cundall and O. D. L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Géotechnique*, 29(1) :pp. 47–65, March 1979.
- [73] T.Y.N. Dang, T. Kolkman, F. Gallucci, and M. van Sint Annaland. Development of a novel infrared technique for instantaneous, whole-field, non invasive gas concentration measurements in gas-solid fluidized beds. *Chemical Engineering Journal*, 219 :545–557, March 2013.
- [74] P. Dantu. Etude Statistique des Forces Intergranulaires dans un Milieu Pulverulent. *Géotechnique*, 18(1) :50–55, March 1968.
- [75] Henry Darcy. *Les fontaines publiques de la ville de Dijon*. Victor delmont edition, 1856.
- [76] R. C. Darton, R. D. Lanauze, J. F. Davidson, and D. Harrison. Bubble growth due to coalescence in fluidized beds. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers*, 55(4) :pp. 274–280, 1963.
- [77] J. F. Davidson and D. Harrison. *Fluidized Particles*. Cambridge University Press, 1963.
- [78] Niels G. Deen, E.A.J.F. Peters, Johan T. Padding, and J.A.M. Kuipers. Review of direct numerical simulation of fluid-particle mass, momentum and heat transfer in dense gas-solid flows. *Chemical Engineering Science*, 116 :710–724, September 2014.
- [79] J. S. Dennis, A. N. Hayhurst, and I. G. Mackley. In *Proceedings of the Combustion Institute*, volume 19, pages 1205–1212, 1982.
- [80] S. C. R. Dennis, D. B. Ingham, and S. N. Singh. The steady flow of a viscous fluid due to a rotating sphere. *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, 34(3) :pp. 361–381, 1981.

- [81] Olivier Desjardins, Guillaume Blanquart, Guillaume Balarac, and Heinz Pitsch. High order conservative finite difference scheme for variable density low Mach number turbulent flows. *Journal of Computational Physics*, 227(15) :7125–7159, July 2008.
- [82] Alberto Di Renzo and Francesco Paolo Di Maio. Comparison of contact-force models for the simulation of collisions in DEM-based granular flow codes. *Chemical Engineering Science*, 59(3) :pp. 525–541, February 2004.
- [83] Jianmin Ding and Dimitri Gidaspow. A bubbling fluidization model using kinetic theory of granular flow. *AIChE Journal*, 36(4) :523–538, April 1990.
- [84] S. Dounit, M. Hemati, and R. Andreux. Modelling and experimental validation of a fluidized-bed reactor freeboard region : Application to natural gas combustion. *Chemical Engineering Journal*, 140(1-3) :457–465, July 2008.
- [85] S. Dounit, M. Hemati, and D. Steinmetz. Natural gas combustion in fluidised bed reactors between 600 and 850 °C : experimental study and modelling of the freeboard. *Powder Technology*, 120(1-2) :49–54, October 2001.
- [86] Thomas G. Drake. Structural features in granular flows. *Journal of Geophysical Research*, 95(B6) :8681, 1990.
- [87] F. L. Dryer and I. Glassman. High-temperature oxidation of co and ch4. *Symposium (International) on Combustion*, 14 :987–1003, 1973. 14th Symposium (International) on Combustion.
- [88] Wei Du, Xiaojun Bao, Jian Xu, and Weisheng Wei. Computational fluid dynamics (CFD) modeling of spouted bed : Assessment of drag coefficient correlations. *Chemical Engineering Science*, 61(5) :1401–1420, March 2006.
- [89] J. Duran. *Sable, poudres et grains : introduction à la physique des matériaux granulaires.*, 1996.
- [90] Algis Dziugys and Bernhard Peters. An approach to simulate the motion of spherical and non-spherical fuel particles in combustion chambers. *Granular matter*, 3(4) :pp. 231–266, 2001.
- [91] S. E. Elghobashi. A two-equation turbulence model for two-phase flows. *Physics of Fluids*, 26(4) :931, 1983.
- [92] S. E. Elghobashi. Particle-laden turbulent flows : direct simulation and closure models. *Applied Scientific Research*, 48(3-4) :301–314, October 1991.
- [93] S. E. Elghobashi and G. C. Truesdell. On the interaction between solid particles and decaying turbulence. In *8th Symposium on Turbulent Shear Flows*, volume 1, pages 731–736, Munich, Federal Republic of Germany, 1991.
- [94] B. J. Ennis, J. Green, and R. Davies. The legacy of neglect in the U.S. *Chemical Engineering Progress*, 90(32) :32–43, April 1994.
- [95] Sabri Ergun. Fluid flow through packed columns. *Journal of Chemical Engineering Progress*, 48(2) :pp. 89–94, 1952.
- [96] Ehsan Esmaili and Nader Mahinpey. Adjustment of drag coefficient correlations in three dimensional CFD simulation of gas-solid bubbling fluidized bed. *Advances in Engineering Software*, 42(6) :375–386, June 2011.
- [97] Amir Esteghamatian. *Multi-scale numerical simulation of fluidized beds by High Performance Computing*. PhD thesis, Ecole Centrale de Lyon, 2016.
- [98] Izhak Etsion. Revisiting the Cattaneo-Mindlin Concept of Interfacial Slip in Tangentially Loaded Compliant Bodies. *Journal of Tribology*, 132(2), 2010.
- [99] Florian Euzenat. *Simulation numérique directe et analyse des transferts de chaleur dans les lits de particules fixes et mobiles*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse (INP Toulouse), Toulouse, 2017.
- [100] Liang-Shih Fan and Chao Zhu. *Principles of Gas-Solid Flows*. Cambridge University Press, Cambridge, 1998.

- [101] H. Faxén. Der Widerstand gegen die Bewegung einer starren Kugel in einer zähen Flüssigkeit die zwischen zwei parallelen ebenen Wänden eingeschlossen ist. *Annalen der Physik*, 373 :89–119, 1922.
- [102] P. Fede, G. Moula, A. Ingram, T. Dumas, and O. Simonin. 3d Numerical simulation and PEPT experimental investigation of pressurized gas-solid fluidized bed hydrodynamic. In *ASME 2009 Fluids Engineering Division Summer Meeting*, pages 1833–1842. American Society of Mechanical Engineers, 2009.
- [103] Pascal Fede, Olivier Simonin, and Andrew Ingram. 3d numerical simulation of a lab-scale pressurized dense fluidized bed focussing on the effect of the particle-particle restitution coefficient and particle-wall boundary conditions. *Chemical Engineering Science*, 142 :215–235, March 2016.
- [104] Jian Feng, Honglai Liu, and Ying Hu. Optimized modified Velocity Verlet algorithm for dissipative particle dynamics simulations. *Journal of Chemical Industry and Engineering*, 57(8) :1841–1847, 2006.
- [105] Licínio M Ferreira, José A.M Castro, and Alírio E Rodrigues. An analytical and experimental study of heat transfer in fixed bed. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45(5) :951–961, February 2002.
- [106] G. Flamant, N. Fatah, and Y. Flitris. Wall-to-bed heat transfer in gas-solid fluidized beds : Prediction of heat transfer regimes. *Powder Technology*, 69(3) :223–230, March 1992.
