



**HAL**  
open science

# Modélisation stochastique du dépôt et du réentrâinement de particules dans un écoulement turbulent

Mathieu Guingo

► **To cite this version:**

Mathieu Guingo. Modélisation stochastique du dépôt et du réentrâinement de particules dans un écoulement turbulent. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Université Nancy 1 - Henri Poincaré, 2008. Français. NNT: . tel-03758007

**HAL Id: tel-03758007**

**<https://theses.hal.science/tel-03758007v1>**

Submitted on 22 Aug 2022

**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.

U.F.R ESSTIN

École Doctorale EMMA (Énergétique, Mécanique et Matériaux)

Département de formation doctorale : Mécanique et Énergétique

Thèse présentée pour l'obtention du titre de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ HENRI POINCARÉ – NANCY I

en Mécanique et Énergétique

par

**Mathieu Guingo**

---

# Modélisation stochastique du dépôt et du réentraînement de particules dans un écoulement turbulent

---

Soutenue le 20 Juin 2008 à l'ESSTIN

devant un jury composé de :

Rapporteurs :	M. Jacek Pozorski	Docteur, Académie des Sciences de Pologne
	M. Richard J. Perkins	Professeur, École Centrale de Lyon
Examineurs :	M. Benoît Oesterlé	Professeur, UHP (Directeur de thèse)
	Mme Anne Tanière	Maître de conférences, UHP (Co-directrice de thèse)
	M. Mike Reeks	Professeur, University of Newcastle
Invité :	M. Jean-Pierre Minier	Tuteur industriel, EDF

Laboratoire d'Énergétique et de Mécanique Théorique et Appliquée (UMR 7563)

Groupe ESSTIN - 2, rue Jean Lamour, 54519 Vandoeuvre-lès-Nancy



# Remerciements

*Cette thèse s'est déroulée de 2005 à 2008 à EDF R&D, dans le groupe "Écoulements Industriels Réactifs et Polyphasiques" du département MFEE (Mécanique des Fluides, Énergie et Environnement) dans le cadre de la convention CIFRE n° 2005/677 de l'Agence Nationale pour la Recherche Technique, que je remercie pour son financement. En outre, au niveau académique, j'étais rattaché au LEMTA (Laboratoire d'Énergétique et de Mécanique Théorique et Appliquée), UMR 7563 - CNRS - INPL - UHP.*

Je tiens tout d'abord à remercier vivement M. Jean-Pierre Minier pour la qualité de son encadrement, sa disponibilité et la pertinence de ses conseils tout au long de ces trois années de thèse.

Je remercie les chefs successifs du groupe "Écoulements Industriels Réactifs et Polyphasiques", M. Jean-Daniel Mattei et Mme Isabelle Flour, pour m'avoir accueilli dans leur groupe et pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail. Pour les mêmes raisons, merci également à M. Hervé Cordier et Mme Anne Jaubertie, responsables successifs du projet MOFPHET-C.

Je remercie Mme Anne Tanière et M. Benoît Oesterlé pour avoir accepté d'assumer la direction académique de cette thèse, et pour leurs questions qui ont permis de mettre mon travail à l'épreuve. Merci à M. Boris Arcen pour ses remarques intéressantes et ses calculs DNS.

Un grand merci à messieurs Richard J. Perkins et Jacek Pozorski, pour avoir accepté d'être les rapporteurs de ce travail, et à M. Mike Reeks, pour avoir accepté de faire partie du jury de cette thèse.

Enfin, merci à l'ensemble des membres du groupe "Écoulements Industriels Réactifs et Polyphasiques" pour leur soutien et leur bonne humeur communicative.



# Résumé

Ce travail de thèse consiste en la formulation, l'implémentation et le test de nouveaux modèles pour simuler le dépôt et la resuspension de particules dans un écoulement turbulent dans le cadre des méthodes Lagrangiennes stochastiques. Dans la première partie, un nouveau modèle pour calculer le taux de dépôt est proposé : il est basé sur une description 1D de la vitesse de l'écoulement vu par une particule dans la couche limite turbulente, et simule explicitement les interactions entre les particules et certaines structures cohérentes de proche paroi. Le modèle est d'abord validé en vérifiant que les statistiques importantes de l'écoulement sont bien retrouvées avec des particules fluides, puis est appliqué avec des particules solides pour calculer le taux de dépôt. Un bon accord avec les expériences disponibles est alors obtenu. La seconde partie de la thèse est consacrée à la modélisation de la remise en suspension de particules. Le modèle que nous avons développé met en relief le rôle joué par la rugosité de surface : pour calculer les forces d'adhésion, une représentation stochastique à deux échelles de la distribution des aspérités de surfaces est proposée, et le parcours d'une particule sur la paroi est modélisé ; la remise en suspension étant alors éventuellement provoquée par un choc avec une aspérité. Les résultats du modèle sont en accord satisfaisant avec les données expérimentales.

# Abstract

The work carried out in this Ph.D thesis concerns the development, implementation and test of new models aiming at simulating particle deposition and resuspension in turbulent flows, in the framework of stochastic Lagrangian methods. In the first part, a new model to calculate particle deposition is proposed: it is based on a 1D description of the velocity of the flow seen by a particle in the turbulent boundary layer, and explicitly simulates the interactions between particles and near-wall coherent structures. The model is first validated with fluid particles to check if important statistics concerning the flow are retrieved, and then applied with inertial particles to compute the deposition rate. Good agreement with available experimental data is obtained. The second part of this work is devoted to the modeling of particle resuspension. The model that we developed stresses the role played by surface roughness: to calculate the adhesion force, a two-scale stochastic representation of the distribution of surface asperities is proposed, and the motion of the particle on the wall is modeled. Resuspension is ultimately caused by particle rocking on an asperity. Results from the model are in satisfactory agreement with experimental data.



# Table des matières

<b>Résumé</b>	<b>v</b>
<b>Nomenclature</b>	<b>xi</b>
<b>I Contexte et choix d'une approche adaptée</b>	<b>1</b>
I.1 Le dépôt-réentraînement de particules . . . . .	1
I.1.1 Une problématique industrielle et environnementale . . . . .	1
I.1.2 Un phénomène complexe et multi-facette . . . . .	5
I.2 La modélisation des écoulements multiphasiques . . . . .	8
I.2.1 Choix d'une approche de modélisation . . . . .	8
I.2.2 Le Modèle de Langevin Standard . . . . .	9
I.3 Une modélisation par paliers successifs . . . . .	11
<b>II Modélisation stochastique du dépôt de particules</b>	<b>13</b>
II.1 Étude bibliographique . . . . .	14
II.1.1 Études expérimentales . . . . .	15
II.1.2 Modèles de dépôt existants . . . . .	18
II.1.3 Résultats issus du Modèle de Langevin Standard . . . . .	19
II.2 Principaux mécanismes du dépôt de particules . . . . .	21
II.2.1 Les structures cohérentes de proche paroi . . . . .	21
II.2.1.1 Classification et identification . . . . .	22
II.2.1.2 Étude des simulations numériques directes . . . . .	24
II.2.2 La sous-couche visqueuse . . . . .	25
II.2.3 Conclusion pour les mécanismes de dépôt turbulent de particules . . . . .	26
II.3 Un nouveau modèle 1D en proche paroi . . . . .	26
II.3.1 Caractéristiques principales du modèle . . . . .	27
II.3.2 Démarche de modélisation suivie . . . . .	30
II.3.3 Un modèle 1D à deux zones . . . . .	31
II.3.3.1 La zone externe : un processus à deux niveaux . . . . .	32
II.3.3.1.1 Introduction du processus de saut $S(t)$ . . . . .	32
II.3.3.1.2 Modélisation des différentes phases . . . . .	33
II.3.3.1.3 Propriétés statistiques de la modélisation . . . . .	35
II.3.3.2 La zone interne : un processus de diffusion . . . . .	41



II.3.3.2.1	Modélisation par processus de diffusion . . . . .	41
II.3.3.2.2	Étude statistique . . . . .	41
II.3.3.2.3	Modélisation du mouvement Brownien . . . . .	42
II.3.3.3	Traitement de l'interface entre les deux zones . . . . .	43
II.3.3.3.1	Contraintes de modélisation . . . . .	43
II.3.3.3.2	Étude théorique . . . . .	43
II.3.3.3.3	Implémentation numérique . . . . .	46
II.3.3.4	Choix de la valeur des paramètres . . . . .	48
II.4	Résultats numériques . . . . .	48
II.4.1	Validation des schémas numériques . . . . .	49
II.4.1.1	Schémas numériques utilisés . . . . .	49
II.4.1.2	Résultats issus des programmes-tests . . . . .	49
II.4.1.2.1	Cas de la zone externe . . . . .	50
II.4.1.2.2	Cas de la zone interne . . . . .	54
II.4.2	Résultats obtenus avec Code_Saturne . . . . .	57
II.4.2.1	Validation avec des particules fluides . . . . .	57
II.4.2.2	Application avec des particules solides . . . . .	61
II.4.2.2.1	Concentration moyenne des particules solides . . . . .	61
II.4.2.2.2	Calcul du taux de dépôt . . . . .	61
II.4.2.2.3	Étude du temps de résidence avant dépôt . . . . .	64
II.5	Bilan concernant le dépôt de particules . . . . .	67
II.5.1	Récapitulatif du travail effectué . . . . .	67
II.5.2	Limites actuelles du modèle et perspectives de développement . . . . .	68
<b>III</b>	<b>Modélisation du réentraînement de particules</b>	<b>71</b>
III.1	Étude bibliographique . . . . .	72
III.1.1	Le réentraînement de particules . . . . .	72
III.1.1.1	Études expérimentales . . . . .	73
III.1.1.2	Principaux modèles existants de remise en suspension . . . . .	74
III.1.1.2.1	Modèles quasi-statiques . . . . .	74
III.1.1.2.2	Modèles dynamiques à "accumulation d'énergie" . . . . .	75
III.1.2	L'adhésion particules-paroi . . . . .	75
III.2	Scénario proposé de réentraînement de particules . . . . .	77
III.3	Un nouveau modèle stochastique de resuspension . . . . .	79
III.3.1	Modélisation de la paroi et de la force d'adhésion . . . . .	80
III.3.1.1	Description stochastique de la paroi . . . . .	80
III.3.1.2	Calcul de la force d'adhésion et des moments . . . . .	82
III.3.1.3	Raffinement de l'échelle fine de rugosité . . . . .	85
III.3.1.4	Résumé du modèle de forces d'adhésion . . . . .	86
III.3.2	Modélisation des efforts hydrodynamiques . . . . .	86
III.3.2.1	Forces hydrodynamiques retenues . . . . .	87
III.3.2.2	Modélisation de l'écoulement vu . . . . .	87

III.3.3	Modélisation du mouvement de la particule et de la resuspension . . . . .	89
III.4	Résultats numériques et discussion . . . . .	91
III.4.1	Procédure numérique . . . . .	91
III.4.2	Calcul de la force d'adhésion . . . . .	93
III.4.2.1	Tests préliminaires . . . . .	93
III.4.2.2	Comparaison aux expériences . . . . .	95
III.4.3	Démarrage des particules sur une paroi presque lisse . . . . .	97
III.4.4	Remise en suspension . . . . .	99
III.4.4.1	Comparaison avec les expériences de Reeks et Hall . . . . .	100
III.4.4.2	Étude de sensibilité aux paramètres . . . . .	102
III.5	Conclusion pour l'étude du réentraînement de particules . . . . .	106
III.5.1	Récapitulatif du travail effectué . . . . .	106
III.5.2	Limites actuelles du modèle et perspectives de développement . . . . .	106
<b>IV</b>	<b>Conclusion générale et perspectives</b>	<b>109</b>
IV.1	Synthèse de l'étude du dépôt-réentraînement . . . . .	109
IV.2	L'agglomération de particules . . . . .	110
IV.2.1	Conditions de l'adhésion particule-particule . . . . .	111
IV.2.2	Principaux mécanismes d'agglomération . . . . .	112
IV.2.3	Approches de modélisation envisageables . . . . .	113
<b>Bibliographie</b>		<b>115</b>



# Nomenclature

## Lettres latines

<b>A</b>	Générateur infinitésimal d'un processus Markovien de saut [ $s^{-1}$ ]
<i>A</i>	Constante d'Hamaker [J]
$A_{12}$	Constante d'Hamaker effective entre un milieu 1 et un milieu 2 [J]
$A_p$	Aire de contact entre la particule et la paroi [ $m^2$ ]
$a_0$	Rayon de contact (théorie JKR) [m]
<i>C</i>	Concentration massique en particules dans l'écoulement [ $kg \cdot m^{-3}$ ]
$C_D$	Coefficient de traînée [sans dim.]
$d_p$	Diamètre de la particule [m]
$D_c$	Diamètre de la conduite [m]
<i>E</i>	Module d'Young [Pa]
$\mathcal{F}_{1 \rightarrow 2}$	Flux de particules depuis la zone 1 vers la zone 2 [ $m \cdot s^{-1}$ ]
$F_a$	Composante normale de la force d'adhésion [N]
$F_D$	Force de traînée [N]
$F_t$	Composante tangentielle de la force d'adhésion [N]
<i>f</i>	Facteur correctif de la force de traînée dans la direction longitudinale [sans dim.]
<i>g</i>	Facteur correctif de la force de traînée dans la direction normale [sans dim.]
$\mathcal{G}$	Réalisation d'une variable aléatoire suivant une loi Gaussienne
<i>I</i>	Moment d'inertie de la particule [ $kg \cdot m^2$ ]
<i>K</i>	Coefficient de diffusion [ $m \cdot s^{-3/2}$ ]
<i>k</i>	Énergie turbulente [ $J \cdot kg^{-1}$ ]
$k_b$	Constante de Boltzmann [ $J \cdot K^{-1}$ ]
$k_p$	Vitesse de dépôt [ $m \cdot s^{-1}$ ]
$L_{large}$	Distance moyenne entre deux aspérités de grande échelle [m]
<i>m</i>	Flux massique de dépôt [ $kg \cdot s^{-1} \cdot m^{-2}$ ]
$M_p$	Masse d'une particule [kg]
$\mathcal{M}_O(F_a)$	Moment de la force $F_a$ calculée au point O [N·m]
<b>M</b>	Matrice de transition d'un processus de saut
$\mathcal{P}$	Réalisation d'une variable aléatoire suivant une loi de Poisson
$r_{fine}$	Rayon d'une aspérité de petite échelle [m]
$r_p$	Rayon d'une particule [m]
<i>Re</i>	Nombre de Reynolds de l'écoulement [sans dim.]
$Re_\tau$	Nombre de Reynolds basé sur la vitesse de frottement [sans dim.]
$Re_p$	Nombre de Reynolds associé à la particule [sans dim.]

---

$R_{eff}$	Rayon de contact efficace [m]
$T$	Temps de relaxation (nouveau modèle de dépôt) [s]
$T_L$	Temps de corrélation Lagrangien [s]
$\mathcal{U}$	Réalisation d'une variable aléatoire suivant une loi uniforme
$U_{1/2}$	Vitesse nécessaire pour mettre en mouvement la moitié des particules [ $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ]
$\mathbf{U}_f$	Vitesse du fluide [ $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ]
$\mathbf{U}_p$	Vitesse de la particule [ $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ]
$\mathbf{U}_r$	Vitesse relative [ $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ]
$\mathbf{U}_s$	Vitesse du fluide vu par une particule [ $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ]
$u_\tau$	Vitesse de frottement pariétale [ $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ]
$V_{struc}$	Vitesse caractéristique d'un événement sweep ou éjection [ $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ]
$V_{pf}$	Composante normale à la paroi de la vitesse d'une particule fluide [ $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ]
$V_p$	Composante normale à la paroi de la vitesse de la particule [ $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ]
$u$	Fluctuation longitudinale de la vitesse du fluide [ $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ]
$v$	Fluctuation de la vitesse du fluide normale à la paroi [ $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ]
$z_0$	Distance de contact entre deux particules, ou une particule et une surface [m]

## Lettres grecques

$\delta_\nu$	Échelle de longueur visqueuse [m]
$\epsilon$	Taux de dissipation turbulent [ $\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}$ ]
$\gamma$	Énergie de surface [ $\text{J}\cdot\text{m}^{-2}$ ]
$\mu_s$	Coefficient de frottement statique [sans dim.]
$\mu_d$	Coefficient de frottement dynamique [sans dim.]
$\nu$	Coefficient de Poisson [sans dim.]
$\nu_f$	Viscosité cinématique du fluide [ $\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$ ]
$\Theta$	Température de l'écoulement [K]
$\rho_{fine}$	Densité des aspérités de petite échelle [ $\text{m}^{-2}$ ]
$\rho_f$	Masse volumique du fluide porteur [ $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ ]
$\rho_p$	Masse volumique de la particule [ $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ ]
$\sigma$	Écart-type d'une fonction densité de probabilité gaussienne
$\tau_d$	Durée moyenne de présence d'une particule dans une phase de diffusion [s]
$\tau_p$	Temps de relaxation de la particule [s]
$\tau_s$	Durée moyenne de présence d'une particule dans une structure cohérente [s]
$\omega$	Vitesse angulaire de la particule [ $\text{rad}\cdot\text{s}^{-1}$ ]

## Indices et exposants

+	Normalisé par les unités de paroi
$\tau$	Valeur à la paroi
int	Relatif à la zone interne du nouveau modèle de dépôt
interf	Relatif à l'interface entre la zone interne et la zone externe
ext	Relatif à la zone externe de la couche limite
x	Relatif à la direction longitudinale de l'écoulement
y	Relatif à la direction normale à la paroi



# Chapitre I

## Contexte et choix d'une approche adaptée

### I.1 Le dépôt-réentraînement de particules

Ce travail de thèse vise à proposer et implémenter des nouveaux modèles afin de simuler les processus de dépôt et de remise en suspension de particules par un écoulement turbulent. Dans un premier temps, nous allons souligner les motivations sur lesquelles repose ce travail en mettant en évidence l'importance industrielle de ces phénomènes par différents exemples. Puis, les différents aspects du dépôt-réentraînement sont présentés, afin de mettre en relief la complexité du phénomène et les difficultés rencontrées dans sa modélisation. Ceci nous oriente alors vers le choix d'une approche de modélisation adaptée décrite dans la section suivante ; et vers une démarche de modélisation progressive par étape présentée à la fin de cette introduction.

#### I.1.1 Une problématique industrielle et environnementale

Pour se convaincre de l'importance des phénomènes de dépôt-réentraînement de particules dans un contexte industriel ou environnemental, il suffit de citer quelques applications dans lesquelles ces processus peuvent jouer un rôle prépondérant.

Une première illustration frappante peut être trouvée dans l'étude des problèmes de santé humaine dus à la pollution. En effet, dans le cadre d'une pollution aérosolée, il peut être essentiel de connaître l'endroit de l'organisme où une particule inhalée va se déposer suivant sa taille, pour déterminer le caractère nocif des conséquences de cette inhalation. Par exemple, des particules inhalées de taille comprise entre cinq et trente microns vont avoir tendance à se déposer à l'intérieur du nez ou de la gorge, et donc être assez facilement expulsées, alors que les particules de diamètre inférieur au micron se déposent plutôt dans la zone des alvéoles, à l'intérieur des poumons. L'inhalation de particules de cette taille peut donc entraîner des conséquences plus importantes sur la santé.



Dans un tout autre domaine qui présente un intérêt particulier pour notre étude, le dépôt de particules joue un rôle critique dans le bon fonctionnement d'une centrale électrique nucléaire. Une centrale de type REP (Réacteur à Eau Pressurisée) repose en effet sur une architecture comportant trois circuits hydrauliques (primaire, secondaire, et de refroidissement), qui échangent des flux de chaleur entre eux pour assurer la production d'électricité en bout de chaîne. Une partie de cette structure, correspondant aux composants situés dans l'enceinte de confinement, est représentée sur la figure I.1.

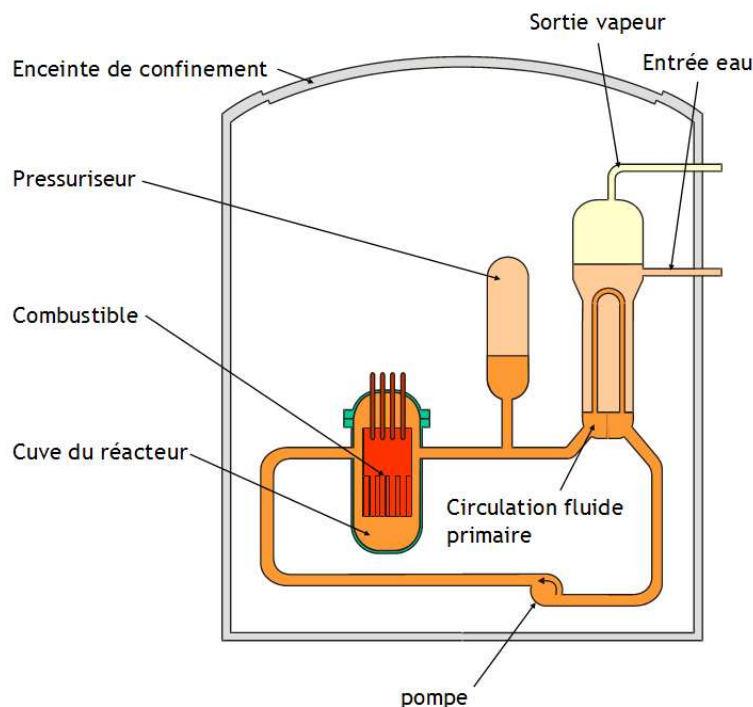


FIG. I.1: Schéma du circuit primaire et d'une partie du circuit secondaire d'une centrale nucléaire de type REP (source IRSN)

Le circuit primaire et le circuit secondaire interagissent au niveau d'un composant important nommé générateur de vapeur (GV), qui, comme son nom l'indique, vise à obtenir la vapeur nécessaire pour actionner les turbines reliées aux alternateurs produisant finalement l'électricité. Cette vapeur s'obtient en vaporisant le fluide du circuit secondaire en le chauffant par contact avec les conduites dans lesquelles circule le fluide chaud ( $300^{\circ}\text{C}$ ) à haute pression du circuit primaire. Dans le générateur de vapeur, pour augmenter la surface d'échange, le fluide caloporteur du circuit primaire circule dans un grand nombre de tubes (de 3 000 à 5 000), relativement fins (2 cm de diamètre), disposés en U renversé, autour desquels circule le fluide à chauffer. Un schéma de générateur de vapeur est fourni sur la figure I.2.

Pour maintenir les tubes et atténuer les vibrations dues à l'écoulement, des plaques per-

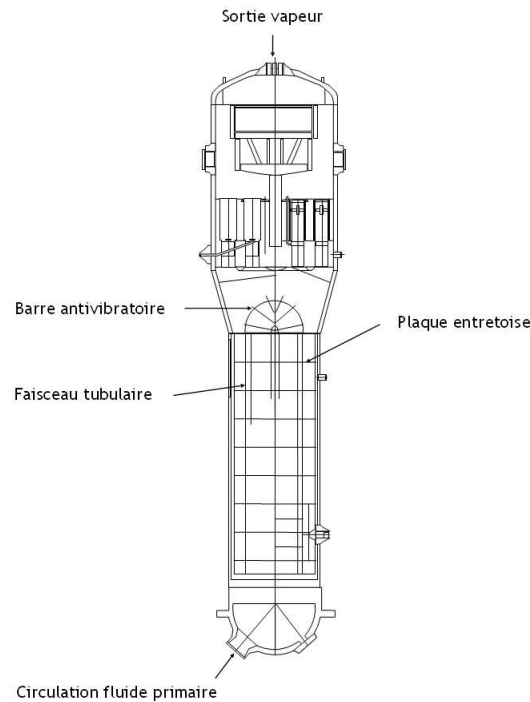


FIG. I.2: Schéma d'un générateur de vapeur d'une centrale nucléaire de type REP (source IRSN)

cées, nommées plaques entretoises, sont utilisées. Cependant, on observe depuis quelques années une formation de dépôt à l'intérieur des orifices des plaques entretoise, à l'endroit où passent à la fois un tube du circuit primaire et le fluide du circuit secondaire. Ces dépôts sont formés de produits de corrosion (oxydes métalliques), et peuvent avoir un impact non négligeable sur le fonctionnement de la centrale : la présence de ces dépôts va en effet progressivement réduire le diamètre des orifices, et ainsi accélérer l'écoulement du fluide du circuit secondaire. Cette augmentation de la vitesse peut provoquer des vibrations inopportunes de certains tubes, et mener ainsi à la création de fissures par phénomène de fatigue des composants. À leur tour, ces fissures sont susceptibles d'entraîner des fuites du fluide du circuit primaire. Outre cette fatigue vibratoire des tubes du circuit primaire, le dépôt de particules modifie le comportement thermohydraulique du fluide du circuit secondaire et augmente les efforts qui s'exercent sur les plaques entretoises. Ce phénomène de bouchage progressif de l'orifice, qui est, comme on peut le constater, très gênant pour le fonctionnement optimal de la centrale, est désigné sous le nom de colmatage. Sur la figure I.3 est représentée cette formation de dépôt au niveau des orifices des plaques entretoises.

Le phénomène de dépôt de particules peut également être observé sur d'autres organes d'une centrale nucléaire de type REP. Parmi ceux-ci, les crayons combustibles peuvent également être siège de dépôts qui peuvent entraîner une gêne, voire une limite de l'exploitation de la centrale en raison d'une mauvaise répartition du flux de neutrons. Ce phénomène est désigné sous l'acronyme AOA (Axial Offset Anomaly), et fait également l'objet d'un grand

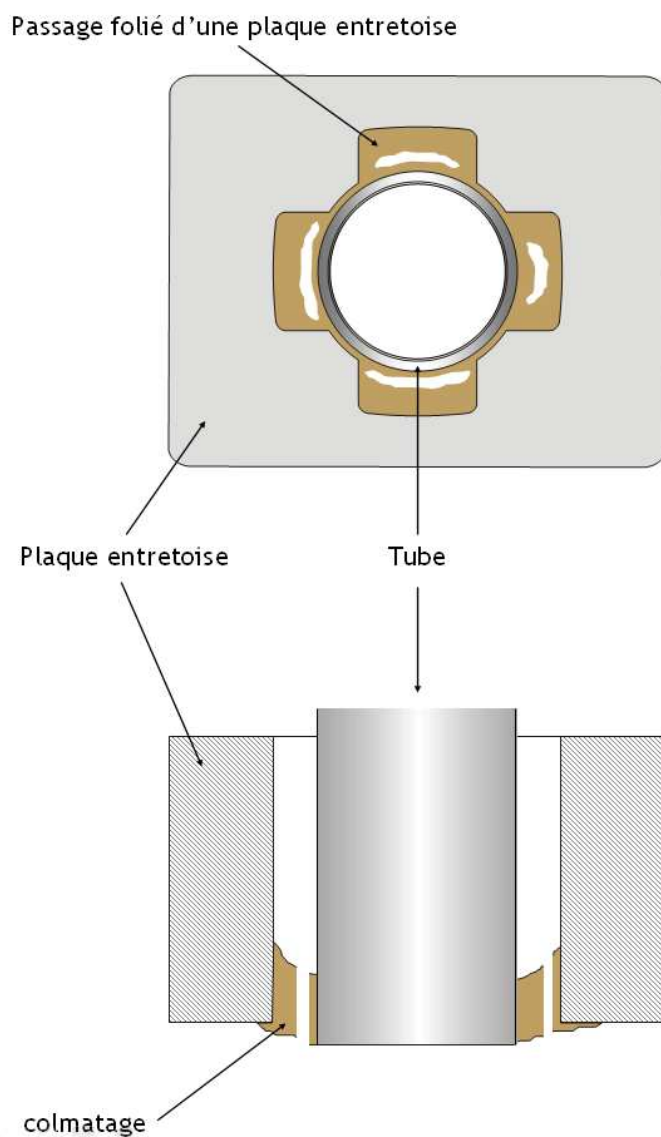


FIG. I.3: Schéma de la formation de dépôt au niveau d'un orifice d'une plaque entretoise (source IRSN)

nombre d'études.

Afin de s'assurer de la bonne marche d'une centrale nucléaire, il est donc crucial de maîtriser autant que possible la formation des dépôts sur certaines parties critiques. Cependant, le contrôle de ce phénomène est rendu difficile par le nombre important de paramètres dont il dépend, et de la connaissance parfois délicate de ces paramètres. C'est pourquoi, à EDF R&D, le projet MOFPHET-C (Modélisation Fine des PHÉnomènes de Thermohydraulique-Chimie) a été lancé avec pour objectif une meilleure compréhension et une meilleure prévision des phénomènes de dépôt-réentrainement dans les circuits hydrauliques des centrales nucléaires. Ce travail de thèse constitue l'une des parties de ce projet.

### I.1.2 Un phénomène complexe et multi-facette

Dans un grand nombre d'applications, le phénomène complet impliquant le dépôt et le réentrainement de particules est désigné sous le terme "encrassement". Toutefois, cette dénomination peut paraître ambiguë au sens où elle recouvre un ensemble de sous-phénomènes plus élémentaires très différents, dont la somme constitue le phénomène total. En outre, l'importance des propriétés hydrodynamiques et physico-chimiques du système qui interviennent dans le processus d'encrassement est souvent principalement visible sur un seul de ces mécanismes élémentaires. C'est pourquoi, dans un objectif de modélisation et de clarification du vocabulaire utilisé dans ce travail, il est intéressant d'essayer d'identifier les processus élémentaires qui sont en jeu, et de déterminer les facteurs principaux qui peuvent les influencer. Ainsi, une décomposition du phénomène complet en quatre sous-phénomènes peut être proposée ici :

Dans cette description, le premier mécanisme (au sens le plus amont) est le processus de dépôt "pur" de la particule : il revient à étudier les conditions dans lesquelles une particule plongée dans un écoulement est transportée jusqu'à la paroi et s'y dépose. Ici, la problématique principale se présente sous deux facettes : d'une part, l'étude des interactions entre la particule et la turbulence de l'écoulement qui régit l'aspect hydrodynamique de ce mécanisme. Comme nous le verrons au chapitre II, l'inertie de la particule est l'un des facteurs prépondérants qui interviennent dans le transport de la particule jusqu'à la paroi. D'autre part, une fois que la particule est entrée en contact avec la paroi, l'étude des forces physico-chimiques présentes à l'interface entre la particule et la paroi détermine si elles sont suffisantes pour maintenir la particule sur la surface. De ces deux aspects, l'étude du transport hydrodynamique peut être considérée comme prioritaire : c'est en effet l'élément limitant d'un modèle de dépôt de particules, puisque si le transport hydrodynamique n'est pas calculé correctement, un modèle de forces d'adhésion entre particule et paroi devient inutile, quelle que soit sa précision. En tant que première étape, il est donc essentiel de modéliser de façon précise le transport hydrodynamique des particules si on a l'ambition de modéliser le phénomène entier d'encrassement.

Une fois que la particule est déposée, elle peut suivre deux comportements différents : si

les forces d'adhésion sont suffisamment intenses, la particule n'est pas remise en suspension par les forces hydrodynamiques qui continuent de s'exercer sur elle par le biais de l'écoulement et reste en contact avec la paroi. Au contraire, si les forces d'adhésion sont trop faibles, la particule a la possibilité de quitter la paroi et donc d'être réentraînée par l'écoulement. On peut donc observer que dans le processus de remise en suspension des particules déposées, les forces d'adhésion jouent un rôle critique. Suivant la nature du système particule-milieu-paroi, elles peuvent être de plusieurs natures : Coulombiennes si les particules ou la paroi sont chargées, de van der Waals dans tous les cas, etc. Elles sont également influencées par un certain nombre de facteurs, telle la rugosité de la paroi. Ainsi, alors que la problématique essentielle du dépôt "pur" de particule est de nature hydrodynamique, on constate que la remise en suspension exige une étude fine et précise des phénomènes physico-chimiques entre la paroi et les particules déposées.

Les deux premiers processus que nous avons décrits jusqu'à maintenant présentent le point commun de ne pas faire intervenir les interactions entre les particules. Cependant, si la concentration en particules dans l'écoulement est suffisamment importante, il n'est pas possible de négliger ces interactions : en effet, si les propriétés physico-chimiques du milieu dans lequel sont plongées les particules sont adéquates, les particules qui entrent en contact les unes avec les autres dans l'écoulement vont adhérer entre elles pour former des agglomérats, c'est-à-dire des macro-particules formées de plusieurs particules. Ces agglomérats présentent alors des propriétés hydrodynamiques différentes des particules simples, puisque (si on se restreint au cas d'agglomérats composés de particule de même type) leur inertie est plus importante : ils ont donc tendance à se déposer plus facilement, modifiant ainsi largement le taux de dépôt observé en l'absence d'agglomérats. Il est toutefois possible que les propriétés chimiques du milieu empêchent la formation de ces agglomérats. Dans le cas d'une concentration importante en particules, il est donc nécessaire de bien connaître les propriétés physico-chimiques du milieu pour déterminer dans quelle mesure les agglomérats vont se former, et donc pour calculer le taux de déposition des particules de façon correcte.

Jusqu'à maintenant, nous considérons un système composé de particules plongées dans un écoulement, susceptibles de se déposer sur les parois, d'être réentraînées, et, si la concentration est suffisante, d'interagir entre elles pour former des macro-particules. Toutefois, en supposant que le processus de réentraînement des particules n'est pas assez efficace (dû par exemple, à des forces d'adhésion très importantes entre particules et paroi) et en supposant également que les propriétés du milieu permettent la formation d'agglomérats de particules, la formation progressive de dépôt va finir par influencer l'écoulement de façon non négligeable. Typiquement, dans le cas d'un écoulement dans une conduite, les dépôts vont éventuellement réduire la section de la conduite, et par conservation du débit, l'écoulement va être accéléré. La forme géométrique de ces dépôts a donc son importance : qualitativement, moins ils seront étalés sur la paroi, plus la section du conduit sera rapidement réduite (voir figure I.7). L'influence de la géométrie du dépôt sur l'écoulement est désignée sous le nom de colmatage.

Ces quatre mécanismes élémentaires (dépôt, réentraînement, agglomération, colmatage) constituent donc le phénomène total d'encrassement. Ils sont représentés respectivement sur les figures I.4, I.5, I.6 et I.7.

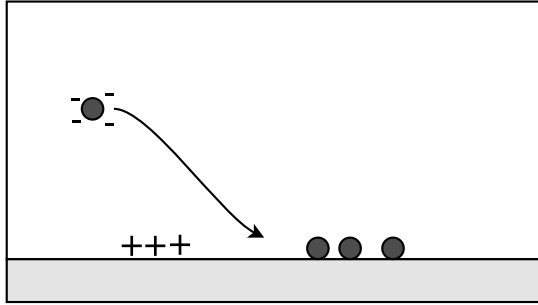


FIG. I.4: Le dépôt de particules

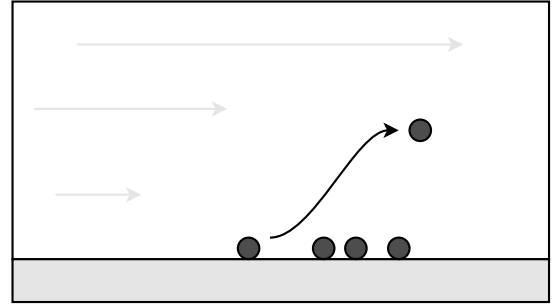


FIG. I.5: Le réentraînement de particules

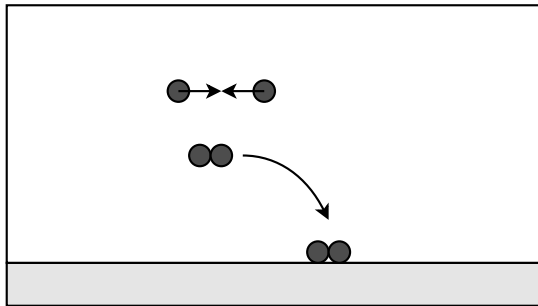


FIG. I.6: L'agglomération de particules

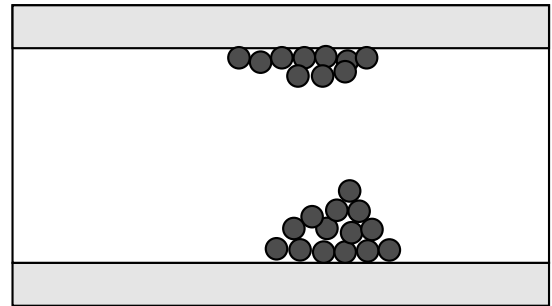


FIG. I.7: Le colmatage

Au vu des phénomènes élémentaires qui le composent, le processus d'encrassement s'articule donc autour de deux aspects principaux :

- D'une part, une partie hydrodynamique, qui consiste en l'étude des interactions entre les particules et l'écoulement. Elle revient à étudier les conditions dans lesquelles une particule va entrer en contact avec la paroi, en considérant que sa trajectoire est influencée principalement par des forces d'origine hydrodynamique, comme la force de traînée.
- D'autre part, un aspect qu'on pourrait qualifier de physico-chimique, spécialement important lorsqu'on étudie l'interaction des particules avec les parois, et les interactions particule-particule. Cet aspect étudie plus spécifiquement les forces d'adhésion (et de répulsion) entre les différents partenaires.

## I.2 La modélisation des écoulements multiphasiques

Les deux parties du phénomène d'encrassement identifiées dans la section précédente relèvent donc de deux domaines assez différents, mais fournissent au modélisateur des contraintes communes au niveau du choix de la méthode de modélisation :

- *la dispersion des particules en taille (polydispersion) doit être traitée sans approximation.* En effet, concernant la partie hydrodynamique, l'inertie de la particule influence fortement son comportement dans un écoulement turbulent. De façon générale, plus la particule est inerte, moins sa trajectoire est influencée par la turbulence de l'écoulement. En ce qui concerne les interactions avec la paroi, les interactions avec les différentes échelles de la rugosité de la paroi sont également très dépendantes de la taille de la particule.
- *les interactions locales doivent pouvoir être modélisées avec une très bonne précision.* En particulier, suivant l'état de surface local de la paroi, le comportement des particules peut être très différent. De même, comme nous le verrons dans le chapitre II, les interactions locales des particules avec les structures turbulentes de proche paroi ont une grande influence sur le transport des particules jusqu'à la paroi.

Nous sommes ainsi en présence d'un phénomène complexe, qui met en jeu des interactions fines et instantanées avec les différents milieux (écoulement turbulent et paroi) et fortement influencé par la dispersion en taille des particules.

### I.2.1 Choix d'une approche de modélisation

Pour modéliser des écoulements multiphasiques, il est possible de suivre deux approches différentes, nommées approche Eulerienne (ou Euler/Euler) et approche Lagrangienne (ou Euler/Lagrange). Dans les méthodes Euleriennes, les deux phases (fluide porteur et phase dispersée) sont considérées comme des milieux qui s'interpénètrent, et les équations sont résolues sur les grandeurs moyennes de l'écoulement (vitesse moyenne, énergie cinétique, concentration en particules...). Le niveau de modélisation de cette approche est donc assez macroscopique puisqu'elle porte directement sur des propriétés moyennes de l'écoulement. Par la nature même de ces méthodes, il est en conséquence délicat de traiter sans approximation la dispersion en taille des particules et les interactions fines des particules avec la turbulence ou la paroi.

Les méthodes stochastiques Lagrangiennes consistent à suivre un grand nombre de particules individuelles. Dans cette approche, les modèles sont directement écrits au niveau de chaque particule, ce qui permet un niveau de détail très fin, notamment par rapport aux méthodes Euleriennes. Les statistiques intéressantes sont ensuite déduites par simulation Monte-Carlo, qui permet d'approcher les fonction densités de probabilité des variables du problème. La dispersion en taille des particules est ainsi traitée sans approximation, et la modélisation

d'interactions locales avec la paroi et la turbulence de l'écoulement est rendue possible. Au vu des caractéristiques du problème que nous devons modéliser, nous nous plaçons donc dans le cadre des méthodes Lagrangiennes, qui répondent naturellement à nos besoins et à nos objectifs de modélisation.

### I.2.2 Le Modèle de Langevin Standard

Une approche Lagrangienne de modélisation des écoulements gaz-particules a été développée par Minier et Peirano (2001). Elle est, dans la suite de notre travail, désignée sous le nom de Modèle de Langevin Standard. Nous n'allons pas ici reproduire l'ensemble de la démarche de construction de ce modèle (qui se trouve détaillée dans Minier et Peirano (2001)), mais plutôt en présenter les grandes lignes et les caractéristiques les plus importantes.

