



HAL
open science

Simulation numérique directe et analyse des transferts de chaleur dans les lits de particules fixes et mobiles

Florian Euzenat

► **To cite this version:**

Florian Euzenat. Simulation numérique directe et analyse des transferts de chaleur dans les lits de particules fixes et mobiles. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Institut National Polytechnique de Toulouse - INPT, 2017. Français. NNT : 2017INPT0114 . tel-04228499

HAL Id: tel-04228499

<https://theses.hal.science/tel-04228499>

Submitted on 4 Oct 2023

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.



Université
de Toulouse

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

Institut National Polytechnique de Toulouse (INP Toulouse)

Discipline ou spécialité :

Dynamique des fluides

Présentée et soutenue par :

M. FLORIAN EUZENAT

le lundi 11 décembre 2017

Titre :

Simulation numérique directe et analyse des transferts de chaleur dans les lits de particules fixes et mobiles

Ecole doctorale :

Mécanique, Energétique, Génie civil, Procédés (MEGeP)

Unité de recherche :

Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (I.M.F.T.)

Directeur(s) de Thèse :

M. ERIC CLIMENT

M. PASCAL FEDE

Rapporteurs :

Mme CHRISTINE HRENYA, UNIVERSITY OF COLORADO AT BOULDER

M. OLIVIER DESJARDINS, CORNELL UNIVERSITY EU

Membre(s) du jury :

M. MICHEL LANCE, ECOLE CENTRALE DE LYON, Président

M. ANTHONY WACHS, UNIVERSITY OF BRITISH COLUMBIA VANCOUVER, Membre

M. ERIC CLIMENT, INP TOULOUSE, Membre

M. LOUNES TADRIST, AIX-MARSEILLE UNIVERSITE, Membre

M. PASCAL FEDE, UNIVERSITE TOULOUSE 3, Membre

Remerciements

Ce travail a été l'occasion pour moi d'engranger des connaissances scientifiques et personnelles, mais il s'inscrit aussi dans un cadre humain qui m'a donné l'opportunité de rencontrer des personnes qui ont toutes contribué, à travers différents prismes, à cette thèse. Ainsi je tiens dans un premier temps à remercier mes directeurs de thèse, Eric Climent et Pascal Fede, pour la pertinence de leurs conseils scientifiques et pour leur aide tout au long de ce travail. Merci aussi à vous, pour m'avoir régulièrement accueillis à l'IMFT sur les derniers mois. Ensuite, je tiens à remercier Anthony Wachs et Abdelkader Hammouti pour leur encadrement et leur investissement permanent sur cette thèse : je vous en suis extrêmement reconnaissant. Anthony, j'ai été honoré de travailler avec toi, ta rigueur scientifique, tes conseils et tes encouragements m'ont beaucoup aidé durant ces trois ans. À toi et à Kad, je vous remercie aussi pour la liberté que vous m'avez accordée pour mener ce travail, tout en sachant me mettre en garde lorsque le chemin s'annonçait difficile. Kad, merci pour ton soutien moral constant, pour ton aide scientifique et technique. Mes remerciements vont aussi aux porteurs de l'ANR MOR4LESS et du projet PeliGRIFF . Merci pour votre collaboration et pour m'avoir permis d'accéder à vos outils et aux ressources de calcul nationales (GENCI, CCRT), sans lesquels, cette thèse n'aurait pas pu être ce qu'elle est.

Je tiens aussi à remercier Christine Hrneya et Olivier Desjardins pour avoir accepté de rapporter et d'examiner cette thèse. Merci aussi aux membres du jury Michel Lance et Lounès Tadriss pour leur présence, leurs remarques et leurs discussions durant la soutenance.

Je remercie aussi tous les membres de l'équipe PeliGRIFF, vous avoir comme collègue a été une très belle expérience. Tout d'abord Kad, tu as su défendre le projet et tes étudiants et je t'en remercie. Les anciens thésards, Manuel, Amir et Daniel, merci pour la bonne ambiance dans le bureau et pour l'émulation au sein de l'équipe. Manuel, merci d'avoir posé les premiers éléments de la partie méso. Amir, merci pour la collaboration des derniers mois et pour nos discussions sur la physique les outils d'analyses. J'espère que tu as pris soin et que tu as bien roulé avec le vélo depuis mon départ de Vancouver. Merci à Daniel pour ta bonne humeur et la découverte de la gastronomie malgache. À la nouvelle génération, Mostafa, et tes centaines d'alias sous Linux. Bon courage à toi pour la fin. Et aux autres stagiaires/thésards de la direction, Pierre-Antoine, Federico, Maroua, Malik, Damien, Tandji et Mehdi.

Merci à tout le personnel de la direction Mécanique Appliquées d'IFPEN de m'avoir permis de connaître une bonne ambiance de travail. Manu, merci pour tes blagues, ta bonne humeur, tes anecdotes et ta passion pour l'aéronautique. Un grand merci à toi ! Merci à Françoise pour sa disponibilité sur les aspects administratifs. Merci aux cyclistes/Vttistes, Jean-Lou, Arnaud et Francis. Véronique, les Cyrils, Pauline, Guillaume, Alice, Xiaoyu, Gauthier, Myriam, Malika, Sophie, Alex, les Philippe, Jean-Pierre, Fabrice, Fabien, Martin, Vincent, Didier, Thimotée, merci à vous. Merci aussi à mes collègues de R12, Rim que j'ai pu retrouver par hasard lors de mes trois conférences. Adrien le roi de l'origami, Charles un autre vttiste, les Mathieu, Sina, Frédéric, Cécile, Jan et les autres. Je tiens aussi à remercier mes collègues

thésards à savoir, Jean-Jérôme pour t'être levé aux aurores pour prendre la navette, Wei, Kevin, Sonia, Marisa, Leonor, Sébastien, et tous ceux que j'oublie.

Mes remerciements vont aussi à mes proches, ma famille et mes amis qui ont toujours été là pour me soutenir, m'encourager mais aussi pour m'avoir permis de lever la tête du guidon. Et pour conclure, je tiens à remercier Hélène pour ces trois belles années passées à ses côtés, sa patience et son soutien sans faille durant cette quête. Je tiens ici à t'exprimer toute ma gratitude.