- [107] M. Foka, J. Chaouki, C. Guy, and D. Klvana. Natural gas combustion in a catalytic turbulent fluidized bed. *Chemical Engineering Science*, 49(24) :4269–4276, 1994.
- [108] Benedetta G. Franzelli, Eleonore Riber, Laurent Gicquel, and Thierry Poinot. Large eddy simulation of combustion instabilities in a lean partially premixed swirled flame. *Combust flame*, 159 :621–637, 2012.
- [109] Ben Freireich, Madhusudhan Kodam, and Carl Wassgren. An exact method for determining local solid fractions in discrete element method simulations. *AIChE Journal*, 56(12) :3036–3048, December 2010.
- [110] Daan Frenkel and Berend Smit. *Understanding molecular simulation : from algorithms to applications*. Number 1 in Computational science series. Academic Press, San Diego, 2nd ed edition, 2002.
- [111] R. Gabl, J. Seibl, B. Gems, and M. Aufleger. 3-D-numerical approach to simulate an avalanche impact into a reservoir. *Natural Hazards and Earth System Sciences Discussions*, 3(6) :4121–4157, June 2015.
- [112] James H. Gary, Glenn E. Handwerk, and Mark J. Kaiser. *Petroleum refining : technology and economics*. CRC Press, Boca Raton, 5th ed edition, 2007.
- [113] R. Gatignol. The Faxen formulae for a rigid sphere in an unsteady non-uniform Stokes flow. *Journal de mécanique théorique et appliquée*, 1 :143–160, 1983.
- [114] Yongming Geng and Defu Che. An extended DEM-CFD model for char combustion in a bubbling fluidized bed combustor of inert sand. *Chemical Engineering Science*, 66(2) :207–219, January 2011.
- [115] Massimo Germano, Ugo Piomelli, Parviz Moin, and William H. Cabot. A dynamic subgrid scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 3(7) :pp. 1760–1765, July 1991.
- [116] Dimitri Gidaspow. *Multiphase flow and fluidization : continuum and kinetic theory descriptions*. Academic Press, Boston, 1994.
- [117] E.G. Gilbert, D.W. Johnson, and S.S. Keerthi. A fast procedure for computing the distance between complex objects in three-dimensional space. *IEEE Journal on Robotics and Automation*, 4(2) :pp. 193–203, April 1988.
- [118] R. Glowinski, T.W. Pan, and J. Périaux. Distributed Lagrange multiplier methods for incompressible viscous flow around moving rigid bodies. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 151(1-2) :181–194, January 1998.
- [119] Anne Gobin, Hervé Neu, Olivier Simonin, Jean-Richard Llinas, Vince Reiling, and Jean-Luc Sélo. Fluid dynamic numerical simulation of a gas phase polymerization reactor : SIMULATION OF GAS PHASE REACTOR. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 43(10-11) :1199–1220, December 2003.
- [120] Werner Goldsmith. *Impact : the theory and physical behaviour of colliding solids*. London : Edward arnold edition, 1960.

- [121] Chirstoph Goniva, Christoph Kloss, Alice Hager, and Stefan Pirker. An Open Source CFD-DEM Perspective. pages 1–10, Göteborg, 2010.
- [122] Christoph Goniva, Christoph Kloss, Niels G. Deen, Johannes A.M. Kuipers, and Stefan Pirker. Influence of rolling friction on single spout fluidized bed simulation. *Particuology*, 10(5) :582–591, October 2012.
- [123] Pradeep Gopalakrishnan and Danesh Tafti. Development of parallel DEM for the open source code MFIX. *Powder technology*, 235 :pp. 33–41, 2013.
- [124] Himanshu Goyal, Jesse Capecelatro, Olivier Desjardins, and Perrine Pepiot. Impact of clustering on heterogeneous reactions in a riser. In *10th U.S. National Combustion Meeting*, College Park, Maryland, 2017.
- [125] T. A. Grimble, A. Agarwal, and M. P. Juniper. Local linear stability analysis of cyclone separators. *Journal of Fluid Mechanics*, 816 :507–538, 2017.
- [126] Robert D. Groot and Patrick B. Warren. Dissipative particle dynamics : Bridging the gap between atomistic and mesoscopic simulation. *The Journal of Chemical Physics*, 107(11) :4423–4435, September 1997.
- [127] D.J. Gunn. Transfer of heat or mass to particles in fixed and fluidised beds. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 21(4) :pp. 467–476, April 1978.
- [128] P.K. Haff and B.T. Werner. Computer simulation of the mechanical sorting of grains. *Powder Technology*, 48(3) :239–245, November 1986.
- [129] Ziad Hamidouche, Enrica Masi, Pascal Fede, Olivier Simonin, Renaud Ansart, Salah Dounit, and M. Hemati. 3d Numerical simulation of natural gas combustion in a fluidized bed reactor. Turku, Finland, 2015.
- [130] Ziad Hamidouche, Enrica Masi, Pascal Fede, Olivier Simonin, Karl Mayer, and Stefan Penthor. Unsteady three-dimensional theoretical model and numerical simulation of a 120-kW chemical looping combustion pilot plant. *Chemical Engineering Science*, 193 :102–119, January 2019.
- [131] Silke Harms, Siegfried Stapf, and Bernhard Blümich. Application of k- and q-space encoding NMR techniques on granular media in a 3d model fluidized bed reactor. *Journal of Magnetic Resonance*, 178(2) :308–317, February 2006.
- [132] H. Hasimoto. On the periodic fundamental solutions of the Stokes equations and their application to viscous flow past a cubic array of spheres. *Journal of Fluid Mechanics*, 5(02) :317, February 1959.
- [133] Roderick M. Hatt. Fireside deposits in coal-fired utility boilers. *Progress in Energy and Combustion Science*, 16(4) :235–241, January 1990.
- [134] H Hertz. Über die Berührung fester elastischer Körper. *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, 92 :156–171, 1881.
- [135] Dang Dinh Hiep. *Transient heat transfer in porous media*. PhD thesis, Monterey, California : U.S. Naval Postgraduate School, 1965.
- [136] Reghan J. Hill, Donald L. Koch, and Anthony J. C. Ladd. The first effects of fluid inertia on flows in ordered and random arrays of spheres. *Journal of Fluid Mechanics*, 448, December 2001.
- [137] J. E. Hilton and P. W. Cleary. Granular flow during hopper discharge. *Physical Review E*, 84(1), July 2011.
- [138] Joseph Oakland Hirschfelder, Charles Francis Curtiss, and Robert Byron Bird. *Molecular theory of gases and liquids*. Structure of matter series. Wiley, New York, NY, corr. print. with notes added edition, 1964.
- [139] Roger W. Hockney and James W. Eastwood. *Computer simulation using particles*. A. Hilger, Bristol [England] ; Philadelphia, 1988.
- [140] W. R. Hoegy and J. V. Sengers. Three-Particle Collisions in a Gas of Hard Spheres. *Physical Review A*, 2(6) :2461–2471, December 1970.