Dans ce modèle, la particule est représentée par un vecteur d'état comportant sa position  $\mathbf{x}_p$ , sa vitesse  $\mathbf{U}_p$  et la vitesse de l'écoulement vu par la particule notée  $\mathbf{U}_s$ . C'est sur cette dernière variable que porte la modélisation proprement dite. En effet, pour reconstituer le champ fluide instantané vu par la particule à partir des informations disponibles, une équation stochastique de type Langevin est utilisée. Des particules plongées dans un écoulement turbulent subissent des forces hydrodynamiques de différentes origines (Maxey et Riley, 1983; Gatignol, 1983; Minier, 1988). Toutefois, dans le cas de particules suffisamment denses, la force hydrodynamique prépondérante s'exerçant sur les particules est la force de traînée. Les équations qui gouvernent le mouvement des particules dans ce modèle sont dans ce cas les suivantes :

$$dx_{p,i} = U_{p,i} dt \quad (\text{I.1})$$

$$dU_{p,i} = \frac{U_{s,i} - U_{p,i}}{\tau_p} dt \quad (\text{I.2})$$

$$\begin{aligned} dU_{s,i} = & -\frac{1}{\rho_f} \frac{\partial \langle P \rangle}{\partial x_i} dt + (\langle U_{p,j} \rangle - \langle U_{f,j} \rangle) \frac{\partial \langle U_{f,i} \rangle}{\partial x_j} dt \\ & - \frac{U_{s,i} - \langle U_{f,i} \rangle}{T_{L,i}^*} dt \\ & + \sqrt{\langle \epsilon \rangle} \left( C_0 b_i \tilde{k}/k + \frac{2}{3} (b_i \tilde{k}/k - 1) \right) dW_i \end{aligned} \quad (\text{I.3})$$

Dans ce système,  $dW_i$  représente l'incrément du processus de Wiener,  $\tau_p$  est le temps de relaxation nécessaire à la particule pour que sa vitesse s'adapte à celle de l'écoulement et représente la force de traînée. Il est donc défini par la formule suivante :

$$\tau_p = \frac{\rho_p}{\rho_f} \frac{4d_p}{3C_D |\mathbf{U}_s - \mathbf{U}_p|} \quad (\text{I.4})$$

$\rho_p$  étant la masse volumique de la particule,  $\rho_f$  la masse volumique du fluide,  $d_p$  le diamètre



de la particule et  $C_D$  le coefficient de traînée calculé par la corrélation empirique :

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) & \text{si } Re_p < 1000 \\ 0.44 & \text{si } Re_p > 1000 \end{cases}$$

où  $Re_p$  désigne le nombre de Reynolds de la particule égale à  $U_r d_p / \nu_f$ ,  $\nu_f$  désignant la viscosité cinématique du fluide. De plus, en suivant l'analyse de Csanady (1963), où  $T_E$  et  $T_L$  sont les temps de corrélation Eulerien et Lagrangien, leur rapport  $\beta = T_L / T_E$  est pris comme constant,  $\langle \mathbf{U}_r \rangle = \langle \mathbf{U}_p \rangle - \langle \mathbf{U}_s \rangle$ , les échelles de temps  $T_{L,i}^*$  de l'écoulement vu par les particules sont définies par les relations suivantes :

$$T_{L,1}^* = \frac{T_L}{\sqrt{1 + \beta^2 \frac{|\langle \mathbf{U}_r \rangle|^2}{2k/3}}} \quad (\text{I.5})$$

$$T_{L,2}^* = T_{L,3}^* = \frac{T_L}{\sqrt{1 + 4\beta^2 \frac{|\langle \mathbf{U}_r \rangle|^2}{2k/3}}} \quad (\text{I.6})$$

$T_L$  étant égal à :

$$T_L = \frac{1}{\frac{1}{2} + \frac{3}{4} C_0} \frac{k}{\langle \epsilon \rangle} \quad (\text{I.7})$$

avec  $C_0$  une constante donnée par la théorie de Kolmogorov. Dans un but de simplicité, les équations précédentes ont été écrites en supposant que la vitesse moyenne relative  $\langle \mathbf{U}_r \rangle$  est alignée avec le premier axe du référentiel. Un modèle général complet est détaillé dans Minier et Peirano (2001). L'énergie cinétique turbulente modifiée qui vise à prendre en compte l'anisotropie de l'écoulement est définie par :

$$\tilde{k} = \frac{3}{2} \frac{\sum_{i=1}^3 b_i \langle u_{f,i}^2 \rangle}{\sum_{i=1}^3 b_i} \quad \text{avec} \quad b_i = \frac{T_L}{T_{L,i}^*} \quad (\text{I.8})$$

Il peut être intéressant de souligner quelques caractéristiques de ce modèle utiles pour notre travail. D'abord, il est possible d'utiliser ce modèle avec des particules possédant une inertie arbitraire : en particulier, il est possible de choisir des particules d'inertie aussi faible que l'on veut. Lorsque l'on fait tendre le temps de relaxation  $\tau_p$  vers 0, on qualifie les particules obtenues de "particules fluides", puisque, par définition, elles s'adaptent instantanément aux fluctuations de la vitesse du fluide vu. En utilisant le modèle avec des particules fluides, on retrouve le modèle conçu par Pope (1994, 2000) et désigné dans la littérature sous le nom de Simplified Langevin Model (SLM). Ainsi, moyenniser l'équation I.3 donne la forme haut-Reynolds de l'équation moyennée de conservation de la quantité de mouvement. L'effet de la viscosité, qui peut être important dans le problème du dépôt de particules puisque les

particules se meuvent dans le voisinage de la paroi, n'est donc pas directement modélisé.

Ce modèle a été implémenté dans Code\_Saturne, le logiciel de calcul de mécanique des fluides numérique développé par EDF R&D, et a été validé sur plusieurs configurations (Minier et al., 2004). Il sert de base au début de notre travail sur la modélisation hydrodynamique du dépôt de particules.

### I.3 Une modélisation par paliers successifs

Nous avons précédemment mis en relief la complexité du phénomène d'encrassement et ses multiples aspects, hydrodynamiques et physico-chimiques, ainsi que le choix d'une méthode de modélisation adaptée, l'approche Lagrangienne. Proposer directement un modèle d'encrassement complet paraît trop ambitieux : il a donc été décidé de diviser le processus complet en plusieurs sous-problèmes dont la somme donne le phénomène complet d'encrassement, suivant la décomposition présentée en section I.1.2. On rappelle que ces différents sous-problèmes sont les suivants :

- Le dépôt de particules. Dans un premier temps, les interactions particule-particule sont négligées, ainsi que l'influence retour sur l'écoulement des particules. Une particule qui entre en contact avec la paroi est considérée définitivement collectée : il n'y a donc pas de modélisation spécifique des forces d'adhésion. La modélisation porte dans ce cas sur les interactions entre les particules et la turbulence, elle est donc purement hydrodynamique.
- La remise en suspension de particules. Une fois que l'on dispose d'un modèle qui calcule efficacement le transfert des particules jusqu'à la paroi dans un écoulement turbulent, il semble judicieux de modéliser les conditions propices au réenvol des particules. À noter que dans ce cas, on considère toujours un régime suffisamment dilué pour traiter les particules indépendamment les unes des autres et négliger l'effet retour sur l'écoulement.
- L'agglomération de particules. Le point majeur et nouveau de cette étape par rapport au deux premières consiste en la prise en compte des interactions particule-particule, et aux conditions d'adhésion des particules entre elles pour former des agglomérats.
- Enfin, l'encrassement proprement dit, qui revient à prendre en compte les trois étapes précédentes et à simuler la formation géométrique du dépôt important pour l'effet retour du dépôt sur l'écoulement (phase de colmatage).

Le présent travail vise à proposer et tester des modèles traitant des deux premières étapes de ce programme, à savoir, les problèmes du dépôt et de remise en suspension des particules dans un écoulement turbulent, en considérant les particules de façon indépendante. Le dépôt

de particules est analysé et modélisé dans le chapitre II, alors que le réentraînement est l'objet de l'étude du chapitre III. Pour ces deux problèmes, des études de modélisation complètes sont proposées, depuis l'étude bibliographique relative aux travaux existants, la formulation de nouveaux modèles stochastiques, jusqu'à l'implémentation numérique et la comparaison avec les mesures expérimentales. Enfin, en guise de perspectives, nous proposons des ouvertures possibles vers l'avant-dernière étape du programme de modélisation, à savoir l'agglomération de particules.

## Chapitre II

# Modélisation stochastique du dépôt de particules

Ce chapitre est consacré à la présentation d'une nouvelle approche Lagrangienne stochastique dans le but de simuler le dépôt de particules dans un écoulement turbulent. À la lumière d'une étude bibliographique et des résultats du Modèle de Langevin Standard, nous proposons ici un modèle qui vise à incorporer les caractéristiques géométriques les plus importantes des structures cohérentes de proche paroi au sein d'une description statistique. Ce modèle est donc de nature hydrodynamique, et nous ne traitons pas dans cette partie des conditions spécifiques d'adhésion entre particules et paroi. Ce travail spécifique consacré au dépôt de particules a fait l'objet d'une publication dans le journal *Physics of Fluids* : "a stochastic model of coherent structures for particle deposition in turbulent flows", Mathieu Guingo et Jean-Pierre Minier (vol.20, 053303) (Guingo et Minier, 2008b) et d'une communication à l'International Conference on Multiphase Flow 2007 (Guingo et Minier, 2007).

Cette partie de la thèse s'organise comme suit : dans un premier temps, nous présentons une étude bibliographique de la problématique générale du dépôt de particules, en récapitulant les principaux résultats expérimentaux et en présentant différents modèles de dépôt turbulent de particules qui ont été proposés au fil des ans, ainsi que leur mécanismes sous-jacents. De plus, les résultats de calcul du taux de dépôt par le Modèle de Langevin Standard, issus d'une étude précédente, sont également présentés : ces simulations montrent principalement que le Modèle de Langevin Standard, à la fois sous sa forme basique et en lui adjoignant quelques améliorations spécifiques, ne parvient pas à calculer un taux de dépôt en accord avec les données expérimentales, spécialement au niveau des particules les moins inertes. Ceci laisse supposer qu'une partie clef de la dynamique des particules en proche paroi n'est pas capturée par le Modèle de Langevin Standard, et que d'autres approches sont envisageables pour obtenir un taux de dépôt en accord avec les expériences pour des particules d'inertie arbitraire.

Dans l'optique du développement d'une description plus détaillée des phénomènes ayant lieu dans la couche limite turbulente, les structures cohérentes de proche paroi sont étudiées en section II.2, et le rôle qu'elles jouent dans le transport des particules normal à la paroi

est souligné. En particulier, des simulations numériques directes récentes montrent une forte corrélation entre les flux de particules dans la direction normale à la paroi et les événements cohérents de type "sweep" et "éjection". L'étude de ces simulations tend à montrer que les interactions entre ce type de structures et les particules sont l'un des mécanismes prépondérants qui interviennent dans le processus de dépôt des particules. Nous essayons alors de sélectionner les caractéristiques principales de ces interactions dans un but de modélisation.

Basé sur ces observations et sur le choix des structures cohérentes à inclure dans la modélisation, un nouveau modèle Lagrangien stochastique est alors développé, et présenté dans la section suivante. Après une discussion sur les motivations sur lesquelles repose le modèle, ses principales caractéristiques sont étudiées en section II.3. Les résultats théoriques relatifs aux propriétés essentielles du modèle sont ensuite démontrés.

Enfin, le modèle ayant été implémenté numériquement, les résultats issus des simulations sont présentés et analysés. Dans un premier temps, des calculs ont été effectués à partir de programmes-tests dédiés, qui ont notamment permis la vérification des expressions théoriques obtenues dans la section précédente et la validation des méthodes numériques mises en jeu. Après ces calculs préliminaires, l'étape suivante a consisté en l'implémentation du nouveau modèle dans le module gaz-particules Lagrangien du code de simulation de thermohydraulique développé par EDF Code\_Saturne. Les résultats issus de Code\_Saturne peuvent être divisés en deux catégories : d'une part, les simulations impliquant des particules d'inertie quasiment nulle ont pour but le calcul des statistiques liées à l'écoulement lui-même (vitesse moyenne, énergie) dans l'optique de démontrer la capacité du modèle à se rapprocher de façon acceptable des caractéristiques connues de l'écoulement. D'autre part, et c'est l'objectif final du modèle, des calculs mettant en jeu des particules d'inertie arbitraire sont menés dans le but notamment d'obtenir la vitesse de dépôt en fonction de l'inertie des particules, statistique qui est ensuite comparée aux données expérimentales disponibles.

## II.1 Étude bibliographique

Du fait de l'importance à la fois industrielle et théorique du problème du dépôt turbulent de particules, il n'est pas surprenant que cette thématique soit l'objet d'un grand nombre d'études. Nous commençons donc ce chapitre par une revue de la littérature existant sur le sujet du dépôt de particules, aussi bien du point de vue expérimental que des différentes modélisations successivement proposées. Dans la plupart des travaux disponibles (incluant le nôtre), la caractéristique principale étudiée est la vitesse (ou taux) de déposition notée  $k_p$  et définie par :

$$k_p = \frac{m}{C} \quad (\text{II.1})$$

Avec  $m$  la masse de particules déposée par seconde et par unité de surface, et  $C$  la concentration moyenne en particules dans l'écoulement. La variable  $k_p$  mesure donc la tendance pour une classe de particules donnée à se déposer de façon plus ou moins importante dans un écoulement. Cette vitesse de déposition peut être normalisée par la vitesse de frottement  $u_\tau$ , et les résultats sont donc traditionnellement représentés relativement à la vitesse de déposition adimensionnée  $k_p^+ = k_p/u_\tau$ .

Un grand nombre d'études ont été consacrées à l'analyse de la dépendance du taux de déposition en fonction de différents paramètres, le plus significatif étant de loin l'inertie des particules. Cette inertie est définie par le temps de relaxation adimensionné  $\tau_p^+$ , qui mesure le temps caractéristique que met une particule plongée dans un écoulement pour s'adapter à une variation de la vitesse de l'écoulement qui l'entoure, dans le cas d'un écoulement de Stokes ( $Re_p \ll 1$ ). Il est donc donné par la formule :

$$\tau_p^+ = \frac{d_p^2 u_\tau^2 \rho_p}{18 \nu_f^2 \rho_f} \quad (\text{II.2})$$

où  $d_p$  est le diamètre de la particule,  $\nu_f$  la viscosité cinématique du fluide,  $\rho_p$  la masse volumique de la particule et  $\rho_f$  la masse volumique du fluide. Dans la suite de notre étude, un grand nombre de résultats ont trait à la fonction  $k_p^+(\tau_p^+)$ , et le but principal du modèle de dépôt développé est d'ailleurs de s'approcher au mieux de la vitesse de dépôt issue des mesures expérimentales.

### II.1.1 Études expérimentales

Entre environ 1960 et 1985 s'est tenue une importante campagne de mesures expérimentales menée par plusieurs équipes visant à étudier les caractéristiques du dépôt de particules dans un écoulement turbulent. Parmi celles-ci, l'expérience de Liu et Agarwal (1974) est fréquemment citée en tant que référence : lors de cette étude, en guise de particules, les auteurs utilisent des gouttelettes d'huile d'olive dont la taille peut être précisément contrôlée, dont l'inertie varie entre  $\tau_p^+ = 0.21$  et  $\tau_p^+ = 774$ . Ces gouttelettes sont injectées dans un écoulement turbulent établi en air, avec un nombre de Reynolds égal à 10 000 ou 50 000 selon les expériences, dans une conduite de longueur égale à 102 cm et de diamètre égal à 1.27 cm positionnée verticalement. Cette conduite est divisée en 10 sections dans la direction longitudinale. Après attente d'une certaine durée (allant de quinze à soixante minutes suivant l'inertie des particules étudiées), l'écoulement est arrêté et la quantité de particules déposées est mesurée section par section, ce qui permet aux auteurs d'en déduire le taux de dépôt adimensionné  $k_p^+$  dans chaque section à l'aide de la formule initialement développée par Semmel

(1968) :

$$k_p = \frac{Q}{\pi D_c L} \ln(1/P) \quad (\text{II.3})$$

où  $Q$  est le débit volumique,  $D_c$  est le diamètre de la conduite,  $L$  la longueur de la section considérée et  $P$  la proportion des particules déposées sur cette section. Les auteurs notent qu'étant donné la nature des particules utilisées pour l'expérience (des gouttelettes), le problème du rebond sur la paroi et du réentraînement est évité : les gouttelettes qui touchent la paroi sont définitivement collectées. Les résultats de ces expériences (pour  $Re = 10\,000$ ), présentés sur la figure II.1, consistent en une moyenne des vitesses de dépôt obtenues section par section, et montrent une forte augmentation de la vitesse de dépôt avec l'inertie des particules. Du reste, les auteurs montrent que les résultats obtenus en faisant varier le nombre de Reynolds de l'écoulement de 10 000 à 50 000 sont quasiment superposables.

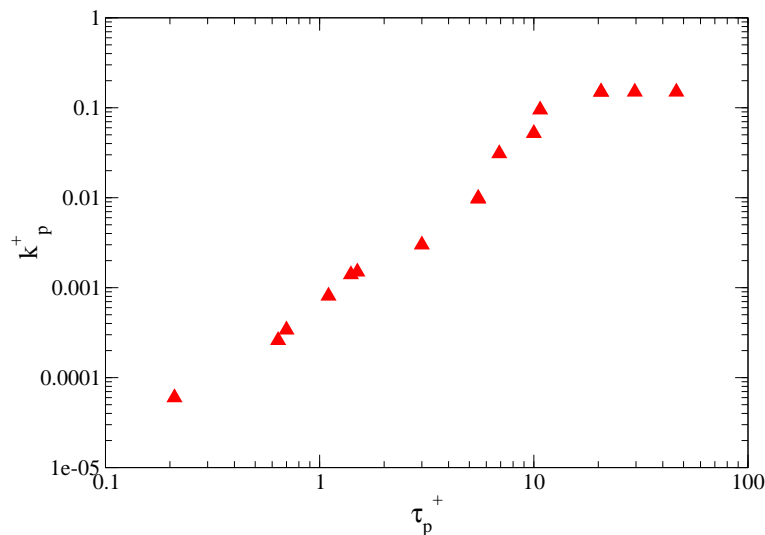


FIG. II.1: Résultats expérimentaux concernant la vitesse de dépôt de particules issus des expériences de Liu et Agarwal (1974) pour  $Re = 10\,000$ .

Outre l'expérience de Liu et Agarwal (1974), les résultats disponibles ont été synthétisés dans les articles de revue exhaustifs de McCoy et Hanratty (1975) et Papavergos et Hedley (1984). Comme caractéristique commune des expériences, on retrouve la nature de la phase porteuse (en air), et des nombres de Reynolds relativement modérés, allant de 3 000 à 50 000. Par contre, la nature des particules utilisés est très diverse puisque, en plus des gouttelettes utilisées par Liu et Agarwal (1974), les différents expérimentateurs ont mené leurs études avec des particules de verre, d'oxyde de zinc, de spores de lycopodium, voire des particules radioactives. La figure II.2 montre l'ensemble des résultats des différentes expériences portés sur un même graphe concernant la fonction  $k_p^+(\tau_p^+)$  issus de la revue de Papavergos et Hedley

(1984). Par la suite, on désigne la représentation de  $k_p^+(\tau_p^+)$  sous le nom de courbe de dépôt.

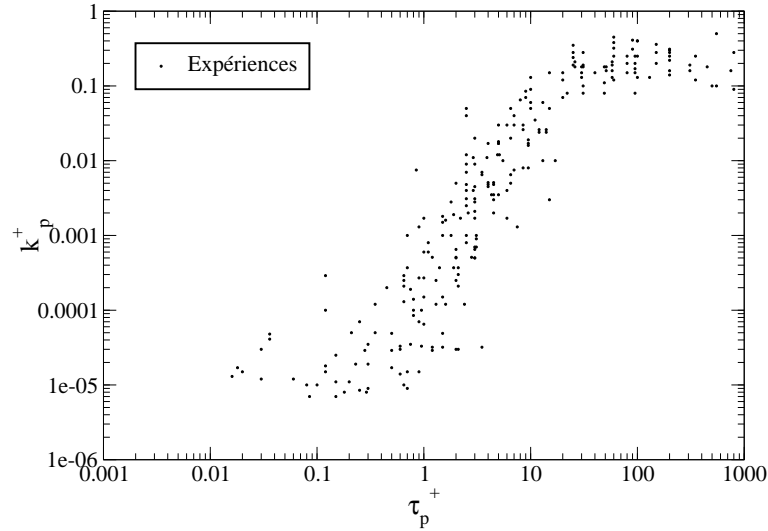


FIG. II.2: Synthèse par Papavergos et Hedley (1984) des résultats expérimentaux concernant la vitesse de dépôt de particules dans un écoulement turbulent dans une conduite verticale

Ces résultats mettent en relief une information claire : selon l'inertie de la particule, la courbe de la vitesse de déposition présente sur le graphe trois régions distinctes :

- Pour  $\tau_p^+ < 1$ , la vitesse de dépôt est faible (de l'ordre de  $10^{-5}$ ) et relativement constante. Dans l'expérience de Liu et Agarwal (1974), cette valeur de la vitesse correspond au dépôt de moins d'une particule sur mille injectées. Les données expérimentales se raréfient pour ces inerties, ceci s'expliquant par les difficultés rencontrées par les expérimentateurs pour étudier et produire des particules de taille en-deçà du micron de diamètre. Cette zone correspond à des particules d'inertie suffisamment faible pour que le mouvement Brownien des particules, dû à l'interaction avec les molécules du fluide, prenne de l'importance dans la propension des particules à s'agiter dans le voisinage immédiat de la paroi et donc éventuellement à se déposer.
- Entre  $\tau_p^+ > 1$  et  $\tau_p^+ < 20$ , le taux de déposition gagne plusieurs ordres de grandeurs, passant de  $10^{-5}$  à 0.1. Dans cette zone importante d'inertie intermédiaire, les particules interagissent fortement avec la turbulence de proche paroi, et basculent d'un régime de dépôt de diffusion (pour les inerties les plus faibles) à un régime de vol libre pour les particules les plus inertes où la turbulence de proche paroi joue un rôle de moins en moins significatif.
- Enfin, pour des particules très inertes ( $\tau_p^+ > 20$ ), la vitesse de dépôt est quasiment constante et de l'ordre de 0.1, valeur qui correspond dans l'expérience de Liu et Agarwal (1974) au dépôt de la moitié des particules injectées. À partir de cette inertie, on entre



dans un régime dit "ballistique" ou "de vol libre". Dans cette région, l'inertie des particules est assez élevée pour qu'elles ne soient quasiment plus influencées par la turbulence de proche paroi : la vitesse et la direction qu'elles ont acquises lors de leur séjour dans le coeur de l'écoulement est conservée jusqu'à la paroi, qu'elles rencontrent avec une vitesse d'impact importante.

Ainsi, une modélisation adéquate de dépôt de particules doit parvenir à retrouver ces différentes régions de la courbe de dépôt, qui correspondent à différents régimes de dépôt et différents comportements des particules dans l'écoulement.

### II.1.2 Modèles de dépôt existants

Dans la littérature, il existe une classe entière de modèles qui vise, à partir de différentes hypothèses, à proposer une expression analytique empirique de la vitesse de déposition  $k_p^+$  en fonction du temps de relaxation  $\tau_p^+$  des particules (voir, par exemple, les travaux de Beal (1970)). Cette approche est donc différente de celle que nous suivons dans ce travail, qui consiste d'abord à développer un modèle Lagrangien, puis à effectuer des simulations pour en déduire la vitesse de dépôt  $k_p^+$ . Il est néanmoins intéressant de présenter quelques-uns de ces modèles, notamment pour mettre en évidence les mécanismes sur lesquels ils s'appuient.

En particulier, le modèle le plus ancien de ce type a été proposé par Friedlander et Johnstone (1957), et a été baptisé "modèle de vol libre" (free-flight model). Il repose principalement sur l'hypothèse que dans la couche limite, les particules s'approchent de la paroi par diffusion turbulente jusqu'à une certaine distance de la paroi  $s^+$  baptisée "distance d'arrêt". Une fois ce point atteint, les particules sont considérées comme ayant pris suffisamment de vitesse pour parcourir la distance d'arrêt jusqu'à la paroi, et donc s'y déposer. De plus, les auteurs supposent que la vitesse de vol libre (c'est-à-dire la vitesse des particules au point  $y_p^+ = s^+$ ) est égale à  $0.9 \cdot u_\tau$ , et que le coefficient de diffusion turbulente des particules est égal au coefficient de diffusion turbulente de l'écoulement. Cependant, si les résultats de ce modèle sont en bon accord avec les données expérimentales pour des particules d'inertie moyenne ( $1 < \tau_p^+ < 20$ ), certains auteurs ont relevé que certaines hypothèses du modèle étaient difficiles à justifier, voire irréalistes, notamment la valeur jugée trop élevée de la vitesse du vol libre pour certaines classes de particules (Brooke et al., 1990, 1992).

En outre, un modèle qui mérite d'être présenté est celui développé par Cleaver et Yates (1975). À notre connaissance, ils sont les premiers à s'être basés sur l'hypothèse que les particules se déposent (ou non) à la suite d'interactions spécifiques avec des mouvements de fluide cohérents localisés dans la zone de proche paroi. En s'appuyant sur cette hypothèse, ils contruisent une expression analytique de la vitesse de dépôt en accord avec les données expérimentales disponibles. Ce modèle a été par la suite légèrement modifié par Fichman et al. (1988), qui ont implémenté en plus les effets d'une force de portance, et une représentation

semi-analytique du champ de vitesse de proche paroi. En anticipant légèrement sur la suite de l'exposé, nous pouvons d'ores et déjà évoquer la similitude des mécanismes entre le modèle de Cleaver et Yates (1975) et celui que nous avons développé dans ce travail ; les deux soulignant l'importance des structures cohérentes dans le processus de dépôt turbulent.

Différentes équipes ont également mené des simulations de dépôt de particules avec des modèles Lagrangiens de dispersion turbulente basés sur une approche dite "random-walk", ou marche aléatoire (Kallio et Reeks, 1989; Kröger et Drossinos, 2000; Matida et al., 2000). Cependant, même si ce type de modèle parvient à retrouver un taux de dépôt en accord acceptable avec les expériences, il ne permet pas sous sa forme la plus simple d'obtenir une concentration en particules d'inertie quasi-nulle uniforme dans l'écoulement (présence d'une forte accumulation en proche paroi).

Plus récemment, Tian et Ahmadi (2007) ont effectué une revue des modèles disponibles dans la littérature. Ils ont testé différentes formules empiriques, parmi lesquelles celle mise en point par Fan et Ahmadi (1993), qui inclut l'influence possible de la rugosité de surface, et différents modèles de sous-couche implémentés dans un code Lagrangien. L'une des conclusions de cette étude met en évidence l'importance d'une prise en compte correcte de l'anisotropie de l'écoulement au voisinage immédiat de la paroi, avec essentiellement un calcul précis de la variance des fluctuations normales à la paroi de la vitesse de l'écoulement.

### II.1.3 Résultats issus du Modèle de Langevin Standard

Des expériences documentées de dépôt turbulent existent donc dans la littérature. Disposant d'un modèle Lagrangien pour les écoulements gaz-particules déjà implémenté et validé sur plusieurs configurations (Minier et al., 2004), il a été décidé d'effectuer des calculs de dépôt avec ce modèle et de les comparer aux expériences. Cette étude, antérieure au présent travail, en a constitué l'une des motivations principales.

Le Modèle de Langevin Standard, dont les équations principales sont données dans le chapitre précédent, a donc été appliqué sur le cas-test standard de Liu et Agarwal (1974) dans le but de calculer le taux de déposition pour des particules de différentes inerties allant de  $\tau_p^+ = 0.15$  à  $\tau_p^+ = 440$ . Les méthodes numériques mises en jeu et les résultats obtenus ont été rapportés dans l'étude de Peirano et al. (2006).

La courbe de dépôt ainsi simulée est représentée sur la figure II.3. On peut observer que les résultats ne sont pas satisfaisants sur plusieurs points : le taux de dépôt calculé avec le Modèle de Langevin Standard est quasiment constant sur tout l'intervalle d'inertie considéré, et reste à un niveau très élevé ( $k_p^+ \approx 0.1$ ). La vitesse de dépôt calculée par ce modèle n'est donc pas en accord avec la tendance observée dans les études expérimentales, qui consiste en un accroissement de plusieurs ordres de grandeur sur l'intervalle d'inertie  $0.1 < \tau_p^+ < 20$ . Les

valeurs calculées sont acceptables au niveau des particules de temps de relaxation normalisé supérieur à 10, ce qui correspond aux inerties telles que les particules ne sont plus que très faiblement influencées par la turbulence de proche paroi. Il semble donc légitime de supposer que dans ce modèle, la modélisation de la turbulence de proche paroi est insuffisante pour un calcul correct du taux de dépôt pour les particules d'inertie moyenne et faible.

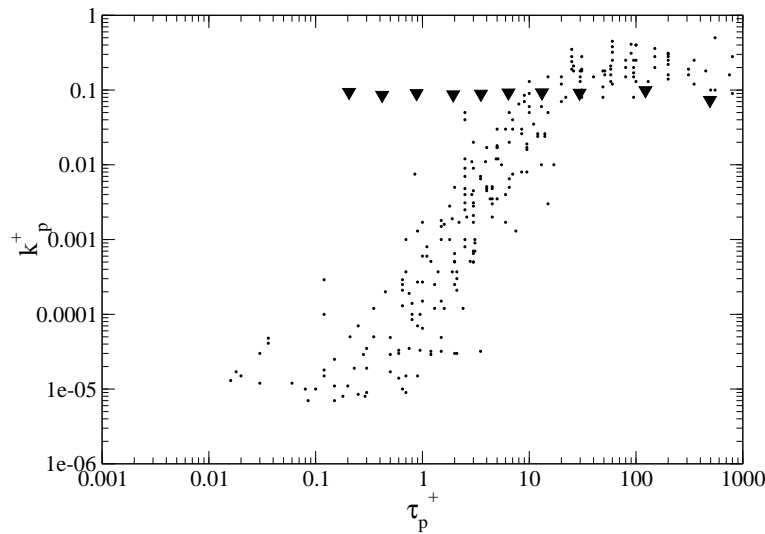


FIG. II.3: Vitesse de déposition en fonction de l'inertie des particules. (●) : résultats expérimentaux; (▼) : résultats issus du Modèle de Langevin Standard.

À la suite de ces calculs, une étude de sensibilité aux paramètres d'entrée a été menée pour tenter d'améliorer les résultats. En effet, des profils issus de simulations numériques directes concernant la vitesse moyenne du fluide  $\langle U_f \rangle$ , l'énergie cinétique turbulente  $k$  et le taux de dissipation moyen  $\langle \epsilon \rangle$  du modèle sont disponibles dans la littérature (Matida et al., 2000), et ont donc été utilisés directement en tant que paramètres d'entrée du modèle. Cependant, ces modifications n'ont pas permis d'améliorer les résultats de façon significative. En outre, des tests additionnels ont été menés, avec une version du Modèle de Langevin Standard légèrement modifiée en ajoutant des termes visant à modéliser l'effet de la viscosité, qui prend de l'importance au voisinage de la paroi (Chibbaro et al., 2004). Néanmoins, les résultats obtenus sont aussi trop légèrement améliorés pour être acceptables, bien que la tendance esquissée soit la bonne, avec une très légère diminution du taux de dépôt pour les particules d'inerties les plus faibles (voir figure II.4).

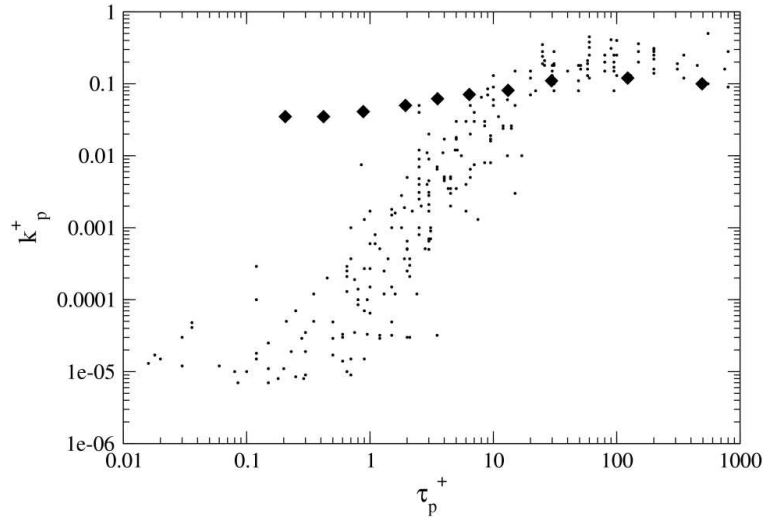


FIG. II.4: Vitesse de dépôt en fonction de l'inertie des particules. (●) : résultats expérimentaux ; (◆) : résultats issus du Modèle de Langevin Standard avec ajout de termes visqueux

## II.2 Principaux mécanismes du dépôt de particules

Les calculs menés avec différentes versions du Modèle de Langevin Standard tendent à prouver qu'un modèle de dépôt plus efficace doit reposer sur une représentation plus fine de la turbulence de proche paroi et des interactions avec les particules qui en découlent. De ce fait, cette partie du rapport est dédiée à l'identification et à l'étude des différents mécanismes qui régissent le dépôt de particules dans un écoulement turbulent. En particulier, les caractéristiques intéressantes des phénomènes regroupés sous le nom générique de "structures cohérentes de proche paroi" sont détaillés. À l'aide d'études expérimentales et de simulations numériques directes récentes, les interactions des particules avec certaines classes de ces événements cohérents de proche paroi sont ainsi mises en évidence.

### II.2.1 Les structures cohérentes de proche paroi

Il est difficile de fournir une définition à la fois concise et exhaustive des structures cohérentes de proche paroi. Dans son article de revue, Robinson (1991) propose de désigner par le terme structure cohérente "une région tridimensionnelle de l'écoulement dans laquelle au moins une variable fondamentale de l'écoulement (composante de la vitesse, densité, température, etc.) montre une corrélation importante avec elle-même ou avec une autre variable sur un intervalle de temps et/ou d'espace significativement plus grand que les échelles les plus petites de l'écoulement". On peut ajouter à cette définition une condition de périodicité : en effet, une structure cohérente se répète de façon plus ou moins périodique dans un écoulement.

Au fil des années, l'étude de ces phénomènes a donné naissance à une littérature considérable sur le sujet, due notamment au nombre de problématiques différentes qui y sont liées (dynamique de ces structures, recherche d'un critère objectif d'identification, recherche de

caractéristiques "universelles", etc.). Dans cette partie, au lieu de reproduire l'ensemble des conclusions issues de ces travaux, nous privilégions la mise en relief des caractéristiques des structures cohérentes qui présentent un intérêt dans la problématique du dépôt turbulent de particules.

### II.2.1.1 Classification et identification

La définition proposée par Robinson recouvre plusieurs classes de phénomènes observables. Parmi les plus importantes et les plus étudiées (en raison, entre autres, du fait que ce sont celles que l'on observe le plus aisément dans les écoulements turbulents à nombre de Reynolds modéré), on peut citer, en conservant la terminologie anglo-saxonne et en suivant Robinson (1991) :

- Les "low-speed streaks" ("bandes à faible vitesse"). Comme leur nom l'indique, ce sont des parties de l'écoulement qui s'organisent en forme de bandes longitudinales plus ou moins parallèles dans la voisinage immédiat de la paroi, et dont la vitesse longitudinale est inférieure à la moyenne de l'écoulement dans cette région.
- Les "streamwise vortices" : parties à forte vortacité de l'écoulement, orientées dans le sens longitudinal (tourbillons longitudinaux).
- Les "sweep" : mouvements de fluide plutôt intenses, principalement visibles dans la direction normale à la paroi, orientés depuis le coeur de l'écoulement vers la paroi.
- Les "ejections" : éjections de fluide depuis le voisinage de la paroi vers le coeur de l'écoulement.

L'étude des interactions de ces structures cohérentes a donné lieu à un nombre significatif de publications. Parmi celles-ci, on peut citer les travaux récents de Schoppa et Hussain (2000), qui ont étudié les mécanismes mutuels de formation entre les "low-speed streaks" et les tourbillons longitudinaux. La figure II.5 illustre ces différentes classes de structures cohérentes et leur probables interactions d'après un scénario proposé par Marchioli et Soldati (2002). Sur cette figure, la direction longitudinale de l'écoulement est notée  $x$ .

La recherche d'un scénario qui regrouperait plusieurs de ces structures en un seul phénomène (Adrian et al., 2000) et d'un critère adéquat pour détecter ces structures sont des sujets de recherche très actifs depuis de nombreuses années. Pour cette dernière problématique, si la visualisation directe à base de fumée, de colorant ou de particules a joué un rôle important, elle présente toutefois l'inconvénient d'un manque possible d'objectivité. On peut également citer des travaux récents qui font usage de la décomposition en ondelettes pour détecter le passage de structures cohérentes (Kaspersen et Krogstad, 2001; Li et al., 1999).

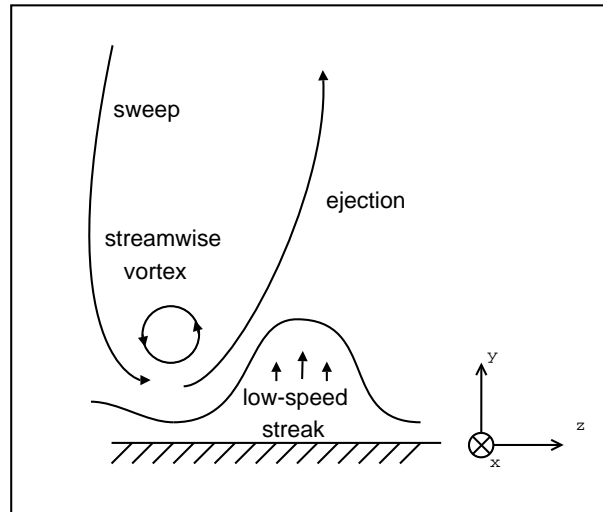


FIG. II.5: Différentes classes de structures cohérentes

Depuis les travaux de Willmarth et Lu (1972) et Wallace et al. (1972), une méthode largement répandue pour identifier les structures de type sweep et éjection se nomme "analyse par quadrant". Cette technique consiste à considérer les valeurs instantanées du produit  $uv$ , et d'identifier les événements par le signe de  $u$ , fluctuation longitudinale de la vitesse de l'écoulement, et  $v$ , fluctuation normale de la vitesse de l'écoulement. Reportées sur un graphe, les structures sweep et éjection correspondent donc chacune à un secteur du quadrant, comme représenté sur la figure II.6. Les sweeps sont donc associés à la partie inférieure droite du quadrant : lors d'un sweep, le fluide provient du coeur de l'écoulement, par conséquent, la fluctuation longitudinale de la vitesse de l'écoulement est positive. De plus, il est dirigé vers la paroi : la fluctuation normale de la vitesse de l'écoulement est donc négative. Un raisonnement similaire conduit à identifier les éjections comme les événements associés au secteur supérieur gauche du quadrant.

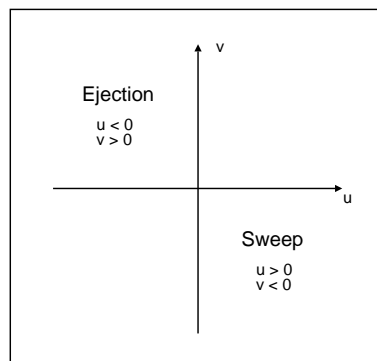


FIG. II.6: Analyse par quadrant des fluctuations de la vitesse de l'écoulement, utilisée pour l'identification des structures cohérentes de type sweep et éjection

### II.2.1.2 Étude des simulations numériques directes

S'appuyant sur l'analyse par quadrant, plusieurs équipes de recherche ont mené des études associant simulation numérique directe de l'écoulement et suivi Lagrangien d'un grand nombre de particules d'inertie moyenne (Arcen et al., 2005; Marchioli et Soldati, 2002; Marchioli et al., 2003). Ces simulations ont montré une forte corrélation entre les flux de particules normaux à la paroi et les événements sweeps et éjections : dans la couche limite, une grande majorité des particules se rapprochant de la paroi est en effet capturée par un sweep. En outre, la quasi-totalité des particules s'éloignant de la paroi est en fait entraînée par une structure de type éjection. On peut donc tirer de ce type d'étude une information essentielle : dans la couche limite turbulente, les particules tendent donc à être piégées dans les événements cohérents. Par conséquent, dans la suite de cette section, on cherche à expliciter les propriétés de ces structures cohérentes qui jouent un rôle dans le dépôt des particules.

Ainsi, par définition des structures cohérentes, les particules localisées dans ces structures "voient" une vitesse de l'écoulement normal à la paroi moins aléatoire que si elles se trouvaient hors de ces régions de l'écoulement. Si elles se trouvent dans un sweep, elle peuvent donc acquérir une vitesse importante qui pourrait alors être suffisante pour leur permettre de se déposer sur la paroi. À l'inverse, une particule transportée par une éjection voit donc son éloignement vis-à-vis de la paroi favorisé. Ces mécanismes peuvent donc influencer le transfert des particules dans la direction normale à la paroi, et donc le taux de dépôt des particules.

Outre ces corrélations entre présence des particules et événements sweep/éjection, des simulations numériques directes (Marchioli et Soldati, 2002) et des études expérimentales (Kaftori et al., 1995b,a) indiquent que les interactions entre sweeps et éjections peuvent également jouer un rôle important dans le processus de dépôt. En effet, dans les scénarios proposant une description unifiée des structures cohérentes, une éjection est souvent décrite comme étant la continuité directe d'un sweep : le fluide initialement transporté vers la paroi par un sweep est ensuite éjecté vers le coeur de l'écoulement dans la même séquence. Ce scénario est représenté sur la figure II.5. Ainsi, l'inertie des particules intervient directement : une particule suffisamment inerte entraînée par un sweep va quitter la structure cohérente et se rapprocher de la paroi, voire s'y déposer. À l'inverse, une particule d'inertie suffisamment faible va plutôt suivre le fluide, et donc être éjectée du voisinage de la paroi. Ce phénomène est illustré par la figure II.7.

Pour ces raisons, les structures cohérentes sweep et éjections paraissent les événements les plus intéressants intervenant dans le processus de dépôt de particules dans un écoulement turbulent. Inclure leurs caractéristiques pertinentes dans une modélisation statistique est l'un des principaux objectifs de ce chapitre.

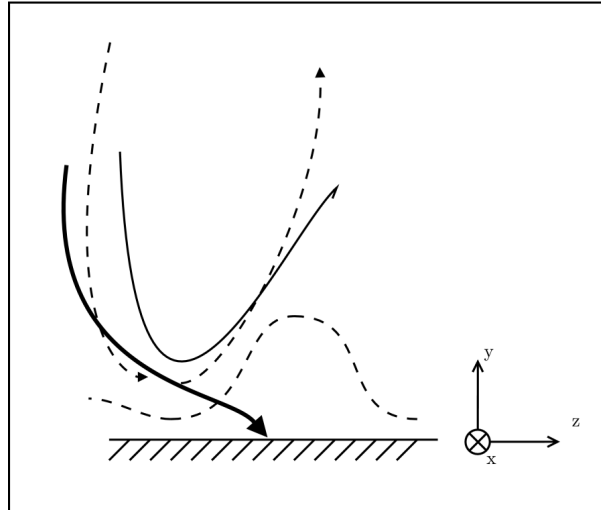


FIG. II.7: Trajectoires possibles pour des particules d'inerties différentes. ( $--\rightarrow$ ) : mouvement du fluide; ( $\rightarrow$ ) : trajectoire d'une particule d'inertie élevée; ( $\dashrightarrow$ ) : trajectoire d'une particule de faible inertie réentraînée dans le coeur de l'écoulement.

### II.2.2 La sous-couche visqueuse

Dans la section précédente, nous avons mis en relief le rôle joué par certaines classes de structures cohérentes sur le transport des particules dans la direction normale à la paroi. Ces phénomènes n'ont toutefois pas la même importance en fonction de la distance à la paroi : étant donné que l'intensité moyenne des fluctuations de la vitesse de fluide décroît lorsque l'on se rapproche de la paroi, l'intensité des sweep et des éjections diminue également. Celle-ci est négligeable dans la sous-couche visqueuse par rapport à celle de la zone logarithmique. De plus, des simulations numériques directes récentes (Narayanan et al., 2003) montrent que les particules d'inertie suffisamment faible présentent un temps de séjour très long dans le voisinage immédiat de la paroi avant de se déposer : elles ne sont donc pas portées directement jusqu'à la paroi par un événement cohérent. En première approximation, et dans notre objectif de modélisation du dépôt de particules, la sous-couche visqueuse est ainsi considérée comme dépourvue de structures cohérentes de type sweep/éjection.

Toutefois, en toute rigueur, la sous-couche visqueuse n'est pas totalement dénuée de structures cohérentes, puisqu'une partie des "low-speed streaks" a lieu dans cette région de l'écoulement. Néanmoins, le but de l'étude actuelle est de sélectionner les structures cohérentes les plus importantes pour modéliser le dépôt des particules : de ce point de vue, à notre connaissance, il n'existe pas de preuves évidentes que les "low-speed streaks" sont un élément clef du transport des particules dans la direction normale à la paroi au même titre que les structures cohérentes sweeps et éjections qui ont lieu dans la zone logarithmique. Dans une première approche, l'effet des interactions entre particules et "low-speed streaks" sur le processus de dépôt turbulent n'est ainsi pas pris en compte dans notre modélisation.