Table des matières

Introduction	1
1 Contexte physique	5
1 La fluidisation	5
2 Transferts thermiques dans les lits fluidisés	20
3 Modélisation multi-échelles des lits fluidisés	40
4 Simulation des écoulements fluide–particule à l’échelle microscopique	42
5 Plateforme PeliGRIFF	47
2 Réseaux fixes de particules	55
1 Introduction	56
2 Numerical model	60
3 Detailed validation of the numerical approach	62
4 Analysis of heat transfer in random arrays of spheres	68
5 Discussion and perspectives	90
Appendices	92
2.A Accuracy of our DLM/FD-FV/SG method for heat transfer in single sphere configurations	92
2.B Intéraction linéaire de trois sphères : Effet sur l’écoulement et les transferts	101
2.C Études complémentaires sur les lits fixes de particules	120
3 Lits fluidisés liquide–solide	127
1 Introduction	127
2 Mathematical modeling and numerical approach	129
3 Results on hydrodynamics of fluidized beds	144
4 Heat transfer in fluidized beds	155

5	Conclusion	167
	Appendices	168
3.A	Auto-perturbation des quantités volumiques locales	168
3.B	Interactions mur-particules	177
4	Comparaison des échelles PRS / DEM–CFD	197
1	Description du modèle thermique DEM–CFD	198
2	Validation du modèle	203
3	Comparaison DEM–CFD / PRS	210
4	Conclusions/Synthèse	220
5	Conclusion et perspectives	223
1	Conclusion	223
2	Perspectives	225
	Bibliographie	247

Table des figures

1.1	Régimes de fluidisation [135].	7
1.2	Similarité comportementale entre fluide et lit fluidisé [135].	8
1.3	Classification de Geldart [79].	9
1.4	Régimes observés pour les différents types de poudres.	10
1.5	Classification de Reh [188].	10
1.6	Classification de Geldart revue par Yang [265].	11
1.7	Représentation des poudres selon Saxena et Ganzha [201].	13
1.8	Dynamique dans un lit fluidisé	16
1.9	Prépondérance des différents modes de transfert thermique Surface–Lit en lits fluidisés [75].	21
1.10	Comparaison de l'évolution du nombre de Nusselt pour une particule isolée prévu par les corrélations [36, 72, 187, 256] en fonction du nombre de Reynolds \mathcal{Re}	24
1.11	Comparaison de l'estimation du coefficient de dispersion axial avec la littérature. Crédits :[50].	28
1.12	Comparaison de l'évolution du nombre de Nusselt prévu par les corrélations [92, 165, 187, 192, 197, 251] en fonction du \mathcal{Re}_S	38
1.13	Comparaison de l'évolution du nombre de Nusselt prévu par les corrélations [92, 165, 187, 192, 197, 251] en fonction de α_c	39
1.14	Schéma de l'approche multi-échelle.	41
2.1	Random array of spheres flow configuration : 3D configuration for $\alpha_c = 0.5$ with boundary labels and dimensions (left) and velocity magnitude and temperature contours in a $x = 3$ cut plane (right).	65
2.2	Radial density function for the three random arrays of spheres.	66
2.3	Grid convergence for a random array of spheres at ($\alpha_c = 0.9$, $\mathcal{Re} = 5$), ($\alpha_c = 0.7$, $\mathcal{Re} = 20$) and ($\alpha_c = 0.5$, $\mathcal{Re} = 50$), and $\mathcal{Pr} = 1$: relative error on global Nusselt number \mathcal{Nu}_g . Black dashed and solid lines respectively represent first and second order convergence rates.	67

2.4	Magnitude and sign of relative error on Nusselt number per particle as a function of their streamwise position for $(\alpha_c = 0.9, \mathcal{R}e = 5)$ and $(\alpha_c = 0.7, \mathcal{R}e = 20)$	68
2.5	Grid convergence for a random array of spheres at $(\alpha_c = 0.9, \mathcal{R}e = 5)$, $(\alpha_c = 0.7, \mathcal{R}e = 20)$ and $(\alpha_c = 0.5, \mathcal{R}e = 50)$, and $\mathcal{P}r = 1$: (a) mean relative error on Nusselt number $\bar{\epsilon}_{\mathcal{N}u}$ and (b) relative error on individual Nusselt $\epsilon_{\mathcal{N}u_{p,i}}$ for 6 individual particles in the array chosen among the cases $(\alpha_c = 0.9, \mathcal{R}e = 5)$ and $(\alpha_c = 0.7, \mathcal{R}e = 20)$. Black dashed and solid lines respectively represent first and second order convergence rates.	69
2.6	Comparison of our computed average Nusselt numbers $\overline{\mathcal{N}u}$ obtained by matching a 1D model for $\mathcal{R}e \in [5, 100]$ and $\mathcal{P}r \in [1, 5]$ with the correlations of Gunn [92] and Deen <i>et al.</i> [46]. Please note that we actually plot $\frac{\overline{\mathcal{N}u} - (7 - 10/\alpha_d + 5\alpha_d^2)}{\mathcal{P}r^{1/3}}$, i.e., the deviation to the part common to all correlations. Red, blue and green dots/lines correspond to $\alpha_c = 0.9, 0.7$ and 0.5 , respectively.	71
2.7	Comparison of our computed average Nusselt numbers $\overline{\mathcal{N}u}$ obtained by matching a 1D model for $\mathcal{R}e \in [0.1, 100]$ and $\mathcal{P}r \in [1, 50]$ with various correlations and data from the literature (grey area from Kunii [135]).	72
2.8	Relative error between $\widetilde{\mathcal{N}u}_p(L_{box})$, the Nusselt number computed with the filtered temperature, and $\mathcal{N}u_{p,ref}$, the value computed with the correct far field temperature, as a function of the control volume size L_{box} for $\mathcal{R}e = 150$, $\mathcal{P}r \in [0.1, 2]$ and 2 different kernels in the case of an isolated sphere in an unbounded domain.	75
2.9	Effect of kernel type and control volume size L_{box} on the filtered particle Nusselt number distribution, average value and standard deviation.	78
2.10	PDF of kernel 0 filtered porosity $\widetilde{\alpha_{c,p}}$ as a function of control volume size L_{box} . 79	79
2.11	2D distribution of normalized kernel 0 filtered porosity and effective kernel 0 filtered streamwise velocity component as a function of control volume size L_{box} for $\alpha_c = 0.7$, $\mathcal{P}r = 1$ and (a) $\mathcal{R}e = 18$ and (b) $\mathcal{R}e = 72$	81
2.12	2D distribution of normalized kernel 0 filtered porosity deviation from mean porosity and kernel 0 filtered velocity deviation from mean velocity for $\alpha_c = 0.7$, $\mathcal{P}r = 1$ and $\mathcal{R}e = 18, 36, 72$: (a) streamwise velocity component and (b) transverse velocity component. Ellipsoidal contours correspond to different L_{box} : black for $L_{box} = 2$, green for $L_{box} = 3$, grey for $L_{box} = 4$ and white for $L_{box} = 5$	82
2.13	PDF of kernel 0 filtered particle Nusselt number computed with $L_{box} = 3$ as a function of (a) Reynolds number and (b) Prandtl number.	83