- [141] A.J. Hoekstra, J.J. Derksen, and H.E.A. Van Den Akker. An experimental and numerical study of turbulent swirling flow in gas cyclones. *Chemical Engineering Science*, 54(13-14) :2055–2065, July 1999.
- [142] Herbert Clark Hoover and Lou Henry Hoover. Georgius Agricola, De Re Metallica (translated from the first latin edition from 1556), 1950.

- [143] J. Horabik and M. Molenda. Mechanical Properties of Granular Materials and Their Impact on Load Distribution in Silo : A Review. *Scientia Agriculturae Bohemica*, 45(4) :203–211, January 2015.
- [144] J.A.K. Horwitz and A. Mani. Accurate calculation of Stokes drag for point-particle tracking in two-way coupled flows. *Journal of Computational Physics*, 318 :85–109, August 2016.
- [145] P.M. Hubbard. Collision detection for interactive graphics applications. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, 1(3) :218–230, September 1995.
- [146] Lu Huilin and Dimitri Gidaspow. Hydrodynamics of binary fluidization in a riser : CFD simulation using two granular temperatures. *Chemical Engineering Science*, 58(16) :pp. 3777–3792, August 2003.
- [147] Yesim Igci, Arthur T. Andrews, Sankaran Sundaresan, Sreekanth Pannala, and Thomas O'Brien. Filtered two-fluid models for fluidized gas-particle suspensions. *AIChE Journal*, 54(6) :1431–1448, June 2008.
- [148] A. Ingram, Z. Yang, S. Bakalis, D. J. Parker, X. Fan, P. J. Fryer, and J. P. K. Seville. Multiple particle tracking in a fluidised bed. *Proceedings of the 12th International Conference on Fluidization - New Horizons in Fluidization Engineering*, pages 448–456, 2007.
- [149] Dalibor Jajcevic, Eva Siegmann, Charles Radeke, and Johannes G. Khinast. Large-scale CFD-DEM simulations of fluidized granular systems. *Chemical Engineering Science*, 98 :pp. 298–310, July 2013.
- [150] H. A. Janssen. Versuche über getreidedruck in Silozellen. *Zeitschr. d. Vereines deutscher Ingenieure*, 39 :1045–1049, 1895.
- [151] Pan Jia, Bruno Andreotti, and Philippe Claudin. Giant ripples on comet 67p/Churyumov-Gerasimenko sculpted by sunset thermal wind. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 114(10) :2509–2514, March 2017.
- [152] Kenneth Langstreth Johnson. *Contact Mechanics*. Cambridge University Press, 1985.
- [153] D. S. J. Jones. *Elements of petroleum processing*. John Wiley & Sons, Chichester ; New York, 1995.
- [154] S. Kamath, J.T. Padding, K.A. Buist, and J.A.M. Kuipers. Stochastic DSMC method for dense bubbly flows : Methodology. *Chemical Engineering Science*, 176 :454–475, February 2018.
- [155] George Karypis and Vipin Kumar. A Fast and High Quality Multilevel Scheme for Partitioning Irregular Graphs. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 20(1) :pp. 359–392, January 1998.
- [156] K. Kato and C.Y. Wen. Bubble assemblage model for fluidized bed catalytic reactors. *Chemical Engineering Science*, 24(8) :1351–1369, August 1969.
- [157] S. C. Kennedy and R. H. Bretton. Axial dispersion of spheres fluidized with liquids. *AIChE Journal*, 12(1) :24–30, January 1966.
- [158] Simon Klein. *Dynamics of large particles in turbulence*. PhD thesis, Institut für Nichtlineare Dynamik Georg-August-Universität zu Göttingen und Max-Planck-Institut für Dynamik und Selbstorganisation, 2012.
- [159] Madhusudhan Kodam, Rahul Bharadwaj, Jennifer Curtis, Bruno Hancock, and Carl Wassgren. Force model considerations for glued-sphere discrete element method simulations. *Chemical Engineering Science*, 64(15) :pp. 3466–3475, August 2009.
- [160] Vincent Komiwes, Philippe Mege, Yves Meimon, and Hans Herrmann. Simulation of granular flow in a fluid applied to sedimentation. *Granular Matter*, 8(1) :pp. 41–54, March 2006.
- [161] N. A. Konan, H. Neau, O. Simonin, M. Dupoizat, and T. Le Geaziou. 3d Unsteady Multiphase Simulation of Uranium Tetrafluoride Particle Fluorination in Fluidized Bed Pilot. In *Proceedings of the 20th International Conference on Fluidized Bed Combustion*, pages 1152–1158, Xian City, China, 2009.
- [162] N.A. Konan, A Badarayani, O Simonin, and K Squires. LES/DPS of Horizontal Gas-Solid Channel Flow with Particle-Particle Collision and Wall Roughness Effects. In *6th Int. Conference on Multiphase Flow, ICMF 2007*, Leipzig, Germany, 2007.
- [163] N.A. Konan, O. Kannengieser, and O. Simonin. Stochastic modeling of the multiple rebound effects for particle-rough wall collisions. *International Journal of Multiphase Flow*, 35(10) :933–945, October 2009.

- [164] N.A. Konan, O. Simonin, and K.D. Squires. Rough wall boundary condition derivation for particle continuum equations : Validation from LES/DPS of gas-solid turbulent channel flow. In *Proceedings of ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting 2006, FEDSM2006*, volume Vol. 1 SYPMOSIA, pages 1723–1732, 2006.
- [165] Joseph Kozeny. Soil permeability. *Sitzungsber. Oesterr. Akad. Wiss. Wien. Math.-Naturwiss. Kl. Abt.*, 136 :271, 1927.
- [166] J. Kozicki and F. V. Donzé. YADE-OPEN DEM : an open-source software using a discrete element method to simulate granular material. Technical report, 2008.
- [167] Matthias Kraushaar. *Application of the compressible and low-Mach number approaches to Large-Eddy Simulation of turbulent flows in aero-engines*. PhD Thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse-INPT, 2011.
- [168] M. Kremmer and J. F. Favier. A method for representing boundaries in discrete element modelling-part I : Geometry and contact detection. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 51(12) :pp. 1407–1421, August 2001.
- [169] Xiaoke Ku, Tian Li, and Terese Løvås. CFD-DEM simulation of biomass gasification with steam in a fluidized bed reactor. *Chemical Engineering Science*, 122 :270–283, January 2015.
- [170] Daizo Kunii and Octave Levenspiel. *Fluidization engineering*. Butterworth-Heinemann series in chemical engineering. Butterworth-Heinemann, Boston, 2. edition, 1991.
- [171] J. Kussin and M. Sommerfeld. Experimental studies on particle behaviour and turbulence modification in horizontal channel flow with different wall roughness. *Experiments in Fluids*, 33(1) :143–159, July 2002.
- [172] Goro Kuwabara and Kimitoshi Kono. Restitution Coefficient in a Collision between Two Spheres. *Japanese Journal of Applied Physics*, 26(Part 1, No. 8) :1230–1233, August 1987.
- [173] Laurent Lacaze, Jeremy C. Phillips, and Rich R. Kerswell. Planar collapse of a granular column : Experiments and discrete element simulations. *Physics of Fluids*, 20(6), June 2008.