### II.2.3 Conclusion pour les mécanismes de dépôt turbulent de particules

En résumé, les caractéristiques principales des structures cohérentes de proche paroi qui influencent le transport des particules normal à la paroi et que nous retenons pour la construction de notre modèle sont les suivantes :

- Une majorité des particules d'inertie moyenne qui sont localisées dans la zone logarithmique de l'écoulement sont situées dans des événements cohérents de type sweep ou éjections : dans ces structures, la composante normale de la vitesse étant moins aléatoire que dans le reste de la couche limite, le transfert d'énergie cinétique dans la direction normale à la paroi depuis l'écoulement vers les particules est donc plus efficace.
- Étant donné que les éjections semblent être une conséquence des sweeps (voir figure II.5), les particules d'inertie suffisamment faible initialement transportées par un sweep peuvent être réentraînées vers le coeur de l'écoulement par une éjection dans la suite du processus, alors que, grâce à leur inertie, les particules plus inertes peuvent atteindre la paroi directement en quittant les structures cohérentes dans lesquelles elles étaient initialement piégées.
- Les événements sweeps et éjections sont beaucoup moins intenses dans la sous-couche visqueuse que dans la zone logarithmique de la couche limite : des particules relativement légères peuvent en effet se déposer après avoir passé un temps important au voisinage immédiat de la paroi. La sous-couche visqueuse est donc vue comme dépourvue de structures cohérentes significatives pour le processus de dépôt turbulent de particules.

La spécificité des interactions entre les particules et les structures cohérentes de proche paroi de type sweep/éjection tend à montrer qu'une modélisation explicite de ces structures est requise pour un calcul correct de la vitesse de déposition. Pour atteindre cet objectif, il s'agit donc de développer un nouveau modèle stochastique dans lequel les structures cohérentes sont représentées par le biais de leurs traits les importants.

## II.3 Un nouveau modèle 1D en proche paroi

Cette section est consacrée à la présentation du nouveau modèle de dépôt de particule que nous avons développé. Comme nous avons pu le souligner dans la partie précédente, les simulations numériques directes semblent prouver que le transfert des particules dans la direction normale à la paroi est fortement influencé par les interactions des particules avec des événements cohérents et intermittents (sweeps et éjections). Cependant, il semble délicat de parvenir à modéliser l'effet de ces interactions en suivant l'approche classique de modélisation Lagrangienne stochastique basée sur l'emploi d'une équation de type Langevin pour représenter l'écoulement vu par la particule : en effet, par nature, l'équation de Langevin

modélise un phénomène de diffusion fortement aléatoire, alors que pour traiter les interactions particules-structures cohérentes, il semble nécessaire d'introduire un facteur d'ordre, de structure justement, dans la modélisation. En outre, dans une modélisation de type Langevin, les fluctuations de l'écoulement vu par une particule présentent un caractère quasi-gaussien dû à la définition du processus de Wiener. À l'inverse, une modélisation qui a l'ambition de représenter des structures cohérentes doit, de notre point de vue, avoir la capacité de présenter des caractéristiques qui s'éloignent de la gaussienne.

C'est pourquoi une nouvelle approche est proposée ici. Au lieu de modifier l'équation de Langevin sur l'écoulement vu dans le cadre du Modèle de Langevin Standard en lui ajoutant des termes pour modéliser l'influence des structures cohérentes, nous sommes partis d'une représentation de la couche limite turbulente comme siège des événements cohérents importants, puis nous avons construit une description de l'écoulement vu par une particule comme succession de structures cohérentes et de phases de diffusion. Cette approche nous a poussé à abandonner l'idée de modéliser l'ensemble des interactions entre les particules et les structures cohérentes à l'aide d'un seul modèle : le modèle complet présenté ici se compose en effet de plusieurs sous-modèles stochastiques dédiés à la succession aléatoire de structures vues par une particule et à la représentation de la vitesse de l'écoulement vu par une particule hors des événements cohérents.

Dans un premier temps, les caractéristiques de ce nouveau modèle, issues en majorité de l'étude des structures cohérentes, sont présentées, notamment sa structure 1D à deux zones, ainsi que la démarche de modélisation que nous avons suivie. Ensuite, nous décrivons les modélisations spécifiques à chacune de ces zones, avant d'explicitier le traitement de leur interface.

### II.3.1 Caractéristiques principales du modèle

L'étude rapportée dans la partie précédente nous a permis de mettre en évidence l'importance du rôle joué par les structures cohérentes dans le transfert des particules vers et depuis la paroi dans la couche limite turbulente. En se basant sur ces conclusions, les caractéristiques principales du nouveau modèle que nous allons développer peuvent d'ores et déjà être présentées :

- Comme les effets des structures cohérentes de type sweep et éjection sont principalement visibles dans la direction normale à la paroi, la modélisation porte sur la composante dans cette direction de la vitesse du fluide vu dans la couche limite turbulente. Dans les autres directions, le Modèle de Langevin Standard est conservé. Cette approche 1D présente de surcroît l'intérêt d'une implémentation possible dans un code de calcul industriel.

- Dans le modèle, la couche limite turbulente est divisée en deux zones, une zone externe (proche du coeur de l'écoulement) et une zone interne (proche de la paroi). Dans la zone externe, qui correspond à une partie de la zone logarithmique de la couche limite turbulente, la trajectoire des particules est considérée comme étant due à une succession aléatoire de structures de type sweep ou éjection, entrecoupée de périodes pendant lesquelles la vitesse du fluide vu est plus aléatoire (phases dites de diffusion). La zone interne, qui correspond à la sous-couche visqueuse, est dépourvue de structures cohérentes. Comme nous l'avons souligné dans la section précédente, ceci est un choix de modélisation principalement basé sur l'intensité décroissante des structures cohérentes lorsque l'on se rapproche de la paroi.
  
- Cette division en deux zones fait donc apparaître une interface entre les deux régions du modèle : à cet endroit, suivant leur inertie, les particules transportées par un sweep (donc situées dans la zone externe) peuvent être ou non entraînées par une éjection vers le coeur de l'écoulement selon le mécanisme décrit dans la section précédente.

Ces caractéristiques, qui constituent l'architecture générale du modèle, sont illustrées sur le schéma de la figure II.8.

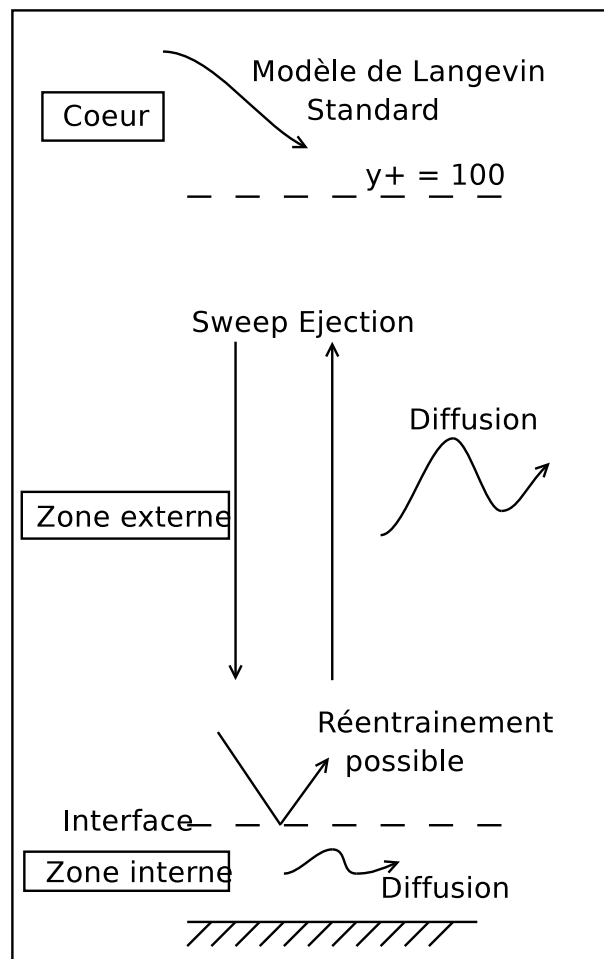


FIG. II.8: Structure du nouveau modèle 1D proposé

### II.3.2 Démarche de modélisation suivie

Pour établir la structure générale du modèle, nous nous sommes donc fortement basés sur l'étude de résultats issus de simulations numériques directes. Du reste, comme on le verra par la suite, les valeurs de certains paramètres du modèle pourront être tirées de cette même source.

En outre, il est important de rappeler une contrainte classique relative à la construction d'un modèle Lagrangien stochastique : en effet, dans ce cas, il est essentiel de respecter les statistiques connues de l'écoulement lorsque le modèle est utilisé avec des particules fluides ( $\tau_p^+ \rightarrow 0$ ). Vu que notre modèle est un modèle 1D de proche paroi, cette contrainte se traduit donc principalement par les conditions suivantes portant sur les deux premiers moments de la vitesse du fluide vu :

- La vitesse moyenne normale à la paroi doit être nulle. Cette condition est équivalente à l'absence du défaut de "spurious drift" qui affecte un certain nombre de modèles Lagrangiens stochastiques (McInnes et Bracco, 1992). Ce phénomène correspond au non-respect de l'équation de conservation de la masse, puisque les simulations effectuées avec des modèles qui souffrent de ce défaut montrent une concentration moyenne en particules fluides supérieur à 1 dans certaines zones de l'écoulement (Matida et al., 2000).
- Un profil de la variance de la fluctuation de la composante normale de la vitesse du fluide vu  $\langle v^2 \rangle$  cohérent. Cette contrainte est d'autant plus importante que ce profil et le flux de particules à la paroi sont étroitement liés : plus l'agitation moyenne des particules est intense, plus le flux de particules est important, et, par conséquent, plus le taux de dépôt est élevé.

En d'autres termes, le modèle doit à la fois permettre de simuler les interactions entre particules et structures cohérentes de façon à obtenir un taux de déposition correct, mais aussi respecter les statistiques connues de l'écoulement concernant les deux premiers moments de sa vitesse quand il est utilisé avec des particules fluides.

Enfin, une fois exploitées les informations issues des simulations numériques directes et comparées les statistiques issues de notre modèle calculées avec des particules fluides avec celles, connues, de l'écoulement, le modèle peut être appliqué pour son objectif initial, c'est-à-dire calculer le taux de dépôt des particules d'inertie arbitraire. La démarche de modélisation complète est résumée sur la figure II.9.

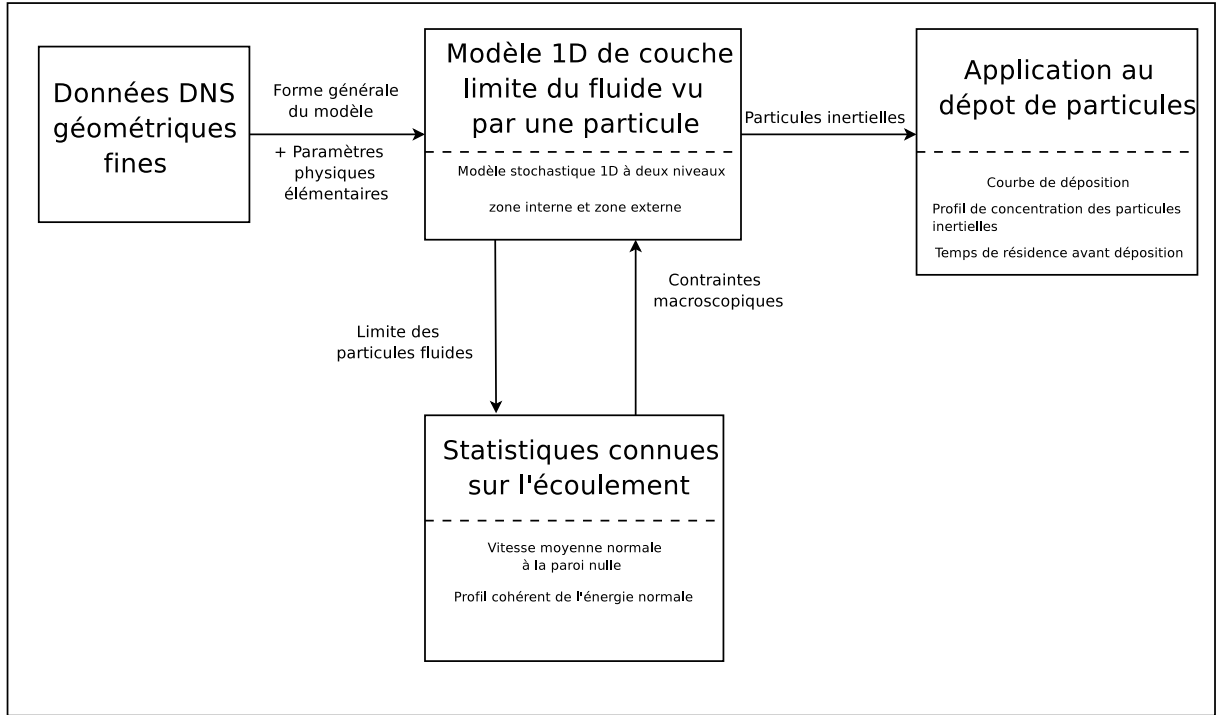


FIG. II.9: Démarche suivie pour la construction du nouveau modèle

### II.3.3 Un modèle 1D à deux zones

Puisque ce modèle s'applique dans la direction normale à la paroi, la particule est représentée par sa distance à la paroi  $y_p$ , sa vitesse normale à la paroi  $V_p$  et la composante normale à la paroi de la vitesse du fluide vu  $V_s$ . À l'instar du Modèle de Langevin Standard, la modélisation porte sur cette dernière variable. Dans notre étude, les particules sont uniquement soumises à la force de traînée; en particulier, ni force de gravité (peu importante pour les tailles de particules considérées), ni force de portance ne sont incluses. Concernant ce dernier type de force, les travaux menés par Wang et al. (1997) ont en effet montré que son implémentation sous une forme "optimale" n'influencerait pas le calcul de la vitesse de dépôt de façon critique. Le système d'équations du modèle est donc le suivant :

$$dy_p = V_p dt \quad (\text{II.4})$$

$$dV_p = \frac{V_s - V_p}{\tau_p} dt \quad (\text{II.5})$$

$$V_s = [\text{Modèle}] \quad (\text{II.6})$$

Dans cette section du rapport, nous exposons successivement les modélisations spécifiques à chaque zone du modèle, en commençant par la zone externe siège des structures cohérentes. En dernier lieu, le traitement de l'interface entre les deux zones est détaillé.

### II.3.3.1 La zone externe : un processus à deux niveaux

L'originalité de la modélisation de la zone externe réside dans le fait qu'elle fait intervenir une composition de deux types de processus stochastiques : l'un discret, l'autre continu.

**II.3.3.1.1 Introduction du processus de saut  $S(t)$**  Comme souligné précédemment, dans la zone externe du modèle, une particule rencontre une succession aléatoire d'événements sweeps et éjections. Entre ces structures cohérentes, elle réside dans des régions de l'écoulement où la vitesse du fluide vu  $V_s$  est plus aléatoire. Par conséquent, la première étape de modélisation consiste en la construction d'un mécanisme qui permet la gestion d'une succession aléatoire d'événements (sweep, éjection, et entre ces événements cohérents, phases de diffusion) eux-mêmes de durée aléatoire. Dans ce but, nous introduisons un processus Markovien de saut noté  $S(t)$ , dont chaque réalisation est associée à une particule située dans la zone externe et qui peut prendre trois valeurs possibles :

- $S(t) = 1$  si la particule est située dans un sweep
- $S(t) = 2$  si la particule est hors d'une structure cohérente (phase de diffusion)
- $S(t) = 3$  si la particule est située dans une éjection

On impose également qu'une particule ne peut généralement pas passer d'une éjection directement à un sweep, et vice-versa. En d'autres termes, une particule qui quitte une structure cohérente passe obligatoirement par une phase diffusion. La seule exception à cette règle se situe à l'interface entre les deux zones : lorsqu'une particule transportée par un sweep atteint l'interface, elle peut alors être directement entraînée par une éjection vers le coeur de l'écoulement si son inertie est suffisamment faible, suivant le scénario décrit sur la figure II.7. De plus, les événements sweeps et éjections sont considérés comme équiprobables : une particule qui achève une période de diffusion a autant de chances d'être ensuite prise par un sweep que par une éjection.

Au vu des éléments précédents, la classe des processus de Poisson (généralisés) nous a paru la plus adaptée pour le processus  $S(t)$  : les durées des différents événements sont donc des variables aléatoires qui suivent des lois exponentielles. Par conséquent, cette caractéristique nécessite l'introduction de deux paramètres :  $\tau_d$  désigne la durée moyenne d'une phase de diffusion, et  $\tau_s$  la durée moyenne d'un événement cohérent. Dans le modèle, les événements sweep et éjection sont donc, en moyenne, de durée identique.

L'ensemble de ces conditions nous permet de caractériser entièrement la matrice de transition du processus  $\mathbf{M}(\Delta t)$ , qui représente la probabilité pour une particule dans un état  $i$  à l'instant  $t$  d'être dans un état  $j$  à l'instant  $t + \Delta t$ , soit par définition :

$$M_{i,j}(\Delta t) = P(S(t + \Delta t) = j | S(t) = i) \quad (\text{II.7})$$

Au regard des informations fournies précédemment, la matrice  $\mathbf{M}(\Delta t)$  est donc dans notre cas égale à :

$$\mathbf{M}(\Delta t) = \begin{pmatrix} e^{-\frac{\Delta t}{\tau_s}} & 1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_s}} & 0 \\ \frac{1}{2} \left( 1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_d}} \right) & e^{-\frac{\Delta t}{\tau_d}} & \frac{1}{2} \left( 1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_d}} \right) \\ 0 & 1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_s}} & e^{-\frac{\Delta t}{\tau_s}} \end{pmatrix} \quad (\text{II.8})$$

Par exemple  $M_{22}(\Delta t)$ , qui représente la probabilité pour une particule initialement située dans une phase de diffusion d'être encore dans cette phase de diffusion au temps  $t + \Delta t$  est égale à  $e^{-\frac{\Delta t}{\tau_d}}$  : plus  $\Delta t$  est grand, plus cette probabilité est faible, et donc plus la particule a des chances de quitter la phase de diffusion.

Le processus  $S(t)$  a été implémenté numériquement, et une partie d'une trajectoire du processus est présentée sur la figure II.10. On observe bien que les durées des phases de diffusion ( $S(t) = 2$ ) et des phases cohérentes ( $S(t) = 1$  et  $S(t) = 3$ ) sont aléatoires, et que la valeur de  $S(t)$  ne passe jamais directement de  $S(t) = 1$  à  $S(t) = 3$ .

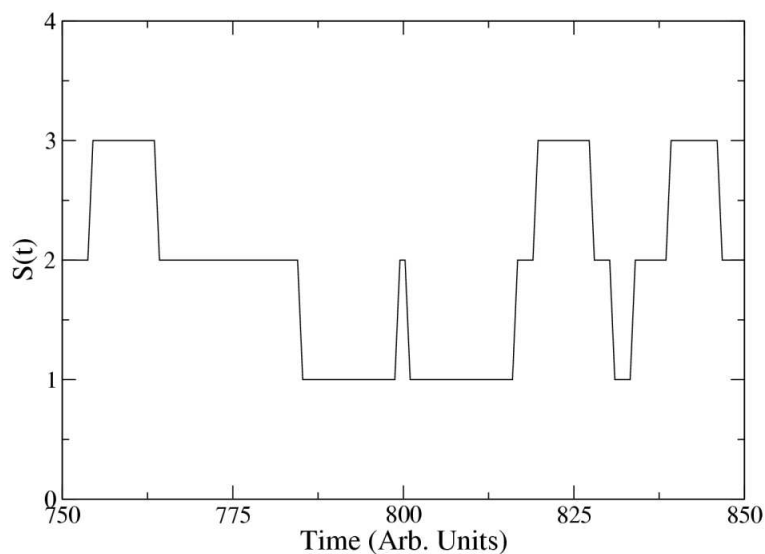


FIG. II.10: Une trajectoire du processus  $S(t)$

**II.3.3.1.2 Modélisation des différentes phases** Une fois achevée la construction du processus  $S(t)$  qui permet la transition entre les différentes phases, l'étape suivante consiste à développer une modélisation du fluide vu lorsque la particule se situe dans chacune de ces phases. Nous proposons donc ici deux sous-modèles de relative simplicité en vue de conserver une complexité raisonnable pour le modèle entier.



Comme nous l'avons souligné plus haut, une particule piégée dans une structure voit une vitesse de l'écoulement moins aléatoire que la moyenne. C'est pourquoi la modélisation choisie revient à considérer cette vitesse constante et uniforme au sein d'une structure cohérente, en faisant du reste l'hypothèse supplémentaire que dans un sweep, cette vitesse est égale et opposée à celle d'une éjection :

$$V_s = \pm V_{struc} \quad (\text{II.9})$$

$V_{struc}$  est donc un paramètre du modèle, au même titre que les durées de vie moyenne  $\tau_s$  et  $\tau_d$  des structures cohérentes et des phases de diffusion. La modélisation de l'écoulement vu dans les structures cohérentes est donc la plus simple possible. Il a été envisagé de rendre  $V_{struc}$  dépendant de la distance à la paroi, afin de simuler l'intensité décroissante des événements cohérents lorsque l'on se rapproche de la paroi : toutefois, après plusieurs tentatives, il s'est avéré que cette modification rendait le défaut de "spurious drifts" beaucoup plus délicat à traiter, et par conséquent, l'idée initiale de modélisation a donc été conservé.

On s'intéresse maintenant à la modélisation des phases de diffusion : à l'inverse des structures cohérentes, le caractère aléatoire de la vitesse dans ce type de phase est de première importance. Ainsi, la vitesse de l'écoulement  $y$  est modélisée par un processus stochastique de diffusion (d'Ornstein-Uhlenbeck) :

$$dV_s = -\frac{V_s}{T} dt + K_{ext} dW \quad (\text{II.10})$$

où  $dW$  est l'incrément d'un processus de Wiener,  $T$  le temps de relaxation du processus et  $K_{ext}$  le coefficient de diffusion.

En résumé, pour modéliser explicitement les structures cohérentes retenues (sweep et éjection), nous avons fait le choix d'une modélisation à deux niveaux : au premier niveau, le processus "pilote"  $S(t)$  dont la valeur gouverne l'état dans lequel se trouve une particule, soit dans une structure cohérente, soit dans une phase de diffusion. Au deuxième niveau se trouvent les modélisations spécifiques de ces phases : si la particule se trouve dans une structure cohérente ( $S(t)=1$  ou  $S(t)=3$ ), elle voit une vitesse de l'écoulement uniforme, constante et égale au paramètre  $V_{struc}$ . Au contraire, si elle est plongée dans une phase de diffusion ( $S(t)=2$ ), la vitesse du fluide vu est alors aléatoire et gouvernée par un processus stationnaire de diffusion d'Ornstein-Uhlenbeck. Un exemple de trajectoire d'une particule fluide associé à la réalisation du processus  $S(t)$  correspondante est présentée sur la figure II.11. Les phases de diffusion et les passages dans une structure cohérente sont clairement visibles.

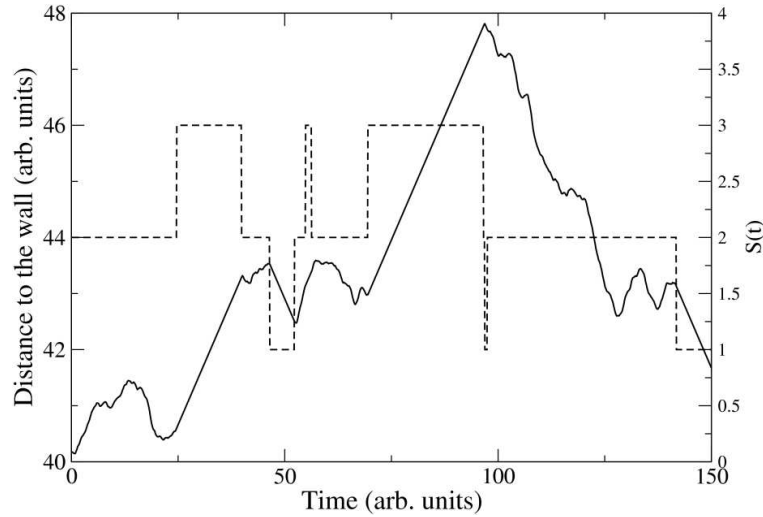


FIG. II.11: Exemple d'une trajectoire d'une particule fluide (ligne pleine), avec la réalisation de  $S(t)$  associée (pointillés)

**II.3.3.1.3 Propriétés statistiques de la modélisation** La modélisation de la zone externe est ainsi entièrement caractérisée. Dans cette section, on s'attache maintenant à expliciter les différentes propriétés statistiques du processus "à deux niveaux" qui a été construit dans la partie précédente. Étant donné que les statistiques essentielles à retrouver concernent l'écoulement lui-même, cette étude théorique se base sur des résultats impliquant des particules fluides ( $\tau_p^+ \rightarrow 0$ ). Dans un souci de clarté, on note  $V_{pf}(t)$  la vitesse d'une particule fluide calculée par le modèle, et  $v_{pf}(t) = V_{pf}(t) - \langle V_{pf}(t) \rangle$  la fluctuation de la vitesse d'une particule fluide.

On s'intéresse dans un premier temps au processus  $S(t)$  : d'abord, ses propriétés Euleriennes sont explicitées, c'est-à-dire qu'on calcule les probabilités pour une particule d'être prise soit dans une structure cohérente, soit dans une phase de diffusion, à un instant quelconque. La loi des probabilités totales donne (avec la convention de sommation des indices répétés) :

$$P(S(t + \Delta t) = j) = P(S(t + \Delta t) = j / S(t) = i) P(S(t) = i) \quad (\text{II.11})$$

En définissant le vecteur ligne de probabilités  $\mathbf{p}(t)$  tel que  $p_i(t) = P(S(t) = i)$ , et par définition de la matrice de transition  $\mathbf{M}$ , la relation précédente peut se réécrire :

$$\mathbf{p}(t + \Delta t) = \mathbf{p}(t) * \mathbf{M}(\Delta t) \quad (\text{II.12})$$

Lorsque  $\Delta t \rightarrow 0$ , en effectuant un développement limité, il vient :

$$\mathbf{p}(t + \Delta t) = \mathbf{p}(t) * (\mathbf{I} + \Delta t \left( \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} \right) (0)) + o(\Delta t) \quad (\text{II.13})$$

On obtient ainsi la relation suivante :

$$\frac{\partial \mathbf{p}(t)}{\partial t} = \mathbf{p}(t) * \left( \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} \right) (0) = \mathbf{p}(t) * \mathbf{A} \quad (\text{II.14})$$

Par définition du générateur infinitésimal  $\mathbf{A} = \left( \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} \right) (0)$  du processus tel que :

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\tau_s} & \frac{1}{\tau_s} & 0 \\ \frac{1}{2\tau_d} & -\frac{1}{\tau_d} & \frac{1}{2\tau_d} \\ 0 & \frac{1}{\tau_s} & -\frac{1}{\tau_s} \end{pmatrix} \quad (\text{II.15})$$

La loi  $\mathbf{p}(t)$  est ainsi donnée à tout instant par la relation :

$$\mathbf{p}(t) = \mathbf{p}(0)e^{t\mathbf{A}} = \mathbf{p}_0 e^{t\mathbf{A}} \quad (\text{II.16})$$

À l'aide d'un calculateur formel (maple), un premier calcul a été mené avec un choix arbitraire du vecteur ligne des conditions initiales :

$$\mathbf{p}_0 = \left( \frac{1}{2}, \quad 0, \quad \frac{1}{2} \right) \quad (\text{II.17})$$

Le résultat obtenu est :

$$\mathbf{p}(t) = \left( \frac{1}{2} \frac{\tau_s + \tau_d e^{-\frac{\tau_s + \tau_d}{\tau_s \tau_d} t}}{\tau_s + \tau_d}, \quad \frac{\tau_d \left( 1 - e^{-\frac{\tau_s + \tau_d}{\tau_s \tau_d} t} \right)}{\tau_s + \tau_d}, \quad \frac{1}{2} \frac{\tau_s + \tau_d e^{-\frac{\tau_s + \tau_d}{\tau_s \tau_d} t}}{\tau_s + \tau_d} \right) \quad (\text{II.18})$$

On observe que lorsque  $t \rightarrow +\infty$ ,

$$\mathbf{p}(t) \rightarrow \left( \frac{\tau_s}{2(\tau_s + \tau_d)}, \quad \frac{\tau_d}{\tau_s + \tau_d}, \quad \frac{\tau_s}{2(\tau_s + \tau_d)} \right) \quad (\text{II.19})$$

La loi  $\mathbf{p}(t)$  tend donc vers une valeur constante. De ce fait, si les conditions initiales (le vecteur

$\mathbf{p}_0$ ) sont choisies de telle sorte qu'elles soient égales à cette valeur, le calcul donne pour tout instant :

$$\mathbf{p}(t) = \mathbf{p}_{calc} = \left( \frac{\tau_s}{2(\tau_s + \tau_d)}, \quad \frac{\tau_d}{\tau_s + \tau_d}, \quad \frac{\tau_s}{2(\tau_s + \tau_d)} \right) \quad (\text{II.20})$$

Il est possible de vérifier que ce vecteur  $\mathbf{p}_{calc}$  correspond bien à la solution stationnaire du problème : la relation II.14 montre en effet que la solution stationnaire  $\mathbf{p}_{sol}$  doit vérifier

$$\frac{\partial \mathbf{p}_{sol}}{\partial t} = \mathbf{0} = \mathbf{p}_{sol} * \mathbf{A}$$

soit

$$\mathbf{A}^t * \mathbf{p}_{sol}^t = \mathbf{0}$$

En d'autres termes, il faut que le vecteur transposé du vecteur solution appartienne au noyau de la transposée de  $\mathbf{A}$ , et l'on vérifie facilement que c'est bien le cas avec le vecteur  $\mathbf{p}_{calc}$ . De plus, par le théorème du rang, on prouve que le noyau de la transposée de  $\mathbf{A}$  est bien de dimension un : Les vecteurs solutions sont donc de la forme  $\mathbf{p}_{sol} = \text{Cste} * \mathbf{p}_{calc}$ . Enfin, puisque la somme des termes de  $\mathbf{p}_{sol}$  doit être égale à un (c'est un vecteur de probabilité) et puisque l'on vérifie que la somme de ceux  $\mathbf{p}_{calc}$  est bien égale à un, on en déduit que  $\text{Cste} = 1$  et que  $\mathbf{p}_{calc}$  est bien l'unique solution stationnaire du problème. En notant  $P_s$  la probabilité pour une particule d'être prise dans une structure cohérente et  $P_d$  la probabilité pour une particule d'être dans une phase de diffusion, on a donc :

$$P_s = P(S(t) \in \{1, 3\}) = \frac{\tau_s}{\tau_s + \tau_d} \quad (\text{II.21})$$

$$P_d = P(S(t) = 2) = \frac{\tau_d}{\tau_s + \tau_d} \quad (\text{II.22})$$

Ce calcul préliminaire nous permet de calculer les premiers moments du processus stochastique qui gouverne le mouvements des particules dans la zone externe du modèle, en commençant par la vitesse moyenne  $\langle V_{pf}(t) \rangle$ . Comme souligné plus haut, cette vitesse doit être nulle pour respecter la conservation de la masse et ainsi éviter le défaut de "spurious drifts". D'après la loi des probabilités totales, la vitesse moyenne pour l'ensemble des particules de la zone externe est donnée par :

$$\langle V_{pf}(t) \rangle = P_s * \langle V_{pf}(t) | S(t) \in \{1, 3\} \rangle + P_d * \langle V_{pf}(t) | S(t) = 2 \rangle \quad (\text{II.23})$$

Avec  $\langle V_{pf}(t) | S(t) \in \{1, 3\} \rangle$  la vitesse moyenne des particules fluides prises dans une structure

cohérente et  $\langle V_{pf}(t)|S(t) = 2 \rangle$  la vitesse moyenne des particules fluides dans une phase de diffusion. La vitesse du fluide dans une éjection étant opposée (et égale en norme) à celle d'un sweep, et les deux événements étant équiprobables, il vient :

$$\langle V_{pf}(t)|S(t) \in \{1, 3\} \rangle = 0 \quad (\text{II.24})$$

On cherche maintenant à calculer  $\langle V_{pf}(t)|S(t) = 2 \rangle$ . La vitesse des particules située dans une phase de diffusion est gouvernée par un processus de diffusion d'Ornstein-Uhlenbeck. Si toutes les particules situées dans une phase de diffusion avaient débuté cette phase au même instant, en notant cet instant  $t = t_{debt}$ , la théorie (Gardiner, 1985) nous indique que la vitesse moyenne serait donnée par :

$$\langle V_{pf}(t)|S(t) = 2 \rangle = \langle V_{pf}(t_{debt}) \rangle e^{-\frac{t-t_{debt}}{T}} \quad (\text{II.25})$$

Cependant, les particules n'ont pas commencé à diffuser au même moment : la valeur de  $t_{debt}$  est propre à chaque particule. Par contre, par définition du processus, on sait que

$$\langle V_{pf}(t_{debt}) \rangle = \langle V_{pf}(t)|S(t) \in \{1, 3\} \rangle = 0 \quad (\text{II.26})$$

Et que  $\tau = t - t_{debt}$  est une variable aléatoire exponentielle de paramètre  $\tau_d$ .  $\langle V_{pf}(t)|S(t) = 2 \rangle$  est donc une fonction de  $\tau$  qu'on note  $f(\tau)$ , et le calcul donne :

$$\langle V_{pf}(t)|S(t) = 2 \rangle = \langle f(\tau) \rangle \quad (\text{II.27})$$

$$= \frac{1}{\tau_d} \int_0^{+\infty} f(u) e^{-\frac{u}{\tau_d}} du \quad (\text{II.28})$$

$$= \frac{\langle V_{pf}(t)|S(t) \in \{1, 3\} \rangle}{\tau_d} \int_0^{+\infty} e^{-\frac{u}{T}} e^{-\frac{u}{\tau_d}} du \quad (\text{II.29})$$

$$\langle V_{pf}(t)|S(t) = 2 \rangle = 0 \quad (\text{II.30})$$

La vitesse moyenne des particules prises dans une phase de diffusion est donc nulle. Au total, on conclut des relations précédentes qu'à tout instant, dans la zone externe du modèle :

$$\langle V_{pf}(t) \rangle = 0 \quad (\text{II.31})$$

Ce qui correspond au résultat recherché pour assurer le respect de l'équation de conservation de la masse dans notre modèle.

On cherche maintenant à obtenir une expression théorique de l'énergie  $\langle v_{pf}^2(t) \rangle$ , qui,

puisque la vitesse moyenne est nulle, est également la variance du processus. Dans la zone externe, par un raisonnement similaire à celui concernant la vitesse moyenne, l'énergie  $\langle v_{pf}^2(t) \rangle$  calculée sur l'ensemble des particules est donnée par :

$$\langle v_{pf}^2(t) \rangle = P_s * \langle v_{pf}^2(t) | S(t) \in \{1, 3\} \rangle + P_d * \langle v_{pf}^2(t) | S(t) = 2 \rangle$$

Le calcul de l'énergie moyenne  $\langle v_{pf}^2(t) | S(t) \in \{1, 3\} \rangle$  des particules prises dans les structures cohérentes est immédiat et égal à  $V_{struc}^2$ . Concernant les particules prises dans une phase de diffusion, on effectue le même type de raisonnement que lors du calcul de la vitesse moyenne. Si les particules avaient commencé la phase au même instant, en conservant les notations précédentes, l'énergie moyenne serait telle que :

$$\langle v_{pf}^2(t) | S(t) = 2 \rangle = \left( \langle v_{pf}^2(t_{debt}) \rangle - \frac{K_{ext}^2 T}{2} \right) e^{-\frac{2(t-t_{debt})}{T}} + \frac{K_{ext}^2 T}{2} \quad (\text{II.32})$$

Soit, en posant  $\tau = t - t_{debt}$  variable aléatoire de paramètre  $\tau_d$  :

$$\langle v_{pf}^2(t) | S(t) = 2 \rangle = \left( V_{struc}^2 - \frac{K_{ext}^2 T}{2} \right) e^{-\frac{2\tau}{T}} + \frac{K_{ext}^2 T}{2} \quad (\text{II.33})$$

L'énergie conditionnée sur les particules diffusantes est donc une fonction de  $\tau$  qu'on peut noter  $g(\tau)$ . Le calcul donne alors :

$$\langle v_{pf}^2(t) | S(t) = 2 \rangle = \langle g(\tau) \rangle \quad (\text{II.34})$$

$$= \frac{1}{\tau_d} \int_0^{+\infty} g(u) e^{-\frac{u}{\tau_d}} du \quad (\text{II.35})$$

$$= \frac{1}{1 + 2\frac{\tau_d}{T}} \left( V_{struc}^2 - \frac{K_{ext}^2 T}{2} \right) + \frac{K_{ext}^2 T}{2} \quad (\text{II.36})$$

Lorsque  $\tau_d \gg T$ , c'est-à-dire lorsque la durée moyenne de la diffusion est très supérieure au temps de relaxation, l'expression classique du régime stationnaire d'un processus d'Ornstein-Uhlenbeck  $\langle v_{pf}^2(t) | S(t) = 2 \rangle = \frac{K_{ext}^2 T}{2}$  est bien retrouvée. A l'inverse, quand  $\tau_d \ll T$ , c'est-à-dire lorsque le temps de relaxation de l'écoulement vu dans la phase de diffusion est très grand par rapport à la durée moyenne de ces phases, l'énergie est telle que  $\langle v_{pf}^2(t) | S(t) = 2 \rangle = V_{struc}^2$ , ce qui correspond bien au résultat attendu. L'expression finale de l'énergie totale est donc :

$$\begin{aligned} \langle v_{pf}^2(t) \rangle &= \frac{\tau_s}{\tau_d + \tau_s} V_{struc}^2 \\ &+ \frac{\tau_d}{\tau_d + \tau_s} \left[ \frac{1}{1 + 2\frac{\tau_d}{T}} \left( V_{struc}^2 - \frac{K_{ext}^2 T}{2} \right) + \frac{K_{ext}^2 T}{2} \right] \end{aligned} \quad (\text{II.37})$$

Dans la limite  $T \ll \tau_d$ , on retrouve bien le fait qu'une partie des particules est localisée dans les événements cohérents, et que l'autre a pour énergie moyenne l'énergie stationnaire d'un processus de diffusion d'Ornstein-Uhlenbeck.

$$\langle v_{pf}^2(t) \rangle = \frac{\tau_s}{\tau_d + \tau_s} V_{struc}^2 + \frac{\tau_d}{\tau_d + \tau_s} \frac{K_{ext}^2 T}{2} \quad (\text{II.38})$$

En dernier lieu, on reproduit ici la démarche qui conduit à l'expression de la fonction densité de probabilité  $p(U)$  du processus stochastique qui gouverne le mouvement des particules dans la zone externe de notre modèle. On part de la relation suivante :

$$\begin{aligned} p(U) = & \frac{P_s}{2} \cdot p(U|S(t) = 1) + \frac{P_s}{2} \cdot p(U|S(t) = 3) \\ & + P_d \cdot p(U|S(t) = 2) \end{aligned} \quad (\text{II.39})$$

La vitesse des particules fluides prises dans des événements cohérents est constante et uniforme et égale à  $\pm V_{struc}$ . On en déduit que  $p(U|S(t) = 1) = \delta(U + V_{struc})$ , et que de la même façon,  $p(U|S(t) = 3) = \delta(U - V_{struc})$ ,  $\delta$  désigne la distribution delta de Dirac. De plus, les particules prises dans une phase de diffusion peuvent provenir soit d'une éjection, soit d'une sweep avec la même probabilité. Dans la phase de diffusion, le mouvement des particules est gouverné par un processus de diffusion d'Ornstein-Uhlenbeck. Cependant, comme elles n'ont pas débuté cette phase de diffusion au même instant, la densité de probabilité  $p(U|S(t) = 2)$  n'est pas une somme de deux gaussiennes centrées sur  $\pm V_{struc}$ . En suivant le même raisonnement que lors du calcul des deux premiers moments de la vitesse des particules fluides, on aboutit finalement à l'expression suivante :

$$\begin{aligned} p(U) = & \frac{\tau_s}{2(\tau_d + \tau_s)} (\delta(U + V_{struc}) + \delta(U - V_{struc})) \\ & + \frac{\tau_d}{2(\tau_d + \tau_s)} (p_3(U) + p_4(U)) \end{aligned} \quad (\text{II.40})$$

Où  $\delta(v)$  est la distribution de Dirac, et où  $p_3(U)$  et  $p_4(U)$  sont définies par :

$$p_3(U) = \frac{1}{\tau_d} \int_0^{+\infty} \frac{1}{\sigma(t)\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(U-(V(t)))^2}{2\sigma^2(t)}} e^{-\frac{t}{\tau_d}} dt \quad (\text{II.41})$$

$$p_4(U) = \frac{1}{\tau_d} \int_0^{+\infty} \frac{1}{\sigma(t)\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(U+(V(t)))^2}{2\sigma^2(t)}} e^{-\frac{t}{\tau_d}} dt \quad (\text{II.42})$$

avec

$$\langle V(t) \rangle = V_{struc} e^{-\frac{t}{T}} \quad (\text{II.43})$$

$$\sigma^2(t) = \frac{K_{ext}^2 T}{2} (1 - e^{-\frac{2t}{T}}) \quad (\text{II.44})$$

### II.3.3.2 La zone interne : un processus de diffusion

**II.3.3.2.1 Modélisation par processus de diffusion** Dans la zone interne de notre modèle, les phénomènes cohérents sont absents. La modélisation est donc plus simple au sens où elle ne présente qu'un seul niveau. Cependant, la zone externe de notre modèle étant homogène (les paramètres ne varient pas avec la distance à la paroi), l'inhomogénéité de la couche limite est donc essentiellement contenue dans la zone interne. Il a donc été choisi de modéliser la vitesse du fluide vu zone interne par un processus de diffusion d'Ornstein-Uhlenbeck inhomogène, l'inhomogénéité portant sur le coefficient de diffusion  $K_{int}$  et le terme supplémentaire  $A_{int}$  :

$$dV_s = A_{int}(y_p^+) dt - \frac{V_s}{T} dt + K_{int}(y_p^+) dW \quad (\text{II.45})$$

On peut observer que le temps de corrélation Lagrangienne est, dans ce modèle, considéré comme uniforme dans la zone interne du modèle dans un objectif de simplicité. Au vu des simulations numériques directes ayant trait à cette propriété (Iliopoulos et al., 2003), cette hypothèse paraît raisonnable.