2.14	2D distribution of normalized kernel 0 filtered porosity and normalized kernel 0 filtered particle Nusselt number as a function of control volume size L_{box} for $\alpha_c = 0.7$, $Pr = 1$ and (a) $Re = 18$ and (b) $Re = 72$	84
2.15	PDF of kernel 0 filtered particle Nusselt number normalized deviation from mean particle Nusselt number. The PDF is fitted with a log-normal distribution and its computed standard deviation is $\sigma_{(\widetilde{\mathcal{N}u_p} - \langle \widetilde{\mathcal{N}u_p} \rangle) / \langle \widetilde{\mathcal{N}u_p} \rangle} = 0.435$	85
2.16	Kernel 0 filtered mean particle Nusselt number as a function of Reynolds number and control volume size L_{box} for (a) $\alpha_c = 0.9$ and (b) $\alpha_c = 0.7$	86
2.17	Kernel 0 filtered mean particle Nusselt number as a function of Peclet number and control volume size L_{box} for $\alpha_c = 0.7$	87
2.18	Conical/torus regions in the wake of particle i defined by an interparticle distance d_{ij} , a length Δd_{ij} , an interparticle angle θ_{ij} with respect to the main flow direction shown by the dashed-dotted red arrow and an aperture $\Delta\theta_{ij}$	88
2.19	Difference between Nusselt numbers of two close particles $\Delta\mathcal{N}u = (\widetilde{\mathcal{N}u_{p,i}} - \widetilde{\mathcal{N}u_{p,j}}) / \langle \widetilde{\mathcal{N}u_p} \rangle$: (a) as a function of d_{ij} for $\theta_{ij} = \pi/18$ (quasi-aligned particles) with $\Delta d_{ij} = 0.25$ and $\Delta\theta_{ij} = 2\pi/18$, (b) as a function of d_{ij} for $\theta_{ij} = 8\pi/18$ (quasi-side-by-side particles) with $\Delta d_{ij} = 0.25$ and $\Delta\theta_{ij} = 2\pi/18$, and (c) as a function of θ_{ij} for $d_{ij} < 1.5$ with $\Delta\theta_{ij} = \pi/18$	89
2.A.1	Comparison of computed and analytical radial temperature profile time evolutions for the case of purely diffusive heat transfer from a sphere in an unbounded domain filled with quiescent fluid.	93
2.A.2	Effect of average spacing between boundary Lagrangian points s on grid convergence of the computed solution : relative error on $\mathcal{N}u_p$ for a single sphere in an unbounded domain at $Re = 40$ and $Pr = 1$	94
2.A.3	A single sphere in an unbounded domain at various Pe : (a) grid convergence, relative error on $\mathcal{N}u_p$ and (b) comparison of our computed $\mathcal{N}u_p$ with assorted correlations from the literature.	95
2.A.4	A single sphere in an unbounded domain at various Pe : (a) profile of local $\mathcal{N}u$ as a function of streamwise angular position, comparison to other results from the literature and (b) thermal boundary layer thickness around the sphere.	96
2.A.5	In-line array of three spheres flow configuration and boundary labels : 3D configuration (left) and streamwise distances shown in a $x = 3$ cut plane (right).	98

2.A.6	Grid convergence for an in-line array of three spheres at $\mathcal{Re} = 150$, $\mathcal{Pr} = 10$, $C_{12} = 2$, $C_{23} = 2$: (a) relative error on global Nusselt number \mathcal{Nu}_g and (b) relative error on Nusselt number per particle $\mathcal{Nu}_{p,i}$, $i = 1, 2, 3$. Black dashed and solid lines respectively represent first and second order convergence rates.	100
2.B.1	Paramètres du sillage derrière une particule isolée.	101
2.B.2	Comparaison des caractéristiques de la zone de recirculation avec la littérature.	102
2.B.3	Paramètres du sillage derrière pour un alignement de particules.	103
2.B.4	Visualisation des zones de recirculation derrière les sphères 1 et 2 et en amont de la sphère 3, $C_{12} = C_{23} = 2$, $\mathcal{Re} = 50$. Champ coloré par la norme de la vitesse fluide $\ \mathbf{u}_c\ $ [184].	107
2.B.5	Comparaison du nombre de Nusselt local pour une sphère isolée et la première sphère (seule particule thermiquement active) en interaction hydrodynamique dans la configuration : $C_{12} = 2$, $C_{23} = 6$, $\mathcal{Re} = 100$. Visualisation du champ de température et des lignes de courant.	110
2.B.6	Nombre de Nusselt local, interaction linéaire.	111
2.B.7	Contours de température en amont de la seconde sphère, $C_{12} = 2$ et $C_{23} = 6$.	112
2.B.8	Rapport de coefficient de traînée. Configurations de Buist [24].	113
2.B.9	Rapports de nombre de Nusselt à celui d'une sphère isolée. Configurations de Buist [24].	118
2.B.10	Effets combinés de C_{12} , C_{23} et \mathcal{Re} sur le rapport de nombre de Nusselt (sphère 1 et 2). Configuration de Buist [24]. Légende : Bleu= $\mathcal{Re} : 20$, Vert= $\mathcal{Re} : 50$, Rouge= $\mathcal{Re} : 100$ et Cyan= $\mathcal{Re} : 150$	119
2.B.11	Effets combinés de C_{12} , C_{23} et \mathcal{Re} sur le rapport de nombre de Nusselt (sphère 3). Configuration de Buist [24]. Légende : Bleu= $\mathcal{Re} : 20$, Vert= $\mathcal{Re} : 50$, Rouge= $\mathcal{Re} : 100$ et Cyan= $\mathcal{Re} : 150$	120
2.C.1	Évolution des paramètres de la nouvelle corrélation avec le chargement solide.	122
2.C.2	Comparison of the fitted function with the literature data, $\mathcal{Pr} = 0.8$	122
2.C.3	Evolution des propriétés locales $L_{box} = 2$ de l'écoulement et de la force subie par les particules pour trois zones du lit : cœur du lit, proche parois et proche des coins.	125
3.1	Evolution of velocity and heat flux probability density functions with grid resolution.	137

3.2	Richardson extrapolation on Feng [73] configuration.	138
3.3	Effect of the grid resolution on the fluid temperature vertical distribution. Shaded regions correspond to the standard deviation of the temperature profile. The results are given for two Reynolds number.	139
3.4	Local fluid velocity comparison for different particles numbers, $L_{box} = 2$. . .	143
3.5	Lagrangian statistics for different fluidized beds sizes.	143
3.6	Comparison of the pressure profiles (total pressure profile from simulations (dash line), hydrostatic pressure in pure fluid (solid line) and theoretical estimate based on the solid volumetric concentration profile $\alpha_c(z)$ (thin line). .	145
3.7	Comparison of the bed height computed from pressure drop (lines) and 99% criteria (dashed lines).	146
3.8	Richardson and Zaki [191] fitting law on PRS data of fluidized beds.	147
3.9	Comparison of fluid and particle agitations.	147
3.10	Evolution of granular temperature with time for fluidized beds.	148
3.11	Ratio of transverse to axial particle velocity variance.	149
3.12	Reynolds number based on particle agitation.	149
3.13	Probability density function of transverse (left) and (axial) particle agitation. .	150
3.14	Comparison of angular to translation velocity in fluidized beds.	151
3.15	Particles collisions in fluidized beds.	152
3.16	Lagrangian autocorrelation functions of particle axial velocity.	153
3.17	Mean square displacement into liquid–solid fluidized beds.	153
3.18	Effect of particle motion on the fluid phase.	154
3.19	Effect of particle motion on the Lagrangian statistics.	155
3.20	Comparison of the Nusselt number distribution into fixed and fluidized beds, $Re_{in} = 6$	157
3.21	Thermal characteristic time scale for a particle to reach 10% of its final heat flux in fixed beds, $Re_{in} = 6$	158
3.22	Temporal local porosity autocorrelation function for different fluidization velocities : Limiting case of $L_{box} = 2d_p$	159
3.23	Distribution of the local Nusselt number through the bed at different heights. .	160