- [174] Anthony J. C. Ladd. Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 1. Theoretical foundation. *Journal of Fluid Mechanics*, 271 :285, July 1994.
- [175] Luca Lanotte, Johannes Mauer, Simon Mendez, Dmitry A. Fedosov, Jean-Marc Fromental, Viviana Claveria, Franck Nicoud, Gerhard Gompper, and Manouk Abkarian. Red cells' dynamic morphologies govern blood shear thinning under microcirculatory flow conditions. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 113(47) :13289–13294, November 2016.
- [176] Jinghai Li, Jiayuan Zhang, Wei Ge, and Xinhua Liu. Multi-scale methodology for complex systems. *Chemical Engineering Science*, 59(8-9) :1687–1700, April 2004.
- [177] Tingwen Li, Sreekanth Pannala, and Mehrdad Shahnam. CFD simulations of circulating fluidized bed risers, part II, evaluation of differences between 2d and 3d simulations. *Powder Technology*, 254 :115–124, March 2014.
- [178] Z. Li, T.C.E. Janssen, K.A. Buist, N.G. Deen, M. van Sint Annaland, and J.A.M. Kuipers. Experimental and simulation study of heat transfer in fluidized beds with heat production. *Chemical Engineering Journal*, 317 :242–257, June 2017.
- [179] T. Lichtenegger, E.A.J.F. Peters, J.A.M. Kuipers, and S. Pirker. A recurrence CFD study of heat transfer in a fluidized bed. *Chemical Engineering Science*, 172 :310–322, November 2017.
- [180] D. K. Lilly. A proposed modification of the Germano subgrid scale closure method. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 4(3) :pp. 633–635, March 1992.
- [181] Sunun Limtrakul, Asada Boonsrirat, and Terdthai Vatanatham. DEM modeling and simulation of a catalytic gas-solid fluidized bed reactor : a spouted bed as a case study. *Chemical Engineering Science*, 59(22-23) :5225–5231, November 2004.
- [182] M.C. Lin and J.F. Canny. A fast algorithm for incremental distance calculation. pages 1008–1014. IEEE Comput. Soc. Press, 1991.

- [183] Ming Lin and Stefan Gottschalk. Collision detection between geometric models : A survey. In *Proc. of IMA conference on mathematics of surfaces*, volume 1, pages 602–608, 1998.
- [184] Daoyin Liu, Xiaoping Chen, Wu Zhou, and Changsui Zhao. Simulation of char and propane combustion in a fluidized bed by extending DEM-CFD approach. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(2) :2701–2708, January 2011.
- [185] Qianlong Liu and Andrea Prosperetti. Wall effects on a rotating sphere. *Journal of Fluid Mechanics*, 657 :1–21, August 2010.
- [186] Liqiang Lu, Aaron Morris, Tingwen Li, and Sofiane Benyahia. Extension of a coarse grained particle method to simulate heat transfer in fluidized beds. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 111 :723–735, August 2017.
- [187] N. Lukerchenko, Yu. Kvurt, I. Keita, Z. Chara, and P. Vlasak. Drag Force, Drag Torque, and Magnus Force Coefficients of Rotating Spherical Particle Moving in Fluid. *Particulate Science and Technology*, 30(1) :55–67, January 2012.
- [188] C. M. R. Luna, I. áVila, L. R. Carrocci, and G. L. A. F. Arce. A CFD ASSESSMENT OF DRAG MODELS PERFORMANCE ON GAS-SOLID FLOW HYDRODYNAMICS IN A FLUIDIZED BED. In *Anais do XX Congresso Brasileiro de Engenharia Química*, pages 5202–5218, Florianópolis, Brasil, February 2015. Editora Edgard Blücher.
- [189] G Magnus. Ueber die Abweichung der Geschosse, und eine auffallende Erscheinung bei rotirenden Körpern. *Poggendorfs Annalen der Physik und Chemie*, 88(1), 1853.
- [190] Paul D Majors, R.C Givler, and Eiichi Fukushima. Velocity and concentration measurements in multiphase flows by NMR. *Journal of Magnetic Resonance*, 85(2) :235–243, November 1989.
- [191] Mathias Malandain, Nicolas Maheu, and Vincent Moureau. Optimization of the deflated Conjugate Gradient algorithm for the solving of elliptic equations on massively parallel machines. *Journal of Computational Physics*, 238 :32–47, April 2013.
- [192] George Mallouppas and Berend van Wachem. Large Eddy Simulations of turbulent particle-laden channel flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 54 :65–75, September 2013.
- [193] C. Mankoc, A. Janda, R. Arévalo, J. M. Pastor, I. Zuriguel, A. Garcimartín, and D. Maza. The flow rate of granular materials through an orifice. *Granular Matter*, 10(6) :469–469, October 2008.
- [194] George Marsaglia. Choosing a Point from the Surface of a Sphere. *The Annals of Mathematical Statistics*, 43(2) :645–646, April 1972.
- [195] S. Mathur, P.K. Tondon, and S.C. Saxena. Thermal conductivity of binary, ternary and quaternary mixtures of rare gases. *Molecular Physics*, 12(6) :pp. 569–579, January 1967.
- [196] B. Maury. Direct Simulations of 2d Fluid-Particle Flows in Biperiodic Domains. *Journal of Computational Physics*, 156(2) :325–351, December 1999.
- [197] N. Maw, J.R. Barber, and J.N. Fawcett. The oblique impact of elastic spheres. *Wear*, 38(1) :pp. 101–114, June 1976.
- [198] Martin R. Maxey. Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow. *Physics of Fluids*, 26(4) :883–889, 1983.
- [199] Sean McNamara and W. R. Young. Inelastic collapse and clumping in a one-dimensional granular medium. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 4(3) :496–504, March 1992.
- [200] Simon Mendez, Etienne Gibaud, and Franck Nicoud. An unstructured solver for simulations of deformable particles in flows at arbitrary Reynolds numbers. *Journal of Computational Physics*, 256 :pp. 465–483, 2014.
- [201] Cindy Merlin. *Simulation numérique de la combustion turbulente : méthode de frontières immergées pour les écoulements compressibles, application à la combustion en aval d’une cavité*. PhD thesis, Institut National des Sciences Appliquées de Rouen, 2011.

- [202] Michele Miccio. Fluidized bed combustion of gaseous fuels : fom lab-scale investigations beyond a scientific curiosity.
- [203] E. E. Michaelides. Review-The Transient Equation of Motion for Particles, Bubbles, and Droplets. *Journal of Fluids Engineering*, 119(2) :233, 1997.
- [204] H. S. Mickley and D. F. Fairbanks. Mechanism of heat transfer to fluidized beds. *AIChE Journal*, 1(3) :374–384, September 1955.
- [205] Alan A. Mills, S. Day, and S. Parkes. Mechanics of the sandglass. *European Journal of Physics*, 17(3) :97, 1996.
- [206] R. D. Mindlin and H. Deresiewicz. Elastic spheres in contact under varying oblique forces. In *ASME J. Appl. Mech.*, number 20, pages 327–344, 1953.