**II.3.3.2.2 Étude statistique** Pope (1987, 2000) a notamment mis en évidence que pour assurer le respect de l'équation de continuité dans une modélisation stochastique de type Langevin (c'est-à-dire, pour obtenir dans notre cas  $\partial \langle V_{pf} \rangle / \partial y = 0$ ), le terme  $A_{int}(y_p^+)$  doit être défini comme :

$$A_{int}(y_p^+) = \frac{d \langle v_{pf}^2 \rangle}{dy} = \frac{d}{dy} \left( \frac{K_{int}(y_p^+)^2 T}{2} \right) \quad (\text{II.46})$$

Le terme  $A_{int}(y_p^+)$  joue donc le rôle du gradient de pression moyen normal à la paroi. En s'appuyant sur la relation II.46, il est donc possible de proposer une expression analytique et dérivable du coefficient de diffusion inhomogène de la zone interne  $K_{int}(y_p^+)$  pour en déduire celle de  $A_{int}(y_p^+)$ . De plus, la forme de  $K_{int}(y_p^+)$  doit satisfaire la contrainte  $\langle v_{pf}^2 \rangle \sim y_p^4$  quand  $y_p \rightarrow 0$ . Dans l'hypothèse d'une zone interne comprise dans l'intervalle  $0 < y^+ < 20$ , l'expression suivante est choisie, et représentée sur la figure II.12, avec une valeur de  $K_{int}(y_{interf}^+)$  ici choisie égale à 50 (dans le modèle complet, cette valeur est en fait déterminée théoriquement par la condition d'équilibre des flux de particules fluides à l'interface, voir la



sous-section II.3.3.3.2).

$$K_{int}(y_p^+) = \begin{cases} \frac{K_{int}(y_{interf}^+)}{2} \left(1 - \cos\left(\frac{\pi y_p^+}{5}\right)\right) & \text{si } y_p^+ < 5. \\ K_{int}(y_{interf}^+) & \text{si } y_p^+ > 5. \end{cases}$$

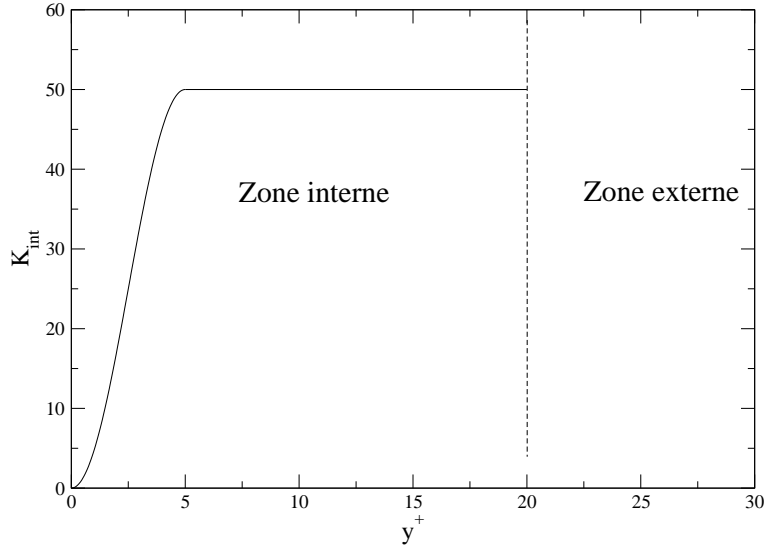


FIG. II.12: courbe de la fonction  $K_{int}(y_p^+)$

**II.3.3.2.3 Modélisation du mouvement Brownien** De plus, étant donné que le mouvement Brownien est un mécanisme important pour le dépôt des particules de très faible inertie, son effet est implémenté par un processus de diffusion sur la vitesse de la particule.

$$dV_p = \frac{V_s - V_p}{\tau_p} dt + K_{bro} dW' \quad (\text{II.47})$$

$dW'$  étant l'incrément d'un processus de Wiener indépendant de  $dW$ . Le coefficient de diffusion  $K_{bro}$  est donné par le théorème d'équipartition de l'énergie :

$$K_{bro} = \sqrt{\frac{2k_B\Theta}{M_p\tau_p}} \quad (\text{II.48})$$

Avec  $k_b$  la constante de Boltzmann,  $\Theta$  la température du milieu en Kelvin, et  $M_p$  la masse de la particule. Étant donné que ce terme ne dépend pas de la distance à la paroi, plus la

particule est proche de la paroi, plus il prend de l'importance puisque le coefficient de diffusion hydrodynamique  $K_{int}(y_p^+)$  décroît lui jusqu'à zéro. D'où l'intérêt d'implémenter l'effet du mouvement Brownien pour calculer le taux de dépôt, vu que la zone où son importance relative est la plus élevée est le voisinage immédiat de la paroi, c'est-à-dire la région de l'écoulement que les particules traversent en dernier avant de se déposer.

### II.3.3.3 Traitement de l'interface entre les deux zones

Les modélisations des deux zones de notre modèle ont été complètement décrites dans les parties précédentes. Dans cette section, nous analysons comment les choix de modélisation effectués impliquent un certain nombre de contraintes théoriques et numériques à l'interface entre les deux zones, et nous présentons la manière dont le problème de l'interface est traité pour respecter ces contraintes.

**II.3.3.3.1 Contraintes de modélisation** Une fois la modélisation des zones interne et externe du modèle présentée reste le problème de l'interface entre les deux parties du modèle. En effet, l'interface joue un rôle centrale dans notre modèle et constitue un problème délicat à gérer :

- D'après la structure générale du modèle, elle doit tout d'abord permettre le possible entraînement vers le coeur de l'écoulement d'une particule initialement transportée par un sweep si son inertie est suffisamment faible.
- De plus, elle doit être transparente lorsque l'on calcule les statistiques relatives à l'écoulement en utilisant des particules fluides : aucune discontinuité dans les statistiques ne doit apparaître, notamment quand on considère la vitesse moyenne normale à la paroi (qui doit rester nulle) et la variance de la fluctuation de vitesse normale à la paroi  $\langle v^2 \rangle$ .
- Enfin, l'implémentation numérique doit rester de complexité raisonnable, indépendante du pas de temps et doit pouvoir être incluse dans une description 1D de la couche limite turbulente.

**II.3.3.3.2 Étude théorique** Le premier problème auquel nous sommes confrontés lors du traitement de l'interface est celui de l'équilibre des flux de particules fluides. En effet, le respect de l'équation de conservation de la masse implique que le flux moyen moyen de particules fluides doit être nulle à l'interface : en moyenne, autant de particules fluides doivent traverser l'interface depuis la zone externe vers la zone interne qu'inversement. La première contrainte identifiée implique que les particules fluides situées dans la zone externe ne peuvent pas traverser l'interface si elles sont portées par un sweep : à l'interface, elles sont immédiatement réentraînées vers le coeur de l'écoulement par une éjection. Par conséquent, la traversée

de l'interface par une particule fluide est uniquement possible si celle-ci est située dans une phase de diffusion.

De façon générale, le flux de particules fluides à travers une surface d'une zone 1 vers une zone 2 est déterminé par la formule (Minier et Pozorski, 1999) :

$$\mathcal{F}_{1 \rightarrow 2} = \int_0^{+\infty} v p_1(v) dv \quad (\text{II.49})$$

Où  $p_1$  est la densité de probabilité de la vitesse des particules fluides dans la zone 1. Dans notre cas, la nullité du flux à l'interface implique que, pour des particules fluides :

$$\mathcal{F}_{int \rightarrow ext} = \mathcal{F}_{ext \rightarrow int} \quad (\text{II.50})$$

Dans la zone interne, le mouvement des particules fluides est gouverné par un processus de diffusion d'Ornstein-Uhlenbeck : la densité de probabilité de la vitesse est donc une gaussienne de vitesse moyenne nulle, et à l'interface, l'écart-type est égal à  $K_{int}(y_{interface}^+) \sqrt{T/2}$ , la théorie donne alors :

$$\mathcal{F}_{int \rightarrow ext} = K_{int}(y_{interface}^+) \sqrt{\frac{T}{8\pi}} \quad (\text{II.51})$$

Concernant la zone externe, seules les particules fluides situées dans une zone de diffusion peuvent traverser l'interface, puisque les particules fluides qui atteignent l'interface portées par un sweep sont toutes réentraînées par une éjection. On a donc :

$$\mathcal{F}_{ext \rightarrow int} = \frac{\tau_d}{\tau_s + \tau_d} \int_0^{+\infty} v p(v|S(t) = 2) dv \quad (\text{II.52})$$

La condition de nullité des flux à l'interface revient donc à déterminer la valeur adéquate de  $K_{int}(y_{interface}^+)$ , qui n'est donc pas un paramètre libre du modèle, et est calculée par la relation suivante :

$$K_{int}(y_{interface}^+) = \frac{\tau_d}{\tau_s + \tau_d} \sqrt{\frac{8\pi}{T}} \int_0^{+\infty} v p(v|S(t) = 2) dv \quad (\text{II.53})$$

Dans le cas général, cette expression peut s'intégrer numériquement. Dans le cas particulier où  $\tau_d \gg T$ , c'est-à-dire lorsqu'on peut considérer que  $p(v|S(t) = 2) = \mathcal{G}(0, K_{ext}^2 T/2)$ , cette

condition se réduit à :

$$K_{int}(y_{interface}^+) = \frac{\tau_d}{\tau_s + \tau_d} K_{ext} \quad (\text{II.54})$$

Pour assurer l'équilibre des flux,  $K_{int}(y_{interface}^+)$  doit donc être inférieur au coefficient de diffusion  $K_{ext}$ . Ceci s'explique qualitativement par le fait que dans la zone interne, toutes les particules sont susceptibles de traverser l'interface, à la différence de la zone externe où seule une partie des particules sont en train de diffuser. L'agitation des particules fluides doit donc être plus faible dans la zone interne pour assurer la nullité du flux à l'interface. Le rapport entre les deux coefficients de diffusion est schématisé sur la figure II.13 (en choisissant des valeurs arbitraires pour les paramètres).

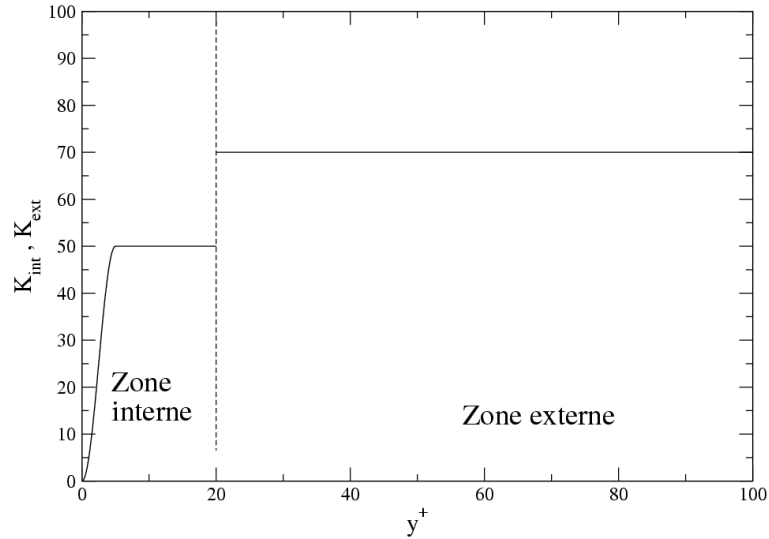


FIG. II.13: Représentation des coefficients de diffusion  $K_{int}$  et  $K_{ext}$

La première contrainte identifiée dans la section précédente a donc été traitée en remarquant que la valeur de  $K_{int}(y_{interface}^+)$  est déterminée par les paramètres de la zone externe. Toutefois, si l'on se contente de cette modélisation, le profil de  $\langle v_{pf}^2 \rangle$  présente une discontinuité marquée à l'interface entre les deux zones. Pour remédier à ce problème, nous avons décidé de rendre aléatoire et propre à chaque particule la variable  $y_{interface}^+$ , distance à la paroi de l'interface : chaque particule "voit" ainsi une distance à la paroi différente, comprise entre deux bornes choisies au préalable, et une zone "tampon" de transition émerge alors comme une conséquence statistique de ce traitement. Ce phénomène, qui est la solution que nous avons choisie pour obtenir un profil continu pour la variance de la fluctuation de la vitesse de l'écoulement normale à la paroi, est représenté sur la figure II.14.

En conclusion, l'étude théorique du traitement de l'interface relative aux particules fluides

fait ressortir deux points principaux : le fait que  $K_{int}(y_{interface}^+)$  soit déterminé par les paramètres de la zone externe du modèle, et la décision de rendre aléatoire la distance à la paroi de l'interface.

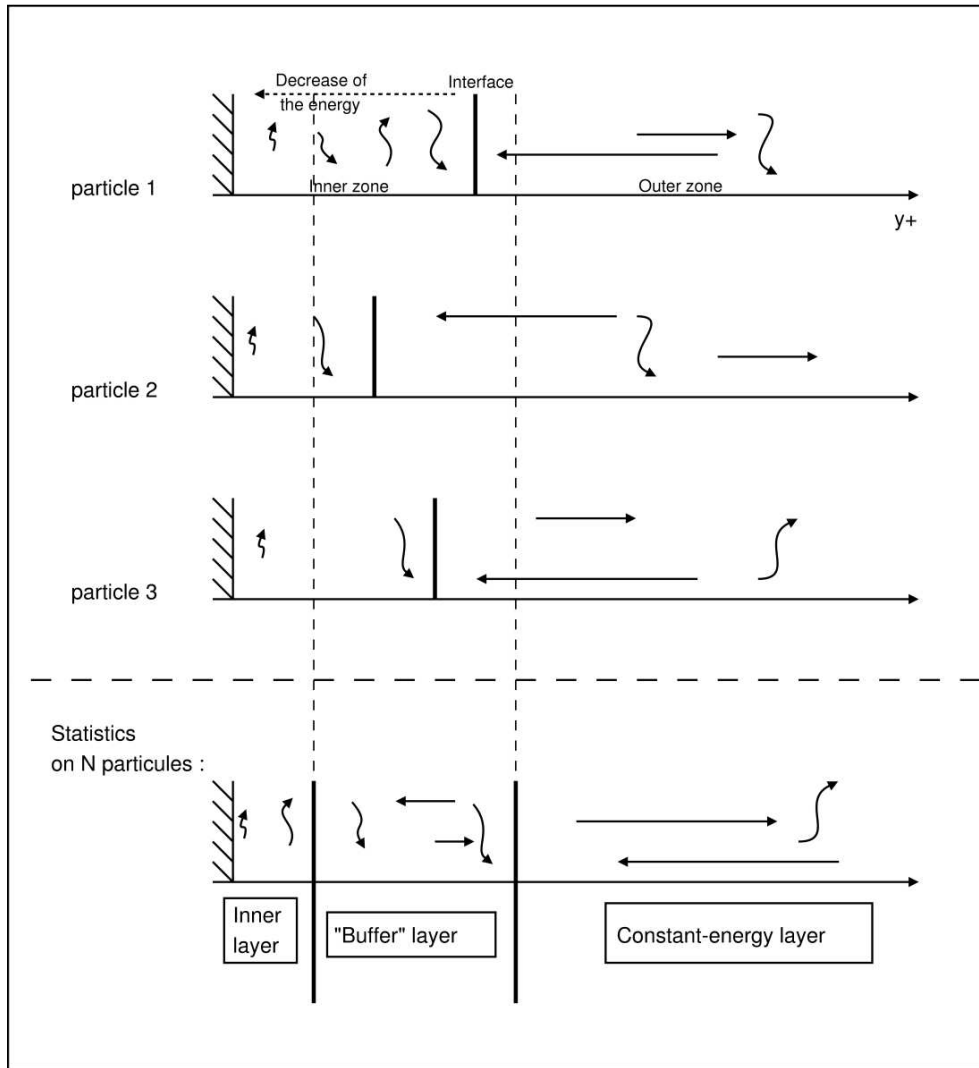


FIG. II.14: Traitement de l'interface – Émergence de la zone "tampon" de la couche limite turbulente

**II.3.3.3.3 Implémentation numérique** La traversée de l'interface par une particule d'inertie arbitraire peut se produire de différentes manières : depuis la zone externe, une particule peut pénétrer en zone interne en étant dans une phase diffusion, transportée par un sweep ou même dans une éjection si sa vitesse et son inertie sont suffisantes. Dans le sens opposé, une particule peut traverser l'interface uniquement si elle diffuse (puisque les structures cohérentes sont absentes de la zone interne). Dans un premier temps, comme c'est le cas le plus complexe, le passage ou non de l'interface par une particule transportée par un sweep est présenté.

Ce traitement spécifique est décrit sur deux diagrammes figure II.15. À chaque instant sont représentées la position la particule  $y_p$ , la vitesse de l'écoulement vu  $V_s$  et entre crochet le sous-modèle qui gère le mouvement de la particule à l'instant suivant (diffusion, éjection...). Quand la particule est prise dans un sweep, un test est effectué pour savoir si elle a traversé l'interface (étape 1). Si c'est le cas, une méthode particulière débute (étape 2). La particule est d'abord replacée à la position de l'interface à un sous-pas de temps  $t + dt'$  ( $t < t + dt' < t + dt$ ).  $t + dt'$  est le moment auquel la particule a effectivement traversé l'interface et est calculé par interpolation linéaire. La vitesse du fluide vu par cette particule est alors inversée et désormais positive et égale à  $V_{struc}$ , et le modèle de diffusion de la zone interne s'applique ensuite de  $t + dt'$  à  $t + dt$ , ce qui revient à supposer que la particule est entrée dans la zone interne. Ensuite, étant donné la vitesse de la particule et son inertie, deux cas sont possibles :

- La particule a effectivement traversé l'interface ( $y_p(t + dt) < y_{interf}$ ). Le traitement s'arrête à cette étape. Au pas de temps suivant, vu la position de la particule, le modèle de diffusion de la zone interne s'applique.
- La nouvelle position de la particule est située hors de la zone interne ( $y_p(t + dt) > y_{interf}$ ), et donc dans la zone externe. Cela signifie que l'inertie de la particule était suffisamment faible pour qu'elle soit entraînée vers le coeur de l'écoulement par l'inversion de la vitesse du fluide vu. Dans ce cas, durant l'étape  $t + dt' \rightarrow t + dt$ , la position et la vitesse de la particule sont recalculées en utilisant le modèle d'éjection.

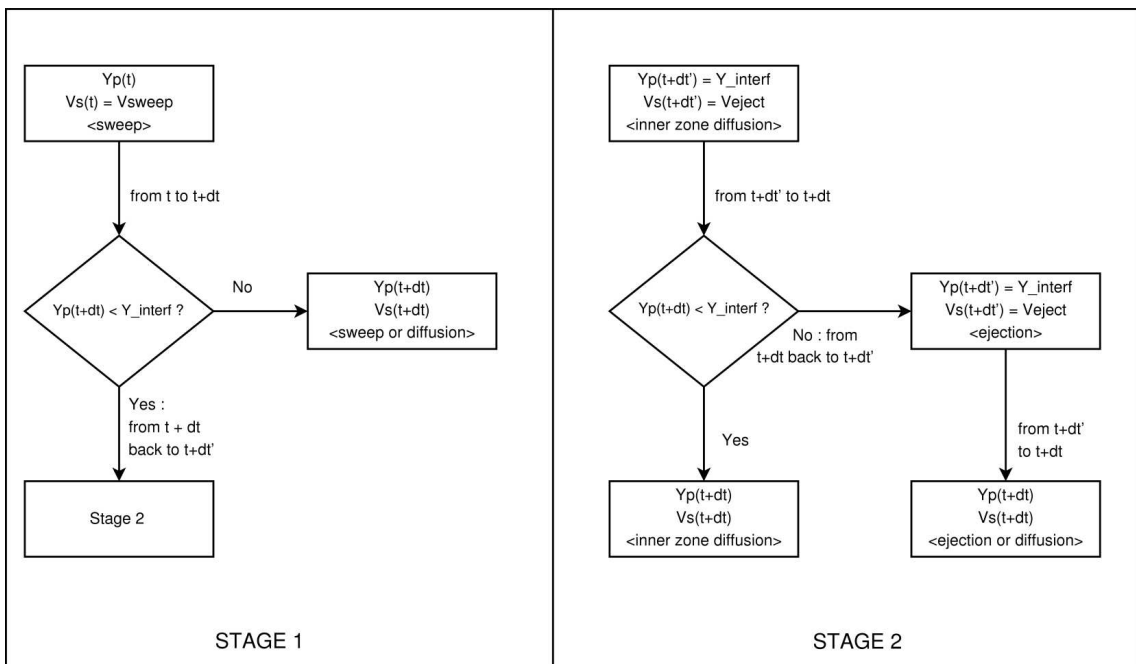


FIG. II.15: Diagrammes du traitement de l'interface entre les deux zones du modèle

### II.3.3.4 Choix de la valeur des paramètres

On récapitule dans cette section les différents paramètres du modèle, et la façon dont leurs valeurs sont fixées. En définitive, les paramètres du modèle sont donc :

- Les durées de vie moyennes des structures cohérentes  $\tau_s$  et des phases de diffusion  $\tau_d$ , ainsi que la vitesse du fluide vu lors des phases cohérentes  $V_{struc}$ .
- Le temps de relaxation  $T$ , commun entre les phases de diffusion de la zone externe du modèle et au modèle de diffusion de la zone interne. Il peut être identifié comme le temps de corrélation Lagrangien dans la zone interne du modèle.
- Les coefficients de diffusion  $K_{int}(y_{interface}^+)$  et  $K_{ext}$ .
- La distance à la paroi de l'interface  $y_{interface}^+$ .

Parmi ces paramètres, certains ont une signification physique claire : c'est le cas notamment du temps de corrélation  $T$ , de la vitesse du fluide vu dans les événements cohérents  $V_{struc}$ , et de la durée moyenne des événements cohérents  $\tau_s$ . Les valeurs de  $T$  et de  $V_{struc}$  peuvent être fixés à partir des simulation numériques directes. Dans notre cas, pour les simulations effectuées dans Code\_Saturne décrites dans la section suivante, on fixe  $V_{struc}^+ = 0.9$  et  $T^+ = 3.2$ . Par contre, à notre connaissance, il existe peu d'études par simulation numérique directe relatives à la durée de vie des événements cohérents. La recherche de données quantitatives sur ces statistiques a toutefois fait l'objet de plusieurs études expérimentales assez anciennes (Cantwell, 1981; Blackwelder et Haritonidis, 1983; Bogard et Tiederman, 1986). Dans nos simulations, les valeurs  $\tau_s^+ = 31$  et  $\tau_d^+ = 10$  ont été choisies, d'une part pour respecter le fait que la majorité des particules est piégée dans les structures cohérentes (donc on fixe  $\tau_s > \tau_d$ ), d'autre part pour obtenir un temps de corrélation Lagrangien acceptable dans la zone externe du modèle. Les bornes de la distance à la paroi de l'interface  $y_{interface}^+$  sont choisies pour correspondre environ à la zone tampon entre la sous-couche visqueuse et la zone logarithmique. Dans nos simulations,  $y_{interface}^+$  varie donc entre 5 et 20. Enfin, les coefficients de diffusion  $K_{int}(y_{interface}^+)$  et  $K_{ext}$  sont choisis pour assurer l'équilibre des flux de particules fluides aux interfaces. La valeur de  $K_{ext}$  est choisie pour respecter l'équilibre avec le Modèle de Langevin Standard. Une fois que  $K_{ext}$  est connu, la valeur de  $K_{int}(y_{interface}^+)$  peut être fixée, comme on l'a vu dans la section précédente.

## II.4 Résultats numériques

Cette partie du rapport a pour objet la présentation des résultats issus de l'implémentation numérique du nouveau modèle de dépôt de particules. Ces résultats ont été obtenus en deux étapes : dans un premier temps, les méthodes numériques utilisées dans les schémas et les expressions théoriques développées dans les sections précédentes ont été validées par l'intermédiaire de programmes-tests mis au point dans cet objectif. Puis, une fois cette validation effectuée, le modèle a été implémenté sur un cas-test simple dans le module Lagrangien du code de calcul de thermohydraulique d'EDF Code\_Saturne.

## II.4.1 Validation des schémas numériques

### II.4.1.1 Schémas numériques utilisés

Les processus stochastiques mis en oeuvre dans notre modèle sont de deux types, des processus de saut (le processus  $S(t)$  qui gère la transition entre les phases dans la zone externe) et des processus de diffusion (dans les périodes de diffusion de la zone externe et dans la zone interne). Pour simuler le processus de saut  $S(t)$ , on s'appuie sur la méthode numérique suivante : d'abord, une propriété du processus  $S(t)$  est :

$$P(S(t + \Delta t) = i | S(t) = i) = e^{-\frac{\Delta t}{\tau_\alpha}} \quad \text{avec } \alpha \in \{d, s\} \quad (\text{II.55})$$

En supposant  $\Delta t \ll \tau_\alpha$ , l'expression se réduit à :

$$P(S(t + \Delta t) = i | S(t) = i) \approx 1 - \frac{\Delta t}{\tau_\alpha} \quad (\text{II.56})$$

La probabilité pour le processus  $S(t)$  de passer d'une valeur  $i$  à une valeur  $j$  pendant un intervalle de temps  $\Delta t$  suffisamment petit est donc  $\Delta t/\tau_\alpha$ . Pour simuler le processus, une réalisation d'une variable aléatoire uniforme standard est calculée à chaque pas de temps, et sa valeur est comparée à  $\Delta t/\tau_\alpha$ . Si cette valeur est supérieure à  $\Delta t/\tau_\alpha$ , alors  $S(t)$  change de valeur, et par conséquent la particule change de phase (de structure cohérente à phase de diffusion, ou vice-versa). On peut d'ores et déjà noter que cette méthode, qui permet donc de simuler un processus Markovien de saut, nécessite un pas de temps petit comparé aux échelles de temps caractéristiques  $\tau_s$  et  $\tau_d$  des structures.

Concernant les phases de diffusion, les périodes de diffusion de la zone externe sont plus faciles à traiter que la zone interne du modèle, au sens où elles sont paramétrées avec des paramètres uniformes (qui ne varient pas avec la distance à la paroi), contrairement à la zone interne qui est fortement inhomogène à cause des gradients importants des paramètres  $A_{int}(y_p^+)$  et  $K_{int}(y_p^+)$ . Dans la zone externe, on utilise donc un schéma de premier ordre développé par Minier et Peirano (2001); Minier et al. (2003) basé sur des formules d'intégration (qui se trouve être exact dans la zone externe grâce à l'uniformité des paramètres). Dans la zone interne, une étude est effectuée pour tester l'influence du schéma sur les statistiques relatives aux particules fluides.

### II.4.1.2 Résultats issus des programmes-tests

Deux programmes indépendants, traitant chacun une zone du modèle, ont donc été développés. Au vu des problématiques propres à chacune des zones (processus à deux niveaux



pour la zone externe et modélisation fortement inhomogène pour la zone interne), cela nous a semblé la meilleure manière d'obtenir des résultats fiables sur la validation des méthodes numériques. Pour s'approcher d'un calcul en conditions réelles, on fixe  $\nu_f = 1.5 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ , et  $u_\tau = 1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ .

**II.4.1.2.1 Cas de la zone externe** Le modèle est unidimensionnel : un segment de longueur 100 (en unité adimensionnée) à donc été programmé et a été divisé en 10 sections de longueur identique. Aux extrémités du segment, la condition aux limites est fixée à un rebond pur : après le rebond, la vitesse du fluide vu et la vitesse de la particule sont inversées. Les paramètres sont initialement fixés avec les valeurs dimensionnées qui sont récapitulés dans le tableau II.1.

Paramètres	Valeur
$\tau_s$	$10^{-4} \text{ s}$
$\tau_d$	$10^{-4} \text{ s}$
$T$	$3 \cdot 10^{-5} \text{ s}$
$K_{ext}$	$100 \text{ m} \cdot \text{s}^{-3/2}$
$V_{struc}$	$0.5 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$

TAB. II.1: Zone externe – valeurs typiques des paramètres

Le premier résultat intéressant concerne l'indépendance des statistiques au nombre de particules fluides, importante dans le cadre des méthodes de Monte-Carlo. L'évolution de la concentration pour une section donnée (choisie arbitrairement puisque le segment est homogène, les paramètres ne dépendant pas de la coordonnée d'espace) est représentée sur la figure II.16, alors que l'évolution de l'énergie est représentée sur la figure II.17. Ces résultats nous permettent aussi de vérifier que les deux premiers moments de la vitesse des particules fluides sont bien calculés.

On note que la convergence en nombre d'échantillons est bien retrouvée, l'erreur est significativement réduite en multipliant le nombre de particules par 100. Plus précisément, l'étude théorique des méthodes de Monte-Carlo indique que l'écart-type sur les statistiques calculées par ces méthodes décroît en  $1/\sqrt{N}$ , où  $N$  est le nombre de particules. En traçant l'évolution de cet écart-type, on constate que c'est effectivement le cas, comme le montre la figure II.18.

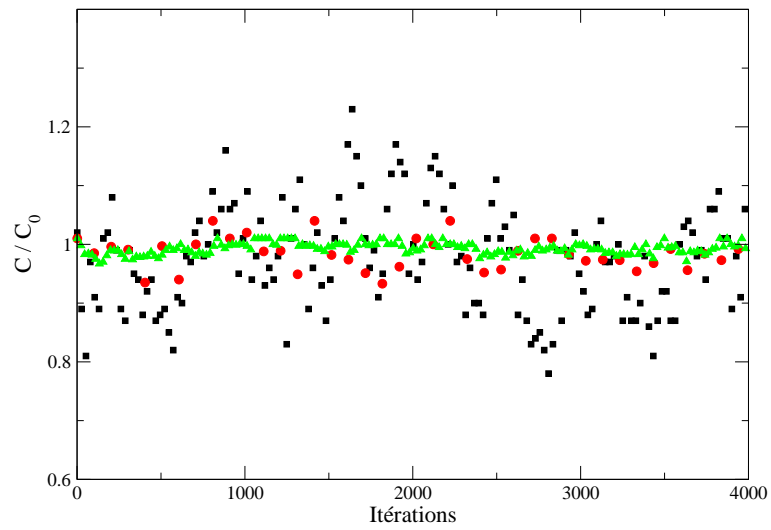


FIG. II.16: Zone externe – Évolution de la concentration des particules pour différents nombres de particules. ( $\square$ ) : 1000 particules; ( $\bullet$ ) : 10 000 particules; ( $\triangle$ ) : 100 000 particules

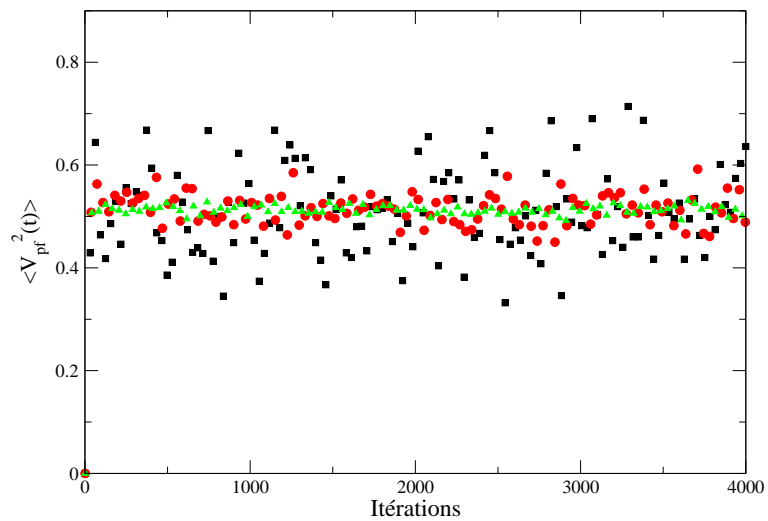


FIG. II.17: Zone externe – Évolution de la variance de la vitesse pour différents nombres de particules. ( $\square$ ) : 1000 particules; ( $\bullet$ ) : 10 000 particules; ( $\triangle$ ) : 100 000 particules

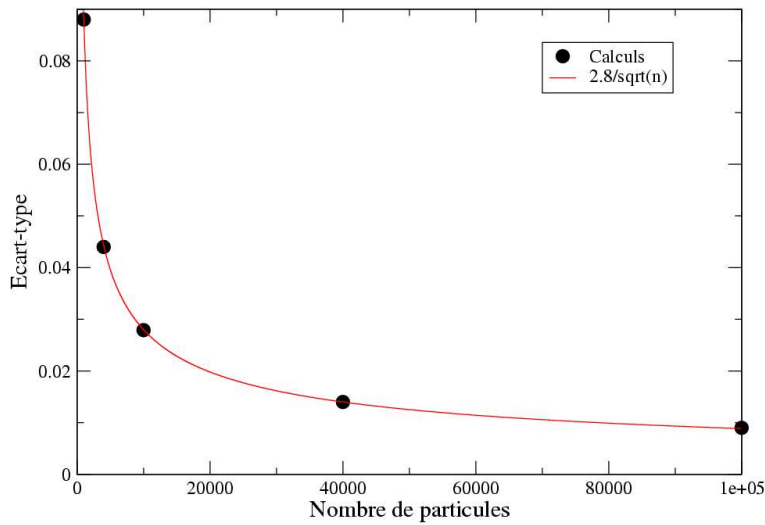


FIG. II.18: Zone externe – Évolution de l'écart-type en fonction du nombre de particules

La concentration moyenne est également égale à  $C_0$ , ce qui correspond au résultat attendu. De même, les paramètres choisis injectés dans la formule de calcul de la variance implique une variance égale à 0.2, ce qui est bien retrouvé par la simulation.

Outre le calcul des deux premiers moments de la vitesse des particules fluides, nous avons vérifié la densité de probabilité obtenue par simulation Monte-Carlo avec l'expression théorique calculée précédemment. Bien que cette expression ne soit pas analytique dans le cas général, il est possible d'obtenir une excellente approximation de cette expression en l'intégrant numériquement. De surcroît, il est intéressant de vérifier qu'en faisant tendre les paramètres vers certaines valeurs, les expressions analytiques prévues sont retrouvées. La figure II.19 montre les PDF de la vitesse des particules fluides avec le choix de paramètres initial issues de la simulation Monte-Carlo et de l'intégration numérique. Pour obtenir une courbe suffisamment régulière avec la simulation Monte-Carlo, un million d'échantillons sont considérés.

On peut observer un très bon accord entre la densité de probabilité calculée et la densité de probabilité théorique. En prenant  $\tau_s = 10^{-3}$  s, et en conservant les valeurs initiales des autres paramètres (notamment  $\tau_d = 10^{-4}$  s), la densité de probabilité dégénère vers les deux distributions de Dirac centrées sur la valeur de  $V_{struc}$  (voir figure II.20).

Enfin, en prenant  $\tau_s = 10^{-4}$  s et  $\tau_d = 10^{-3}$  s, soit  $\tau_s \ll \tau_d$ , la PDF tend vers une gaussienne, puisque la part des particules fluides prises dans une phase de diffusion devient

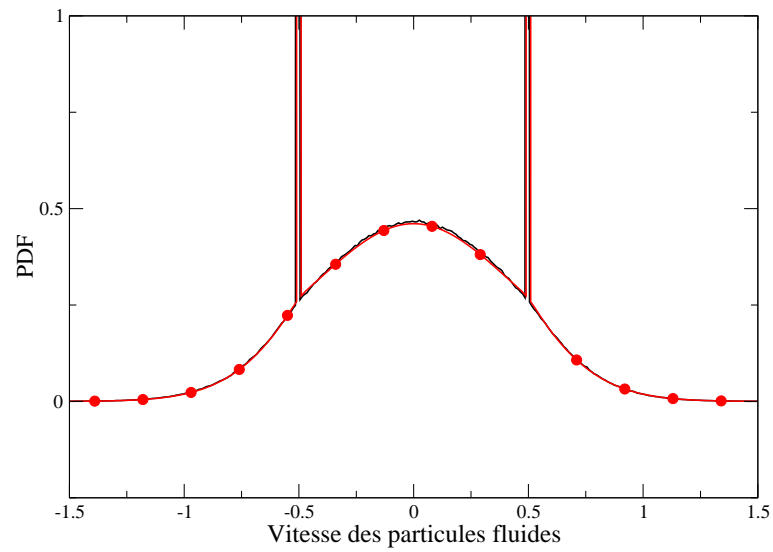


FIG. II.19: Zone externe – PDF de la vitesse des particules fluides avec le choix initial de paramètres. (trait plein) : expression théorique. (-●-) : simulation Monte-Carlo.

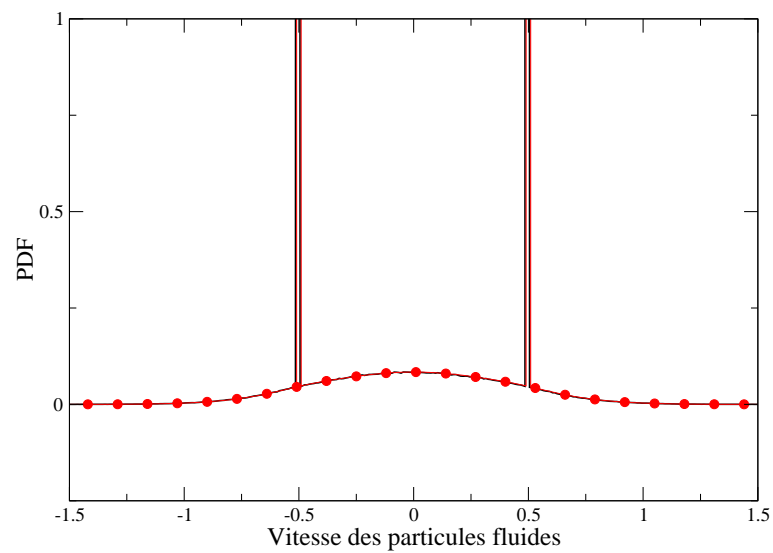


FIG. II.20: Zone externe – PDF de la vitesse des particules fluides avec  $\tau_s \gg \tau_d$ . (trait plein) : expression théorique. (-●-) : simulation Monte-Carlo.

très importante (voir figure II.21).

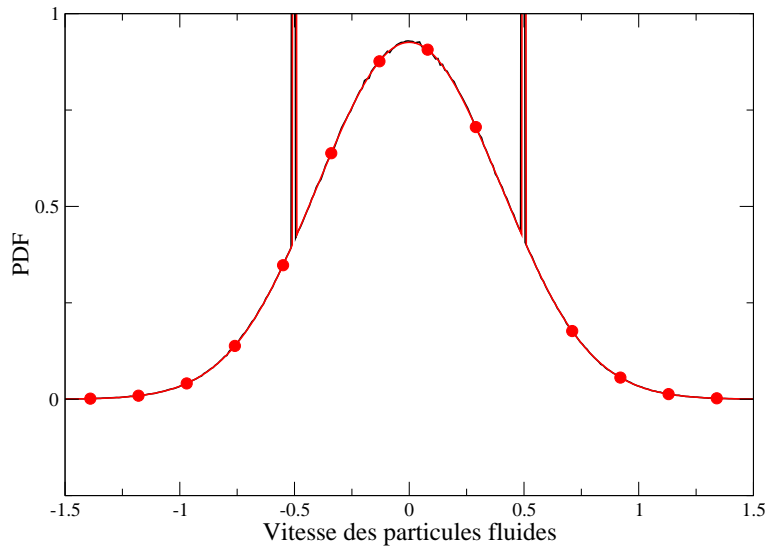


FIG. II.21: Zone externe – PDF de la vitesse des particules fluides avec  $\tau_s \ll \tau_d$ . (trait plein) : expression théorique. (-●-) : simulation Monte-Carlo.

Nous avons également vérifié la capacité du modèle à calculer les flux aux interfaces.

**II.4.1.2.2 Cas de la zone interne** La zone interne a également fait l'objet d'un programme spécifique pour calculer les principales statistiques sur la vitesse des particules fluides dans cette zone. Les valeurs initiales des paramètres sont récapitulées dans le tableau II.2 :

Paramètres	Valeur
$T$	$5 \cdot 10^{-5}$ s
$K_{int}$	$30 \text{ m} \cdot \text{s}^{-3/2}$

TAB. II.2: Zone interne – valeurs initiales des paramètres

La figure II.22 représente une trajectoire typique d'une particule fluide dans la zone interne. On peut observer le caractère extrêmement aléatoire de son parcours : à la différence des trajectoires de particules fluides dans la zone externe, cette trajectoire ne présente pas de périodes dans lesquelles elle serait déterministe, ce qui est cohérent avec la modélisation employée utilisant un processus de diffusion. De plus, l'amplitude de la trajectoire est importante quand la particule se situe dans la zone  $5 < y^+ < 20$ , et beaucoup moins lorsqu'elle se trouve dans le voisinage immédiat de la paroi ( $y^+ < 5$ ). Ceci s'explique par la brusque décroissance du coefficient de diffusion  $K_{int}(y_p^+)$  dans cette région. Pour la même raison, le flux de particules fluides à l'extrémité supérieure du segment ( $y^+ = 20$ ) est très supérieur au flux à ( $y^+ = 0$ ) : celui-ci est nul vu que le coefficient de diffusion  $K_{int}(y_p^+)$  décroît jusqu'à 0.

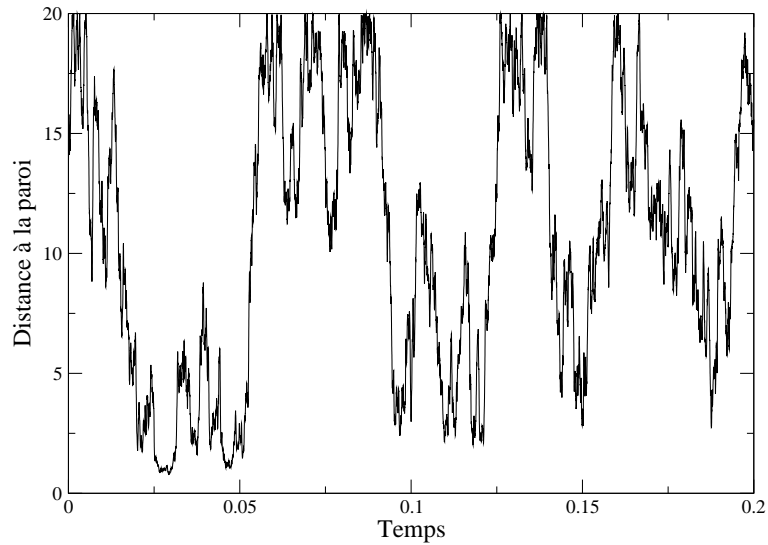


FIG. II.22: Zone interne – Trajectoire typique d’une particule fluide

Les figures II.23 et II.24 montrent respectivement la concentration moyenne en particules fluides dans la zone interne, et la variance  $\langle v_{pf}^2 \rangle$ , comparées aux expressions théoriques, pour les deux schémas du premier et du deuxième ordre développés par Minier et al. (2003). Le pas de temps utilisé est égal à  $10^{-5}$  s. On peut observer que, pour les deux schémas, la variance calculée est en bon accord avec l’expression théorique prévue pour les deux schémas, notamment la partie fortement inhomogène dans le voisinage immédiat de la paroi. La concentration moyenne présente des différences plus marquées entre les deux schémas : on constate que la concentration moyenne calculée par le schéma d’ordre 1 est égale à 1.15 dans la section la plus proche de la paroi, alors que la déviation par rapport à 1 calculée par le schéma d’ordre 2 est plus faible ( $C/C_0 \approx 0.95$ ). C’est pour cette raison que lors de nos simulations avec Code\_Saturne, l’emploi du schéma d’ordre 2 est privilégié.