3.24	Evolution of Nusselt number distribution with fluidization regimes.	160
3.25	Autocorrelation functions of the Nusselt numbers.	162
3.26	Flow and cell size effect of autocorrelation functions.	164
3.27	Cross-correlation and adaptation lag time between particle and surrounding fluid.	165
3.28	Spatial correlation of particulate properties.	166
3.A.1	Effet de l'auto-perturbation d'une particule sur la vitesse environnante $\widetilde{u}_{c,ax}$, $L_{box} = 2$ et $L_{box} = 4$	170
3.A.2	Erreur de la vitesse environnante $\widetilde{u}_{c,ax}$, à la vitesse non-perturbée, $L_{box} = 2$ et $L_{box} = 4$	171
3.A.3	Effet de l'auto-perturbation d'une particule sur la température environnante \widetilde{u}_c pour $L_{box} = 2$ et $L_{box} = 4$	172
3.A.4	Méthode de sélection des particules voisines. Particule retirée : P_r ; Gris : Voisines sélectionnées (intersection avec le cercle pointillé); Blanc : Particule ne vérifiant pas le critère.	173
3.A.5	Effet de la suppression d'une particule sur la force hydrodynamique F_{ax} des voisines. Coloré par l'écart sur $F_{ax} : e = \frac{F_{i,ax,all} - F_{i,ax,rem}}{F_{i,ax,all}}$	175
3.A.6	Effet de la suppression d'une particule sur le flux de chaleur normalisé $\mathcal{N}u_p$ des voisines. Coloré par l'écart sur $\mathcal{N}u_p : e = \frac{\mathcal{N}u_{p_i,all} - \mathcal{N}u_{p_i,rem}}{\mathcal{N}u_{p_i,all}}$	176
3.B.1	Comparaison du régime de fluidisation dans un lit de 500 particules : Gauche : Bi-périodique, Droite : Murs.	177
3.B.2	Effet du critère de répartition sur la distribution autour de $\eta = 0.9$	179
3.B.3	Fonction de densité de probabilité de vitesses : comparaison bi-périodique et murs.	181
3.B.4	Distinctions entre vitesse transverse normale et parallèle aux murs pour les particules de la catégorie « Murs ».	182
3.B.5	Fonctions de densité de probabilité des vitesses normales V_{\perp} et transverses V_{\parallel} aux murs pour la catégorie « Murs ».	182
3.B.6	Définitions du temps de résidence en proche paroi dans un lit fluidisé.	183
3.B.7	Impact du temps de résidence dans les zones « Murs » sur l'estimation d'un coefficient d'autodiffusion transverse granulaire.	184

3.B.8	Estimation des coefficients d'autodiffusion dans le cas avec parois.	185
3.B.9	Fonction de densité de probabilité de vitesses : comparaison bi-périodique et murs.	186
3.B.10	Fonction de densité de probabilité de vitesses : comparaison bi-périodique et murs.	187
3.B.11	Influence du critère de détection des collisions sur l'angle d'impact.	188
3.B.12	Définitions des vitesses et angles d'impacts.	189
3.B.13	Angles et Vitesses d'impact : effets des parois.	191
3.B.14	Fonctions d'autocorrélations dans le lit et en proche paroi pour la force hydrodynamique.	191
3.B.15	Impact du critère de répartition η sur les grandeurs thermiques pour la catégorie « Murs ».	193
3.B.16	Troncature du volume de contrôle pour les particules en proche paroi.	194
3.B.17	Comparaison des transferts thermiques entre zones du lit.	195
3.B.18	Distribution des températures locales : $L_{box} = 1$	195
4.1	Schéma d'interpolation tri-linéaire à un instant t	201
4.2	Exemple 1D du noyau Gaussien, $W = 2.5$	201
4.3	Schéma des méthodes d'interpolation à l'échelle DEM-CFD.	202
4.4	Evolution temporelle d'un Dirac de température dans un champ de vitesse uniforme. Rouge : $t = 0.15s$, Bleu : $t = 0.65s$, Vert : $t = 1.15s$, Cyan : $t = 1.65s$. La zone grisée correspond à l'étalement du Dirac de température à $t = 0$	204
4.5	Evolution temporelle de la température d'une sphère refroidie par un fluide : comparaison DEM-CFD / solution analytique.	206
4.6	Evolution temporelle de la norme L_2 de la vitesse et de la température du fluide. Cette norme est calculée entre deux itérations successives.	206
4.7	Comparaison de l'évolution temporelle du profil de température de la phase solide dans un lit fixe de particules. Symboles : DEM-CFD, Traits plein : Solution du bilan (1D).	210
4.8	Comportement thermique du lit fixe : comparaison PRS/DEM-CFD.	213

4.9	Comparaison de la distribution de nombre de Nusselt issue de la PRS avec les valeurs de la corrélation de Gunn [92] autour du couple $(\alpha_c, Re_p) = (0.7, 72)$.	214
4.10	Comportement thermique du lit fixe : comparaison PRS/DEM-CFD avec terme fluctuant.	216
4.11	Comportement thermique du lit fluidisé $U_{in} = 4U_{mf}$: comparaison PRS/DEM-CFD.	217
4.12	Évolution des temps Lagrangiens thermiques en lits fluidisés.	218
4.13	Comparaison des fonctions d'autocorrélations de $\mathcal{N}u'_p$ et $\ln(\mathcal{N}u'_p)$ avec les équations 4.25 et 4.21.	220
4.14	Comportement thermique du lit fluidisé : comparaison PRS/DEM-CFD avec terme fluctuant.	221

Liste des tableaux

1.1	Estimation de $U_{c,mf}^*$ pour des lit mono ou poly-disperse.	15
1.2	Estimation de $U_{c,mb}^*$ pour des lits fluidisés.	16
1.3	Corrélations pour les différentes vitesses de fluidisation turbulente.	18
1.4	Calcul de la vitesse de transport du lit U_{tr}^* selon plusieurs auteurs.	19
1.5	Expression du nombre de Nusselt $\mathcal{N}u_p$ selon différents auteurs.	23
1.6	Gammes de validité du nombre de Nusselt $\mathcal{N}u_p$ selon différents auteurs. . .	23
1.7	Notations utilisées dans les corrélations.	24
1.8	Formulations des bilans enthalpiques pour chaque phase.	25
1.9	Gamme de validité de la corrélation de Rowe et Claxton [197].	30
1.10	Relations issues de compilations de données pour les transferts thermiques en lits denses.	31
2.1	Comparison of mean Nusselt number from plug flow and plug flow with axial dispersion.	73
2.2	Weighting functions used for box fluid volume averaging.	76
2.A.1	Relative error in % between our computed $\mathcal{N}u_{p,i}$ with $N_p = 32$ for Sphere 1, Sphere 2 and Sphere 3, and values reported by [184], as a function of $(C_{1,2}, C_{2,3}, \mathcal{R}e)$ for the case of forced convection over a row of 3 spheres in an unbounded domain at $\mathcal{P}r = 0.72$	99
2.B.1	Longueurs des zones de recirculations. Configurations de Ramachandran [184].	114
2.B.2	Angles de séparation dans les configurations de Ramachandran [184].	115
2.B.3	Angles d'interaction θ_r dans les configurations de Ramachandran [184].	116
2.B.4	Centres des vortex. Configurations de Ramachandran [184].	117
2.C.1	Comparaison du rapport $\mathcal{N}u_p/\mathcal{N}u_{p,iso}$ pour une particule thermiquement active dans un lit de particules avec les valeurs fournies par les corrélations, $\mathcal{P}r = 0.72$	123
2.C.2	Vitesse axiale locale dans le cas d'interactions avec des parois.	126