- [207] Brian Mirtich. V-clip : Fast and robust polyhedral Collision Detection. *Submitted to ACM Transactions on Graphics*, 1997.
- [208] Mohammad Mohseni and Bernhard Peters. An attempt to study conversion of biomass spheres in a stove using a DEM-CFD approach. volume 120, pages 657–664, INFUB - 11th European Conference on Industrial Furnaces and Boilers, 2017. Energy Procedia.
- [209] Guilhem Mollon. *Mécanique des matériaux granulaires*, 2015.
- [210] H. Moritomi, T. Iwase, and T. Chiba. A comprehensive interpretation of solid layer inversion in liquid fluidised beds. *Chemical Engineering Science*, 37(12) :1751–1757, 1982.
- [211] Vincent Moureau, Pascale Domingo, and Luc Vervisch. Design of a massively parallel CFD code for complex geometries. *Comptes Rendus Mécanique*, 339(2-3) :pp. 141–148, February 2011.
- [212] Matthias Müller and Hans J. Herrmann. DSMC - A Stochastic Algorithm for Granular Matter. In H. J. Herrmann, J.-P. Hovi, and S. Luding, editors, *Physics of Dry Granular Media*, pages 413–420. Springer Netherlands, Dordrecht, 1998.
- [213] Matthias Müller, Stefan Luding, and Hans J. Herrmann. Simulations of vibrated granular media in 2D and 3D. In *Workshop on Friction, Arching, Contact Dynamics : HLRZ, Forschungszentrum Jülich, Germany, October 28-30, 1996 / ed. by D. E. Wolf ; P. Grassberger*, pages 335–340. World Scientific, 1997.
- [214] A. Munjiza and K. R. F. Andrews. NBS contact detection algorithm for bodies of similar size. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 43(1) :131–149, September 1998.
- [215] Bruce Roy Munson, Donald F. Young, and T. H. Okiishi. *Fundamentals of fluid mechanics*. Wiley, New York, 4th ed edition, 2002.
- [216] M. Nakagawa, S. A. Altobelli, A. Caprihan, E. Fukushima, and E. K. Jeong. Non-invasive measurements of granular flows by magnetic resonance imaging. *Experiments in Fluids*, 16(1) :54–60, November 1993.
- [217] D. A. Nield and A. Bejan. *Convection in Porous Media*. Springer-verlag edition, 1992.
- [218] Hamid Reza Norouzi, Reza Zarghami, Rahmat Sotudeh-Gharebagh, and Navid Mostoufi. *Coupled CFD-DEM modeling : formulation, implementation and application to multiphase flows*. Wiley, Chichester, West Sussex, first edition edition, 2016.
- [219] Michael Oevermann, Stephan Gerber, and Frank Behrendt. Euler-Lagrange/DEM simulation of wood gasification in a bubbling fluidized bed reactor. *Particuology*, 7(4) :307–316, August 2009.
- [220] I. P. Omelyan, I. M. Mryglod, and R. Folk. Optimized Verlet-like algorithms for molecular dynamics simulations. *Physical Review E*, 65(5), May 2002.
- [221] C. W. Oseen. *Hydrodynamik*. Akademische verlagsgesellschaft leipzig edition, 1927.
- [222] A. özel, A. Sarthou, Z. Zeren, P. Fede, O. Simonin, I. Ghouila, and J-L. Chamayou. Numerical Simulation of Liquid Injection into an Anisothermal Dense Fluidized Bed. In *8th International Conference on Multiphase Flow, ICMF 2013, Jeju, South Korea*, 2013.
- [223] William Pao, Fakhruldin M. Hashim, Aklilu Tesfamichael Baheta, and Sook Harn Seng. Hydrate Formation in Two Phase Flow in Pipe. *Applied Mechanics and Materials*, 819 :295–299, January 2016.

- [224] D.J. Parker, A.E. Dijkstra, T.W. Martin, and J.P.K. Seville. Positron emission particle tracking studies of spherical particle motion in rotating drums. *Chemical Engineering Science*, 52(13) :2011–2022, July 1997.
- [225] Computational particle fluid dynamics. Barracuda virtual reactor. <https://cpfd-software.com/barracuda-vr-solutions/barracuda-vr>, 2018.
- [226] Amit V. Patil, E.A.J.F. Peters, Vinayak S. Sutkar, N.G. Deen, and J.A.M. Kuipers. A study of heat transfer in fluidized beds using an integrated DIA/PIV/IR technique. *Chemical Engineering Journal*, 259 :90–106, January 2015.
- [227] A.V. Patil, E.A.J.F. Peters, and J.A.M. Kuipers. Comparison of CFD-DEM heat transfer simulations with infrared/visual measurements. *Chemical Engineering Journal*, 277 :388–401, October 2015.
- [228] Oldouz Payan. *Detailed modelling of fluid-particle interaction in sediment transport with applications in rivers*. PhD Thesis, University of Leeds, 2015.
- [229] F. Pellegrini and J. Roman. SCOTCH : A Software Package for Static Mapping by Dual Recursive Bipartitioning of Process and Architecture Graphs. In *Proceedings of HPCN'96*, pages 493–498, Bruxelles, Belgique, 1996.
- [230] John H. Perry. Chemical engineers' handbook. *Journal of Chemical Education*, 27(9) :533, September 1950.
- [231] Charles S. Peskin and Beth Feller Printz. Improved Volume Conservation in the Computation of Flows with Immersed Elastic Boundaries. *Journal of Computational Physics*, 105(1) :33–46, March 1993.
- [232] John F. Peters, Raju Kala, and Robert S. Maier. A hierarchical search algorithm for discrete element method of greatly differing particle sizes. *Engineering Computations*, 26(6) :621–634, August 2009.
- [233] Charles D. Pierce and Parviz Moin. Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion. *Journal of Fluid Mechanics*, 504 :pp. 73–97, April 2004.
- [234] P. Pizette, N. Govender, D. N. Wilke, and N.-E. Abriak. New advances in large scale industrial DEM modeling towards energy efficient processes. In *23ème Congrès Français de Mécanique*, Lille, France, 2017.
- [235] Pascaline Pré, M. Hemati, and B Marchand. Study of natural gas combustion in fluidized beds : modelling and experimental validation. *Chemical Engineering Science*, 53(16) :2871–2883.
- [236] Pascaline Pré-Goubelle. *Contribution à l'étude expérimentale et à la modélisation de la combustion du gaz naturel en réacteur à lit fluidisé*. PhD Thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse-INPT, 1997.
- [237] Darko Radenkovic and Olivier Simonin. Stochastic modelling of three-dimensional particle rebound from isotropic rough wall surface. *International Journal of Multiphase Flow*, July 2018.
- [238] M. Rahman, W. Cheng, and R. Samtaney. Large-eddy simulation of charged particle flows to model sandstorms. In *APS Meeting Abstracts*, November 2016.
- [239] W. E. Ranz and W. R. Marshall. Evaporation from drops, part i and ii. *Chemical Engineering Progress*, 48 :141–146, 173–180, 1952.