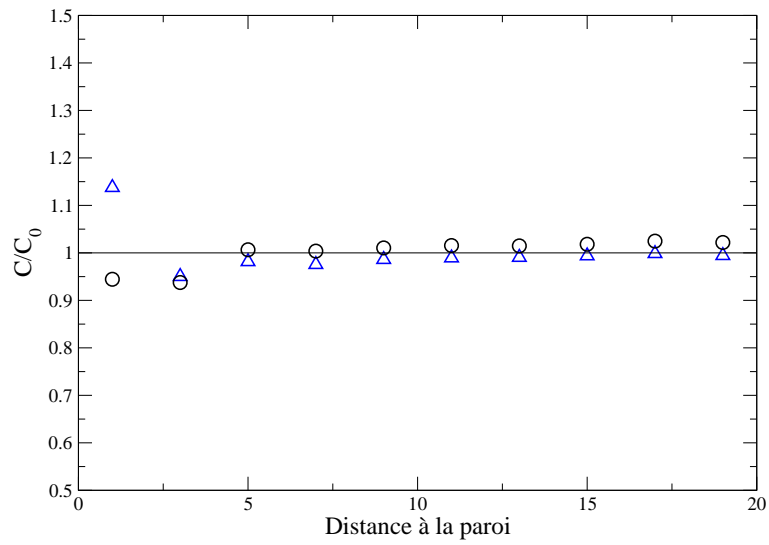


FIG. II.23: Zone interne – Concentration moyenne en particules fluides en fonction de la distance à la paroi. ( $\triangle$ ) : schéma d'ordre 1 ; ( $\circ$ ) : schéma d'ordre 2.

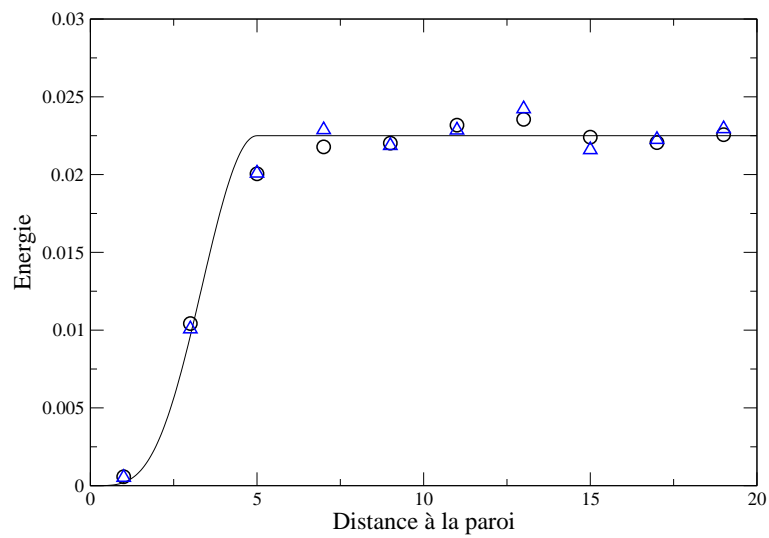


FIG. II.24: Zone interne – Variance de la vitesse en fonction de la distance à la paroi. ( $\triangle$ ) : schéma d'ordre 1 ; ( $\circ$ ) : schéma d'ordre 2.

### II.4.2 Résultats obtenus avec Code\_Saturne

Une fois les méthodes numériques vérifiées à l'aide des programme-tests, le modèle a été implémenté sur un cas-test standard dans le code développé par EDF Code\_Saturne. Alors que les programmes-tests ont permis d'effectuer des vérifications sur les statistiques obtenues avec des particules fluides dans les deux zones du modèle, l'implémentation dans Code\_Saturne présente des objectifs plus ambitieux :

- Elle permet d'obtenir des statistiques sur l'écoulement sur l'ensemble de la zone modélisée  $y^+ < 100$ , et de vérifier qu'elles sont cohérentes avec les données disponibles.
- Nous allons pouvoir vérifier si le raccord avec le Modèle de Langevin Standard se déroule de façon acceptable.
- Elle permet l'application du modèle avec des particules d'inertie arbitraire, alors que pour le moment seuls des statistiques concernant le fluide ont été extraites. Notamment, nous allons pouvoir calculer la courbe de dépôt issue du modèle.

Le cas est celui de l'expérience de Liu et Agarwal (1974), c'est-à-dire un écoulement en air en conduite de diamètre égal à 1.27 cm et de 1.02 m de longueur. Tout d'abord, la phase continue est résolue à l'aide du modèle de turbulence  $k-\varepsilon$ . Les particules sont ensuite injectées dans l'écoulement précalculé. Il n'y a pas d'influence retour des particules sur l'écoulement, ni de prise en compte des interactions des particules entre elles, ce qui correspond à un régime suffisamment dilué (Sommerfeld, 2000).

#### II.4.2.1 Validation avec des particules fluides

La validation d'un modèle Lagrangien avec des particules fluide est une étape cruciale : en effet, une base de données importante concernant les statistiques de l'écoulement (vitesse moyenne, énergie cinétique turbulente, composantes du tenseur de Reynolds) a été développée au fil des ans, d'abord par des études expérimentales, puis par simulation numérique directe. Par conséquent, ces statistiques peuvent servir de références avec lesquelles il est possible de comparer les résultats issus d'un modèle, et de juger ainsi de leur qualité. Dans cette étude, nous nous concentrons plus spécifiquement sur deux statistiques importantes : la vitesse moyenne de l'écoulement normale à la paroi, et l'écart-type de la fluctuation de la vitesse de l'écoulement normale à la paroi  $\langle v^2 \rangle^{1/2}$ . L'inertie des particules est dans un premier temps fixée à  $\tau_p^+ = 10^{-30}$ , et la condition à la paroi est fixée comme un rebond parfait. Après l'injection des particules, l'état stationnaire est atteint et les statistiques peuvent être calculées. La plus importante est la vitesse moyenne normale à la paroi : dans notre cas, nous cherchons à obtenir la satisfaction de l'équation de conservation de la masse dans



l'approximation de la couche limite, c'est-à-dire :

$$\frac{\partial \langle V_{pf} \rangle}{\partial y} = 0 \quad \text{quand} \quad \tau_p \rightarrow 0 \quad (\text{II.57})$$

Pour calculer la concentration en particules, le domaine est donc divisé en couches parallèles, et nous comptons la proportion moyenne de particules qui se situent dans chacune des couches. Les résultats obtenus sont présentés sur les figures II.25 et II.26 pour trois pas de temps différents. Sur le domaine entier, qui couvre aussi la partie où le Modèle de Langevin Standard s'applique (au-delà de  $y^+ > 100$ ), la figure II.25 montre que l'erreur maximale est de l'ordre de cinq pour cent, ce qui reste très acceptable. La figure II.26 est un zoom sur la partie de la couche limite dans laquelle le nouveau modèle s'applique ( $y^+ < 100$ ) : bien qu'elle ne soit pas parfaitement égale à un, les profils montrent que la conservation de la masse est respectée dans une bonne approximation pour un pas de temps  $\Delta t = 10^{-5}$  s (ce qui correspond, en unités normalisées, à un pas de temps de  $\Delta t^+ \approx 0.6$ ). Ce résultat est délicat à obtenir pour deux raisons principales : d'une part, la forte inhomogénéité de la zone interne du nouveau modèle ; d'autre part, les interactions entre les différents type de modèles stochastiques. C'est pourquoi, même si les résultats ne sont pas parfaits et indiquent qu'une amélioration des méthodes numériques utilisées pourrait être souhaitable, ils peuvent être néanmoins considérés comme une validation significative des différentes techniques utilisées pour assurer la conservation de la masse (c'est-à-dire l'emploi du terme additionnel dans la zone interne du modèle, le contrôle des flux de particules fluides à l'interface entre la zone interne et la zone externe, etc.)

Outre la composante normale à la paroi de la vitesse moyenne des particules fluides, la deuxième variable importante est l'écart-type de la fluctuation normale  $\langle v^2 \rangle^{1/2}$ . La figure II.27 montre les résultats issus du modèle comparés à une simulation numérique directe pour différents pas de temps. Bien qu'il ne soit pas complètement satisfaisant (sa pente étant plus prononcée que le calcul DNS dans la zone  $10 < y^+ < 30$ ), le profil de  $\langle v^2 \rangle^{1/2}$  calculé par le modèle présentent tout de même les caractéristiques les plus importantes recherchées et se compare assez bien au profil DNS. De plus, on peut noter qu'un choix différent de paramètre (en l'occurrence, choisir  $y_{interf}^+$  variable entre 10 et 40) permet d'obtenir un profil de  $\langle v^2 \rangle^{1/2}$  qui se superpose aux données DNS, comme représenté sur la figure II.28. Cependant, étant donné que de meilleurs résultats sur le dépôt de particules sont obtenus avec le choix initial de paramètre, celui-ci a été conservé pour les autres calculs.

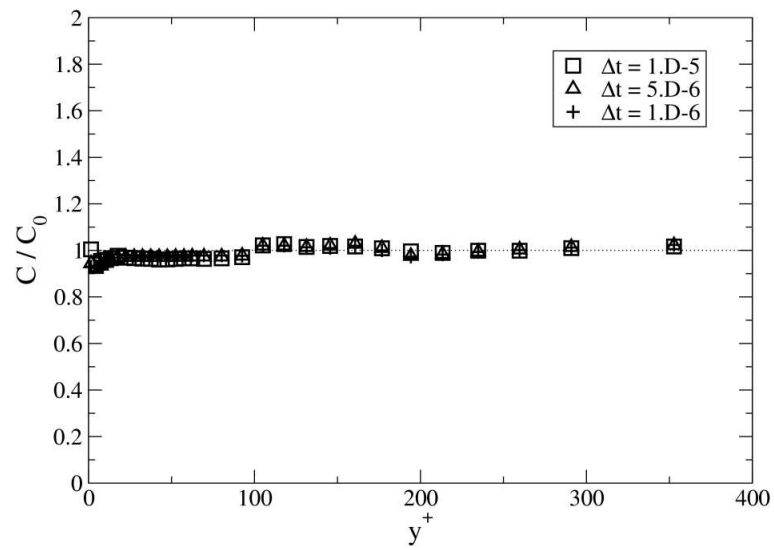


FIG. II.25: Concentration des particules fluides sur tout le domaine pour différents pas de temps

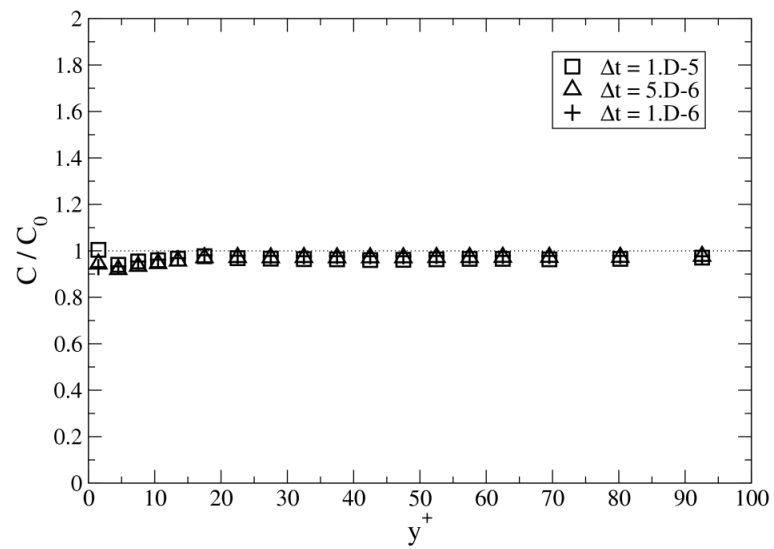


FIG. II.26: Concentration des particules pour différents pas de temps - zoom sur la zone concernée par le nouveau modèle

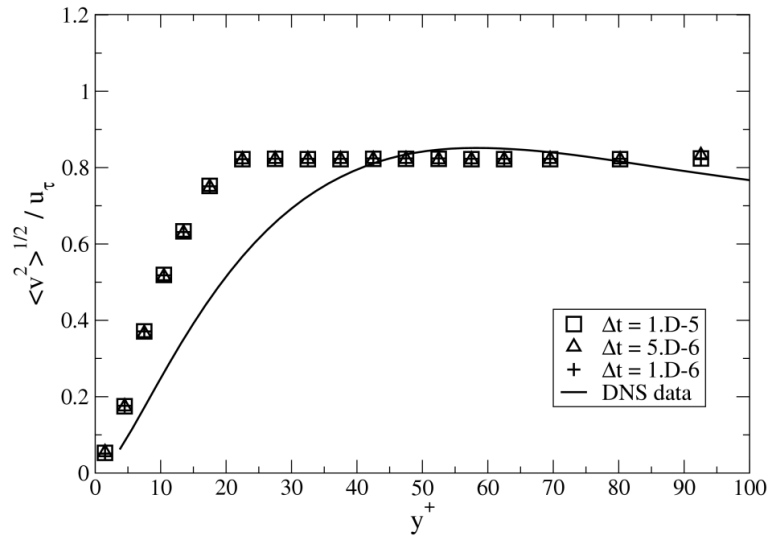


FIG. II.27: Écart-type de la vitesse  $\langle v^2 \rangle^{1/2}$  pour différents pas de temps

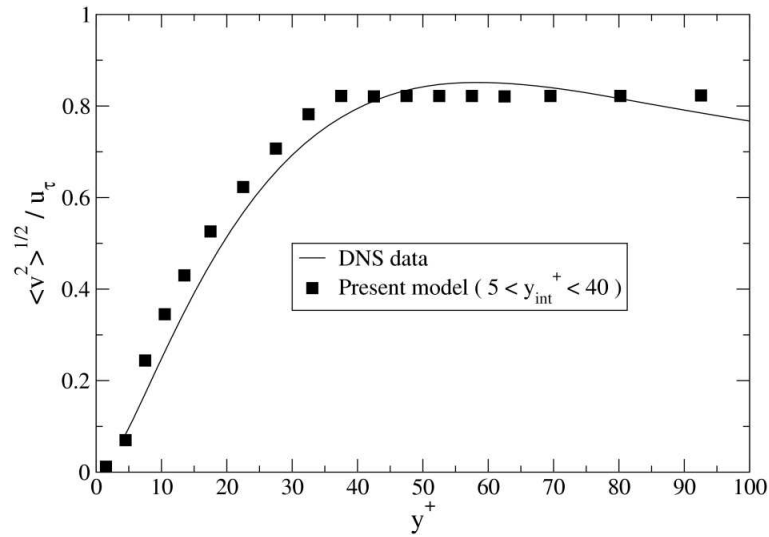


FIG. II.28: Écart-type de la vitesse  $\langle v^2 \rangle^{1/2}$  avec  $5 < y_{int}^+ < 40$ .

### II.4.2.2 Application avec des particules solides

Une fois réalisée la nécessaire phase de validation avec des particules fluides, nous avons entamé l'application du modèle proprement dite en utilisant des particules d'inertie arbitraire. Les caractéristiques de ces particules sont récapitulées dans le tableau II.3.

diamètres ( $\mu m$ )	$\tau_p^+$
0.1	0.0016
1	0.167
2	0.664
3	1.49
4	2.66
5	4.15
7	8.14
10	16.61
15	37.38
20	66.45
25	103.4
40	265.8

TAB. II.3: caractéristiques des particules

**II.4.2.2.1 Concentration moyenne des particules solides** Nous avons dans un premier temps dressé les profils de concentration moyenne normale à la paroi pour trois classes de particules, d'inertie respective telle que  $\tau_p^+ = 0.0016$ ,  $\tau_p^+ = 4.1$  et  $\tau_p^+ = 37$ . Cette statistique est en effet essentielle dans la perspective de calculer un taux de dépôt en accord avec les expériences, vu que le flux de particules vers la paroi dépend de la concentration des particules au voisinage de celle-ci.

Les résultats sont présentés sur la figure II.29 sous forme d'un graphe en échelle log-log. Ces profils ont été obtenus une fois que la concentration a atteint un régime stationnaire (après un temps de calcul  $t^+ \approx 20\,000$ , du même ordre de grandeur que celui obtenu par simulation numérique directe récente (Marchioli et al., 2007)). Les résultats montrent principalement une migration très forte des particules vers le voisinage de la paroi, d'autant plus importante que l'inertie des particule est élevée. Quant aux particules d'inertie très faible ( $\tau_p^+ = 0.0016$ ), elle présentent une concentration très proche de l'uniformité, ce qui était attendu.

**II.4.2.2.2 Calcul du taux de dépôt** Ensuite, la vitesse de dépôt pour des particules de différentes inerties a été calculée. La condition à la paroi a été changée de rebond parfait à dépôt parfait : dès qu'une particule entre en contact avec la paroi (c'est-à-dire dès que  $y_p^+ < d_p^+/2$ ), elle est définitivement collectée : on se place donc dans le cas où tout réentraînement est impossible. Le cas-test de Liu et Agarwal (1974) est conservé et le taux de dépôt est calculé par la méthode développé par Matida et al. (2000). D'abord, différentes sections sont

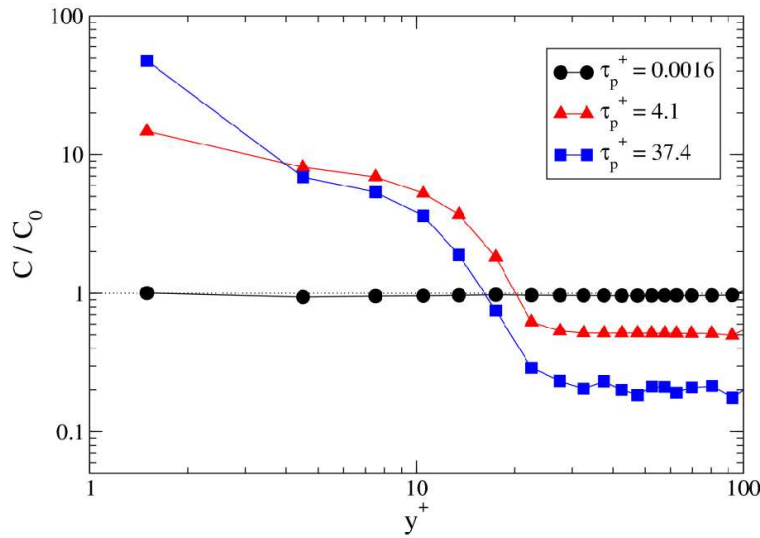


FIG. II.29: Profils de concentration moyenne pour trois classes de particules

définies dans la direction longitudinale de la conduite aux positions notées  $x_i$ , et les fractions  $F_i$  sont définies par :

$$F_i = \frac{\text{Nombre de particules traversant la section } x_i}{\text{Nombre total de particules injectées dans l'écoulement}} \quad (\text{II.58})$$

Puis, la vitesse de dépôt  $k_p$  est définie par :

$$k_p = \frac{U_{bulk} D_t}{4(x_2 - x_1)} \ln \left( \frac{F_1}{F_2} \right) \quad (\text{II.59})$$

Dans cette formule,  $U_{bulk}$  est la vitesse débitante de l'écoulement,  $D_t$  est le diamètre de la conduite, et  $x_1$  et  $x_2$  sont deux sections situées respectivement à 25 cm et 75 cm de l'entrée de la conduite. Au début de chaque calcul Lagrangien, typiquement 10 000 particules par classe sont injectées dans l'écoulement.

Les résultats pour les douze classes de particules étudiées sont présentés sur la figure II.30, et comparés aux résultats expérimentaux réunis par Papavergos et Hedley (1984) et aux résultats issus du Modèle de Langevin Standard. On peut observer que les résultats du nouveau modèle sont en bon accord avec les résultats expérimentaux : en particulier, les principales caractéristiques de la courbe de dépôt sont retrouvées, notamment l'accroissement très rapide du taux de dépôt pour les particules d'inertie moyenne.

La zone correspondant au régime ballistique, avec un taux de dépôt quasi-constant, est

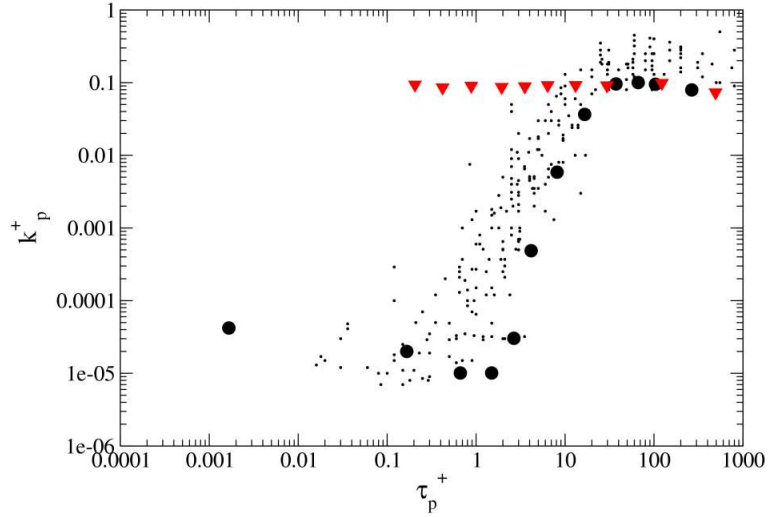


FIG. II.30: Deposition rate. ( $\cdot$ ) : experimental data; ( $\nabla$ ) : Standard Langevin Model; ( $\bullet$ ) : present model.

bien calculée pour des particules d'inertie telle que  $\tau_p^+ > 20$ . En-deçà de  $\tau_p^+ = 1$ , le processus de dépôt est entièrement dominé par le mouvement Brownien : si le coefficient de diffusion Brownienne  $K_{bro}$  est pris égal à zéro, aucune particule de cette inertie ne se dépose. Du reste, pour les particules de cette inertie, on constate que le taux de dépôt tend à augmenter très légèrement si l'inertie des particules diminue. Ce phénomène s'explique par le fait que plus l'inertie des particules est faible, plus celles-ci sont sensibles au mouvement Brownien (le coefficient  $K_{bro}$  croît lorsque le diamètre des particules décroît). Cette tendance, bien que logique, est difficile à confirmer du fait de la rareté des données expérimentales pour des particules de cette inertie. En outre, on peut noter qu'avec le choix actuel de paramètres, la vitesse de dépôt est légèrement sous-estimée par notre modèle pour presque toutes les classes de particules mises en jeu par rapport à la moyenne des résultats expérimentaux.

L'indépendance de la courbe de dépôt calculée par rapport au pas de temps est étudiée sur la figure II.31 ; on peut constater qu'elle est atteinte pour un pas de temps égale à  $\Delta t = 10^{-5}$  s (soit  $\Delta t^+ = 0.6$ ). La légère différence pour les particules de faible inertie pouvant s'expliquer par le bruit statistique sur ces calculs, puisque pour ces classes, entre une et dix particules sur dix mille seulement se déposent : une particule déposée en plus ou en moins peut alors modifier la vitesse de dépôt de façon visible sur le graphe.

On peut enfin noter qu'en utilisant un choix différent de paramètres, c'est-à-dire en fixant  $y_{interf}^+ = 5$ , il est possible d'obtenir une courbe de dépôt plus en accord avec les mesures expérimentales (comme représenté sur la figure II.32). Cependant, cette valeur de la distance à paroi de l'interface donne un profil de l'énergie normale à la paroi qui est trop raide pour être acceptable. C'est pourquoi nous avons choisi de conserver la valeur initiale comprise entre

5 et 20.

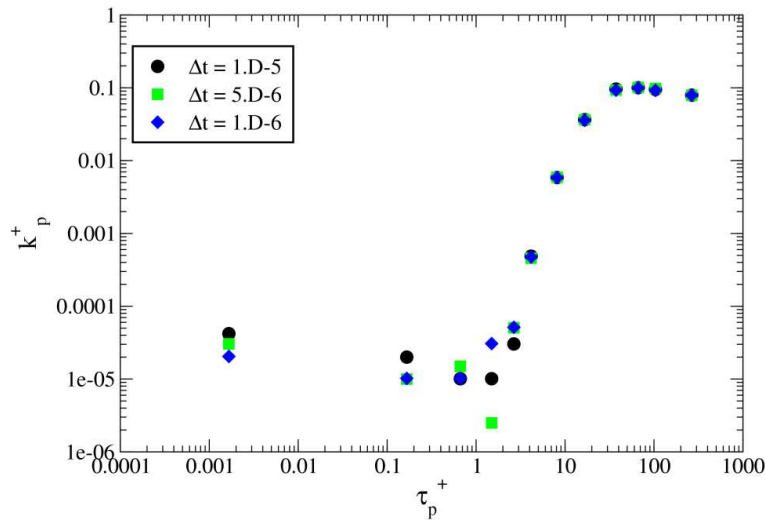


FIG. II.31: Étude de l'indépendance au pas de temps du taux de dépôt.

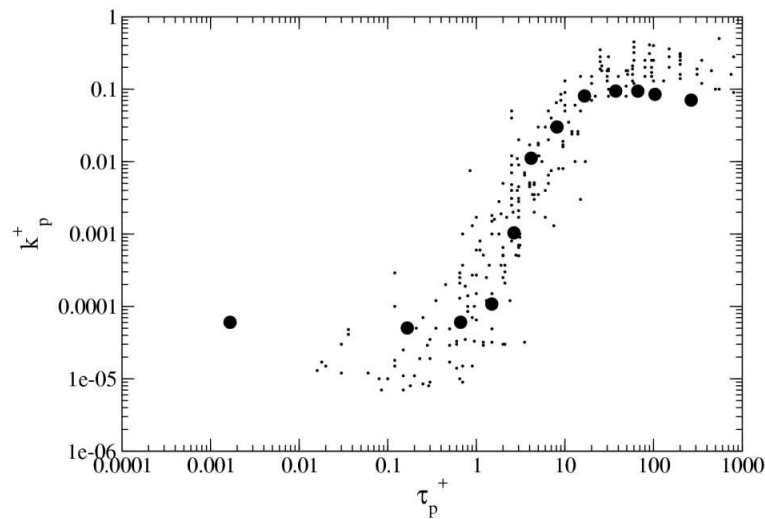


FIG. II.32: Deposition rate. ( $\cdot$ ) : experimental data; ( $\bullet$ ) : present model with  $y_{int}^+ = 5$ .

**II.4.2.2.3 Étude du temps de résidence avant dépôt** Outre la courbe de dépôt, la physique du dépôt de particules dans un écoulement turbulent peut être caractérisée plus précisément grâce à la récente étude par simulation numérique directe de Narayanan et al. (2003). Ce travail a en effet permis la mise en évidence claire de deux régimes de dépôt fonction de l'inertie des particules, que les auteurs ont baptisés "régime de vol libre" et "régime de diffusion". Leur analyse est basée sur le temps de résidence avant déposition d'une particule dans une couche très mince au voisinage immédiat de la paroi ( $y^+ < 3$ ), et sur la vitesse de

la particule au moment où elle se dépose. Qualitativement, le régime de vol libre est associé à des temps de résidence plutôt brefs et des vitesses d'impact plutôt élevées, alors que le régime de diffusion correspond à l'inverse à des temps de résidence longs, voire très longs, dans la couche mince et à des vitesses d'impact faibles. Il est ainsi intéressant de vérifier si notre modèle peut capturer les principales caractéristiques de ces deux régimes de dépôt.

L'analyse par simulation numérique directe a montré que les particules d'inertie élevée se déposent majoritairement avec le régime de vol libre, et qu'au contraire, les particules d'inertie très faible ont tendance à se déposer en suivant le régime de diffusion. Dans le but d'identifier les particules qui se déposent en suivant le régime de vol libre, Narayanan et al. (2003) ont calculé dans ce cas une relation liant la vitesse d'impact  $V_{dep}^+$  au temps de résidence dans la couche  $y^+ < 3$  noté  $T_{res}$  :

$$V_{dep}^+ = \frac{3 - d_p^+/2}{\tau_p^+ \left( 1 - \exp\left(-\frac{T_{res}^+}{\tau_p^+}\right) \right)} \quad (\text{II.60})$$

Nous avons donc mené des calculs similaires avec notre modèle avec trois classes de particules, et les résultats sont présentés sur les figures II.33, II.34 et II.35. Comme on peut le constater, pour les particules d'inertie très faible, le temps de résidence dans la zone  $y^+ < 3$  est très important et la vitesse d'impact très réduite pour toutes les particules qui se déposent : les particules de cette inertie se déposent uniquement en suivant le régime de diffusion. Au contraire, les particules dont l'inertie est la plus importante se déposent en écrasante majorité en suivant le régime de vol libre, comme le montre la figure II.35. Enfin, la figure II.34 est intéressante au sens où les particules se déposent suivant les deux régimes de dépôt : certaines se déposent en vol libre, d'autres, au contraire, présentent un temps de séjour très important au voisinage de la paroi, et suivent donc le régime de diffusion. Qualitativement, le modèle parvient donc à reproduire les deux régimes observés par simulations numériques directes.



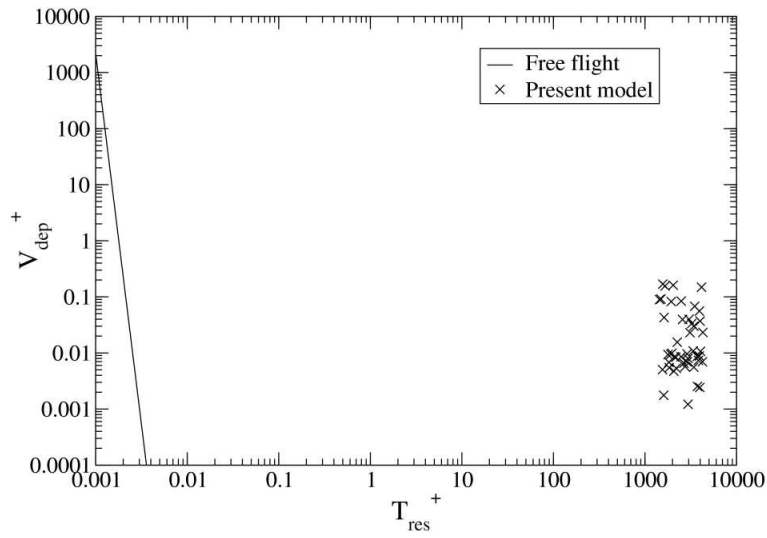


FIG. II.33: Régimes de déposition pour des particules d'inertie  $\tau_p^+ = 0.0016$ .

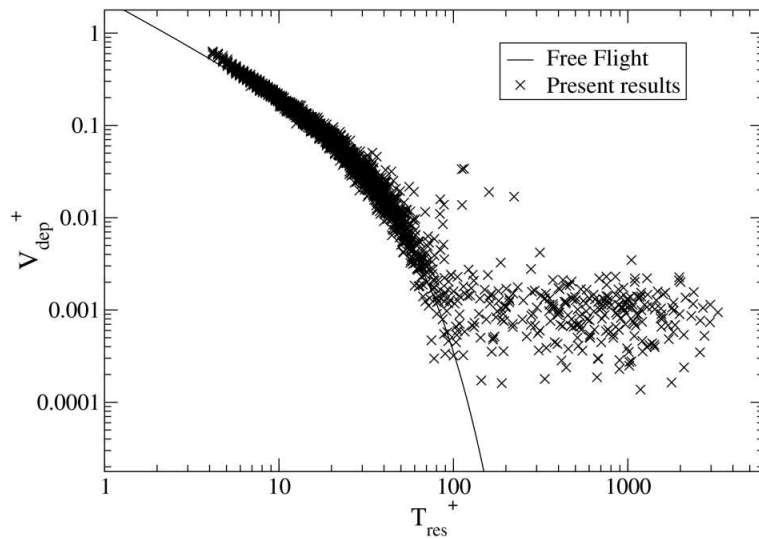


FIG. II.34: Régimes de déposition pour des particules d'inertie  $\tau_p^+ = 8.14$ .

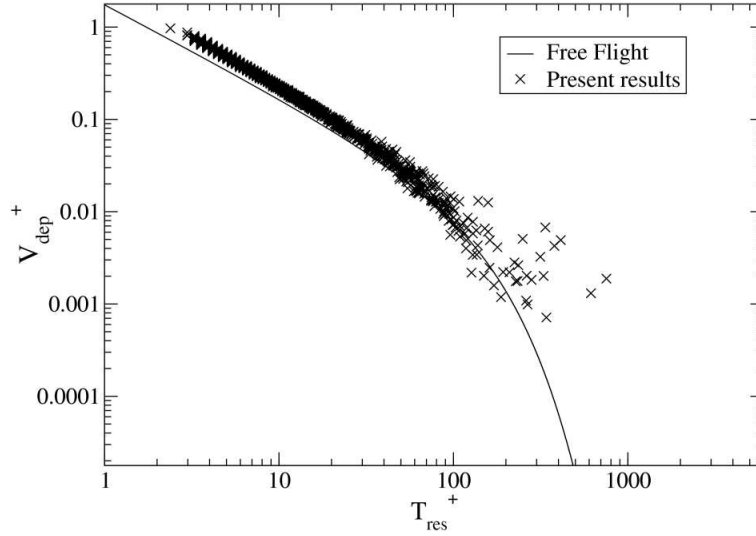


FIG. II.35: Régimes de déposition pour des particules d'inertie  $\tau_p^+ = 103.8$ .

## II.5 Bilan concernant le dépôt de particules

En conclusion, nous dressons le bilan de notre étude de la modélisation du dépôt de particules dans un écoulement turbulent, en commençant par récapituler les principaux points de notre travail, qui, à notre connaissance, figure parmi les premières tentatives pour inclure des caractéristiques géométriques des structures cohérentes dans une description statistique.

### II.5.1 Récapitulatif du travail effectué

En partant, d'une part, d'une étude bibliographique consacrée à la fois aux structures cohérentes de proche paroi et au dépôt de particules, et d'autre part, des résultats issus du Modèle de Langevin Standard, un nouveau modèle stochastique Lagrangien de couche limite visant à simuler le dépôt de particules a été proposé dans ce chapitre. Basé sur une structure monodimensionnelle à deux zones, il propose une simulation explicite des interactions entre les particules présentes dans la couche limite turbulente et certains types de structures cohérentes (sweep et éjection) qui régissent le transport des particules dans la direction normale à la paroi. Pour cela, une modélisation faisant intervenir deux types différents de processus stochastiques a été développée : dans la zone externe, un processus Markovien de saut pilote en effet le passage d'une particule entre les différentes phases, alors qu'un processus de diffusion d'Ornstein-Uhlenbeck gouverne le mouvement d'une particule lorsque celle-ci se trouve dans une phase de diffusion. Dans la zone interne, la forte inhomogénéité et l'absence de structures cohérentes modélisées ont conduit à l'utilisation d'un processus d'Ornstein-Uhlenbeck, avec un terme additionnel représentant le gradient de pression normal à la paroi destiné à assurer la conservation de la masse. Dans cette zone, le mouvement Brownien est également modélisé, au vu de son importance dans le processus de dépôt des particules de très faible inertie par l'ajout d'un processus de Wiener au niveau de la vitesse des particules.

Une fois cette modélisation proposée, ses propriétés statistiques ont été étudiées théoriquement : on s'est notamment assuré des conditions pour lesquelles le modèle calcule une vitesse moyenne normale à la paroi nulle lorsqu'il est utilisé avec des particules d'inertie quasi-nulle, et rend un profil d'énergie cohérent. Une fois ce travail théorique achevé, les deux zones du modèle ont été implémentées numériquement de façon indépendante dans des programmes dédiés, ce qui nous a permis de vérifier les méthodes numériques utilisées en calculant les statistiques les plus importantes sur la vitesse des particules fluides (voire directement la fonction densité de probabilité de la vitesse des particules fluides) et en les comparant aux résultats théoriques.

Le modèle a ensuite été implémenté sur un cas-test standard dans le logiciel Code\_Saturne, principalement pour tester sa capacité à reproduire les résultats expérimentaux disponibles concernant la vitesse de dépôt. Après avoir vérifié que les statistiques connues de l'écoulement sont correctement retrouvées, le modèle est appliqué avec plusieurs classes de particules d'inerties différentes. D'abord, en conservant une condition de rebond parfait à la paroi, on observe bien une tendance très nette des particules inertielles à migrer vers le voisinage immédiat de la paroi, phénomène parfois désigné sous le nom de "turbophorèse". Puis, après avoir fixé la condition à la paroi en dépôt parfait (dès que la particule entre en contact avec la paroi, elle est considérée comme définitivement collectée), la courbe de dépôt issue du modèle a pu être dressée : celle-ci reproduit de façon correcte la brusque augmentation de vitesse de dépôt pour des particules dont l'inertie est comprise entre  $\tau_p^+ = 1$  et  $\tau_p^+ = 20$ . Pour toutes ces statistiques, l'indépendance au pas de temps est également testée. Enfin, à l'instar des résultats d'une étude récente par simulation numérique directe, le modèle parvient à retrouver les deux régimes de dépôt suivant l'inertie des particules, de diffusion et de vol libre.

De notre point de vue, l'approche développée dans ce chapitre a permis une modélisation stochastique originale et efficace des interactions entre particules et structures cohérentes de proche paroi dans l'objectif de calculer le taux de dépôt turbulent.

## II.5.2 Limites actuelles du modèle et perspectives de développement

Pour le moment, la description des structures cohérentes dans le modèle reste très simple : ces événements sont représentés uniquement par des paramètres constants et uniformes, la vitesse  $V_{struc}$  et la durée moyenne d'interaction avec les particules  $\tau_s$ . En particulier, le fait que la vitesse soit un paramètre fixé une fois pour toute au début du calcul donne une fonction de densité de probabilité de la vitesse du fluide vu qui présente deux distributions Delta de Dirac centrée sur  $V_{struc}$  et  $-V_{struc}$ . Pour rendre cette PDF plus physiquement acceptable, il serait nécessaire (et suffisant) de représenter cette vitesse comme une variable aléatoire centrée sur  $V_{struc}$  (pour une éjection) et  $-V_{struc}$  (pour un sweep). Chaque fois qu'une particule entrerait dans une structure cohérente, une réalisation de cette variable serait calculée et conservée pendant la durée du séjour de la particule dans cette structure. Ainsi, les distributions de

Dirac disparaîtraient, et la densité de probabilité de la vitesse de l'écoulement calculée par le modèle se rapprocherait de celle qu'on observe dans les simulations numériques directes.

Une autre limitation actuelle du modèle concerne la dépendance possible de la fréquence des événements sweep et éjection en fonction du nombre de Reynolds de l'écoulement. La connaissance d'une loi concernant la variation de la fréquence et des structures cohérentes en fonction du nombre de Reynolds n'est toutefois pas accessible dans l'immédiat, les simulations numériques directes actuelles étant pour le moment (pour des raisons de coût de calcul) limitées à des écoulements à nombres de Reynolds assez faibles. Si cette loi était connue, il serait alors possible de l'implémenter dans le modèle en rendant, par exemple, les paramètres  $\tau_s$  et  $\tau_d$  dépendants du nombre de Reynolds.

Enfin, comme première modélisation, nous n'avons pas pris explicitement en compte les effets de concentration préférentielle, c'est-à-dire le fait que la localisation des particules dans les structures cohérentes dépende de leur inertie (Picciotto et al., 2004) : la probabilité  $P_s$  de se trouver piégées dans une structure cohérente est identique pour toutes les particules, quelle que soit leur inertie. Là encore, l'implémentation de ce phénomène passerait dans notre modèle par la modification des échelles de temps  $\tau_s$  et  $\tau_d$  pour les rendre fonctions de  $\tau_p^+$ .



## Chapitre III

# Modélisation du réentraînement de particules

Avec ce chapitre, nous abordons la deuxième partie de notre étude, qui traite du phénomène de réentraînement par un écoulement turbulent de particules initialement déposées sur une paroi. Le but de ce travail est de construire un modèle Lagrangien de remise en suspension basé sur les mécanismes physiques prépondérants qui semblent jouer dans le processus. Ce modèle devant, par la suite, être intégré dans une modélisation complète de dépôt-réentraînement pour des cas industriels, il doit de plus présenter un degré de complexité qui reste raisonnable. La démarche suivie et les principaux résultats obtenus ont fait l'objet de la publication d'un article (Guingo et Minier, 2008a) et d'une communication en congrès (Guingo et Minier, 2008c).

Dans un premier temps, une revue de la littérature existant sur le sujet est effectuée. Elle nous a permis de mettre en évidence plusieurs facettes du processus de réentraînement, notamment les mécanismes responsables de l'adhésion d'une particule sur une paroi, et les différents scénarios et mécanismes de resuspension qui ont été proposés au fil des ans. En se basant sur cette étude, nous avons déterminé le scénario de remise en suspension qui nous paraît le plus crédible et nous avons pu tracer les contours de l'approche de modélisation Lagrangienne que nous avons suivie.

Dans la partie suivante, le scénario de resuspension sur lequel nous nous basons pour la construction du modèle est présenté. Cette représentation met en relief le rôle joué par les interactions entre la particule et la rugosité de paroi lors du réentraînement de la particule : la particule est d'abord mise en mouvement, puis heurte éventuellement une aspérité et c'est ce choc qui va, ou non, provoquer la remise en suspension de la particule suivant l'énergie cinétique de celle-ci.

Partant de ce scénario, le modèle de resuspension est alors construit en plusieurs étapes. Puisque le mécanisme retenu repose fortement sur les interactions particule-aspérités de paroi, une description simplifiée de la rugosité de surface est alors proposée. Cette description,

outre sa compatibilité avec le scénario de réentraînement, présente l'avantage de permettre un calcul rapide des efforts d'adhésion s'exerçant sur une particule déposée à l'aide de formules analytiques.

La partie hydrodynamique du modèle complet est développée dans la section suivante. Elle consiste surtout à récapituler l'expression des forces hydrodynamiques retenues et à proposer une modélisation stochastique assez simple de l'écoulement vu par une particule déposée. Une fois effectué le bilan des forces d'adhésion et hydrodynamiques appliquées sur une particule, il est alors possible de modéliser le mouvement (par roulement ou glissement) d'une particule sur la paroi, et d'explicitier le critère final de remise en suspension, qui revient à calculer un bilan d'énergie lors d'un choc avec une aspérité.

Le modèle complet a été implémenté numériquement et les résultats sont présentés en fin de chapitre en plusieurs étapes. On vérifie dans un premier temps si le sous-modèle de forces d'adhésion est capable de calculer une force d'adhésion en accord avec les résultats expérimentaux disponibles, et de reproduire l'effet de la rugosité. Une fois cet aspect du modèle testé, des expériences récentes (Ibrahim et al., 2003) permettent de vérifier la capacité du modèle à retrouver la vitesse de l'écoulement nécessaire pour qu'une particule initialement déposée se mette à rouler sur la paroi. Enfin, des résultats du modèle complet (qui inclut la phase de roulement sur la paroi et la phase d'envol des particules) sont présentés et comparés aux résultats des études expérimentales de Reeks et Hall (2001). Outre cette comparaison aux expériences, le modèle complet est analysé par le biais d'une étude de sensibilité aux paramètres les plus significatifs du modèle.