3.1	Parameters used in Feng and Musong [73].	135
3.2	Comparison of the bed height.	135
3.3	Evolution of bed properties with grid refinement.	136
3.4	Parameters of the simulations.	140
3.5	Fluidized bed physical properties.	140
3.6	Effect of particle number on macroscopic fluid quantities of a fluidized bed.	140
3.7	Effect of the number of particles on the fluid properties.	141
3.8	Effect of particle number on macroscopic particle parameters of a fluidized bed.	142
3.9	Effect of the number of particles on the mean Nusselt number.	144
3.10	Effect of the inlet velocity on the macroscopic properties of a liquid-solid fluidized bed.	145
3.11	Effect of inlet velocity on mean Nusselt number in a liquid-solid fluidized bed.	156
3.12	Comparison of Nusselt number between fixed and fluidized beds.	157
3.13	Standard deviation of the Nusselt number distributions ($L_{box} = 2.5$).	160
3.14	Effect of inlet velocity on Nusselt number integral times.	161
3.B.1	Estimation du critère d'interaction mur-particules : distance critique d'effet pariétal.	179
3.B.2	Estimation des coefficients d'autodiffusion granulaire : impact des parois.	185
3.B.3	Fréquence d'interactions moyenne pour les trois zones du lit.	189
3.B.4	Rapport des temps intégraux Lagrangiens hydrodynamiques entre le centre du lit et en proche paroi.	192
4.1	Paramètres physiques utilisés pour valider la partie fluide du code DEM-CFD.	204
4.2	Paramètres physiques dans le cas du refroidissement d'une sphère par convection.	205
4.3	Paramètres physiques dans le cas du transfert thermique pour une particule isolée.	207

4.4	Pourcentage d'erreur entre la chaleur échangée dans le fluide et le flux de chaleur de la particule du système. Calculs effectués avec trois méthodes d'interpolation : Bounding Cube (BC), Gaussian Kernel avec une taille de filtre de 1 diamètre (GK-W1) et Gaussian Kernel avec une taille de filtre de 3 diamètres (GK-W3).	207
4.5	Comparaison de l'erreur du nombre de Nusselt et de la température interpolée au centre d'une particule isolée aux valeurs théoriques basées sur les paramètres de simulations : $Re_p = 5$	208
4.6	Comparaison de l'erreur du nombre de Nusselt et de la température interpolée au centre d'une particule isolée aux valeurs théoriques basées sur les paramètres de simulations : $Re_p = 50$	208
4.7	Paramètres physiques dans le cas du transfert thermique pour un lit fixe de particules.	209
4.8	Paramètres physiques pour les lits fixes dans la configuration de Deen <i>et al.</i> [49].	211
4.9	Comparaison du nombre de Nusselt moyen dans un lit fixe de particules avec les données issues de la PRS.	212

Introduction

Des applications mettant en jeu des particules solides en interactions entre elles et avec le fluide environnant se retrouvent souvent dans l'industrie ou dans l'environnement. C'est notamment le cas dans l'industrie pharmaceutique lors de la granulation [26], dans le domaine de l'énergie, pour la gazéification de la biomasse [133], le nucléaire [129], la combustion [206] ou le traitement des boues [88, 140]. On les retrouve aussi en hygiène et sécurité [34, 241] ou encore dans l'industrie agroalimentaire. Enfin, cette configuration se retrouve aussi en météorologie avec les tempêtes de poussière [128], en sciences de l'environnement pour la compréhension de la formation des dunes [128], l'érosion côtière [207, 212], les avalanches ou les éruptions volcaniques. Dans un grand nombre de ces applications, instabilités, turbulence et interactions fluide-solides sont couplées de manières complexes et la compréhension physique de ces écoulements n'est pas encore totalement établie (lois de traînée, influence des parois, transferts internes). Au niveau industriel, des opérations telles que le séchage (céréales, ...), la synthèse de produits chimiques de base (acrylonitrile, polyéthylène), le craquage catalytique, le raffinage et l'énergie (procédé Winkler, gazéification de la biomasse) sont conduites en lits fluidisés. La compréhension générale de la physique des lits fluidisés a fait l'objet de nombreux travaux [135], notamment sur les régimes de fluidisation [79], les transferts de matière et de chaleur [92], aboutissant à des modèles ou corrélations. Ainsi, initialement cantonnés à un faible champ d'applications, le dimensionnement et le développement d'unités utilisant cette technologie a pu s'étendre à d'autres domaines.

Les aspects généraux des mécanismes en jeu dans les écoulements diphasiques sont entre autres présentés par Fan et Zhu [69] ou Kunii et Levenspiel [135]. En particulier, les propriétés de la fluidisation et donc des écoulements et transferts fluide-particules sont très dépendants des propriétés relatives des deux phases : taille et distribution des particules, taux de présence, rapports des masses volumiques ou des capacités calorifiques. De même, Kunii et Levenspiel [135] rendent compte des effets de la géométrie du lit, du type de distributeur et des paramètres opérationnels sur la fluidisation. Une caractérisation des régimes d'écoulement suivant les types de poudres a été le premier critère retenu [79]. De même, les grandeurs macroscopiques des lits fluidisés telles que la perte de charge [63], la relation vitesse d'injection/porosité [191] ou la vitesse minimale de fluidisation [135] ont permis d'établir des lois pour le pilotage ou le dimensionnement des unités. La description (1-D) des écoulements a vu l'émergence de modèles pour l'hydrodynamique et les transferts de chaleur ou de matière [135]. De ces modèles, des lois régissant les transferts thermiques moyens ont pu être établies [135, 165]. Ces modèles seront ensuite corrigés pour les faibles nombres de Reynolds [81].

Désormais, les lois générales et corrélations ne suffisent plus à la compréhension et l'optimisation de ces procédés [258]. Des données plus précises, notamment sur les interactions hydrodynamiques, la distribution du solide, la dynamique des écoulements, l'impact des distributeurs, le mélange, sont nécessaires pour la compréhension des changements lors du scale-up des unités. Ainsi, les dernières décennies ont vu se développer un intérêt pour la simulation numérique (CFD) des écoulements et des transferts dans ces unités. La résolution des équations

tions de conservation de masse, de quantité de mouvement et de chaleur, permet à la CFD de donner de plus amples informations sur les paramètres clés de ces systèmes. L'intérêt pour cette technique a été accru par le développement des puissances de calcul des ordinateurs, d'abord via la miniaturisation des puces puis par la parallélisation. La simulation numérique des lits fluidisés se découpe en deux types de modèles : Euler-Euler et Euler-Lagrange. Le premier est initialement développé par Anderson et Jackson [8] et considère chaque phase comme un milieu continu régi par les équations de Navier-Stokes moyennées. Les interactions hydrodynamiques sont prises en compte via des lois de fermeture issues de l'expérience ou de simulations numériques directes. Le second type de modèle résout les équations de Newton sur chaque particule de la phase dispersée et suit leurs trajectoires de manière Lagrangienne. La phase fluide peut quant à elle être résolue de manière moyennée (DEM-CFD) ou localement autour des particules (PRS). Ce dernier type de simulation requiert des ressources de calcul importantes et ne permet de traiter que des petits systèmes. La plupart des études se concentrent désormais sur les informations fournies par ces deux derniers types de simulations afin de nourrir les modèles aux échelles supérieures (PRS \rightarrow DEM-CFD, et DEM-CFD \rightarrow Euler-Euler).