- [240] E. Ranzi, M. Dente, A. Goldaniga, G. Bozzano, and T. Faravelli. Lumping procedures in detailed kinetic modeling of gasification, pyrolysis, partial oxidation and combustion of hydrocarbon mixtures. *Progress in Energy and Combustion Science*, 27(1) :99–139, January 2001.
- [241] Shouryya Ray, Tobias Kempe, and Jochen Fröhlich. Efficient modelling of particle collisions using a non-linear viscoelastic contact force. *International Journal of Multiphase Flow*, 76 :101–110, November 2015.
- [242] L. Reh. Verbrennung in der Wirbelschicht. *Chemie Ingenieur Technik - CIT*, 40(11) :509–515, June 1968.
- [243] Bing Ren, Wenqi Zhong, Yu Chen, Xi Chen, Baosheng Jin, Zhulin Yuan, and Yong Lu. CFD-DEM simulation of spouting of corn-shaped particles. *Particuology*, 10(5) :pp. 562–572, October 2012.
- [244] E.M. Reyna and S.R. Stewart. Case History of the Removal of a Hydrate Plug Formed During Deep Water Well Testing. In *SPE/IADC Drilling Conference*, Amsterdam, Netherlands, 2001. Society of Petroleum Engineers.

- [245] O. Reynolds, A.W. Brightmore, and W.H. Moorby. *Papers on Mechanical and Physical Subjects : 1881-1900*. Classic reprint series. The University Press, 1900.
- [246] J. F. Richardson and W. N. Zaki. Sedimentation and fluidisation : Part I. *Transactions of the American Institute of Chemical Engineers*, page 35, 1954.
- [247] Gerald H. Ristow. Simulating granular flow with molecular dynamics. *Journal de Physique I*, 2(5) :649–662, May 1992.
- [248] Degang Rong and Masayuki Horio. DEM simulation of char combustion in a fluidized bed. In *Second International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries*, CSIRO, Melbourne, Australie, 1999.
- [249] Tomas Rosén. *Angular dynamics of non-spherical particles in linear flows related to production of biobased materials*. PhD Thesis, KTH Royal Institute of Technology, 2016.
- [250] Martin Rüdüsüli, Tilman J. Schildhauer, Serge M.A. Biollaz, and J. Ruud van Ommen. Scale-up of bubbling fluidized bed reactors-a review. *Powder Technology*, 217 :pp. 21–38, 2012.
- [251] Byron Rupp, Marcus Bursik, Laercio Namikawa, Amy Webb, Abani K. Patra, Ricardo Saucedo, José Luis Macías, and Chris Renschler. Computational modeling of the 1991 block and ash flows at Colima Volcano, México. In *Special Paper 402 : Neogene-Quaternary Continental Margin Volcanism : A perspective from México*, volume 402, pages 237–252. Geological Society of America, 2006.
- [252] B. Saberi, K. Shakourzadeh, and P. Guigon. Local Solid Concentration Measurement by Fibre Optics. *Chemical Engineering Research and Design*, 76(6) :748–752, September 1998.
- [253] P. G. Saffman. The lift on a small sphere in a slow shear flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 22(02) :385, June 1965.
- [254] Marc Sakiz. *Simulation numérique lagrangienne et modélisation eulérienne d'écoulements diphasiques gaz-particules en canal vertical*. PhD thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 1999.
- [255] Kasra Samiei. *Assessment of implicit and explicit algorithms in numerical simulation of granular matter*. PhD thesis, Université du Luxembourg, 2012.
- [256] S. C. Saxena and G. J. Vogel. The measurement of incipient fluidization velocities in a bed of coarse dolomite at temperature and pressure. *Transactions of the Institute of Chemical Engineers*, 55(3) :184–189, 1977.
- [257] K. P. Schade and T. Hädrich. Investigation of influence of wall roughness on particle-wall collision. In *3rd Int. Conference on Multiphase Flow, ICMF 1998*, Lyon, France, 1998.
- [258] J. Schäfer, S. Dippel, and D. E. Wolf. Force Schemes in Simulations of Granular Materials. *Journal de Physique I*, 6(1) :5–20, January 1996.
- [259] Jochen Schäfer and Dietrich E. Wolf. Bistability in simulated granular flow along corrugated walls. *Physical Review E*, 51(6) :6154–6157, June 1995.
- [260] Guillermo Gonzalo Schiava D'Albano, Tomas Lukas, Fang Su, Theodosios Korakianitis, and Ante Munjiza. Numerical comparison of some contact detection algorithms. *Engineering Computations*, 34(3) :832–851, May 2017.
- [261] L Schiller and Z Naumann. A Drag Coefficient Correlation. *VDI Zeitung*, 77 :318–320, 1935.
- [262] T.E.W. Schumann. Heat transfer : A liquid flowing through a porous prism. *Journal of the Franklin Institute*, 208(3) :405–416, September 1929.
- [263] Gordon Scott and Philip Richardson. The application of computational fluid dynamics in the food industry. *Trends in Food Science & Technology*, 8(4) :119–124, April 1997.
- [264] A.J. Sederman, M.L. Johns, A.S. Bramley, P. Alexander, and L.F. Gladden. Magnetic resonance imaging of liquid flow and pore structure within packed beds. *Chemical Engineering Science*, 52(14) :2239–2250, July 1997.

- [265] James A. Sethian. A fast marching level set method for monotonically advancing fronts. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 93(4) :pp. 1591–1595, 1996.
- [266] Khalil Shakourzadeh. Techniques de fluidisation. *Techniques de l'ingénieur Opérations unitaires : tri et traitement des liquides et des solides*, base documentaire : TIB446DUO.(ref. article : j3390), 2002.
- [267] Felix Sharipov and José L. Strapasson. *Ab initio* simulation of transport phenomena in rarefied gases. *Physical Review E*, 86(3), September 2012.
- [268] J. Sigüenza, Simon Mendez, Dominique Ambard, Frédéric Dubois, Franck Jourdan, Rémy Mozul, and Franck Nicoud. Validation of an immersed thick boundary method for simulating fluid-structure interactions of deformable membranes. *Journal of Computational Physics*, 322 :723–746, 2016.
- [269] S.P. Sit and J.R. Grace. Effect of bubble interaction on interphase mass transfer in gas fluidized beds. *Chemical Engineering Science*, 36(2) :327–335, 1981.
- [270] J. Smagorinsky. GENERAL CIRCULATION EXPERIMENTS WITH THE PRIMITIVE EQUATIONS : I. THE BASIC EXPERIMENT*. *Monthly Weather Review*, 91(3) :pp. 99–164, March 1963.
- [271] Gregory P. Smith, David M. Golden, Michael Frenklach, Nigel W. Moriarty, Boris Eiteneer, Mikhail Golden-berg, Thomas C. Bowman, Ronald K. Hanson, Soonho Song, and William C. Gardiner Jr. *Gri-mech 3.0*, 1999.
- [272] Quinn O. Snell, Armin R. Mikler, and John L. Gustafson. Netpipe : A network protocol independent performance evaluator. In *IASTED international conference on intelligent information management and systems*, volume 6, page 49. Washington, DC, (USA), 1996.
- [273] D.M. Snider. An Incompressible Three-Dimensional Multiphase Particle-in-Cell Model for Dense Particle Flows. *Journal of Computational Physics*, 170(2) :523–549, July 2001.