### III.1 Étude bibliographique

L'étude bibliographique que nous avons menée se décompose en deux parties distinctes : la première a pour objet le réentraînement de particules proprement dit, du point de vue des études expérimentales et de la modélisation. Au cours de cette étude, nous avons réalisé qu'il serait également nécessaire de développer un modèle spécifique dédié au calcul des forces d'adhésion. La seconde partie de l'étude bibliographique vise par conséquent à récapituler les principaux résultats des études relatives à l'adhésion entre une particule et une paroi. En particulier, on s'intéresse spécialement à l'influence de la rugosité de paroi sur les forces d'adhésion.

#### III.1.1 Le réentraînement de particules

L'importance industrielle de la remise en suspension de particules est reconnue depuis plusieurs dizaines d'années. Cependant, du fait de la complexité du phénomène, l'identification des paramètres les plus importants est une tâche difficile. Outre la nature des particules (diamètre, élasticité, charge électrique), de la paroi (matériau), de l'écoulement (nature du

milieu gazeux ou liquide, vitesse de l'écoulement), on peut citer :

- La rugosité de la paroi. Comme on le verra par la suite, ce paramètre intervient de façon essentielle dans le processus de resuspension.
- L'humidité ambiante, dans le cas d'un écoulement en air, qui influence la force d'adhésion entre la particule et la paroi.

Cependant, il n'est pas rare qu'un ou plusieurs facteurs qui jouent un rôle dans le processus ne soit pas répertorié dans les articles rapportant les études expérimentales, rendant délicate l'utilisation de ces travaux dans un but de modélisation. Avec le développement des moyens technologiques et de la connaissance de la nature des paramètres importants, certaines études récentes ont toutefois permis d'obtenir des résultats exploitables sur lesquels il est possible de se baser pour construire un modèle de remise en suspension.

#### III.1.1.1 Études expérimentales

Différentes études expérimentales traitant de la remise en suspension existent dans la littérature. On peut toutefois observer que ces études sont moins nombreuses que celles ayant trait au phénomène de dépôt. Dans un article récent, Biasi et al. (2001) répertorie les principales expériences s'étant tenues pendant les quinze années précédentes.

Parmi celles-ci, l'expérience menée par Reeks et Hall (2001) présente un intérêt particulier. Les particules étudiées sont en oxyde d'aluminium ou en graphite, et présentent un diamètre de 10 et 20  $\mu\text{m}$ . Initialement conditionnées pour éviter la présence d'agglomérats, elles sont disposées sur une plaque d'acier poli avant de démarrer l'écoulement et de mesurer le taux de resuspension après une seconde. À l'occasion de cette étude, des mesures de la force d'adhésion ont également été effectuées : en plaçant les particules déposées dans une ultra centrifuge, et en mesurant la vitesse de rotation de la centrifuge nécessaire pour arracher la moitié des particules de la surface, les auteurs parviennent à une estimation de la force d'adhésion.

Enfin, l'étude expérimentale consacrée au réentraînement la plus récente à notre connaissance est due à Ibrahim et al. (2003). En contrôlant précisément les paramètres critiques (entre autres, rugosité et humidité), les auteurs sont parvenus à obtenir des résultats particulièrement reproductibles. Cependant, cette étude ne traite pas à proprement parler de remise en suspension puisque les statistiques présentées par les auteurs s'appliquent seulement aux particules mises en mouvement par l'écoulement (c'est-à-dire les particules qui se sont déplacées sur la paroi sous l'effet de l'écoulement). Cette expérience est néanmoins très utile pour nous, puisque dans le modèle que nous proposons, la phase de mise en mouvement précède celle de resuspension.



### III.1.1.2 Principaux modèles existants de remise en suspension

L'effort de modélisation relatif à la remise en suspension de particules est basé sur l'observation que des particules déposées sur une surface y adhèrent en général avec une force très importante. Considérant le niveau moyen très faible des fluctuations de la vitesse de l'écoulement dans la direction normale à la paroi au voisinage immédiat de celle-ci, il est donc nécessaire de proposer et de tester des mécanismes de resuspension qui vont au-delà de l'arrachement direct par les forces hydrodynamiques dans la direction normale à la paroi. Dans leur article de revue, Ziskind et al. (1995) répertorient les principaux modèles de remise en suspension, et les classent en deux catégories, qu'ils nomment modèles "quasi-statiques" où modèles "à accumulation d'énergie". Les principaux modèles de ces deux groupes sont décrits dans cette section.

**III.1.1.2.1 Modèles quasi-statiques** Les modèles dit "quasi-statiques" effectuent un bilan des forces et/ou des moments qui s'exercent sur une particule déposée pour en déduire un critère de remise en suspension de la particule. Étant donné l'intensité importante des forces d'adhésion, les propositions s'appuient majoritairement soit sur un bilan de moments, soit sur l'effet supposé des structures cohérentes de proche paroi.

Un modèle de ce type a été développé par Cleaver et Yates (1973, 1976) : à partir d'une description statistique des structures cohérentes de proche paroi, les auteurs établissent un critère de resuspension basé sur la possibilité que la force d'arrachement verticale appliquée par ces structures sur la particule puisse être supérieure à la force d'adhésion. Un mécanisme assez similaire sous-tend le modèle proposé par Braaten et al. (1990) : dans ce modèle, les structures cohérentes sont également responsables de l'arrachement des particules, et s'exercent de façon intermittente au cours du temps. La force d'adhésion est supposée suivre une loi log-normale, et, lorsque la particule "voit" une structure cohérente susceptible de l'arracher, la remise en suspension survient si la force exercée par la structure cohérente est supérieure à la force d'adhésion. Le taux de remise en suspension est alors déterminé par simulation Monte-Carlo.

Une approche par bilan de moments a été suivie par Ziskind et al. (1997) : la particule est considérée comme remise en suspension lorsque le moment exercé sur la particule par les forces hydrodynamiques est supérieur au moment exercé par les forces d'adhésion sur cette même particule. Les auteurs montrent dans ce travail que la rugosité de paroi facilite la remise en suspension de la particule, puisque les forces d'adhésion (et donc le moment qu'elles exercent) sont réduites. Cependant, dans ce travail, les auteurs ne mettent pas en évidence de procédure qui permettrait de calculer le taux de remise en suspension des particules, et ainsi de pouvoir comparer les prédictions de modèle aux expériences.

Le modèle désigné sous le nom de "Rock'n Roll" développé par Reeks et Hall (2001) suit également, sous sa version la plus simple, l'approche par bilan de moments : la particule, en

contact avec une surface rugueuse, subit un moment des forces hydrodynamiques qui peut entraîner sa mise en roulement, et donc, selon les auteurs, sa remise en suspension. Le taux de remise en suspension est alors calculé par une formule qui présente des analogies avec la loi d'Arrhénius de désorption des molécules d'une surface.

**III.1.1.2.2 Modèles dynamiques à "accumulation d'énergie"** Reeks et al. (1988) ont proposé une démarche différente des approches quasi-statiques en proposant le concept d'accumulation d'énergie. Dans ce modèle, baptisé RRH du nom des trois auteurs, ils s'intéressent aux fréquences propres du système particule-paroi dans le sens normal à la paroi. Ils supposent qu'une particule soumise à une force normale à la paroi (les auteurs utilisent une expression empirique d'une force de portance) emmagazine de l'énergie vibratoire si la fréquence de la force de portance est proche de la fréquence propre du système. Le système particule-paroi est donc considéré comme un oscillateur. Si la particule emmagazine suffisamment d'énergie, alors elle peut se détacher de la paroi et donc être réentraînée par l'écoulement. Cependant, les résultats de ce modèle issus de l'étude de Reeks et Hall (2001) sous-estiment de plusieurs ordres de grandeur le taux de resuspension observé expérimentalement. D'après Ziskind et al. (1995), cette sous-estimation est probablement due au fait que la prise en compte de la force de portance n'est pas suffisante pour modéliser correctement la remise en suspension des particules, et donc que la force de traînée longitudinale joue un rôle bien plus important dans le processus.

En se basant sur cette conclusion, Vainshtein et al. (1997) propose une évolution du modèle RRH : dans ce cas, l'oscillateur particule-paroi est considéré dans la direction longitudinale ; la force d'excitation du système particule-paroi est donc la force de traînée longitudinale. Cette approche permet d'obtenir un taux de resuspension supérieur à celui obtenu en ne prenant en compte que la force de portance, ce qui est un résultat cohérent avec le fait que la force de traînée longitudinale est bien plus intense que la force de portance normale dans le voisinage immédiat de la paroi. Cependant, à notre connaissance, ce modèle n'a pas fait l'objet d'une comparaison à des mesures expérimentales.

Enfin, il est utile de mentionner la mise au point par Hontañón et al. (2000) d'un code Lagrangien (le code CAESAR) dédié à la simulation de la remise en suspension de particules, basé sur une approche par bilan de forces et sur une description stochastique de la paroi.

### III.1.2 L'adhésion particules-paroi

La modélisation des forces d'adhésion est une problématique amont de la resuspension de particules. En effet, même si l'on parvient à déterminer le bon mécanisme de resuspension, un mauvais calcul de la force d'adhésion compromettrait grandement les chances d'obtenir un taux de remise en suspension correct. À partir des caractéristiques de la particule, de la surface et du fluide, l'effort de modélisation consiste ici à donner une estimation de la force nécessaire pour arracher la particule de la paroi. Les études que nous rapportons ici

considèrent des particules plongées dans un milieu gazeux, puisque lorsqu'elles sont plongées dans un milieu liquide, la situation devient plus compliquée avec la présence éventuelle de compétition entre plusieurs types de forces (voir la conclusion générale de ce travail et une description des grandes lignes de la théorie DLVO).

Suivant les propriétés du système particule-paroi, l'adhésion peut s'expliquer de différentes façons. D'abord, si la particule est suffisamment petite (de diamètre de l'ordre du micron), Kendall (2001) nous apprend que les forces de van der Waals de type London deviennent prépondérantes, et comme ces forces sont toujours attractives par nature, l'adhésion est le comportement dominant pour les particules de cette taille. Toutefois, les forces de type London ont une portée très faible : elles entraînent l'adhésion uniquement si la surface de la particule est extrêmement proche de la paroi (de l'ordre de quelques nanomètres). C'est pourquoi, lorsque l'on considère des particules plus grosses, il est possible que l'adhésion soit très atténuée : non seulement le poids des particules est moins négligeable, mais les particules de cette taille sont plus sensibles aux effets de la rugosité de la paroi, qui réduit la surface de contact entre les particules et la paroi, et donc l'efficacité des forces d'adhésion de van der Waals. Outre les forces de van der Waals, d'autres types de forces peuvent influencer l'adhésion de la particules, comme les forces Coulombiennes si la particule et la paroi sont chargées électriquement.

L'adhésion peut être également fortement influencée par la présence de molécules adsorbées à la surface de la paroi ou de la particule. Israelachvili (1991) montre notamment que l'adsorption de molécules d'eau peut entraîner une chute de la force d'adhésion dans le cas de particules et de paroi lisse plongées dans l'air. À l'inverse, si on considère des particules et des surfaces présentant une certaine rugosité, il est possible que de la vapeur d'eau se condense dans les interstices du système particule-paroi, et donc provoque le contact entre les deux partenaires et augmentent donc la force d'adhésion.

Ainsi, à l'instar du processus de remise en suspension de particules, l'adhésion des particules à une paroi est un phénomène complexe, pouvant faire intervenir un grand nombre de paramètres. C'est pourquoi les théoriciens se sont de prime abord penchés sur le cas le plus simple de surfaces lisses jusqu'au niveau atomique, et dépourvues autant que possible de contamination par l'humidité ambiante. La théorie développée par Johnson et al. (1971), nommée théorie JKR, parvient à expliquer les résultats expérimentaux obtenus dans ces conditions de façon satisfaisante. Selon cette théorie, pour deux sphères de même diamètre, la force nécessaire pour les séparer est égale à :

$$F_a = 3\pi r_p \gamma \quad (\text{III.1})$$

où  $r_p$  est le rayon des particules et  $\gamma$  l'énergie de surface. En faisant tendre le rayon de l'une des deux sphères vers l'infini, on se place dans le cas qui nous intéresse de l'adhésion d'une

particule et d'une paroi lisse. Dans ce cas, la force d'adhésion est égale à deux fois la force d'adhésion entre deux sphères identiques.

Bien que cette théorie permette avec succès d'expliquer l'adhésion dans le cas d'un contact parfait entre deux surfaces lisses jusqu'au niveau atomique, le traitement des interactions entre une particule et une surface rugueuse, qui sont les plus fréquentes dans les applications industrielles, est malheureusement hors de son champ d'application. C'est pourquoi une partie de l'effort de modélisation porte actuellement sur la recherche d'une méthode pour prendre en compte efficacement la rugosité de surface lors du calcul de la force d'adhésion. Cheng et al. (2002) ont mis au point un modèle précis de forces d'adhésion qui prend en compte la déformation élastique de la particule et de la surface. Une autre approche, parmi les plus suivies pour prendre en compte la rugosité de surface, a été développée par Rumpf (1990). Dans ce modèle, qui vise à modéliser l'adhésion avec une paroi dont la rugosité est de l'ordre du nanomètre, la particule est considérée en contact avec une aspérité de forme hémisphérique. La force d'adhésion (due aux interactions de van der Waals) consiste alors en la somme de deux termes, l'un représentant la force de contact entre la particule sphérique et l'aspérité hémisphérique, l'autre la force de "non-contact" entre la particule et la paroi lisse à l'exception de l'aspérité :

$$F_a = \frac{\mathcal{A}}{6z_0^2} \left[ \frac{r_p R_{asp}}{r_p + R_{asp}} + \frac{R_{asp}}{(1 + r_p/z_0)^2} \right] \quad (\text{III.2})$$

où  $\mathcal{A}$  est la constante d'Hamaker,  $R_{asp}$  le rayon de l'aspérité hémisphérique, et  $z_0$  la distance de contact entre la particule et l'aspérité, approximativement égale à 0.3 nm. Ce modèle a été modifié par Rabinovich et al. (2000a,b) dans le but de décrire plus précisément la géométrie réelle de la rugosité de paroi, et par Katainen et al. (2006) pour prendre un compte un nombre arbitraire de contacts avec des aspérités hémisphériques dans le cas de particules de diamètre suffisamment important.

## III.2 Scénario proposé de réentraînement de particules

L'étude bibliographique précédente nous a permis de recenser les principales hypothèses sur lesquelles se basent les modèles de resuspension actuels. En se basant sur cette étude, nous présentons ici les principaux mécanismes qui, de notre point de vue, semblent à l'oeuvre pendant le processus de resuspension. Comme on l'a souligné plus haut, même si les modèles à accumulation d'énergie ont fourni des informations intéressantes sur la dynamique du système particule-paroi (Ziskind et al., 2000), les études les plus récentes montrent que le réentraînement de particules vient principalement du mouvement de roulement ou de glissement des particules sur la paroi. Certains modèles existants, comme le modèle Rock'n Roll de Reeks et Hall (2001) considèrent d'ailleurs qu'une particule est réentraînée si le moment des forces hydrodynamiques qui s'exercent sur elle est supérieur au moment des forces d'adhésion. Cependant, à notre connaissance, les particules ainsi mises en mouvement sur la paroi

peuvent simplement rouler sur la paroi et donc rester en contact avec elle, la séparation effective avec la paroi ne se produisant pas. C'est pourquoi nous proposons un autre scénario de resuspension, basé sur une approche en deux étapes :

- 1) D'abord, les forces hydrodynamiques peuvent mettre la particule en mouvement sur la paroi (par glissement ou roulement)
- 2) dans un deuxième temps seulement, suivant les interactions entre la particule et les aspérités de la paroi, la particule peut ou non se détacher de la paroi, et donc être effectivement réentraînée par l'écoulement.

Ce scénario repose donc initialement sur le mécanisme qui sous-tend le modèle Rock'n Roll, tout en tentant de décrire plus finement les interactions particule-paroi qui suivent la mise en roulement (ou glissement) de la particule sur la surface.

Ainsi, dans le processus de réentraînement proposé, la rugosité de surface joue un rôle majeur, d'une part en réduisant la force d'adhésion entre la particule et la paroi comparée au cas où la paroi serait lisse, d'autre part en rendant le mouvement de la particule sur la paroi irrégulier et chaotique. En effet, en se déplaçant sur la paroi, la particule va rencontrer une succession d'aspérités le long de son parcours. Ainsi, si elle possède suffisamment d'énergie cinétique et si ces interactions sont assez violentes, la remise en suspension de la particule peut se produire. Plus précisément, en heurtant une aspérité, la particule est remise en suspension si son énergie cinétique est supérieure au potentiel de van der Waals responsable de son adhésion.

Le scénario complet de resuspension est illustré sur la figure III.1 en trois étapes. À la première étape, la particule commence à rouler, étant donné que les forces hydrodynamiques exercent un moment supérieur à celui des forces d'adhésion. Ces forces (hydrodynamiques et d'adhésion) fluctuent pendant le trajet de la particule sur la paroi à cause du caractère aléatoire de l'écoulement vu par la particule et du contact entre la particule et la paroi. C'est pourquoi il est possible que, à un instant donné, les forces d'adhésion deviennent suffisamment importantes pour causer l'arrêt du mouvement de la particule. Cependant, en supposant que la particule continue de rouler sur la surface (étape 2), il est possible qu'elle rencontre un creux, c'est-à-dire un intervalle entre deux aspérités plus grand que le diamètre de la particule. Dans ce cas, si elle poursuit son déplacement, la particule va frapper l'aspérité suivante (étape 3). Lors de ce choc, l'énergie cinétique longitudinale de la particule est convertie en énergie cinétique normale à la paroi : la remise en suspension se produit à ce moment si l'énergie cinétique de la particule est suffisante ; dans le cas contraire, elle continue de rouler sur la paroi. On peut noter que dans cette perspective, on ne considère pas comme choc le contact avec les aspérités pendant l'étape 2 : puisque pendant cette étape, les aspérités sont séparées par une distance plus petite que le diamètre de la particule, le mouvement de roulement est

ici considéré comme suffisamment régulier pour permettre à la particule de continuer à rouler sur la surface.

Chaque étape de ce scénario présente ses propres difficultés de modélisation : à la première étape, nous devons modéliser de façon précise la force d'adhésion et les efforts hydrodynamiques qui s'exercent sur une particule déposée sur une surface. L'étape 2 nécessite la modélisation du mouvement d'une particule sur une surface rugueuse. Enfin, à l'étape 3, il faut modéliser le choc d'une particule avec une aspérité qui peut déclencher la remise en suspension de la particule. On peut observer que ce modèle s'applique principalement de la direction longitudinale de l'écoulement, dans laquelle il est le plus probable que la resuspension s'effectue.

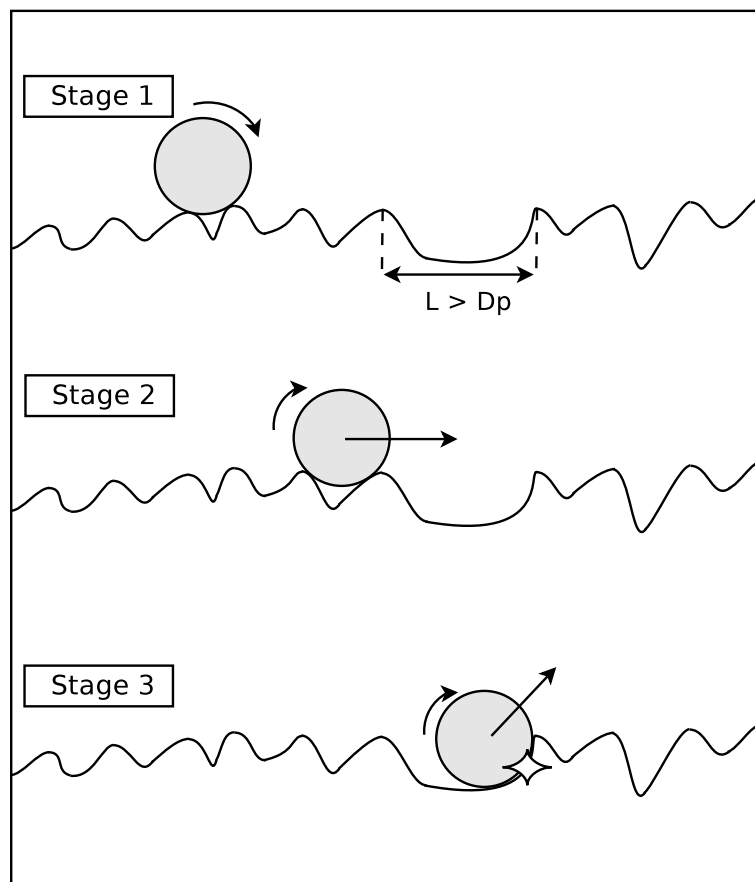


FIG. III.1: Mécanisme de réentraînement proposé mettant en relief le rôle de la rugosité de paroi.

### III.3 Un nouveau modèle stochastique de resuspension

Le scénario que nous avons proposé dans la partie précédente implique la mise au point de plusieurs sous-modèles dédiés à ces différents aspects. Nous les présentons dans cette partie,

en commençant par le sous-modèle dédié au calcul des forces d'adhésion.

### III.3.1 Modélisation de la paroi et de la force d'adhésion

La description du modèle qui nous permet de calculer les forces d'adhésion s'exerçant sur les particules est l'objet de cette partie du rapport. Les particules et les surfaces sont considérées comme électriquement neutres (les interactions Coulombiennes ne sont pas prises en compte). Les effets de capillarité et de chimie de surface sont également négligés : l'adhésion de la particule est donc supposée être causée uniquement par les forces de van der Waals.

Si la surface est lisse jusqu'au niveau atomique, et que la particule est elle-même lisse, sphérique et élastiquement déformable, alors il est possible d'appliquer la théorie JKR (Johnson et al., 1971) qui explique de façon correcte les forces d'adhésion présentes dans un contact de cette nature (Kendall, 2001). Toutefois, la grande majorité des surfaces industrielles sont rugueuses, et présentent en outre souvent différentes échelles de rugosité, dont l'influence sur l'importance des forces d'adhésion est connue depuis les années soixante (Greenwood et Williamson, 1966). La surface de contact effective entre une particule et une surface rugueuse est en effet réduite par rapport à un contact avec une paroi lisse. Ainsi, le problème d'un calcul correct des forces d'adhésion est étroitement lié à une description appropriée de la rugosité de surface. Pour cette raison, le modèle de forces d'adhésion proposé ici se base principalement sur une description stochastique de la rugosité de surface associée au calcul des forces de van der Waals qui interviennent dans ce cas.

#### III.3.1.1 Description stochastique de la paroi

Développer une représentation de la rugosité de surface qui soit à la fois précise et exploitable numériquement est un problème délicat. Dans la littérature, il existe différentes descriptions assez fines qui font appel à des outils mathématiques comme les fractales ou la transformée de Fourier (Eichenlaub et al., 2004), ou faisant appel à des méthodes de reconstruction stochastique (Jafari et al., 2003). Cependant, elles impliquent des calculs assez complexes, et, dans notre approche, le modèle d'adhésion n'étant qu'un maillon du modèle complet de resuspension, ces méthodes sont donc de notre point de vue inadéquates à notre objectif final. Du reste, il est nécessaire de choisir une représentation qui soit à la fois compatible avec le scénario développé dans la section précédente et qui permette un calcul rapide des forces de van der Waals qui assurent l'adhésion de la particule.

Ainsi, le modèle que nous avons développé prolonge l'approche initiée par Rumpf (1990) et suivie par Rabinovich et al. (2000a,b) et Katainen et al. (2006) qui consiste à modéliser la rugosité de surface comme une collection d'aspérités hémisphériques. Cette géométrie rend possible l'évaluation des forces de van der Waals et de leurs moments en utilisant des formules analytiques considérées comme pouvant fournir des estimations acceptables des forces entre particules et surfaces industrielles.

Les surfaces utilisées dans les processus industriels présentent très souvent une rugosité dont les dimensions caractéristiques (hauteur moyenne des pics, distance moyenne pic à pic) sont distribuées sur plusieurs échelles, allant du nanomètre à plusieurs microns (Cornet et Deville, 1998). La plus petite échelle de rugosité est importante au sens où, à cause de la faible portée des forces de van der Waals, c'est elle qui détermine finalement l'intensité de ces forces. De plus, dans le scénario de réentraînement décrit dans la section précédente, la plus grande échelle de rugosité joue également un rôle prépondérant, vu que c'est un choc avec une aspérité de cette échelle qui déclenche ou non la remise en suspension de la particule. Pour ces raisons, ces deux échelles de rugosité (la plus petite et la plus grande) semblent les plus intéressantes à retenir dans un objectif de modélisation. Ainsi, nous proposons de modéliser la rugosité de surface comme une superposition de deux échelles de rugosité : l'une de l'ordre du micron, qu'on désigne dans la suite en tant que "rugosité de grande échelle", l'autre de l'ordre du nanomètre, appelée dans notre modèle "rugosité de petite échelle"). Ce choix de modélisation est illustré sur la figure III.2.

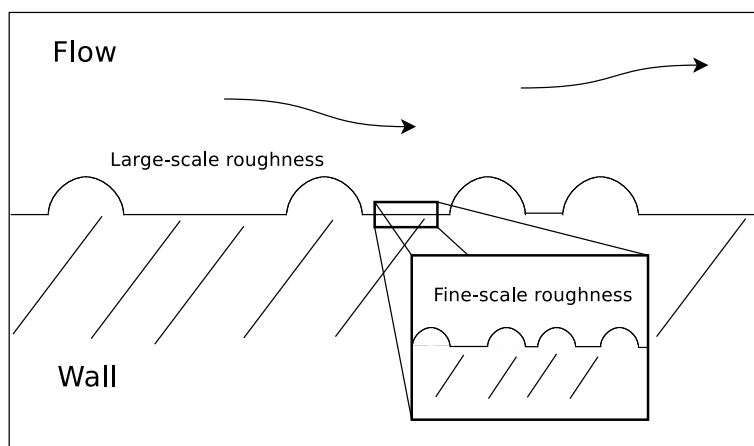


FIG. III.2: Schéma de la géométrie simplifiée de la rugosité de la paroi, consistant en la superposition de deux échelles d'aspérités hémisphériques.

Le scénario de réentraînement est un modèle 1D qui traite de la direction longitudinale de l'écoulement, et d'un mouvement longitudinal des particules sur la paroi : nous sommes donc principalement intéressés par la distribution longitudinale des aspérités de grande échelle. En considérant que ces aspérités sont réparties de façon aléatoire sur la surface, il est donc raisonnable de modéliser l'écart moyen entre deux aspérités par une variable aléatoire qui suit une loi de Poisson de paramètre  $L_{large}$ . Il peut être utile de rappeler que les statistiques de points répartis au hasard sur un intervalle suivent une loi de Poisson (Papoulis, 1991). De plus, pour faciliter le calcul des forces de van der Waals, la rugosité de petite échelle est caractérisée par une densité d'aspérité  $\rho_{fine}$ . De même, ces aspérités sont considérées comme réparties au hasard sur la paroi : en notant  $A_p$  l'aire de contact entre une particule et la surface, le nombre d'aspérités de petite échelle est donc une variable aléatoire qui suit une loi



de Poisson de moyenne  $\rho_{fine} \times A_p$ .

### III.3.1.2 Calcul de la force d'adhésion et des moments

En suivant Katainen et al. (2006), les forces de van der Waals entre deux sphères pleines en contact, en supposant que ces forces sont additives et non-retardées, sont données par la formule (Israelachvili, 1991) :

$$F_a = \frac{\mathcal{A}_{12}}{6z_0^2} \left( \frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} \right) \quad (\text{III.3})$$

où  $\mathcal{A}_{12}$  est la constante d'Hamaker effective,  $R_1$  et  $R_2$  sont les rayons des deux sphères et  $z_0 \approx 0.3$  nm est la distance de contact entre les deux sphères et correspond environ à un diamètre atomique. Ici, une particule est considérée comme la première sphère et une aspérité de petite échelle est considérée comme la seconde. On néglige donc le terme de "non-contact" du modèle original de Rumpf (1990), dont l'influence est du second ordre (Katainen et al., 2006). Dans ce contexte, pour appliquer notre modèle d'adhésion, il est nécessaire d'évaluer correctement le nombre d'aspérités de petite échelle en contact avec la particule. Considérant les forces de van der Waals comme additives, la force d'adhésion totale est donnée par ce nombre multiplié par la force d'adhésion élémentaire fournie par l'équation III.3.

Le modèle d'adhésion dépend du rapport entre le diamètre de la particule et l'intervalle entre les aspérités de grande et de petite échelles de la paroi. En fonction de ces rapports, différents cas sont possibles :

- Cas A : La particule est suffisamment petite pour s'intercaler entre deux aspérités de petite échelle : elle "voit" une surface lisse. Ce cas est représenté sur la figure III.3.
- Cas B : La particule est assez grande pour être en contact avec une ou plusieurs aspérités de petite échelle mais suffisamment petite pour s'intercaler dans un intervalle entre deux aspérités de grande échelle. Ce cas est également illustré sur la figure III.3.
- Cas C : La particule est suffisamment grande pour être en contact avec une ou plusieurs aspérités de grande échelle. Ce cas est présenté sur la figure III.4.

Le cas A est l'unique cas dans lequel la surface vue par la particule est considérée comme lisse. Ainsi, dans cette situation, la théorie JKR peut s'appliquer et on rappelle que la force d'adhésion est donnée par la formule :

$$F_a = 3\pi r_p \gamma \quad (\text{III.4})$$

où  $\gamma$  correspond à l'énergie de surface et  $r_p$  au rayon de la particule.

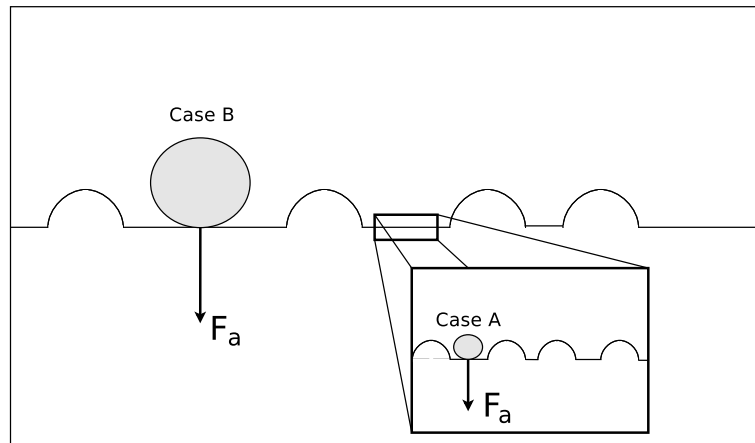


FIG. III.3: Modèle de forces d'adhésion, cas A et B : particule de taille petite et moyenne en contact avec une paroi dont la rugosité est représentée par des aspérités hémisphériques.

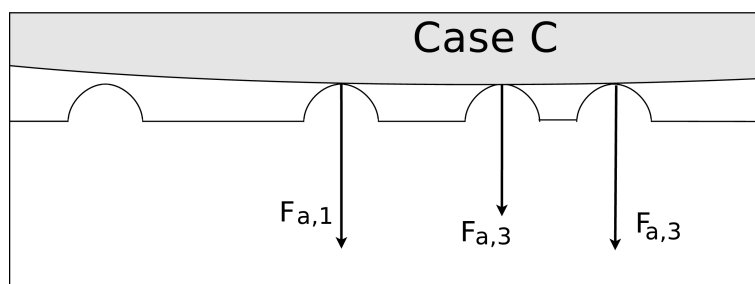


FIG. III.4: Modèle de forces d'adhésion, cas C : particule de grande taille en contact avec une paroi dont la rugosité est représentée par des aspérités hémisphériques.

Concernant le cas B, pour évaluer le nombre d'aspérités de petite échelle en contact avec la particule, il est dans un premier temps nécessaire d'estimer l'aire de contact entre la particule et la surface. Dans ce but, on utilise le rayon de contact fourni par la théorie JKR dans le cas où aucune charge n'est exercée sur la particule, considérée ici comme une hypothèse raisonnable. Pour deux sphères de rayon  $R_1$  et  $R_2$ , ce rayon est donné par la formule :

$$a_0 = \left( \frac{3\pi\gamma R_{eff}^2}{E} \right)^{1/3} \quad (\text{III.5})$$

où le rayon effectif de contact est défini par (Kendall, 2001) :

$$R_{eff} = \frac{2R_1R_2}{R_1 + R_2} \quad (\text{III.6})$$

Et  $E$  le module d'Young composite défini par (Ibrahim et al., 2003) :

$$E = \frac{4}{3} \left( \frac{1 - \nu_1^2}{E_1} + \frac{1 - \nu_2^2}{E_2} \right)^{-1} \quad (\text{III.7})$$

où  $E_1$  et  $E_2$  sont les modules d'Young et  $\nu_1$  et  $\nu_2$  les coefficients de Poisson des deux sphères. En posant  $R_1 = r_p$  et  $R_2 \rightarrow \infty$  (la surface sur laquelle repose la particule est considérée comme une sphère dont le rayon tend vers l'infini), le rayon de contact pour une particule déposée sur une surface lisse est finalement donnée par :

$$a_0 = \left( \frac{12\pi\gamma r_p^2}{E} \right)^{1/3} \quad (\text{III.8})$$

Une fois l'aire de contact  $A_p = \pi a_0^2$  calculée, le dernier pas à effectuer est le calcul du nombre d'aspérités de petite échelle en contact avec la particule. Vu que les aspérités sont distribuées aléatoirement sur la surface, ce nombre est modélisé par une variable aléatoire qui suit une loi de Poisson de moyenne  $\rho_{fine} \times A_p$  et est noté  $\mathcal{P}(\rho_{fine} \times A_p)$  (dans cette formule,  $\mathcal{P}$  désigne une réalisation d'une variable qui suit une loi de Poisson). Ainsi, pour le cas B, la force d'adhésion est donnée par la formule :

$$F_a = \mathcal{P}(\rho_{fine} \times A_p) \frac{\mathcal{A}_{12}}{6z_0^2} \left( \frac{r_p \times r_{fine}}{r_p + r_{fine}} \right) \quad (\text{III.9})$$

Le cas C concerne les particules les plus grandes et présente une étape additionnelle. Dans ce cas, nous avons en effet dans un premier temps à déterminer le nombre d'aspérités de grande échelle en contact avec la particule. Comme les aspérités de ce type sont également distribuées de façon aléatoire, ce nombre peut être estimé par une variable aléatoire suivant une loi de Poisson de moyenne  $d_p/L_{large}$ . Puis, à l'instar du cas B, l'aire de contact par aspérité de grande échelle est calculée pour déterminer le nombre d'aspérités de petite échelle en contact

avec la particule. Dans ce but, nous utilisons l'équation (III.5), avec  $R_1 = r_p$  et  $R_2 = R_{large}$ . La force d'adhésion totale est alors calculée par :

$$F_a = \sum_{i=1}^{\mathcal{P}(d_p/L_{large})} F_{a,i} \quad (\text{III.10})$$

$$= \sum_{i=1}^{\mathcal{P}(d_p/L_{large})} \mathcal{P}_i(\rho_{fine} \times A_p) \frac{\mathcal{A}_{12}}{6z_0^2} \left( \frac{r_p \times r_{fine}}{r_p + r_{fine}} \right) \quad (\text{III.11})$$

À ce point de notre exposé, nous avons complètement décrit la méthode mise en oeuvre pour calculer la force d'adhésion dans les différents cas possibles. Toutefois, puisque le scénario de réentraînement implique également une phase de roulement et/ou de glissement, il nous faut également calculer la composante tangentielle de la force d'adhésion ainsi que son moment. Dans les deux cas, on suppose que cette composante tangentielle est proportionnelle à la composante normale de telle sorte que :

$$F_t = \mu_s F_a \quad (\text{III.12})$$

où  $\mu_s$  est le coefficient statique de frottement.

Le calcul du moment de la force d'adhésion dépend quant à lui des cas A, B ou C. On s'intéresse au calcul des moments au point O, identifié comme la zone de contact entre la particule et la surface la plus aval. C'est en effet autour de ce point que la particule tend à pivoter si le moment des forces hydrodynamiques devient supérieur au moment des forces d'adhésion. En ce point O, le moment de la composante tangentielle  $F_t$  est nulle. Dans les cas A et B, la force d'adhésion est supposée s'exercer au centre de l'aire de contact. Le moment de cette force calculé au point O est donc :

$$\mathcal{M}_O(F_a) = F_a \times a_0. \quad (\text{III.13})$$

Le cas C implique d'abord la détermination de l'aspérité la plus avale parmi les aspérités en contact avec la particule pour déterminer la position du point O. Ensuite, les distances  $d_i$  entre les aspérités et l'aspérité qui représente le point O sont calculés, et le moment en O est alors donné par la formule :

$$\mathcal{M}_O(F_a) = \sum_{i=1}^{\mathcal{P}(d_p/L_{large})} F_{a,i} \times d_i \quad (\text{III.14})$$

### III.3.1.3 Raffinement de l'échelle fine de rugosité

Jusqu'à présent, la représentation de la rugosité de surface que nous avons développée utilise deux tailles d'aspérités : au sein de chaque échelle, les aspérités sont de taille identique.

Cependant, dans le cas de surface industrielles réelles, la taille des aspérités est fréquemment distribuée sur un intervalle plus large. Robbe-Valloire (2001) a souligné le fait que les surfaces obtenues à partir de différents procédés industriels présentent des rugosités dont la taille était très variable et pouvait être modélisée par une variable aléatoire suivant une loi log-normale, dont l'écart-type est de l'ordre de la moyenne.

En se basant sur cette observation, le modèle sur la rugosité de petite échelle (qui détermine finalement l'intensité des forces d'adhésion) peut être légèrement modifié : en supposant que les particules mises en jeu sont de taille beaucoup plus importante que les aspérités de petite échelle ( $r_p \gg r_{fine}$ ), l'équation (III.9) devient :

$$F_a \approx \mathcal{P}(\rho_{fine} \times A_p) \frac{\mathcal{A}_{12} \times \tilde{r}_{fine}}{6z_0^2}. \quad (\text{III.15})$$

Dans cette équation,  $\tilde{r}_{fine}$  est maintenant une variable aléatoire log-normale de moyenne  $\langle r_{fine} \rangle$  et d'écart-type de valeur égale à sa moyenne. Ainsi, avec cette description de la rugosité de petite échelle, quand  $\rho_{fine} \times A_p \gg 1$ , la force d'adhésion  $F_a$  calculée par l'équation III.15 tend vers une variable aléatoire qui suit une loi log-normale, dont la valeur moyenne est égale à l'écart-type.

#### III.3.1.4 Résumé du modèle de forces d'adhésion

En résumé, le calcul des forces d'adhésion est, dans ce modèle, très dépendant des interactions entre particule et rugosité de paroi, en particulier du rapport entre la taille de la particule et l'intervalle moyen entre les aspérités dans les deux échelles de rugosité modélisées. Ce calcul repose sur la procédure suivante : dans un premier temps, le nombre d'aspérités de grande échelle en contact avec la particule  $\mathcal{P}(d_p/L_{large})$  est calculé. Si ce nombre est strictement plus grand que zéro, nous sommes en présence du cas C : dans cette situation, le nombre d'aspérités de petite échelle par aspérité de grande échelle est évalué, et partant, la force d'adhésion est calculé par l'équation III.11). Sinon, si  $\mathcal{P}(d_p/L_{large}) = 0$ , on se trouve soit dans le cas A, soit dans le cas B. Pour le déterminer, il est nécessaire de calculer  $\mathcal{P}(\rho_{fine} \times A_p)$ , nombre d'aspérités de petite échelle en contact avec la particule. Si  $\mathcal{P}(\rho_{fine} \times A_p) = 0$ , nous sommes en fait en présence du cas A et la théorie JKR s'applique. Sinon, c'est le cas B, et la force d'adhésion est calculée par l'équation III.9.

### III.3.2 Modélisation des efforts hydrodynamiques

Dans la section précédente, nous avons présenté le sous-modèle consacré au calcul des forces d'adhésion, qui repose fortement sur le calcul des interactions entre les particules et la rugosité de paroi. Une autre partie importante du modèle complet est l'aspect hydrodynamique, que nous décrivons dans cette section du rapport. Dans un premier temps, les efforts qui s'exercent sur une particule déposée et plongée dans un écoulement que nous avons choisis de modéliser sont présentés. Puis, une représentation de l'écoulement vu par une particule

déposée est explicitée.

### III.3.2.1 Forces hydrodynamiques retenues

À l'instar du modèle de dépôt qui a été présenté dans le chapitre précédent de ce rapport, le type de force modélisée ici est la force de traînée. En effet, même si un type de force de portance a été prise en compte dans les efforts de modélisation de différentes équipes (Reeks et Hall, 2001; Ibrahim et al., 2003), il semble toutefois que la force de traînée joue un rôle prépondérant dans le processus de remise en suspension des particules, spécialement dans le scénario que nous avons proposé en début de chapitre.

Dans cette étude, les particules sont considérées comme suffisamment petites pour qu'une fois déposées sur la paroi, elle soient complètement plongées dans la sous-couche visqueuse de la couche limite turbulente : la force de traînée qui s'applique sur les particules est donc la force de traînée de Stokes. Dans la direction longitudinale, la plus importante dans notre cas, elle est donnée par la formule suivante :

$$F_{D,x} = 6\pi\rho_f\nu_f r_p U_{s,x} \times f \quad (\text{III.16})$$

où  $\rho_f$  est la masse volumique du fluide,  $\nu_f$  la viscosité cinématique,  $U_{s,x}$  la composante longitudinale de la vitesse du fluide vu par la particule et  $f = 1.7$  un facteur correctif qui vise à prendre en compte la présence de la paroi (O'Neill, 1968). En outre, étant donné que la particule déposée voit un écoulement cisailé, l'écoulement exerce sur la particule un moment qui peut être estimé par la formule (O'Neill, 1968) :

$$\mathcal{M}_O(F_{D,x}) \approx 1.4 \times r_p \times F_{D,x}. \quad (\text{III.17})$$

Des relations comparables existent dans la direction normale à la paroi pour la force de traînée :

$$F_{D,y} = 6\pi\rho_f\nu_f r_p U_{s,y} \times g \quad (\text{III.18})$$

où  $U_{s,y}$  la composante normale de la vitesse du fluide vu par la particule et  $g = 3.39$  un facteur correctif dû à la présence de la paroi (Maude, 1963). Le moment exercé est alors donné par :

$$\mathcal{M}_O(F_{D,y}) = l_p \times F_{D,y} \quad (\text{III.19})$$

où  $l_p$  représente la distance entre le point O et l'axe normal à la paroi passant par le centre de masse de la particule.