La description qui précède met en évidence le caractère commun de l'étude des écoulements multiphasiques à phase dispersée à la fois des laboratoires académiques pour la description et la modélisation, et des industriels pour le pilotage et l'amélioration des performances des unités. Ce dénominateur commun est la raison de ce travail de thèse dans le département de mécanique des fluides de IFP Énergies Nouvelles (IFPEN), en collaboration avec le groupe de recherche Particules, Sprays et Combustion de l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT). Ce travail poursuit celui initié par Wachs *et al.* [42, 245, 248, 268] sur la simulation et la modélisation des écoulements fluide-particules. En particulier, le présent travail vient compléter la stratégie multi-échelles de comparaison DEM-CFD / PRS d'abord introduite par Bernard [18] et poursuivie par Esteghamatian [67]. Les travaux s'articulent autour de quatre chapitres dont une description est proposée ci-après.

Un premier chapitre présente les aspects généraux des applications industrielles d'intérêt : les lits fluidisés. Ces unités sont largement utilisées au niveau industriel et sont, avec les lits fixes, les principales technologies de mise en contact fluide-particules [135]. Ces interactions entre une phase fluide et une phase solide se retrouvent fréquemment dans la nature et de multiples secteurs industriels. En particulier, ce chapitre s'attache à décrire, à partir des travaux de la littérature, les caractéristiques de la fluidisation et les différents régimes d'écoulement en fonction du type de poudre et de la vitesse d'injection de la phase continue [78, 80, 135, 265]. Une seconde partie est consacrée à la description des transferts thermiques dans les systèmes fluide-particules pour les configurations fixes et fluidisées. La description des transferts pour une sphère isolée plongée dans un fluide en mouvement est connue de manière précise [36, 72, 203], mais ces transferts thermiques se limitent principalement à une description globale du milieu fluide-particules pour les systèmes denses [92, 135]. Seules des études numériques récentes s'attachent à caractériser localement les transferts thermiques [45, 162]. Enfin, dans le cadre de la simulation numérique directe des écoulements fluide-particules, une brève revue des méthodes développées ces dernières années est faite, ainsi qu'une description des méthodes employées dans la suite de ce document.

Dans un second chapitre, la validité et les limites du modèle utilisé sont estimées sur des configurations de complexité croissante : sphère isolée, chaîne de particules et systèmes de particules fixes. La précision de l'outil de simulation se focalise sur les transferts thermiques et met en évidence les mêmes tendances que les premiers éléments publiés sur les aspects hydrodynamiques [245]. Une comparaison avec les données de la littérature pour une sphère isolée permet de conforter la validité et la robustesse des simulations [72, 117, 260]. En cas d'interactions thermiques entre les particules (chaîne de particules et lits fixes), le caractère aléatoire du lit et l'anisotropie de l'écoulement imposent d'estimer la précision numérique au niveau des particules plutôt qu'à partir du transfert thermique total du système. À l'aide de ces conclusions, une série de simulations numériques dans des configurations fixes issues de la littérature est réalisée. Les nombres de Nusselt particuliers sont estimés à partir de la température locale autour des particules. En particulier, l'impact du noyau de pondération sur la forme des distributions du nombre de Nusselt est étudié dans le cas d'une sphère isolée et des réseaux aléatoires de particules. Enfin, une partie s'attarde sur l'effet de l'interaction de sillage entre des sphères proches dans les lits aléatoires et de l'interaction fluide-particules en proche paroi. Un complément à ces études s'inspire des travaux de Buist [24] pour les transferts thermiques d'une particule thermiquement active dans une chaîne de particules. Ainsi, une étude comparative des propriétés de l'écoulement et du champ de température à celles issues d'une particule isolée est réalisée.

Le troisième chapitre s'intéresse à des configurations fluidisées. Il est choisi de se concentrer sur une fluidisation bi-périodique liquide-solide du fait de son caractère homogène (pas de régime de pistonage). Une première partie s'attache à définir un élément « représentatif » du lit fluidisé dont les statistiques sont indépendantes de la taille et du nombre de particules. À la suite de la sélection du système d'étude, une série de simulations pour différentes vitesses de fluidisation est réalisée. Contrairement au chapitre précédent, l'accent est ici mis sur la dynamique du nombre de Nusselt dans les lits fluidisés. Les effets respectifs des composantes du nombre de Nusselt : flux de chaleur et température locale sont étudiés de manière à comprendre la dynamique du nombre de Nusselt. Les temps caractéristiques de ces paramètres thermiques sont comparés à ceux issus de l'hydrodynamique. Dans un second temps, une série de lits fixes est extraite des configurations fluidisées. Une comparaison directe entre les systèmes fixes et les lits fluidisés est alors menée. Cette comparaison porte à la fois sur les aspects hydrodynamiques et thermiques. Afin de compléter ces études, des particules sont retirées des systèmes fixes afin d'estimer l'auto-perturbation des propriétés locales du fluide. De plus, l'impact de la suppression des particules sur les propriétés des particules environnantes est analysé. Enfin, une configuration fluidisée est reproduite avec parois afin d'en estimer l'impact sur l'hydrodynamique, la thermique et les statistiques particulières.

Le quatrième chapitre se consacre à la présentation et la validation du modèle DEM-CFD thermique. Une seconde partie est dédiée à la comparaison directe des échelles DEM-CFD et PRS et s'attache en particulier à mettre en évidence les différences entre ces échelles. Les configurations fixes et fluidisées sont ensuite reproduites à l'échelle DEM-CFD et comparées aux résultats issus de la PRS. Cette démarche prend la suite des travaux d'Esteghamatian *et al.* [64] pour la partie hydrodynamique. Le caractère moyenné des équations DEM-CFD impacte les distributions des paramètres physiques à cette échelle. Les différences mises à jour

lors de ces comparaisons sur la partie thermique sont alors comblées par ajout d'un terme fluctuant dans les lois de fermeture. Une formulation simple pour les configurations fixes est ensuite améliorée pour tenir compte de la dynamique observée dans les lits fluidisés [162].