- [274] M. Sommerfeld. Modelling of particle-wall collisions in confined gas-particle flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 18(6) :905–926, November 1992.
- [275] M Sommerfeld and N Huber. Experimental analysis and modelling of particle-wall collisions. *International Journal of Multiphase Flow*, 25(6-7) :1457–1489, September 1999.
- [276] M. Sommerfeld and J. Kussin. Wall roughness effects on pneumatic conveying of spherical particles in a narrow horizontal channel. *Powder Technology*, 142(2-3) :180–192, April 2004.
- [277] Rahul Kumar Soni. Study of Discrete Element Method (DEM) : Methodologies and Applications in Mineral Engineering and Grinding Mill Simulation with MillSoft © 1997. 2012.
- [278] Matthias Sperl. Experiments on corn pressure in silo cells - translation and comment of Janssen's paper from 1895. *Granular Matter*, 8(2) :59–65, May 2006.
- [279] A Squelard. Solid rocket motor propulsion - Satellite design & engineering, 2017.
- [280] D. Stauffer, H.E. Stanley, and A. Lesne. *Cours de physique : De Newton à Mandelbrot*. Springer, 1999.
- [281] G. G. Stokes. On the Effect of the Internal Friction of Fluids on the Motion of Pendulums. *Transactions of the Cambridge Philosophical Society*, 9 :8, 1851.
- [282] Severin Strobl, Arno Formella, and Thorsten Pöschel. Exact calculation of the overlap volume of spheres and mesh elements. *Journal of Computational Physics*, 311 :158–172, April 2016.
- [283] Junwei Su, Zhaolin Gu, and Xiao Yun Xu. Discrete element simulation of particle flow in arbitrarily complex geometries. *Chemical Engineering Science*, 66(23) :pp. 6069–6088, December 2011.
- [284] B. Sun, S. Tenneti, and S. Subramaniam. Modeling average gas-solid heat transfer using particle-resolved direct numerical simulation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 86 :898–913, July 2015.
- [285] Rui Sun and Heng Xiao. Diffusion-based coarse graining in hybrid continuum-discrete solvers : Applications in CFD-DEM. *International Journal of Multiphase Flow*, 72 :pp. 233–247, June 2015.
- [286] Rui Sun and Heng Xiao. Diffusion-based coarse graining in hybrid continuum-discrete solvers : Theoretical formulation and a priori tests. *International Journal of Multiphase Flow*, 77 :142–157, December 2015.

- [287] Rui Sun and Heng Xiao. CFD-DEM simulations of current-induced dune formation and morphological evolution. *Advances in Water Resources*, 92 :228–239, June 2016.
- [288] Rui Sun and Heng Xiao. SediFoam : A general-purpose, open-source CFD-DEM solver for particle-laden flow with emphasis on sediment transport. *Computers & Geosciences*, 89 :207–219, April 2016.
- [289] Shivshankar Sundaram and Lance R. Collins. Numerical Considerations in Simulating a Turbulent Suspension of Finite-Volume Particles. *Journal of Computational Physics*, 124(2) :337–350, March 1996.
- [290] William C. Swope, Hans C. Andersen, Peter H. Berens, and Kent R. Wilson. A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules : Application to small water clusters. *The Journal of Chemical Physics*, 76(1) :637–649, January 1982.
- [291] M. Syamlal and Dimitri Gidaspow. Hydrodynamics of fluidization : Prediction of wall to bed heat transfer coefficients. *AIChE Journal*, 31(1) :127–135, January 1985.
- [292] Mandar V. Tabib, Stein T. Johansen, and Shahriar Amini. A 3d CFD-DEM Methodology for Simulating Industrial Scale Packed Bed Chemical Looping Combustion Reactors. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 52(34) :12041–12058, August 2013.
- [293] Yali Tang, E. A. J. F. Peters, and J. A. M. Kuipers. Direct numerical simulations of dynamic gas-solid suspensions. *AIChE Journal*, 62(6) :1958–1969, June 2016.
- [294] C. M. Tchen. *Mean value and correlation problems connected with the motion of small particles suspended in a turbulent fluid*. PhD thesis, Delft University of Technology, 1947.
- [295] Gérard Thomas and Olivier Bonnefoy. *Poudres et mélanges granulaires : modélisation, propriétés, procédés*. Ellipses, Paris, 2012.
- [296] Kiwing To, Pik-Yin Lai, and H. K. Pak. Jamming of Granular Flow in a Two-Dimensional Hopper. *Physical Review Letters*, 86(1) :71–74, January 2001.
- [297] Jürgen Tomas. *Mechanics of Particle Adhesion*. 2006.
- [298] Alok Tripathy, Subhankar Bagchi, S.K. Biswal, and B.C. Meikap. Study of particle hydrodynamics and misplacement in liquid-solid fluidized bed separator. *Chemical Engineering Research and Design*, 117 :520–532, January 2017.
- [299] Y. M. Tsirkunov and S. V. Panfilov. Modelling of particle-wall interaction in two-phase flows at moderate and high particle impact velocity. In *3rd Int. Conference on Multiphase Flow, ICMF 1998*, Lyon, France, 1998.
- [300] J.N. Tsitsiklis. Efficient algorithms for globally optimal trajectories. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 40(9) :pp. 1528–1538, September 1995.
- [301] Takuya Tsuji, Takuya Miyauchi, Satoshi Oh, and Toshitsugu Tanaka. Simultaneous Measurement of Particle Motion and Temperature in Two-Dimensional Fluidized Bed with Heat Transfer. *KONA Powder and Particle Journal*, 28 :167–179, 2010.
- [302] Y. Tsuji, T. Kawaguchi, and T. Tanaka. Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed. *Powder Technology*, 77(1) :79–87, October 1993.
- [303] Y. Tsuji, Y. Morikawa, T. Tanaka, N. Nakatsukasa, and M. Nakatani. Numerical simulation of gas-solid two-phase flow in a two-dimensional horizontal channel. *International Journal of Multiphase Flow*, 13(5) :671–684, September 1987.
- [304] H.J. Uananisa, C.W. Siyasiya, W.E. Stumpf, and M.J. Papo. The influence of thermomechanical processing on the surface quality of an AISI 436 ferritic stainless steel. *Journal of the Southern African Institute of Mining and Metallurgy*, pages 981–986, October 2015.
- [305] Maureen S. van Buijtenen, Matthias Börner, Niels G. Deen, Stefan Heinrich, Sergiy Antonyuk, and J.A.M. Kuipers. An experimental study of the effect of collision properties on spout fluidized bed dynamics. *Powder Technology*, 206(1-2) :139–148, January 2011.

- [306] M.A. van der Hoef, M. Ye, M. van Sint Annaland, A.T. Andrews, S. Sundaresan, and J.A.M. Kuipers. Multiscale Modeling of Gas-Fluidized Beds. In *Advances in Chemical Engineering*, volume 31, pages 65–149. Elsevier, 2006.