### III.3.2.2 Modélisation de l'écoulement vu

Les efforts appliqués à la particule décrits plus haut dépendent de la vitesse du fluide vu par la particule. Par conséquent, nous proposons ici une première description simple de

l'écoulement vu par la particule. Puisque l'écoulement dans lequel sont plongées les particules déposées est turbulent, la vitesse instantanée de l'écoulement vu par la particule peut être décomposée en une partie moyenne et une partie fluctuante (décomposition de Reynolds). Dans la sous-couche visqueuse, la relation suivante relie la composante longitudinale de la vitesse moyenne et la distance à la paroi adimensionnée :

$$\langle U_x \rangle^+ = y^+ \quad (\text{III.20})$$

alors que la vitesse moyenne normale à la paroi est nulle. Une représentation simple qui vise à prendre en compte la nature stochastique de l'écoulement consiste à modéliser les parties fluctuantes des composantes longitudinales et normales de la vitesse de l'écoulement en tant que processus de diffusion d'Ornstein-Uhlenbeck :

$$\begin{cases} U_x^+(t) = \langle U_x \rangle^+ + u^+ \\ du^+ = -\frac{u^+}{T^+} dt^+ + \sqrt{\frac{2\langle u^2 \rangle^+}{T^+}} dW_x^+ \\ dv^+ = -\frac{v^+}{T^+} dt^+ + \sqrt{\frac{2\langle v^2 \rangle^+}{T^+}} dW_y^+ \end{cases} \quad (\text{III.21})$$

où  $dW_x$  et  $dW_y$  sont des incréments de deux processus de Wiener indépendants. Le temps de relaxation  $T$  et les intensités des fluctuations  $\sqrt{\langle u^2 \rangle^+}$  et  $\sqrt{\langle v^2 \rangle^+}$  apparaissent comme les paramètres de ce modèle. Si on considère que la particule est immobile sur la paroi, le temps de relaxation  $T$  correspond au temps de corrélation Eulerien, et en l'adimensionnant en unités de paroi, il peut être pris comme approximativement égal à  $T^+ \simeq 5$  dans la sous-couche visqueuse. Pour modéliser  $\sqrt{\langle u^2 \rangle^+}$  et  $\sqrt{\langle v^2 \rangle^+}$  qui dépendent de la distance à la paroi  $y^+$  (égale dans notre cas au rayon de la particule  $r_p$ ), les corrélations suivantes issues des travaux de Matida et al. (2000) sont utilisées :

$$\sqrt{\langle u^2 \rangle^+} = \frac{0.4y^+}{1 + 0.00239(y^+)^{1.496}} \quad (\text{III.22})$$

$$\sqrt{\langle v^2 \rangle^+} = \frac{0.0116(y^+)^2}{1 + 0.203y^+ + 0.00140(y^+)^{2.421}} \quad (\text{III.23})$$

Cette modélisation, bien que très simple, est à même de reproduire l'intensité des fluctuations de la vitesse de l'écoulement dans le voisinage immédiat de la paroi. On peut observer que les fluctuations de la vitesse  $y$  sont traitées de façon indépendantes, et donc que le cisaillement moyen est nul :  $\langle u^+v^+ \rangle = 0$ . Toutefois, une estimation plus précise (Pope, 2000) souligne que, au voisinage de la paroi, le cisaillement moyen évolue avec  $y^+$  comme  $\langle u^+v^+ \rangle \sim (y^+)^3$  et peut donc être négligé dans notre cas. Une modélisation plus fine de l'écoulement vu par la particule consisterait à utiliser un modèle de Langevin complet (Waclawczyk et al., 2004),

qui, pour la vitesse instantanée de l'écoulement vu, se présente sous la forme :

$$dx_i = U_i dt + \sqrt{2\nu_f} dW_i^X \quad (\text{III.24})$$

$$dU_i = -\frac{d\langle P \rangle}{dx_i} dt + (A_{ij} + G_{ij})(U_j - \langle U_j \rangle) - \frac{1}{2} \frac{\epsilon}{k} (U_i - \langle U_i \rangle) dt + \sqrt{D} dW_i \quad (\text{III.25})$$

Cependant, de notre point de vue, un autre raffinement possible de la modélisation d'écoulement vu par une particule déposée serait de conserver une version stochastique plutôt simple, mais de la formuler de telle sorte à prendre en compte les effets instantanés de l'organisation de l'écoulement en proche paroi en bandes longitudinales de vitesse plus faible, ou plus importante que la moyenne (les "low-speed streaks"). Cela pourrait être réalisé en suivant une voie inspirée de celle utilisée pour la modélisation des structures cohérentes dans la partie logarithmique dans l'écoulement, présentée dans le chapitre traitant du modèle de dépôt.

### III.3.3 Modélisation du mouvement de la particule et de la resuspension

Les deux sections précédentes du rapport ont permis de présenter les approches retenues pour modéliser les efforts (d'adhésion et hydrodynamiques) appliqués sur une particule déposée plongée dans un écoulement turbulent. Nous traitons dans cette partie du mouvement de la particule sur la paroi, et des conditions dans lesquelles le réentraînement par l'écoulement peut survenir.

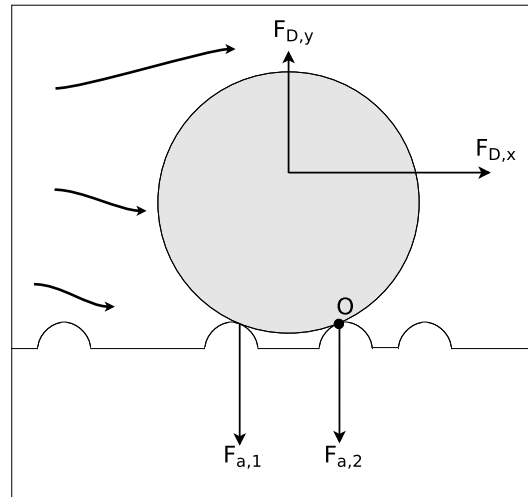


FIG. III.5: Bilan des forces (cas C) pour une particule de grande taille en utilisant la description simplifiée de la géométrie

Les forces exercées sur une particule sont répertoriées sur la figure III.5. En suivant Ibrahim et al. (2003), une particule peut être mise en mouvement si :



- une force normale à la paroi suffisante est appliquée :  $F_{D,y} > F_a$
- la force de traînée longitudinale est supérieure à la composante normale de la force d'adhésion, la particule commence alors à glisser :  $(F_{D,x} > \mu_s F_a)$
- le moment au point O exercé par les forces hydrodynamiques est plus grand que le moment des forces d'adhésion, la particule se mettant alors à rouler sur la paroi.

Dans le premier cas, puisque la particule cesse d'être en contact avec la paroi, le modèle de réentraînement ne s'applique plus. Ce cas est néanmoins très improbable ; le mouvement de la particule sur la paroi (que ce soit par glissement ou par roulement) doit être modélisé. Concernant le mouvement de glissement, le mouvement de la particule sur la paroi est décrit par l'équation suivante :

$$m_p \frac{dU_{p,x}}{dt} = F_{D,x} - \mu_d * F_a \quad (\text{III.26})$$

où  $m_p$  est la masse de la particule et  $\mu_d$  le coefficient de frottement dynamique (que l'on prend dans notre cas égal au coefficient de frottement statique dans un objectif de simplicité).

Dans le cas du mouvement de roulement, l'évolution de la vitesse angulaire  $\omega$  de la particule autour point O est régie par l'équation :

$$I \frac{d\omega}{dt} \approx \mathcal{M}_O(F_{D,x}) + \mathcal{M}_O(F_{D,y}) - \mathcal{M}_O(F_a) \quad (\text{III.27})$$

avec  $I$  moment d'inertie de la particule exprimé au point O. Pour une sphère pleine, il est donné par la relation :

$$I = \frac{7}{5} m_p r_p^2 \quad (\text{III.28})$$

Même en utilisant la description simplifiée de la rugosité de surface développée dans une précédente section, décrire de façon exacte ce mouvement est une tâche difficile, qui ne fait toutefois pas partie des objectifs principaux de cette étude. En effet, pour notre modèle de resuspension, il est seulement nécessaire de connaître une estimation de la vitesse de la particule (et donc de son énergie cinétique) en vue d'un choc potentiel avec une aspérité. C'est pourquoi, dans le cas du roulement, cette vitesse est estimée par la formule :

$$U_{p,x} \approx r_p * \omega \quad (\text{III.29})$$

Une fois que la particule s'est mise à glisser ou à rouler sur la paroi, le nombre d'aspérités en contact avec elle va évoluer. En fonction de sa taille, et de la distribution des aspérités sur la paroi, elle peut parvenir jusqu'à un creux entre deux aspérités. À ce moment, suivant le scénario proposé plus haut, la particule va heurter la surface de l'aspérité suivante, et, lors de ce choc, son mouvement longitudinal va être converti en un mouvement potentiel normal à la paroi. En effectuant un bilan d'énergie, on en déduit que la particule va se détacher de la paroi à la condition que son énergie cinétique soit supérieur au potentiel de van der Waals

responsable de l'adhésion de la particule à la paroi :

$$\frac{1}{2}m_p U_{p,x}^2 > V_A \quad (\text{III.30})$$

où  $V_A = F_{a,k} * z_0$  est le potentiel d'interaction entre la particule et l'aspérité  $k$  que la particule heurte.

### III.4 Résultats numériques et discussion

Le modèle complet de réentraînement a été implémenté numériquement, et les résultats obtenus sont présentés dans cette section. Les détails de la procédure numérique sont d'abord donnés, et les calculs sont ensuite comparés aux expériences disponibles en plusieurs paliers qui correspondent aux différentes étapes du développement du modèle : sous-modèle de force d'adhésion, conditions de mise en mouvement de la particule sur la paroi, et enfin, modèle complet de resuspension. Toutefois, le phénomène de réentraînement mettant en jeu de nombreux paramètres, il arrive que les expériences disponibles ne documentent pas certaines données qui seraient utiles pour mener une démarche de validation complète de chaque aspect de notre modèle. Par conséquent, dans la suite, nous sommes parfois amenés à estimer la valeur de certains paramètres, comme la rugosité de surface ou les constantes d'Hamaker. Bien que ce ne soit donc pas la configuration idéale pour tester le modèle de manière exhaustive, cette démarche est tout de même est une démarche de validation qui peut rendre compte des capacités du modèle. En outre, cette approche est proche des applications industrielles, où les paramètres sont parfois difficilement accessibles et doivent donc être estimés.

#### III.4.1 Procédure numérique

Pour chaque calcul, on considère typiquement des milliers de particules déposées sur la paroi. Par chacune d'entre elles, on calcule d'abord le nombre  $N(0)$  d'aspérités de grande échelle en contact avec elle en utilisant un générateur de variables aléatoires de Poisson. La probabilité que  $N(0)$  soit égale à  $n$  est donc donnée par la formule :

$$P(N(0) = n) = e^{-\frac{d_p}{L_{large}}} \frac{(d_p/L_{large})^n}{n!} \quad (\text{III.31})$$

En supposant que  $N(0) > 0$  (on se trouve alors dans le cas C), le contact  $C_j$  (avec  $j \in [1, N(0)]$ ) est caractérisé par un couple de paramètres. Sa position longitudinale vis-à-vis de la particule (qui peut donc varier entre 0 et  $d_p$ ) et le nombre d'aspérités de petite échelle en contact avec la particule. Pour chaque particule, la position de chaque aspérité de grande échelle est calculée par une variable aléatoire de loi uniforme :

$$X_{C_j}(0) = \mathcal{U}([0, d_p]) \quad (\text{III.32})$$

On pose par convention que l'aspérité la plus aval en contact avec la particule est celle dont la position est minimale. L'étape suivante consiste à calculer le nombre d'aspérités de petite échelle pour chaque aspérité de grande échelle. Ce nombre est également donné par un générateur de variable aléatoire de Poisson paramétré par  $\rho_{fine} * A_p$ , comme nous l'avons détaillé dans la section consacrée au sous-modèle de force d'adhésion. En un mot, dans le modèle, la particule est représentée par sa coordonnée longitudinale  $X_p$ , sa vitesse longitudinale  $U_p$ , les deux composantes orthogonales de la vitesse du fluide vu  $U_{s,x}$  et  $U_{s,y}$ , et par la liste des contacts avec des aspérités de grande échelle. C'est-à-dire, au temps  $t$  :

$$\text{Une particule déposée} \equiv \begin{pmatrix} X_p(t) \\ U_p(t) \\ U_{s,x}(t) \\ U_{s,y}(t) \\ C_1(t) \\ \vdots \\ C_N(t) \end{pmatrix} \quad \text{with } C_j(t) \equiv \begin{pmatrix} Xc_j(t) \\ Nc_j \end{pmatrix}$$

Si la particule se déplace sur la paroi, au pas de temps suivant, la liste de contacts avec des aspérités est susceptible d'évoluer. En effet, si  $Xc_j(t + \Delta t) > d_p$ , l'aspérité n'est plus en contact avec la particule. Le passage du temps  $t$  au temps  $t + \Delta t$  est donc traité en deux étapes. La première consiste à identifier et éliminer les aspérités qui ne sont plus en contact avec la particule, et à l'issue de cette étape, il reste donc  $N_1 < N(t)$  aspérités dans la liste. La seconde étape revient à déterminer si la particule a rencontré d'autres aspérités de grande échelle pendant son parcours de  $t$  à  $t + \Delta t$ . Dans ce but, un générateur de variable aléatoire de Poisson est utilisé, et la probabilité que le nombre de nouvelles aspérités  $N_2$  soit égal à  $n$  est donnée par :

- si  $|X_p(t + \Delta t) - X_p(t)| < d_p$  (au cours du pas de temps, la particule a parcouru une distance inférieure à son diamètre) :

$$P(N_2 = n) = \exp(-|X_p(t + \Delta t) - X_p(t)|/L_{large}) \times \frac{(|X_p(t + \Delta t) - X_p(t)|/L_{large})^n}{n!} \quad (\text{III.33})$$

- sinon, si  $|X_p(t + \Delta t) - X_p(t)| > d_p$ , la particule a parcouru une distance supérieure à son diamètre et il y a donc un renouvellement complet de la liste des contacts :

$$P(N_2 = n) = \exp(-d_p/L_{large}) \frac{(d_p/L_{large})^n}{n!} \quad (\text{III.34})$$

La position des nouvelles aspérités ainsi que le nombre d'aspérités de petite échelle sont calculés en suivant la procédure décrite précédemment. Le nombre total de contacts entre la

paroi et la particule à l'instant  $t + \Delta t$  est donc  $N(t + \Delta t) = N_1 + N_2$ , et, une fois ces calculs effectués, nous pouvons alors calculer les forces et les moments qui s'exercent sur la particule. Comme le veut le scénario de réentraînement présenté dans au début de ce chapitre, tant que le nombre  $N(t)$  est strictement supérieur à zéro, la particule continue de rouler ou de glisser sur la paroi d'une façon suffisamment régulière pour que les chocs avec les aspérités puissent être négligés. Cependant, si à un instant donné le nombre  $N(t)$  devient nulle, cela signifie que la particule a atteint un creux entre deux aspérités, et que le contact suivant sera considéré comme un choc.

Concernant le mouvement d'une particule sur une paroi présentant uniquement une rugosité de type nanométrique (cas B), calculer exactement et à chaque instant la position de toutes les aspérités de petite échelle en contact avec la particule est trop gourmand en terme de temps de calcul, et, de surcroît, d'intérêt assez limité. Dans ce cas, nous utilisons donc une description plus macroscopique : le nombre d'aspérités de petite échelle en contact avec la particule est gelé pendant le temps mis par la particule pour parcourir une distance égale à un diamètre, puis est calculé à nouveau. Cette méthode nous permet d'effectuer des calculs en utilisant des pas de temps raisonnables.

### III.4.2 Calcul de la force d'adhésion

Le processus de validation du modèle débute par une phase de test du sous-modèle d'adhésion, qui constitue la partie la plus amont du modèle complet.

#### III.4.2.1 Tests préliminaires

Dans un premier temps, des tests sont effectués pour vérifier que l'influence de différents paramètres est bien reproduite. La figure III.6 représente des simulations Monte-Carlo de la PDF de la force d'adhésion pour des particules de différents diamètres (allant de  $0.1 \mu\text{m}$  à  $72 \mu\text{m}$ ) déposées sur une paroi de rugosité de petite échelle. Pour ces calculs, la représentation log-normale des forces d'adhésion n'est pas utilisée. Différents aspects intéressants du modèle d'adhésion sont visibles sur cette figure : d'abord, la PDF de la force d'adhésion des particules les plus petites ( $d_p = 0.1 \mu\text{m}$ ) est centrée sur deux valeurs très différentes. La dispersion autour de la valeur moyenne est de plus quasiment inexistante. Ceci s'explique par le fait que les particules de ce diamètre sont en contact avec au plus une aspérité de petite échelle. Si c'est le cas, la force d'adhésion calculée est égale à environ  $5 \text{ nN}$ , ce qui est une valeur très faible. Au contraire, si la particule voit une paroi lisse (si le nombre d'aspérités est égale à 0), la théorie JKR s'applique, et la force d'adhésion est dans ce cas égale à  $130 \text{ nN}$  environ. Pour les autres diamètres, on constate que la force d'adhésion est croissante entre  $d_p = 5 \mu\text{m}$  et  $d_p = 30 \mu\text{m}$ , de même que la dispersion autour de la valeur moyenne, ce qui correspond à l'augmentation du nombre d'aspérités en contact avec les particules. Cependant, les résultats obtenus avec un diamètre égal à  $d_p = 72 \mu\text{m}$  sont sensiblement identiques à ceux qu'on

observe pour  $d_p = 30 \mu\text{m}$ .

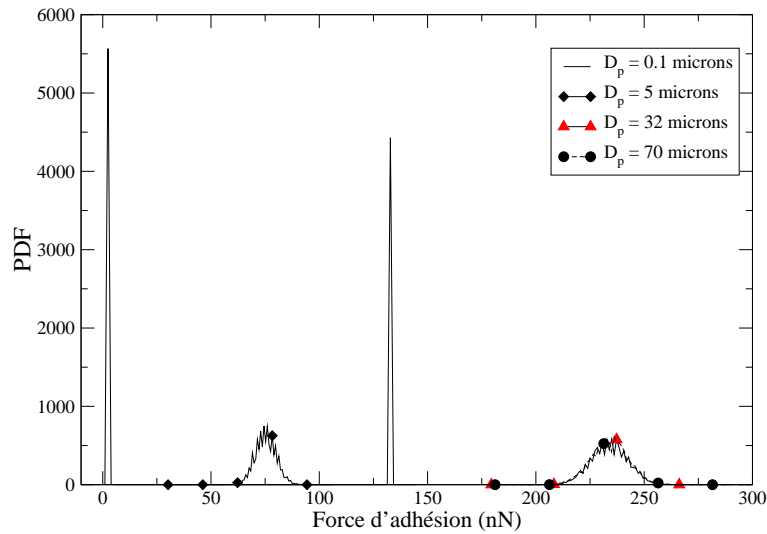


FIG. III.6: Variation de la force d'adhésion suivant le diamètre de la particule

La figure III.7 représente une simulation Monte-Carlo de la fonction densité de probabilité de la force d'adhésion, pour une particule de  $70 \mu\text{m}$  de diamètre, en utilisant, ou non, la représentation log-normale des forces d'adhésion. La rugosité de la paroi est constituée uniquement par des aspérités de petite échelle. On peut observer que si cette description n'est pas utilisée, la dispersion (symétrique) autour de la valeur moyenne est plutôt faible et uniquement due au nombre aléatoire d'aspérités de petite échelle en contact avec la particule. Au contraire, la représentation log-normale présente une dispersion bien plus importante; sa forme étant caractéristique de la distribution log-normale. Comme attendu, les valeurs moyennes obtenues avec les deux descriptions sont identiques.

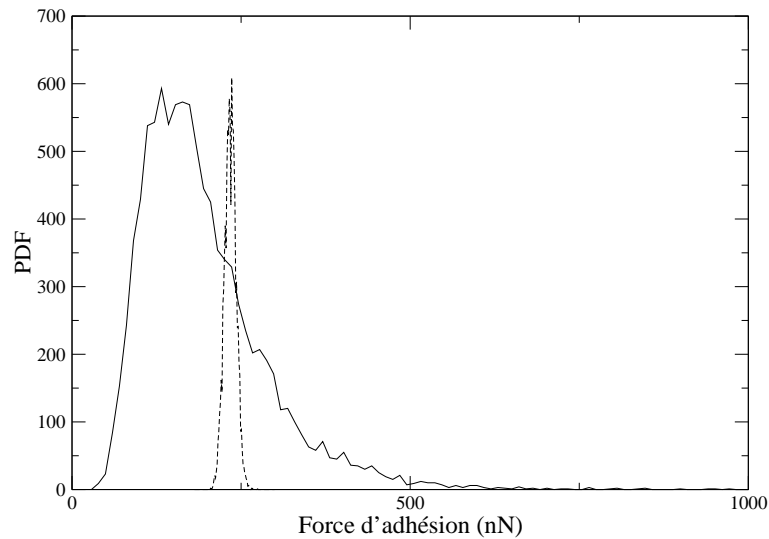


FIG. III.7: Comparaison des forces d'adhésion suivant la prise en compte ou non de la représentation log-normale de la taille des aspérités de petite échelle

### III.4.2.2 Comparaison aux expériences

La validation expérimentale du sous-modèle d'adhésion est un point délicat pour plusieurs raisons : d'abord, étant donné la valeur très faible de la force d'adhésion entre particules et surfaces rugueuses (couramment de l'ordre du nanonewton), les avancées technologiques (avec l'avènement du microscope à force atomique) n'ont permis que récemment des mesures précises et reproductibles de cette force. Une autre difficulté concerne le traitement statistique des mesures des forces d'adhésion, qui est un sujet de recherche actuel (Göttinger et Peukert, 2003). Enfin, les données expérimentales disponibles sur la force d'adhésion concernent principalement des surfaces présentant uniquement une rugosité de l'ordre du nanomètre, donc bien plus faible que les rugosités rencontrées sur la majorité des surfaces industrielles.

Des résultats expérimentaux intéressants ont été récemment présentés par Zhou et al. (2003), qui ont étudié l'adhésion de particules sphériques, lisses, de  $10 \mu\text{m}$  de diamètre, sur des surfaces dont les rugosités présentent des caractéristiques différentes (bien que toutes de l'ordre du nanomètre). Ils ont mesuré la fonction de répartition (CDF) de la force d'adhésion. Les deux surfaces rugueuses étudiées dans les expériences présentent des rugosités dont la distance moyenne entre les aspérités est différente : pour la première (désigné sous le nom d'aluminium "PVD-coated"), les aspérités sont en moyenne très proches les unes des autres. Sur la seconde (en aluminium poli), la distance entre les aspérités en plus importantes, ce qui, selon les auteurs, permet aux particules déposées sur la surface de s'intercaler entre les aspérités et donc de voir une surface quasiment lisse. Par conséquent, en comparant les résultats de notre modèle à ces expériences, il est possible de tester les cas A (particule en

contact avec une surface lisse) et B (particule en contact avec une surface de faible rugosité) de notre sous-modèle d'adhésion. L'objectif est de tester non seulement la force d'adhésion moyenne calculée par le modèle pour les différents cas, mais aussi d'observer la capacité du modèle à reproduire l'influence du profil de rugosité sur la fonction de distribution de la force d'adhésion, ce qui constituerait une justification de la présente approche.

Avec un substrat lisse (correspondant à notre cas A), les résultats expérimentaux indiquent une valeur moyenne de la force d'adhésion autour de 160 nN présentant une très faible dispersion autour de cette valeur. En utilisant la théorie JKR, cela correspond à une énergie de surface de l'ordre de  $3,5 \text{ mJ.m}^{-2}$ , ce qui est une valeur réaliste pour une surface contaminée par des couches d'eau adsorbées (Kendall, 2001). Cette valeur de l'énergie de surface permet de calculer la surface de contact entre les particules et la surface en utilisant l'équation III.8, et, en fixant la densité d'aspérités de petite échelle  $\rho_{fine}$ , le calcul de la force d'adhésion pour les surfaces rugueuses.

Les résultats issus du sous-modèle d'adhésion sont montrés sur la figure III.8 et comparés aux valeurs expérimentales. Les résultats concernant les surfaces rugueuses illustrent clairement l'influence de la distance moyenne entre les aspérités : avec l'aluminium poli, le modèle d'adhésion est capable de reproduire la division entre les particules intercalées entre les aspérités, qui voient donc une surface lisse (notre cas A) et les particules en contact avec plusieurs aspérités (notre cas B) qui adhèrent donc à la surface avec une force bien plus faible. Au contraire, les particules déposées sur l'aluminium "PVD-coated" ne présentent pas ce type de division : les aspérités sont si proches les unes des autres en moyenne qu'elles ne permettent à quasiment aucune particule de s'intercaler entre elles. La tendance observée sur les mesures expérimentales est donc fidèlement reproduite par le modèle, même si quantitativement les forces calculées sont légèrement plus faibles que les mesures expérimentales dans ce cas.

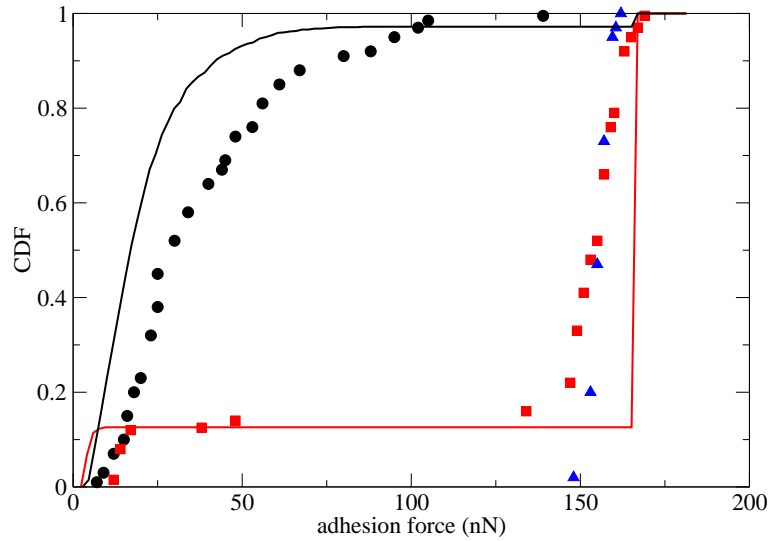


FIG. III.8: Force d'adhésion : comparaison entre résultats du modèle (lignes pleines) et données expérimentales (symboles) de Zhou et al. (2003) pour différentes surfaces. ( $\blacktriangle$ ) : surface lisse ; ( $\blacksquare$ ) : aluminium poli ; ( $\bullet$ ) : aluminium "PVD-coated".

### III.4.3 Démarrage des particules sur une paroi presque lisse

Comme deuxième étape de la démarche de validation numérique, nous présentons dans cette section des résultats relatifs à la vitesse nécessaire pour mettre une particule en mouvement sur la paroi. Les résultats issus du modèle sont comparés à l'étude expérimentale récente d'Ibrahim et al. (2003), qui ont mené des expériences visant à mesurer la vitesse de l'écoulement qui provoque la mise en roulement des particules sur une paroi présentant une rugosité de l'ordre du nanomètre. Il est utile de noter que dès que les particules sont mises en mouvement, elles sont marquées et ne sont plus suivies : les résultats de cette section ne concernent donc pas le scénario complet de réentraînement. Cette étude est néanmoins intéressante dans la mesure où elle permet de tester simultanément deux aspects du modèle : le cas B du sous-modèle d'adhésion (particule micrométrique en contact avec une rugosité nanométrique) et le calcul des moments des forces appliquées sur la particule dans ce cas.

Dans l'expérience d'Ibrahim et al. (2003), une grande attention a été portée sur la répétabilité des résultats, ce qui indique que les paramètres critiques du phénomène ont été contrôlés de façon précise. Les particules de différents diamètres sont sphériques, lisses jusqu'au niveau atomique, et faites d'acier ou de verre. Leurs caractéristiques sont récapitulées dans le tableau III.1.

La surface sur laquelle reposent les particules est en verre, et présente une rugosité moyenne de l'ordre de deux nanomètres. Puisque selon les auteurs, les surfaces sont préparées pour éviter une adsorption de couches mince d'eau, dans notre modèle, nous utilisons



	SS70	GL72	GL32
Diamètre ( $\mu\text{m}$ )	70	72	32
Densité ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )	8000	2420	2420
Module d'Young (GPa)	215	80.1	80.1
Coefficient de Poisson	0.28	0.27	0.27
Énergie de surface sur le verre ( $\text{J}/\text{m}^2$ )	0.085	0.2	0.2

TAB. III.1: Caractéristiques des particules de l'expérience de Ibrahim et al. (2003).

une constante d'Hamaker égale à  $1,5 \cdot 10^{-19}$  J. À notre connaissance, aucune information n'est fournie concernant la densité des aspérités sur la paroi qui pourrait être utilisée dans notre modèle, la valeur  $\rho_{fine} = 5 \cdot 10^{15} \text{m}^{-2}$  est donc choisie, ce qui correspond à une distance moyenne entre les aspérités de l'ordre de quinze nanomètres.

Les premiers calculs effectués ont été menés avec la version la plus simple du modèle : le sous-modèle d'adhésion ne considère qu'une échelle de rugosité (au vu de la taille des aspérités de la surface expérimentale, la rugosité de petite échelle est utilisée) et l'écoulement vu est représenté uniquement par la composante longitudinale de sa vitesse moyenne  $\langle U_{s,x} \rangle^+$ , et n'inclut donc pas de modélisation stochastique sur la partie fluctuante. Les résultats concernant la proportion de particules mises en mouvement sur la surface en fonction de la vitesse moyenne de l'écoulement sont présentés sur la figure III.9 et comparés aux résultats de l'expérience correspondante d'Ibrahim et al. (2003).

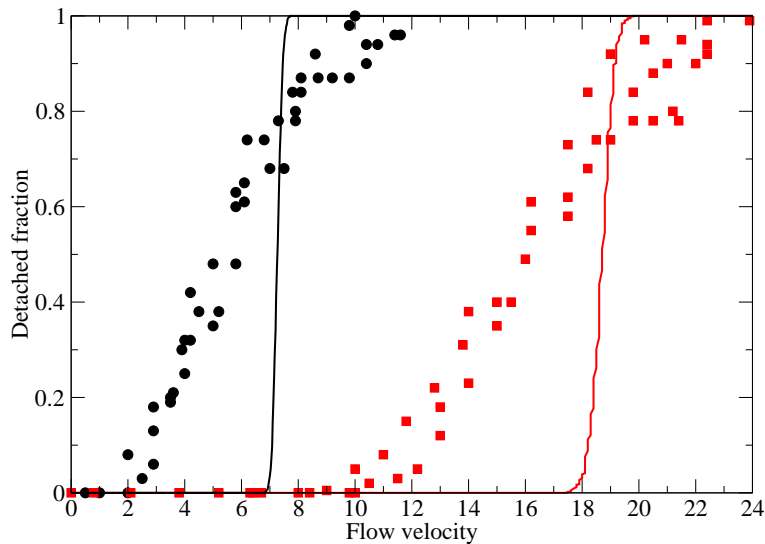


FIG. III.9: Comparaison entre les résultats du modèle sous sa forme la plus simple (lignes pleines) et les résultats expérimentaux de Ibrahim et al. (2003). (●) : particules GL72 ; (■) : particules GL32.

À partir de ce calcul, on peut noter que le modèle parvient à retrouver la vitesse de l'écoulement nécessaire pour mettre en mouvement la moitié des particules déposées sur la

surface (on désigne, dans la suite, cette vitesse par  $U_{1/2}$ ). Cette vitesse  $U_{1/2}$  est en accord avec les expériences pour les deux classes de particules. Cependant, la dispersion autour de cette valeur est notablement plus faible que celle observée dans les mesures expérimentales, même en tenant compte des incertitudes autour de celles-ci : la proportion des particules mises en mouvement passe de 0 à 100% sur un intervalle de vitesse trop réduit par rapport aux expériences, pour les deux classes de particules étudiées, même si la dispersion est légèrement plus visible pour les particule GL32, ce qui est la tendance observée sur les mesures.

C'est pourquoi, pour tenter de capturer cette tendance, des calculs ont été effectués avec des versions plus détaillées du modèle : nous avons utilisé le raffinement du sous-modèle d'adhésion qui revient à considérer la taille des aspérités comme une variable aléatoire distribuée de façon log-normale, et la représentation de la partie fluctuante basé sur des processus stochastiques. Les résultats sont représentés sur la figure III.10. Dans ce cas, les résultats obtenus sont en accord correct avec les mesures expérimentales, aussi bien au niveau de la valeur de  $U_{1/2}$  que de la dispersion. Ainsi, on peut conclure que pour reproduire correctement la dispersion présente dans les mesures expérimentales, il est nécessaire d'utiliser la version détaillée du modèle.

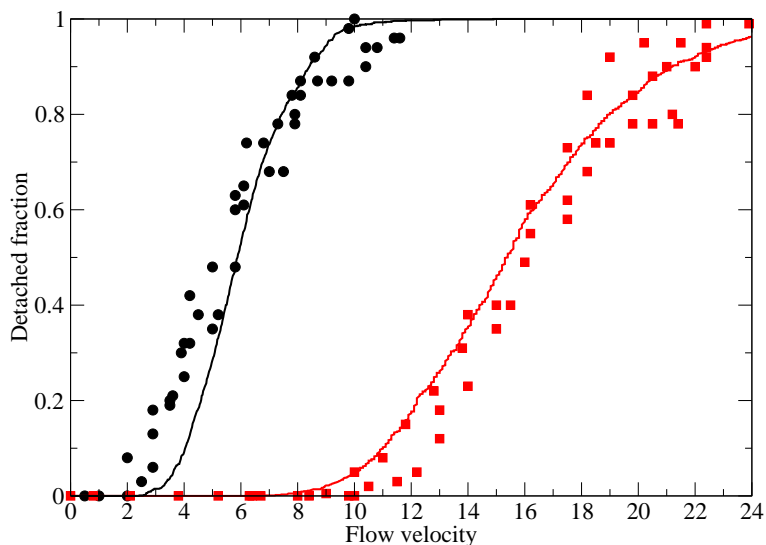


FIG. III.10: Comparaison entre les résultats du modèle entier (lignes pleines) et les résultats expérimentaux de Ibrahim et al. (2003). (●) : particules GL72; (■) : particules GL32.

#### III.4.4 Remise en suspension

Les deux premières étapes de la procédure de validation (test de la force d'adhésion et calcul de la proportion de particules mise en mouvement) ont permis de tester des aspects importants du modèle à caractère plutôt statique. Le troisième palier consiste à tester le phénomène complet de réentraînement, en utilisant le modèle complet qui inclut la représentation

du mouvement de la particule sur la paroi et le critère final de resuspension. Pour valider les résultats issus du modèle, les mesures expérimentales effectuées par Reeks et Hall (2001) sont utilisées. Ensuite, une étude de sensibilité du modèle à différents paramètres importants est effectuée.

#### III.4.4.1 Comparaison avec les expériences de Reeks et Hall

Reeks et Hall (2001) ont étudié expérimentalement la remise en suspension de particules en appliquant le protocole suivant : initialement, les particules sont déposées sur une surface et comptées. Ensuite, l'écoulement débute à une vitesse donnée et dure une seconde. Une fois l'écoulement stoppé, les particules restant sur la surface sont comptabilisées. La statistique étudiée dans cette expérience est donc la fraction de particules restant sur la surface au bout d'une seconde en fonction de la vitesse de l'écoulement. Les particules sont faites en oxyde d'aluminium et en graphite ; les particules d'oxyde d'aluminium (alumine) sont quasiment monodispersées en taille, alors que celles de graphite présentent une dispersion assez importante. Les propriétés des particules sont récapitulées dans les tableaux III.2 et III.3.

	Graphite	Alumine
Diamètre ( $\mu\text{m}$ )	13	10 and 20
Densité ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )	2300	1600
Module d'Young (GPa)	20	350
Coefficient de Poisson	0.3	0.3
Énergie de surface sur l'acier ( $\text{J}/\text{m}^2$ )	0.075	0.28

TAB. III.2: Caractéristiques de particules dans les expériences de Reeks et Hall (2001).

Diamètre minimal ( $\mu\text{m}$ )	6
Diamètre maximal ( $\mu\text{m}$ )	30
Moyenne géométrique du diamètre ( $\mu\text{m}$ )	13
Écart-type géométrique	1.85

TAB. III.3: Caractéristiques de la polydispersion des particules de graphite dans l'étude de Reeks et Hall (2001).

Le substrat est fait en acier poli. Étant donné que les informations quantitatives concernant la rugosité ne sont pas disponibles, nous avons supposé dans nos calculs une rugosité de grande échelle de  $2 \mu\text{m}$ , et une rugosité de petite échelle égale à  $2 \text{ nm}$ . La distance moyenne entre deux aspérités de grande échelle a été choisie égale à  $30 \mu\text{m}$ .

Sur les figures III.11, III.12 et III.13 sont représentés les résultats du modèle concernant les fractions restantes sur la surface après une seconde, comparés aux mesures expérimentales, pour les trois classes de particules. Dans ces calculs, la version complète du modèle est utilisée (représentation log-normale de la force d'adhésion et stochastique de la vitesse de l'écoulement vu) et le pas de temps est fixé à  $10^{-4} \text{ s}$ . Le diamètre des particules d'alumine est choisi,

selon les expériences, égal à 10 ou 20  $\mu\text{m}$  pour toutes les particules (on simule donc une stricte monodispersion). On peut observer que les résultats mettant en jeu des particules d'alumine sont en bon accord avec les expériences pour les deux tailles de particules : la fraction restant sur la surface chute de façon abrupte de 1 à 0.1 pour une vitesse de frottement approximativement égale à 1  $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ . Cette vitesse est légèrement plus faible pour les particules de 20  $\mu\text{m}$  de diamètre, ce qui corrobore l'expérience de Ibrahim et al. (2003) : les particules les plus grosses ont tendance à être plus facilement réentraînées par l'écoulement. Du reste, la pente de la fraction calculée est également en bon accord avec les résultats expérimentaux.

Les résultats des calculs obtenus avec des particules de graphite sont montrés sur la figure III.13. Pour ce calcul, nous avons choisi une constante d'Hamaker légèrement plus élevée que celle utilisée pour les particules d'alumine, et le diamètre de la particule est cette fois-ci choisi comme une variable aléatoire suivant une loi log-normale paramétrée par les valeurs fournies par les auteurs. Les résultats sont également bien comparables aux expériences ; en particulier, la pente obtenue est plus faible que celle observée dans les calculs utilisant des particules d'alumine, ce qui suggère que l'effet de polydispersion des diamètres est bien pris en compte.

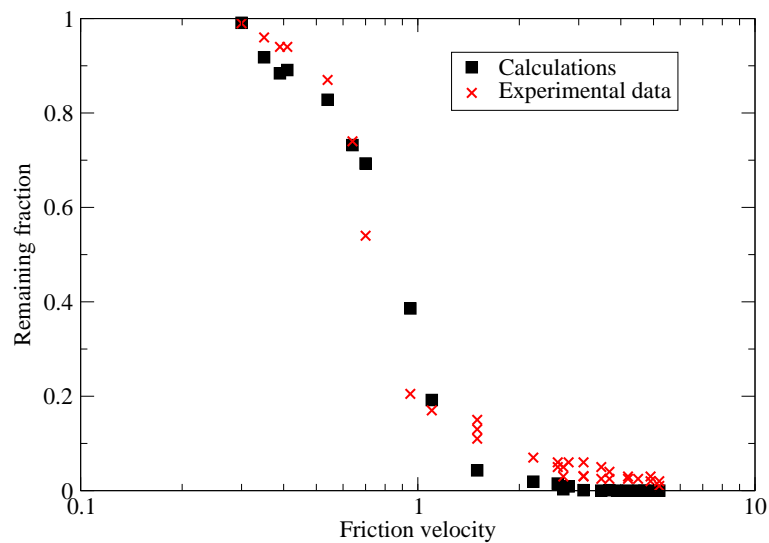


FIG. III.11: Remise en suspension de particules : comparaison entre les résultats du modèle et les expériences de Reeks et Hall (2001) avec des particules d'alumine de 10  $\mu\text{m}$  de diamètre.

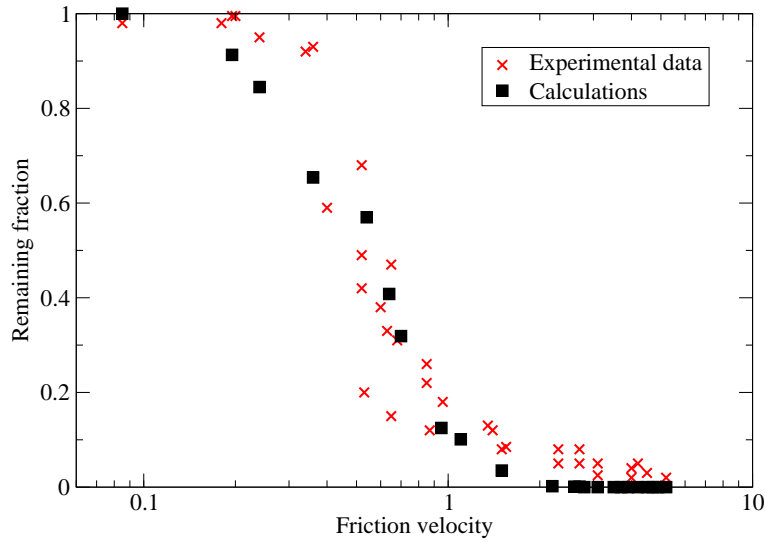


FIG. III.12: Remise en suspension de particules : comparaison entre les résultats du modèle et les expériences de Reeks et Hall (2001) avec des particules d'alumine de  $20 \mu\text{m}$  de diamètre.

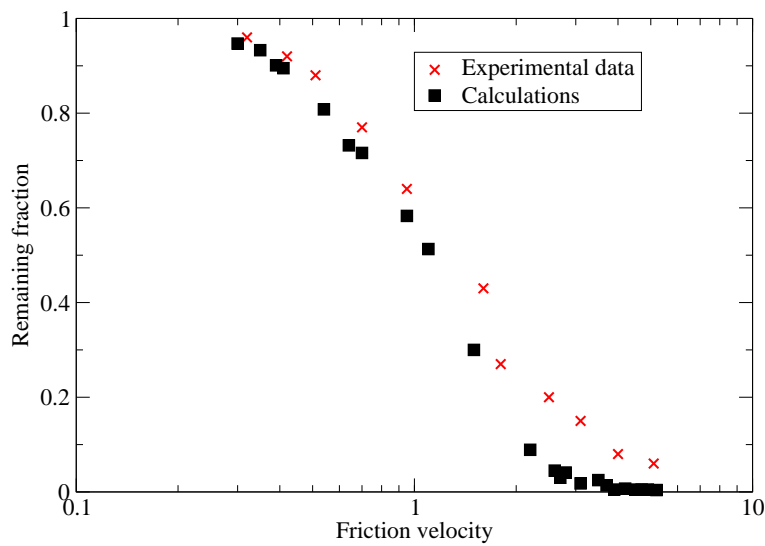


FIG. III.13: Remise en suspension de particules : comparaison entre les résultats du modèle et les expériences de Reeks et Hall (2001) avec des particules de graphite de  $13 \mu\text{m}$  de diamètre.

#### III.4.4.2 Étude de sensibilité aux paramètres

Dans cette section, nous présentons une étude de sensibilité des résultats au choix de la valeur des paramètres. Dans un premier temps, les méthodes numériques utilisées sont validées en menant des calculs visant à prouver l'indépendance des résultats au pas de temps, qui est une étape spécialement critique quand on développe des modèles Lagrangiens stochastiques.