Contexte physique

Sommaire

1	La fluidisation	5
1.1	Le phénomène de fluidisation	5
1.2	Classification des poudres	8
1.3	Caractéristiques des régimes de fluidisation	13
2	Transferts thermiques dans les lits fluidisés	20
2.1	Preliminaires	21
2.2	Particule isolée	23
2.3	Dans un écoulement gaz-particules	24
3	Modélisation multi-échelles des lits fluidisés	40
3.1	l'échelle microscopique	40
3.2	l'échelle mésoscopique	41
3.3	l'échelle macroscopique	41
4	Simulation des écoulements fluide-particule à l'échelle microscopique	42
4.1	Méthodes à maillage adaptatif	42
4.2	Méthodes à maillage fixe	43
5	Plateforme PeliGRIF	47
5.1	Modèle à l'échelle microscopique	47
5.2	Modèle à l'échelle mesoscopique	50
5.3	Solveur granulaire	50

1 La fluidisation

1.1 Le phénomène de fluidisation

La fluidisation des solides traduit le processus par lequel des propriétés d'un fluide en ébullition sont conférées à un lit dense de particules sous l'action d'un flux (liquide ou gazeux) à travers celui-ci. Ceci n'est possible que si le solide est assez finement divisé (diamètre compris entre $10\mu m$ et $1mm$). Le phénomène de fluidisation est le résultat de la compétition entre la force de traînée, exercée par le fluide sur chaque particule, et la force de gravité. Lorsque la fluidisation apparaît l'ensemble du lit se comporte de façon similaire à un fluide. Cependant,

la dynamique de l'écoulement ainsi généré est très complexe et présente des instabilités. Le phénomène de fluidisation est fortement dépendant de la géométrie du système, de la nature de la phase dispersée (taille, masse volumique, forme, propriétés chimiques) et de celle du fluide (masse volumique, viscosité, température, composition, etc) [135]. L'hydrodynamique de tels écoulements joue sur les échanges de chaleur et de matière dans ces lits et donc sur les performances des installations utilisant ce phénomène. C'est pourquoi il est important de comprendre et de caractériser ces écoulements.

Ici est considéré un lit de particules au repos sur un distributeur de gaz (plaque perforée ou matériau poreux) par lequel est introduit un fluide dont la direction est opposée à la force d'Archimède. Dans la plupart des « lits fluidisés », la masse volumique de la phase dispersée est supérieure à celle de la phase continue ($\rho_d^* > \rho_c^*$) et le courant fluide est alors opposé à la force de gravité. Dans le cas contraire, le système est alors appelé « lit fluidisé inverse ». Cette dernière configuration est souvent utilisée pour le traitement des eaux usées, les biotechnologies, pour les bioréacteurs ou la croissance de biofilm [23, 96, 238]. Sous l'effet du courant fluide, les particules sont mises en suspension. Il est alors possible d'observer les différents régimes de fluidisation par le suivi de la perte de charge entre l'entrée et la sortie du lit en fonction de la vitesse de fluidisation de la phase continue (rapport du débit d'injection sur la section du lit) $U_{c,in}^*$. Ici sont répertoriés les régimes de fluidisation gaz–solide (voir FIG. 1.1).

- Pour des vitesses superficielles relativement faibles, la perte de charge liée aux frottements du fluide sur les particules ainsi que sur lui-même est approximativement proportionnelle à la vitesse $U_{c,in}^*$. La couche de particules se comporte comme un milieu poreux, les particules restent fixes, cette configuration est appelée « lit fixe ».
- Lorsque $U_{c,in}^*$ augmente, le lit commence à s'expandre, la hauteur du lit augmente. La perte de charge passe alors par un maximum avant de décroître et de se stabiliser autour d'une valeur proche au rapport du poids des particules sur la section du lit. Lorsque ce palier est atteint, la force de traînée compense le poids du lit. : c'est la vitesse minimale de fluidisation $U_{c,mf}^*$. Une fois cette vitesse passée, la suspension se comporte globalement comme un fluide, le lit de particules est dit « fluidisé ».
- En augmentant $U_{c,in}^*$, le lit fluidisé continue son expansion de manière homogène, sans qu'aucune bulle n'apparaisse dans le lit. Cependant, si le solide est mal distribué dans la colonne, la fluidisation peut disparaître du fait de la création de passages préférentiels dans le lit, appelés renardages. Ce régime est appelé fluidisation particulière.
- Si $U_{c,in}^*$ continue d'augmenter jusqu'à atteindre une valeur nommée $U_{c,mb}^*$, des bulles commencent à se former au niveau de la grille d'injection de l'air. Ces dernières remontent en grossissant et éclatent à la surface du lit. $U_{c,mb}^*$ est appelée vitesse minimale de bullage et le régime est appelé «fluidisation bouillonnante» ou fluidisation par bullage.
- A mesure que $U_{c,in}^*$ augmente, le nombre de bulles augmente, elles coalescent et éclatent à la surface du lit. Lorsque la dimension des bulles devient de l'ordre de celle de la colonne, la surface du lit se soulève et retombe de manière régulière. C'est le régime de pistonage. Ce régime est souvent à éviter car diminuant la surface d'échange gaz–particules et pouvant être dangereux pour les installations.

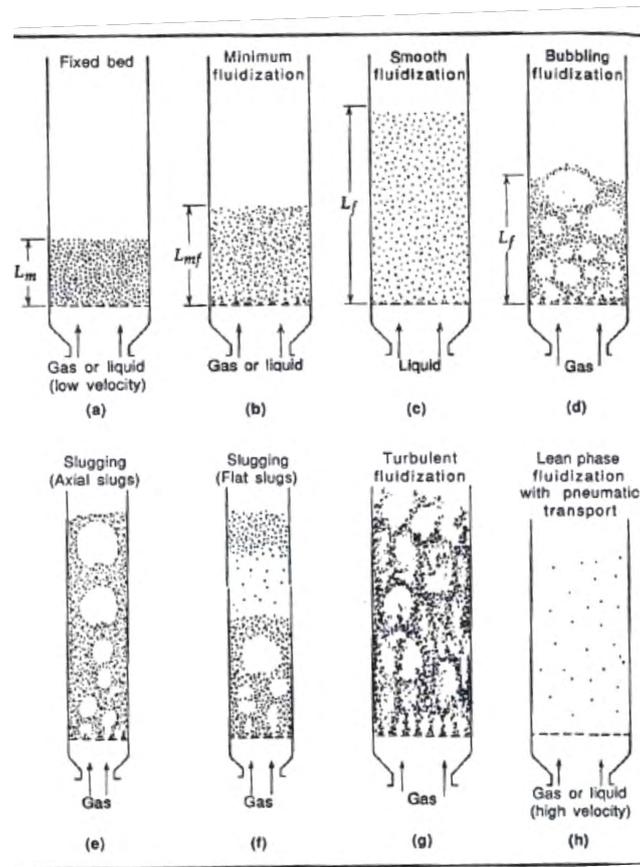


FIGURE 1.1 – Régimes de fluidisation [135].

- Quand $U_{c,in}^*$ augmente encore et que la vitesse terminale de chute des particules $V_{d,t}^*$ est atteinte ou dépassée, la surface du lit disparaît et les bulles laissent place à un régime turbulent de paquets solides et gaz de formes et tailles différentes. L'entraînement de particules devient important et la surface du lit devient mal définie. Le régime de fluidisation turbulente est atteint
- En augmentant encore la vitesse $U_{c,in}^*$, les particules sont entraînées hors de la colonne ($U_{c,in}^* > U_{c,tr}^*$) et un phénomène de « choking » apparaît. Des paquets de solides redescendent au niveau des parois, un système de recirculation est nécessaire. La perte de charge sur le lit diminue fortement. C'est le régime de fluidisation rapide.
- Au-delà de la vitesse caractérisant le phénomène de « choking », la concentration des particules est très faible et les particules sont toutes entraînées sans retour au niveau des parois. C'est le transport pneumatique.