- [307] C. van Heerden, A. P. P. Nobel, and D. W. van Krevelen. Mechanism of Heat Transfer in Fluidized Beds. *Industrial & Engineering Chemistry*, 45(6) :1237–1242, June 1953.
- [308] Loup Verlet. Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules. *Physical Review*, 159(1) :98–103, July 1967.
- [309] F.R. Villatoro, J. Pérez, J.L.G. Santander, M.A. Borovsky, Yu.L. Ratis, E.A. Izzheurov, and P. Fernández de Córdoba. Perturbation analysis of the heat transfer in porous media with small thermal conductivity. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 374(1) :57–70, February 2011.
- [310] R. Volk, E. Calzavarini, G. Verhille, D. Lohse, N. Mordant, J.-F. Pinton, and F. Toschi. Acceleration of heavy and light particles in turbulence : Comparison between experiments and direct numerical simulations. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 237(14-17) :2084–2089, August 2008.
- [311] H. A. V. D. Vorst. Parallel iterative solution methods for linear systems arising from discretized pdes. *AGARD Special Course on Parallel Computing in CFD*, 1995.
- [312] D. Vortmeyer and R.J. Schaefer. Equivalence of one- and two-phase models for heat transfer processes in packed beds : one dimensional theory. *Chemical Engineering Science*, 29(2) :485–491, February 1974.
- [313] Anthony Wachs, Laurence Girolami, Guillaume Vinay, and Gilles Ferrer. Grains3d, a flexible DEM approach for particles of arbitrary convex shape-Part I : Numerical model and validations. *Powder Technology*, 224 :374–389, July 2012.
- [314] Takao Wakabayashi. Photo-elastic Method for Determination of Stress in Powdered Mass. *Journal of the Physical Society of Japan*, 5(5) :383–385, September 1950.
- [315] O. R. Walton. Granular solids flow project. quarterly report, Lawrence Livermore National Laboratory, 1988.
- [316] O. R. Walton and R. L. Braun. Stress calculations for assemblies of inelastic spheres in uniform shear. *Acta Mechanica*, 63(1-4) :73–86, November 1986.
- [317] Li Wang, Ping Wu, and Xuezhong Ni. Combustion of liquid petroleum gas in a fluidized bed furnace with a jetting-mixing distributor. *Powder Technology*, 170(2) :86–93, December 2006.
- [318] Carl Wassgren. DEM Modeling : Lecture 06 Introduction to Soft-Particle DEM Normal Contact Force Models. Part I.
- [319] Carl Wassgren. DEM Modeling : Lecture 09 - Tangential Contact Force Models.
- [320] C. Y. Wen and Y. H. Yu. A generalized method for predicting the minimum fluidization velocity. *AIChE Journal*, 12(3) :pp. 610–612, May 1966.
- [321] C. Y. Wen and Y. H. Yu. Mechanics of Fluidization. *The Chemical Engineering Progress Symposium Series*, 162 :100–111, 1966.
- [322] Frank M. White. *Viscous fluid flow*. McGraw-Hill, New York, 1974.
- [323] J.R. Williams and R. O'Connor. A linear complexity intersection algorithm for discrete element simulation of arbitrary geometries. *Engineering Computations*, 12(2) :pp. 185–201, February 1995.
- [324] Sebastian Wolff and Christian Bucher. Distance fields on unstructured grids : Stable interpolation, assumed gradients, collision detection and gap function. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 259 :77–92, June 2013.
- [325] Changning Wu, Yi Cheng, Yulong Ding, and Yong Jin. CFD-DEM simulation of gas-solid reacting flows in fluid catalytic cracking (FCC) process. *Chemical Engineering Science*, 65(1) :542–549, January 2010.
- [326] B.H. Xu and A.B. Yu. Numerical simulation of the gas-solid flow in a fluidized bed by combining discrete particle method with computational fluid dynamics. *Chemical Engineering Science*, 52(16) :2785–2809, August 1997.

- [327] Jing Xu and J.-X. Zhu. Visualization of particle aggregation and effects of particle properties on cluster characteristics in a CFB riser. *Chemical Engineering Journal*, 168(1) :376–389, March 2011.
- [328] Sheng Xu and Z. Jane Wang. An immersed interface method for simulating the interaction of a fluid with moving boundaries. *Journal of Computational Physics*, 216(2) :454–493, August 2006.
- [329] Yupeng Xu, Jordan Musser, Tingwen Li, Balaji Gopalan, Rupen Panday, Jonathan Tucker, Gregory Breault, Mary Ann Clarke, and William A. Rogers. Numerical Simulation and Experimental Study of the Gas-Solid Flow Behavior Inside a Full-Loop Circulating Fluidized Bed : Evaluation of Different Drag Models. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 57(2) :740–750, January 2018.
- [330] K. Yamane, M. Nakagawa, S. A. Altobelli, T. Tanaka, and Y. Tsuji. Steady particulate flows in a horizontal rotating cylinder. *Physics of Fluids*, 10(6) :1419–1427, June 1998.
- [331] Kenji Yamane, Toshiharu Sato, Toshitsugu Tanaka, and Yutaka Tsuji. Computer Simulation of Tablet Motion in Coating Drum. *Pharmaceutical Research*, 12(9) :1264–1268, September 1995.
- [332] Jian Ye, Jing-Xiong Chen, Xiao-Qing Chen, and He-Ping Tao. Modeling and Rendering of Real-time Large-scale Granular Flow Scene on GPU. *Procedia Environmental Sciences*, 10 :1035–1045, 2011.
- [333] Jielin Yu, Chenguang Zhang, Chunliang Wu, and K Nandakumar. Understanding Particle-Particle and Fluid-Particle Interactions, 2018.
- [334] Kuizheng Yu. *Analytical modeling of transient heat transfer coupled with fluid flow in heavy oil reservoirs during thermal recovery processes*. PhD thesis, University of Regina, Regina, Saskatchewan, November 2014.
- [335] Yu Zhang, Jiecheng Yang, Dayou Liu, Xiaolin Wei, and Lixin Yu. Sand storms : CFD analysis of Reynolds stress and collision stress of particles near sand bed. *Particuology*, 8(4) :325–331, August 2010.
- [336] Lihao Zhao and Helge I. Andersson. On particle spin in two-way coupled turbulent channel flow simulations. *Physics of Fluids*, 23(9), September 2011.
- [337] Haosheng Zhou, Gilles Flamant, and Daniel Gauthier. DEM-LES of coal combustion in a bubbling fluidized bed. Part I : gas-particle turbulent flow structure. *Chemical Engineering Science*, 59(20) :4193–4203, October 2004.
- [338] Z.Y. Zhou, A.B. Yu, and P. Zulli. A new computational method for studying heat transfer in fluid bed reactors. *Powder Technology*, 197(1-2) :102–110, January 2010.
- [339] H.P. Zhu, Z.Y. Zhou, R.Y. Yang, and A.B. Yu. Discrete particle simulation of particulate systems : Theoretical developments. *Chemical Engineering Science*, 62(13) :3378–3396, July 2007.
- [340] Witold Zukowski. An acoustic method of studying sequential explosions during gas combustion in bubbling fluidized beds. *Combustion and Flame*, 125(3) :1075–1082, May 2001.