Dans ce but, le même calcul a été effectué avec différents pas de temps, allant de  $10^{-3}$  s à  $10^{-5}$  s, et les résultats sont présentés sur la figure III.14. On peut observer que l'indépendance du pas de temps est obtenue pour un pas de temps de  $10^{-4}$  s. Du reste, les résultats obtenus avec un pas de temps de  $10^{-3}$  s ne diffèrent que très peu de ceux obtenus avec des pas de temps plus faibles.

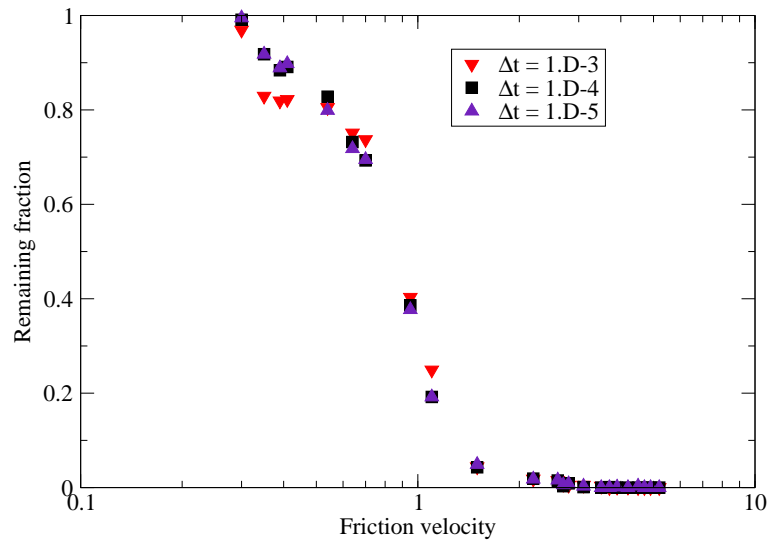


FIG. III.14: Remise en suspension de particules : vérification de l'indépendance au pas de temps des résultats issus du modèle.

La figure III.15 présente des résultats obtenus avec des versions plus simples du modèle dans le cas de particule de  $10 \mu\text{m}$  de diamètre en alumine. Ces résultats montrent qu'en moyenne, ces versions donnent une vitesse nécessaire pour réentraîner les particules plus importante que celle issue de la version complète du modèle qui utilise une représentation stochastique de la vitesse du fluide vu et une description log-normale des forces d'adhésion. On peut également observer que les effets de la représentation du fluide vu et de la force d'adhésion sont approximativement du même ordre de grandeur.

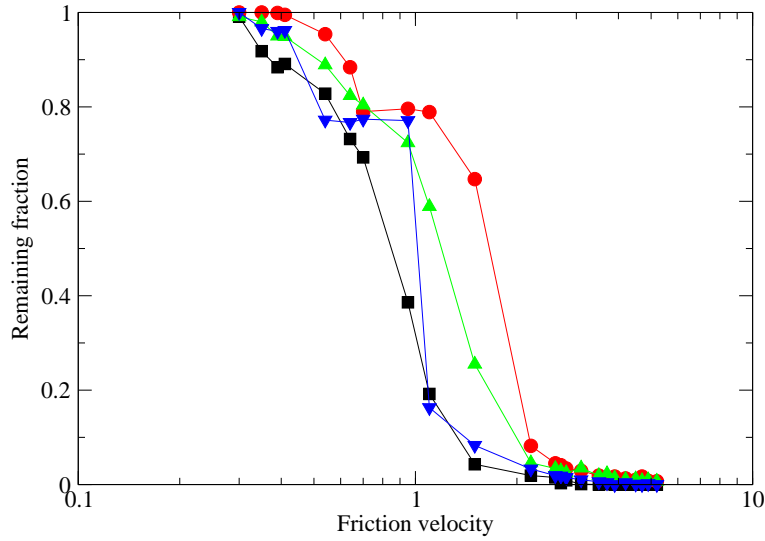


FIG. III.15: Remise en suspension : étude de sensibilité des résultats à la forme du modèle : (—●—) : version la plus simple du modèle ; (—△—) : version basique + représentation stochastique de la vitesse de l'écoulement ; (—▽—) : version basique + forces d'adhésion log-normales ; (—■—) : modèle complet.

Des résultats additionnels concernant la variation du taux de resuspension en fonction du diamètre de la particule sont présentés sur la figure III.16. En plus des particules de 10 microns de diamètre, des particules de 70  $\mu\text{m}$  et de 1  $\mu\text{m}$  de diamètre sont étudiées. Ces résultats montrent bien que, pour ces diamètres, plus le diamètre de la particule est important, plus la particule est facilement réentraînée par l'écoulement (plus la vitesse nécessaire pour la remettre en suspension est faible), ce qui correspond à la tendance observée dans les expériences.

En dernier lieu, nous avons mené des calculs en conservant les particules d'alumine de 10  $\mu\text{m}$  de diamètre et en faisant varier distance moyenne  $L_{large}$  entre deux aspérités de la rugosité de grande échelle et les résultats sont représentés sur la figure III.17. Pour une distance  $L_{large}$  égale à 3  $\mu\text{m}$ , on peut observer que la vitesse nécessaire à la resuspension des particules est bien plus élevée que lorsque ce paramètre est fixé à 30 ou 100  $\mu\text{m}$ . Ceci peut s'expliquer par le fait que les particules doivent couvrir une distance plus importante sur la paroi pour trouver un intervalle entre deux aspérités plus large que leur diamètre, puisque les aspérités sont plus serrées avec ce choix de paramètre. On remarque également que pour  $L_{large} = 30 \mu\text{m}$ , la vitesse nécessaire pour la resuspension est légèrement plus élevée en moyenne que pour  $L_{large} = 3 \mu\text{m}$ , car dans ce cas, les particules doivent couvrir une distance plus importante sur la paroi pour rencontrer une aspérité qui peut entraîner la resuspension. Dans notre modèle, le taux de resuspension n'est pas donc monotone en fonction du paramètre  $L_{large}$ , et semble atteindre son maximum pour une valeur de l'ordre du diamètre de la particule étudiée.

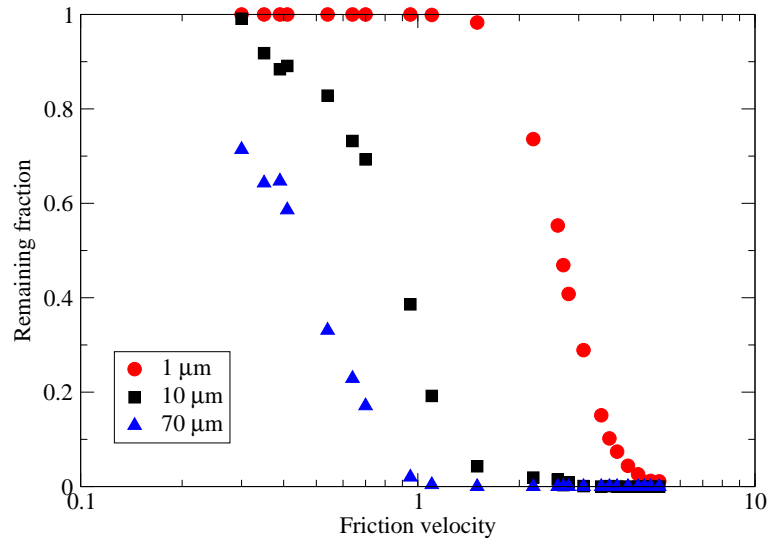


FIG. III.16: Résultats du modèle de resuspension concernant trois classes de particules de diamètre différent.

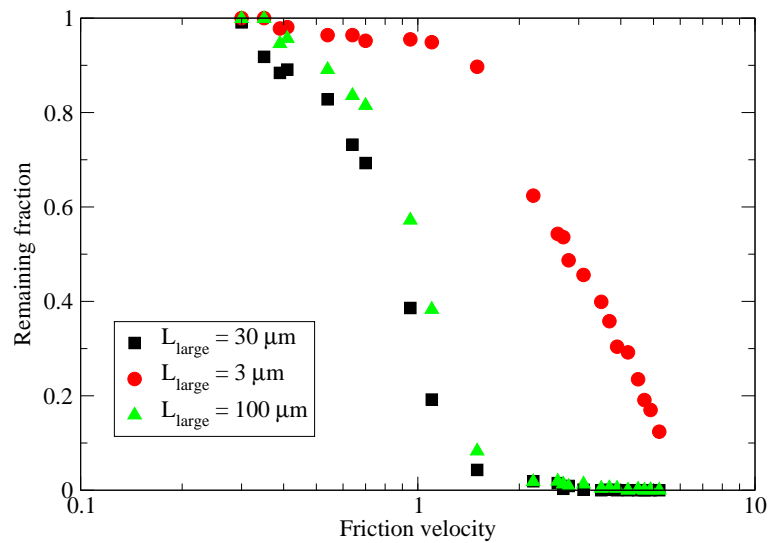


FIG. III.17: Étude de la sensibilité des résultats de remise en suspension à la variation de l'espace moyen entre aspérités  $L_{large}$ .



## III.5 Conclusion pour l'étude du réentraînement de particules

Nous faisons ici le bilan de notre étude relative à la modélisation de la remise en suspension de particules par un écoulement turbulent. Le travail accompli est d'abord récapitulé et analysé, et, dans un second temps, nous exposons les limites que présente notre modèle, et nous proposons des perspectives de développement pour le futur.

### III.5.1 Récapitulatif du travail effectué

Cette partie de notre travail a donc porté sur la mise au point d'une nouvelle approche Lagrangienne pour la simulation du réentraînement de particules dans un écoulement turbulent, qui se base principalement sur une représentation stochastique et simplifiée de la rugosité de paroi. Cette représentation de la paroi permet une estimation rapide des forces et des moments d'adhésion exercés sur la particule déposée, en utilisant des méthodes récemment développées (Katainen et al., 2006). Un nouveau scénario de remise en suspension a également été proposé, reposant sur les interactions entre les particules et les aspérités de la surface. Dans ce scénario, les particules sont mises en mouvement par l'action des forces hydrodynamiques, puis se mettent à glisser ou rouler sur la paroi, avant de heurter une aspérité de surface susceptible de provoquer le détachement de la particule de la surface.

Le modèle a été implémenté numériquement et des simulations Monte-Carlo ont été menées et comparées aux données expérimentales. Vu la complexité du phénomène de réentraînement, tous les paramètres physiques nécessaires au paramétrage du modèle n'étaient pas toujours rapportés dans les expériences. Par conséquent, pour nos calculs, nous avons dû parfois estimer la valeur de certains paramètres d'entrée de notre modèle, notamment la valeur des constantes d'Hamaker utilisées et des paramètres de notre représentation de la rugosité. Cependant, on peut noter que ces paramètres ne sont pas des paramètres "libres" qui n'ont un sens uniquement à l'intérieur d'un modèle : ils représentent des quantités physiques ou des propriétés des matériaux. Ainsi, en fixant des valeurs que nous estimons physiques pour les paramètres inconnus des expériences, les résultats numériques obtenus sont en bon accord avec les mesures expérimentales disponibles. On peut donc supposer, avec une bonne confiance, que les aspects les plus importants du phénomène de resuspension sont bien pris en compte par le modèle.

### III.5.2 Limites actuelles du modèle et perspectives de développement

À l'heure actuelle, le modèle est implémenté dans un code numérique dédié. L'étape suivante de l'implémentation informatique consisterait en son implémentation dans un code Lagrangien gaz-particule complet (comme le module Lagrangien de Code\_Saturne). Ainsi, il sera possible de faire cohabiter le modèle de dépôt de particules présenté dans le chapitre II avec le modèle de réentraînement, et de disposer ainsi d'un modèle Lagrangien complet de dépôt-réentraînement. Une fois l'implémentation réalisée, des tests seront effectués pour vérifier que

les comportements typiques de dépôt-réentraînement de particules observés expérimentalement sont bien retrouvés Tanière et al. (1997).

Du reste, dans son état actuel, le modèle de réentraînement est surtout valide pour les écoulements en air, avec une humidité peu importante, et pour des particules non chargées électriquement : l'adhésion des particules est en effet supposée être uniquement due aux forces de van der Waals. Pour traiter des situations plus complexes, le sous-modèle de forces d'adhésion devrait être modifié, pour prendre par exemple en compte la polarisation des particules et de la paroi dans le cas d'un écoulement en eau, les effets du pH de la solution, où les interactions Coulombiennes dans le cas de particules chargées électriquement. Dans les années 1940, une théorie (nommée théorie DLVO) a été développée pour expliquer le comportement et les interactions des particules en solution et est présentée dans le prochain chapitre. On peut noter que les modifications envisagées concernent principalement la description des forces d'adhésion : même dans un écoulement en eau, il est très probable que le scénario de resuspension proposé reste valable.



## Chapitre IV

# Conclusion générale et perspectives

Pour clôturer notre étude, cette dernière partie est organisée en deux sections. Nous dressons dans un premier temps un bilan du travail effectué, qui a consisté en la formulation et le développement de nouvelles approches stochastiques Lagrangiennes en vue de modéliser le dépôt et le réentraînement de particules dans un écoulement turbulent. Comme nous l'avons défini dans l'introduction, ces deux phénomènes constituent les deux premières étapes d'un programme de modélisation du processus complet d'encrassement, qui comprend en outre les phases d'agglomération de particules et de colmatage de conduite. C'est pourquoi, dans une seconde section, différentes pistes sont proposées pour mettre au point des modèles pour la phase d'agglomération.

### IV.1 Synthèse de l'étude du dépôt-réentraînement

Dans ce travail, des modèles stochastiques Lagrangiens de dépôt et de remise en suspension de particules dans un écoulement turbulent ont été proposés et testés numériquement de façon indépendante. La mise au point du modèle de dépôt s'est fortement basée sur l'observation de simulations numériques directes mettant en relief les interactions entre les particules et des événements cohérents localisés principalement dans la zone logarithmique de la couche limite turbulente. Cette étude préliminaire nous a poussé à développer une modélisation stochastique qui s'éloigne de l'approche Lagrangienne plus standard qui consiste à modéliser l'écoulement vu par une particule au moyen d'une équation stochastique de Langevin, qui, de notre point de vue, permet difficilement l'incorporation directe de caractéristiques géométriques cohérentes de l'écoulement. Étant donné que nous avons pris le parti de différencier certains types de structures cohérentes du reste de l'écoulement, nous avons été amenés à introduire un processus stochastique Markovien discret chargé de gérer la succession aléatoire de phases (cohérentes ou non) rencontrée par la particule dans la couche limite turbulente. Ce choix de modélisation nous a amenés à calculer des densités de probabilité non-gaussiennes pour la vitesse des particules, et à les simuler par méthode de Monte-Carlo. Le modèle a ensuite été implémenté sur un cas simple dans le code de calcul d'EDF Code\_Saturne afin

de calculer le taux de dépôt pour des particules de différentes inertie, et un bon accord avec les résultats expérimentaux a été trouvé. Nous avons également vérifié que le modèle est dépourvu du défaut de "spurious drift" quant il est utilisé avec des particules d'inertie quasiment nulle, et que, du point de vue numérique, les résultats obtenus ne dépendent pas du pas de temps. Globalement, cette étude a duré environ un an et demi, de novembre 2005 à juin 2007, et a donné lieu à une communication en congrès international (Guingo et Minier, 2007) et une publication (Guingo et Minier, 2008b).

Le second volet de l'étude a porté sur la phase de remise de suspension d'une particule initialement déposée. Dans cette partie, le travail a consisté d'abord en la recherche d'un scénario crédible de réentraînement. Une fois ce mécanisme choisi, nous avons développé une approche stochastique pour à la fois calculer les forces d'adhésion entre une particule et la paroi en fonction des caractéristiques de la rugosité de celle-ci, et, si les conditions sont réunies, modéliser le mouvement de la particule sur la surface et son éventuel décollage dû à un choc contre une aspérité. Ce modèle a également été implémenté dans un code dédié. Les résultats issus du sous-modèle de calcul des forces d'adhésion montrent qu'il parvient à retrouver des forces d'adhésion cohérentes, ainsi que l'effet de la rugosité sur la distribution des forces d'adhésion. Bien que, en l'absence de certaines données, nous soyons parfois obligés de fixer certains paramètres avec des valeurs qui nous semblent physiques, d'autres résultats expérimentaux permettent une validation du modèle complet, à la fois au niveau de la mise en mouvement des particules sur la paroi que de leur remise en suspension proprement dite. La partie "remise en suspension" s'est déroulée sur une dizaine de mois, de juillet 2007 à avril 2008, et a donné lieu à la rédaction d'un article (Guingo et Minier, 2008a).

Le thème du dépôt-réentraînement a donc donné lieu à deux études indépendantes, mais finalement tout à fait compatibles. En effet, dans notre représentation, la modélisation de la phase de dépôt est de nature hydrodynamique, dans le sens normal à la paroi. Au contraire, la modélisation de la phase de remise en suspension porte sur la direction longitudinale de l'écoulement et est essentiellement de nature physico-chimique. Il est donc envisageable que dans un avenir proche, ces deux modèles soient implémentés au sein d'un même code (par exemple, Code\_Saturne) afin de mener des calculs de dépôt-réentraînement complets.

## IV.2 L'agglomération de particules

Dans cette dernière partie de notre travail, nous proposons des pistes pour modéliser l'étape d'agglomération du processus d'encrassement que nous avons proposée en introduction. Pour mémoire, les figures IV.1, IV.2, IV.3 et IV.4 récapitulent les quatre phases élémentaires dont la somme donne le phénomène entier.

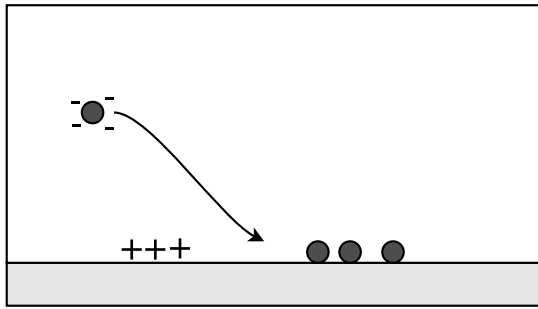


FIG. IV.1: Le dépôt de particules

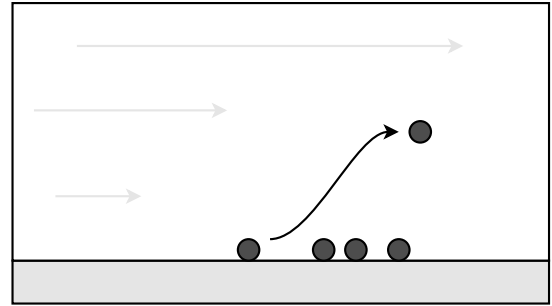


FIG. IV.2: Le réentraînement de particules

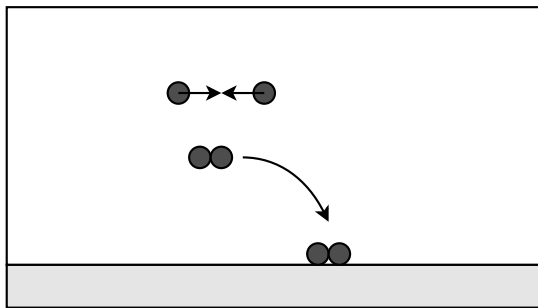


FIG. IV.3: L'agglomération de particules

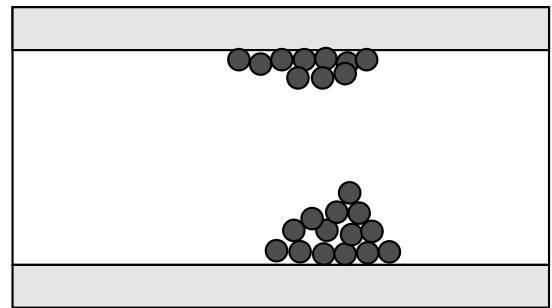


FIG. IV.4: Le colmatage

Dans la représentation proposée, l'étape d'agglomération vise à prendre en compte les interactions particule-particule, phénomène qui n'a pas été modélisé jusqu'à présent (les modèles proposés de dépôt-réentraînement se placent dans le cas d'un régime suffisamment dilué pour négliger ces interactions). De plus, l'écoulement considéré est en eau, vu que les problématiques industrielles d'encrassement (comme le colmatage des plaques entretoises) ont lieu le plus souvent dans ce type de milieu.

### IV.2.1 Conditions de l'adhésion particule-particule

La théorie qui explique les conditions de l'adhésion entre particules dans une solution est connue sous le nom de théorie DLVO, du nom de Derjaguin et Landau (1941), d'une part, et Verwey et Overbeek (1948), d'autre part. Nous allons ici décrire les grandes lignes de cette théorie, en suivant en grande partie l'exposé de Israelachvili (1991).

Plongées dans un liquide, les surfaces (et donc les surfaces des particules) sont généralement chargées, soit par dissociation de groupes en surface (par exemple, l'arrachement d'un proton qui laisse une surface chargée négativement), soit par adsorption d'ions. Pour assurer l'électronégativité de l'ensemble, une couche d'ions de signe opposé à la charge de la surface se forme à proximité de celle-ci. Ces ions sont soit directement adsorbés sur la surface, soit

dans le voisinage de la surface. Cette dernière catégorie d'ions forme la "double couche électrique" (electric double layer). On en déduit que deux particules de même type plongées dans un liquide vont présenter une charge de surface de même signe, et donc des doubles couches électriques de même signe. Elles auront donc tendance à se repousser, défavorisant ainsi la formation d'agglomérats. La compétition entre ce type d'interaction répulsive et les interactions de van der Waals toujours attractives donne lieu à plusieurs types de comportement du système formé par les deux particules.

En effet, l'épaisseur de la double couche électrique dépend de la concentration en ions dans la solution, la couche étant d'autant plus épaisse que la concentration en ions est faible, et que la charge de surface est importante. Dans le cas de particules fortement chargées en surface et plongées dans un milieu à faible concentration en ions, le potentiel total d'interaction (consistant en la somme du potentiel de van der Waals et du potentiel électrostatique de double couche) est fortement repulsif, présente un maximum pour une distance (la "barrière d'énergie") habituellement comprise entre 1 et 4 nm.

Si la concentration en ions est légèrement plus élevée dans la solution, il va exister un minimum secondaire situé à une distance interparticulaire de 5 nm environ (le minimum primaire étant situé à 0.3 nm et correspond à l'adhésion pure, comme nous l'avons vu lors de notre étude des forces d'adhésion). La barrière d'énergie existe toujours, défavorisant l'adhésion pure. Dans ce cas, les particules vont soit se positionner dans ce minimum secondaire, et donc former des agglomérats moins solides que si elles se situaient dans le minimum primaire, soit rester à l'état dispersé en solution.

Si la charge de surface des particules est suffisamment faible, alors la barrière d'énergie est également plus faible, et l'aggrégation se produit de façon lente (on parle alors de flocculation ou de coagulation). Pour une concentration critique en ions, la barrière d'énergie devient négative et les particules s'agglomèrent de façon rapide. Enfin, pour une charge surfacique nulle, l'effet de la double couche disparaît totalement et on se rapproche alors de l'interaction de van der Waals pure. L'interaction entre les deux particules est alors attractive pour n'importe quelle distance interparticulaire.

#### IV.2.2 Principaux mécanismes d'agglomération

Connaissant les propriétés du milieu et des particules, il est donc possible de déterminer si les particules ont tendance, une fois en quasi-contact, à former des agglomérats grâce à la théorie DLVO. En outre, dans une revue récente, Allen et al. (2001) répertorient les principaux mécanismes qui peuvent mener à la formation d'agglomérats :

- L'agglomération Brownienne : plus les particules sont petites, plus elles sont sensibles au mouvement Brownien, et donc, plus elles ont tendance à entrer en contact les unes

avec les autres.

- L'agglomération par gravité : les particules qui se déposent lentement sous l'effet de la gravité (habituellement les plus petites) sont capturées par les particules de taille plus importante, de vitesse de sédimentation plus élevée.
- L'agglomération turbulente : les particules entrent en collision soit en quittant leur lignes de courant par effet d'inertie, soit, dans le cas d'un écoulement cisailé, en se rattrapant mutuellement.

Allen et al. (2001) notent que ces différents mécanismes sont en compétition les uns avec les autres, ce qui renforce la complexité du phénomène. On peut en effet considérer des particules de diamètre inférieur au micron plongées dans un écoulement turbulent : vu la taille initiale de ces particules, le processus d'agglomération serait probablement au début fortement basé sur l'agglomération Brownienne. Puis, une fois que les agglomérats sont suffisamment gros, il réagissent plus fortement aux structures turbulentes : à partir d'une certaine inertie, les agglomérats de particules se concentrent alors dans des zones particulières de l'écoulement (effets de concentration préférentielle observés par différentes simulations numériques directes), et l'agglomération est donc favorisée dans ces zones du fait de la proximité des particules. Enfin, à partir d'une certaine taille d'agglomérats, la gravité prend le pas sur les autres mécanismes et les agglomérats ainsi formés finissent par sédimenter sur la paroi horizontale.

### IV.2.3 Approches de modélisation envisageables

Au fil des années, une grande partie de l'effort de modélisation relatif à l'agglomération a été consacré à la mise au point de modèles concernant la fonction  $\phi(r_i, r_j)$ , appelée noyau d'agglomération et mesurant le taux auquel les particules de rayon  $r_i$  s'agglomèrent avec les particules de rayon  $r_j$ . Suivant le mécanisme considéré (agglomération Brownienne, agglomération par gravité ou turbulent), différentes expressions de ce noyau ont été proposées dans la littérature et sont récapitulées dans Allen et al. (2001).

De notre point de vue, il serait possible d'adapter cette approche aux modèles Lagrangiens gaz-particules de la façon suivante : à chaque instant, chaque particule se verrait attribuer une probabilité de rencontre avec une autre particule en fonction de différents paramètres (concentration en particules, taille de la particule, etc.). À chaque instant, il y a donc un nombre  $N$  de particules qui entrent en contact les unes avec les autres par maille, et donc un maximum de  $N/2$  agglomérats qui se forment, ce nombre étant influencé par les conditions chimiques du milieu (cf. la théorie DLVO). En supposant par simplicité que  $N/2$  agglomérats se forment, on peut tirer au hasard  $N/2$  couples de particules qui constituent alors ces agglomérats. La mise en oeuvre de cette approche semble relativement simple et a priori peu



gourmande en ressources informatiques. Cependant, le principal problème de cette méthode réside dans la mise au point d'une expression réaliste pour la probabilité de rencontre par pas de temps, au vu de la compétition potentielle entre les différents mécanismes d'agglomération.

Une autre méthode envisageable, plus directe que la précédente, reviendrait à détecter précisément les rencontres entre particules : en effet, l'influence du mouvement Brownien, de la gravité et de la turbulence est déjà implémentée dans les modèles Lagrangiens gaz-particules actuels. S'il est possible de détecter les rencontres interparticulaires au sein de ce type de modèles, il suffirait alors de se baser sur la théorie DLVO pour déterminer s'il y a formation ou non d'agglomérats. Cette méthode présente l'avantage de minimiser les hypothèses de modélisation par rapport à la première. Toutefois, elle n'est pas dénuée d'inconvénients puisque d'une part, il est probable que détecter les collisions demande des ressources informatiques non négligeables, et d'autre part, cette approche sort du cadre des méthodes stochastiques Lagrangiennes "classiques" dans lesquelles les particules sont considérées comme des échantillons indépendants. Le cadre théorique serait donc à étudier plus en avant.

# Bibliographie

- Adrian, R., Meinhart, C., Tomkins, C., 2000. *Vortex organization in the outer region of the turbulent boundary layer*. J. Fluid Mech. 422, 1–54.
- Allen, E., Smith, P., Henshaw, J., 2001. A review of particle agglomeration. Tech. rep., US Dept. of Energy.
- Arcen, B., Taniere, A., Oesterle, B., 2005. Particle-laden channel flow : preferential concentration and statistics. In : 11th Workshop on two-phase flow predictions. Merseburg.
- Beal, S., 1970. *Deposition of particles in turbulent flow on channel or pipe walls*. Nucl. Sci. Eng. 40, 1–11.
- Biasi, L., de los Reyes, A., Reeks, M., de Santi, G., 2001. *Use of a simple model for the interpretation of experimental data on particle resuspension in turbulent flows*. J. Aerosol Sci. 32, 1175–1200.
- Blackwelder, R., Haritonidis, J., 1983. *Scaling of the bursting frequency in turbulent boundary layers*. J. Fluid. Mech. 132, 87–103.
- Bogard, D., Tiederman, W., 1986. *Burst detection with single-point velocity detector*. J. Fluid Mech., 389–413.
- Braaten, D., Paw, K., Shaw, R., 1990. *Particle resuspension in a turbulent boundary layer – observed and modeled*. J. Aerosol Sci. 21 (5), 613–628.
- Brooke, J., Kontomaris, K., Hanratty, T., McLaughlin, J., 1990. Turbulent deposition and trapping of aerosols at a wall. In : Proceedings of the 12th Symposium on Turbulence. University of Missouri.
- Brooke, J., Kontomaris, K., Hanratty, T., McLaughlin, J., 1992. *Turbulent deposition and trapping of aerosols at a wall*. Phys. Fluids 4 (4), 825–834.
- Cantwell, B., 1981. *Organized motion in turbulent flow*. Ann. Rev. Fluid Mech. 13, 457–515.
- Cheng, W., Dunn, P., Brach, R., 2002. *Surface roughness effects on microparticle adhesion*. J. Adhesion 78, 929–965.

- Chibbaro, S., Douce, A., Minier, J.-P., Ouraou, M., October 2004. Etude du transport en proche paroi de particules entraînées par un écoulement d'air turbulent. Application à la déposition. EDF Internal Report HI-81/03/020/A, EDF R&D.
- Cleaver, J., Yates, B., 1973. *Mechanism of detachment of colloidal particles from a flat substrate in a turbulent flow*. J. Colloid Interf. Sci. 44 (3), 464–474.
- Cleaver, J., Yates, B., 1975. *A sub-layer model for the deposition of particles from a turbulent flow*. Chem. Eng. Sci. 30, 983–992.
- Cleaver, J., Yates, B., 1976. *The effect of re-entrainment on particle deposition*. Chem. Eng. Sci. 31, 147–151.
- Cornet, A., Deville, J.-P., 1998. *Physique et ingénierie des surfaces*. EDP Sciences.
- Csanady, G., 1963. *Turbulent diffusion of heavy particles in the atmosphere*. J. Atmos. Sci. 20, 201–208.
- Derjaguin, B., Landau, L., 1941. Acta Physicochim. URSS 14, 633–662.
- Eichenlaub, S., Gelb, A., Beaudoin, S., 2004. *Roughness models for particle adhesion*. J. Colloid Interf. Sci. 280, 289–298.
- Fan, F., Ahmadi, G., 1993. *A sublayer model for turbulent deposition of particles in vertical ducts with smooth and rough surfaces*. J. Aerosol Sci. 24, 45–64.
- Fichman, M., Gutfinger, C., Pnueli, P., 1988. *A model for turbulent deposition of aerosol*. J. Aerosol Sci. 19 (123).
- Friedlander, S., Johnstone, H., 1957. *Deposition of suspended particles in turbulent gas streams*. Ind. Eng. Chem. 49, 1151–1156.
- Gardiner, C., 1985. *Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and the Natural Sciences*. Springer.
- Gatignol, R., 1983. *The Faxén formulas for a rigid particle in an unsteady non-uniform Stokes flow*. J. Méc. Théor. Appl. 1 (2), 143–160.
- Götzinger, M., Peukert, W., 2003. *Dispersive forces of particle-surface interaction : direct AFM measurements and modelling*. Powder Technol. 130, 102–109.
- Greenwood, J., Williamson, J., 1966. Proc. R. Soc. A 295 (300–19).
- Guingo, M., Minier, J.-P., 2007. A stochastic model of coherent structures in boundary layers for the simulation of particle deposition in turbulent flows. In : Proceedings of the 6th International Conference on Multiphase Flow. Leipzig, Germany.
- Guingo, M., Minier, J.-P., 2008a. *A new model for the simulation of particle resuspension by turbulent flows based on a stochastic description of wall roughness and adhesion forces*. J. Aerosol Sci. (accepted for publication).

- Guingo, M., Minier, J.-P., 2008b. *A stochastic model of coherent structures for particle deposition in turbulent flows*. Phys. Fluids 20 (053303).
- Guingo, M., Minier, J.-P., 2008c. A stochastic model to simulate particle resuspension in turbulent flows. In : Proceedings of th 11th International Symposium on Particles on Surfaces : Detection, Adhesion and Removal (to appear). Orono, USA.
- Hontañón, E., de los Reyes, A., Capitão, J., 2000. *The CAESAR code for aerosol resuspension in turbulent pipe flows. Assessment against the STORM experiments*. J. Aerosol Sci. 31 (9), 1061–1076.
- Ibrahim, A., Dunn, P., Brach, R., 2003. *Microparticle detachment from surfaces exposed to turbulent air flow : controlled experiments and modeling*. J. Aerosol Sci. 34, 765–782.
- Iliopoulos, I., Mito, Y., Hanratty, T., 2003. *A stochastic model for sold particle dispersion in a nonhomogeneous turbulent field*. Int. J. Multiphase Flow 29, 375–394.
- Israelachvili, J., 1991. *Intermolecular and Surface Forces*, 2nd Edition. Academic Press.
- Jafari, G., Fazeli, S., Ghasemi, F., Allaei, S. V., Tabar, M. R. R., Iraj Zad, A., Kavei, G., 2003. *Stochastic analysis and regeneration of rough surfaces*. Phys. Rev. Lett. 91 (22).
- Johnson, K., Kendall, K., Roberts, A., 1971. *Surface energy and the contact of elastic solids*. Proc. R. Soc. A 324 (301–13).
- Kaftori, D., Hetsroni, G., Banerjee, S., 1995a. *Particle behavior in the turbulent boundary layer. ii. velocity and distribution profiles*. Phys. Fluids 7 (5), 1107–1121.
- Kaftori, D., Hetsroni, G., Banerjee, S., 1995b. *Particle behavior in the turbulent boundary layer. i. motion, deposition and entrainment*. Phys. Fluids 7 (5), 1095–1106.
- Kallio, G., Reeks, M., 1989. *A numerical simulation of particle deposition in turbulent boundary layers*. Int. J. Multiphase Flow 15 (3), 433–446.
- Kaspersen, J., Krogstad, P.-A., 2001. *Wavelet-based method for burst detection*. Fluid Dyn. Res. 28, 223–236.
- Katainen, J., Paaanen, M., Ahtola, E., Pore, V., Lahtinen, J., 2006. *Adhesion as an interplay between particle size and surface roughness*. J. Colloid Interf. Sci. 304, 524–529.
- Kendall, K., 2001. *Molecular adhesion and its applications – The sticky universe*. Kluwer Academic/Plenum Publisher.
- Kröger, C., Drossinos, Y., 2000. *A random-walk simulation of thermophoretic particle deposition in a turbulent boundary layer*. Int. J. Multiphase Flow 26, 1325–1350.
- Li, L., Xu, C., Zhang, Z., Cui, G., 1999. *Measurement of the mean burst period in wall turbulence by wavelet analysis*. Com. Nonlinear Sci. and Num. Sim. 4 (3).

- Liu, B., Agarwal, J., 1974. *Experimental observation of aerosol deposition in turbulent flow*. J. Aerosol Sci. 5, 145–155.
- Marchioli, C., Giusti, A., Salvetti, M., Soldati, A., 2003. *Direct numerical simulation of particle wall transfer in upward turbulent pipe flow*. Int. J. Multiphase Flow 29, 1017–1038.
- Marchioli, C., Soldati, A., 2002. *Mechanisms for particle transfer and segregation in a turbulent boundary layer*. J. Fluid Mech. 468, 283–315.
- Marchioli, C., Soldati, A., Kuerten, J., Arcen, B., Taniere, A., Goldensoph, G., Squires, K., Cargnelutti, M., Portela, L., 2007. *Statistics of particle dispersion in direct numerical simulations of wall-bounded turbulence : results of an international collaborative benchmark test*. In : Proceedings of the 6th International Conference on Multiphase Flow. Leipzig.
- Matida, E., Nishino, K., Torii, K., 2000. *Statistical simulation of particle deposition on the wall from turbulent dispersed pipe flow*. Int. J. Heat Fluid Fl. 21, 389–402.
- Maude, A., 1963. *The movement of a sphere in front of a plane at low reynolds number*. Brit. J. Appl. Phys. 14, 894–898.
- Maxey, M., Riley, J., 1983. *Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow*. Phys. Fluids 26 (4), 883–889.
- McCoy, D., Hanratty, T., 1975. *Rate of deposition of droplets in annular two-phase flow*. Int. J. Multiphase Flow 3, 319–331.
- McInnes, J., Bracco, F., 1992. *Stochastic particle dispersion modeling and the tracer-particle limit*. Phys. Fluids A 4 (12), 2809–2824.
- Minier, J.-P., 1988. *Construction de la trajectoire d'une particule dans un écoulement turbulent*. Tech. rep., EDF R&D.
- Minier, J.-P., Peirano, E., October 2001. *The PDF approach to turbulent polydispersed two-phase flows*. Phys. Rep. 352 (1-3), 1–214.
- Minier, J.-P., Peirano, E., Chibbaro, S., 2003. *Weak first- and second-order numerical schemes for stochastic differential equations appearing in lagrangian two-phase flow modeling*. Monte Carlo Methods and Appl. 9 (2), 93–133.
- Minier, J.-P., Peirano, E., Chibbaro, S., 2004. *PDF model based on Langevin equation for polydispersed two-phase flows applied to a bluff-body gas-solid flow*. Phys. Fluids 16 (7), 2419–2431.
- Minier, J.-P., Pozorski, J., 1999. *Wall-boundary conditions in probability function methods and application to a turbulent channel flow*. Phys. Fluids 11 (9).
- Narayanan, C., Lakehal, D., Botto, L., Soldati, A., 2003. *Mechanisms of particle diffusion in a fully-developed turbulent open channel flow*. Phys. Fluids 15, 763–775.

- O'Neill, M., 1968. *A sphere in contact with a plane in a slow shear linear flow*. Chem. Eng. Sci. 23, 1293–1298.
- Papavergos, P., Hedley, A., 1984. *Particle deposition behaviour from turbulent flow*. Chem. Eng. Res. Des. 62, 275–295.
- Papoulis, A., 1991. *Probability, Random Variables and Stochastic Processes*, 3rd Edition. McGraw-Hill, Inc.
- Peirano, E., Pozorski, J., Chibbaro, S., Minier, J.-P., 2006. *Mean-field/pdf numerical approach for polydispersed two-phase flow*. Prog. Energ. Combust. 32, 315–371.
- Picciotto, M., Marchioli, C., Reeks, M., Soldati, A., 2004. On the preferential concentration of inertial particles dispersed in a turbulent boundary layer. In : Proceedings of the 3rd International Symposium on Two-Phase Flow Modelling and Experimentation. Pisa.
- Pope, S., 1987. *Consistency conditions for random-walk models of turbulent dispersion*. Phys. Fluids 30 (8), 2374–2379.
- Pope, S., 1994. *Lagrangian PDF methods for turbulent reactive flows*. Ann. Rev. Fluid Mech. 26, 23–63.
- Pope, S., 2000. *Turbulent Flows*. Cambridge University Press.
- Rabinovich, Y., Adler, J., Ata, A., Singh, R., Moudgil, B., 2000a. *Adhesion between nanoscale rough surfaces. i. role of asperity geometry*. J. Colloid Interface Sci. 232, 1–16.
- Rabinovich, Y., Adler, J., Ata, A., Singh, R., Moudgil, B., 2000b. *Adhesion between nanoscale rough surfaces. ii. measurement and comparison with theory*. J. Colloid Interf. Sci. 232, 17–24.
- Reeks, M., Hall, D., 2001. *Kinetic models of particle resuspension in turbulent flows : theory and measurement*. J. Aerosol Sci. 32, 1–31.
- Reeks, M., Reed, J., Hall, D., 1988. *The resuspension of small particles by a turbulent flow*. J. Phys. D Appl. Phys. 21, 574–589.
- Robbe-Valloire, F., 2001. *Statistical analysis of asperities on a rough surface*. Wear 249, 401–408.
- Robinson, S., 1991. *Coherent motions in the turbulent boundary layer*. Annu. Rev. Fluid Mech. 23, 601–639.
- Rumpf, H., 1990. *Particle Technology*. Chapman & Hall, London/New-York.
- Schoppa, W., Hussain, F., 2000. *Coherent structure dynamics in near-wall turbulence*. Fluid Dyn. Res. 26, 119–139.

- Sehmel, G., 1968. Aerosol deposition from turbulent airstreams in vertical conduits. Tech. rep., Pacific Northwest Laboratory, Richland, Washington.
- Sommerfeld, M., April 2000. Theoretical and experimental modelling of particulate flows. Tech. rep., Von Karman Institute for Fluid Dynamics.
- Tanière, A., Oesterlé, B., Monnier, J.-C., 1997. *On the behaviour of solid particles in a horizontal boundary layer with turbulence and saltation effects*. Exp. Fluids 23, 463–471.
- Tian, L., Ahmadi, G., 2007. *Particle deposition in turbulent duct flows – comparisons of different model predictions*. J. Aerosol Sci. 38, 377–397.
- Vainshtein, P., Ziskind, G., Fichman, M., Gutfinger, G., 1997. *Kinetic model of particle resuspension by drag force*. Phys. Rev. Lett. 78 (3), 551–554.
- Verwey, E., Overbeek, J. T. G., 1948. *Theory of stability of lyophobic colloids*. Elsevier, Amsterdam.
- Waclawczyk, M., Pozorski, J., Minier, J.-P., 2004. *Probability density function computation of turbulent flows with a new near-wall model*. Phys. Fluids 16 (5).
- Wallace, J., Eckelmann, H., Brodkey, R., 1972. *The wall region in turbulent shear flow*. J. Fluid Mech. 54, 39–48.
- Wang, Q., Squires, K., Chen, M., McLaughlin, J., 1997. *On the role of the lift force in turbulence simulations of particle deposition*. Int. J. Multiphase Flow 23, 749.
- Willmarth, W., Lu, S., 1972. *Structure of the Reynolds stress near the wall*. J. Fluid Mech., 65–92.
- Zhou, H., Götzinger, M., Peukert, W., 2003. *The influence of particle charge and roughness on particle-substrate adhesion*. Powder Technol. 135-136, 82–91.
- Ziskind, G., Fichman, M., Gutfinger, C., 1995. *Resuspension of particulates from surfaces to turbulent flows – review and analysis*. J. Aerosol Sci. 26 (4), 613–644.
- Ziskind, G., Fichman, M., Gutfinger, C., 1997. *Adhesion moment model for estimating particle detachment from a surface*. J. Aerosol Sci. 28 (4), 623–634.
- Ziskind, G., Fichman, M., Gutfinger, C., 2000. *Particle behaviour on surfaces subjected to external excitations*. J. Aerosol Sci. 31 (6), 703–719.