Cependant, tous les régimes présentés ci-dessus ne sont pas toujours observables en réalité. Le lit fluidisé peut être défini comme constitué d'une phase dense (le lit), et d'une phase diluée au-dessus du lit, constituée de particules entraînées ou en équilibre dynamique. La phase dense peut elle-même être définie par deux phases : l'émulsion où les particules sont agitées par le

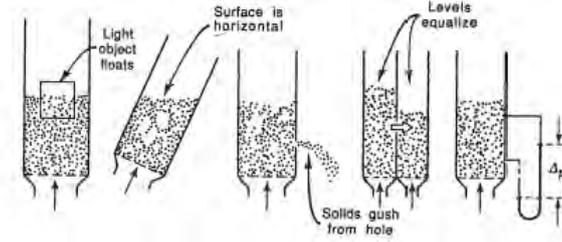


FIGURE 1.2 – Similarité comportementale entre fluide et lit fluidisé [135].

gaz et les bulles, traversant le lit. Cette même phase dense du lit fluidisé possède des propriétés similaires à un liquide en ébullition comme montré en FIG. 1.2. Tout comme dans une colonne à bulles, le mouvement des poches de gaz induit un brassage et un mouvement ascendant aux particules qui recirculent jusqu'au distributeur dans l'émulsion.

1.2 Classification des poudres

1.2.1 Classification de Baeyens et Geldart, 1973

Le comportement hydrodynamique de l'écoulement gaz-particules, et en particulier, les régimes observables lors de la fluidisation dépendent de plusieurs facteurs, dont la nature des poudres utilisées. Si plusieurs caractérisations sont proposées [135], une des plus pertinentes est celle de Geldart [79] (voir FIG. 1.3). En observant le comportement en fluidisation de solides de toutes sortes de formes, Geldart définit quatre groupes de poudres caractérisées par le diamètre moyen des particules d_p en μm , et la différence de masse volumique entre la phase dispersée la phase continue $(\rho_d^* - \rho_c^*)$ en $kg.m^{-3}$.

Groupe C : $d_p^* < 25\mu m$

Cette classe regroupe les poudres dont le diamètre est inférieur à $25\mu m$ et dont la masse volumique est très faible ($\ll 1400kg/m^3$). La farine, le talc ou le ciment font partie de ce groupe de poudres dites cohésives. Les fortes interactions électrostatiques entre les particules ne peuvent être rompues par le passage du fluide. La fluidisation de ces poudres est très difficile et est souvent le siège de phénomènes de pistonnage ou de renardage dans le lit. C'est pourquoi la fluidisation de telles poudres doit être accompagnée d'un système d'agitation ou de vibration du lit pour éviter la création de passages préférentiels.

Groupe A : $25\mu m < d_p^* < 225/(\rho_d^* - \rho_c^*)\mu m$

Ici sont classées les particules fines ($25\mu m < d_p^* < 100\mu m$ et $\rho_d^* < 1400kg/m^3$) comme les catalyseurs utilisés pour le craquage des essences. Ces poudres sont très faciles à fluidiser et la plage de fluidisation particulière est large entre $U_{c,mf}^*$ et $U_{c,mb}^*$. Une forte expansion du lit précède le bullage et peut être le siège de renardages. La désaération (arrêt du débit gazeux) de ces poudres est lente.

Groupe B : $225/(\rho_d^* - \rho_c^*)\mu m < d_p^* < 1000/(\rho_d^* - \rho_c^*)^{0.5}\mu m$

Les particules de cette catégorie ont des diamètres compris entre $150\mu m$ et $500\mu m$ pour des masses volumiques entre $1400kg.m^{-3}$ et $4000kg.m^{-3}$. La fluidisation de ces particules est aussi aisée et les vitesses $U_{c,mf}^*$ et $U_{c,mb}^*$ sont très proches ou confondues. Le sable fait partie de ce groupe de particules. La désaération de ces poudres est rapide.

Groupe D : $d_p^* > 1000/(\rho_d^* - \rho_c^*)^{0.5}\mu m$

Les grosses particules $d_p^* > 500\mu m$ ou particules très denses $\rho_d^* < 4000kg.m^{-3}$ sont classées ici, comme les graviers, les grains de café, les céréales ou le plomb de chasse. La fluidisation est difficile, et le mélange est mauvais dans ces lits. Des jaillissements sont observés pendant la fluidisation et $U_{c,mf}^*$ est élevée. Ces poudres sont en général fluidisées dans des colonnes larges pour éviter le pistonage.

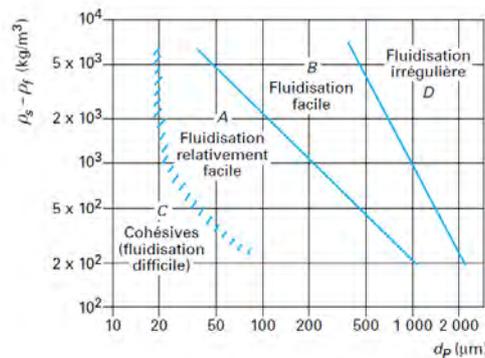


FIGURE 1.3 – Classification de Geldart [79].

À partir de cette classification, il est possible d'associer les différents régimes décrits plus haut aux types de poudres utilisées. Ainsi, comme montré en FIG. 1.4, les régimes suivants : lit fixe, fluidisation turbulente, fluidisation rapide et d'entraînement, sont communs à toutes les classes de poudres. Cependant, les régimes sont très différents dans la gamme de vitesse comprise entre $U_{c,mf}^*$ et $V_{d,t}^*$ (i.e. dans l'état fluidisé). Ainsi, les poudres du groupe C ne se fluidisent pas bien et sont le siège de renardages. En revanche, tous les autres groupes connaissent la fluidisation bouillonnante, mais seules les poudres de classe A connaissent le régime de fluidisation particulière (expansion du lit sans apparition de bulles) entre le minimum de fluidisation et l'apparition des bulles. Pour les poudres des groupes B et D les vitesses minimales de fluidisation et de bullage sont confondues.

Une cartographie des régimes de fonctionnement est proposée par Reh [188] dont l'abscisse correspond au diamètre des particules et l'ordonnée à la vitesse de fluidisation (voir FIG. 1.5). Cette cartographie fait apparaître les classes de particules introduites par Geldart [79]. Le régime de fluidisation bouillonnante y est représenté par la zone formée entre les courbes de vitesse minimale de fluidisation et terminale de chute libre. Il est à noter que les lits circulants et les lits transportés sont difficilement observables pour les grosses particules. Enfin, un régime de fluidisation à jet pour les grosses particules est souvent utilisé.

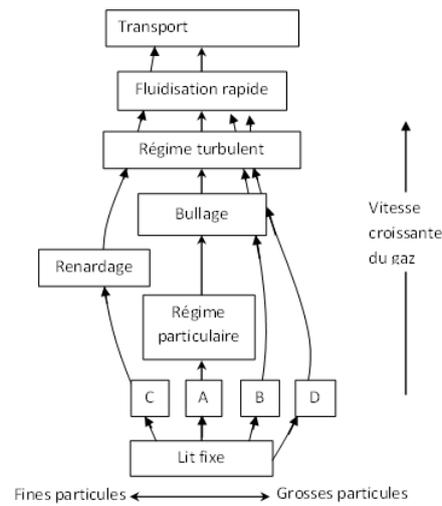


FIGURE 1.4 – Régimes observés pour les différents types de poudres.

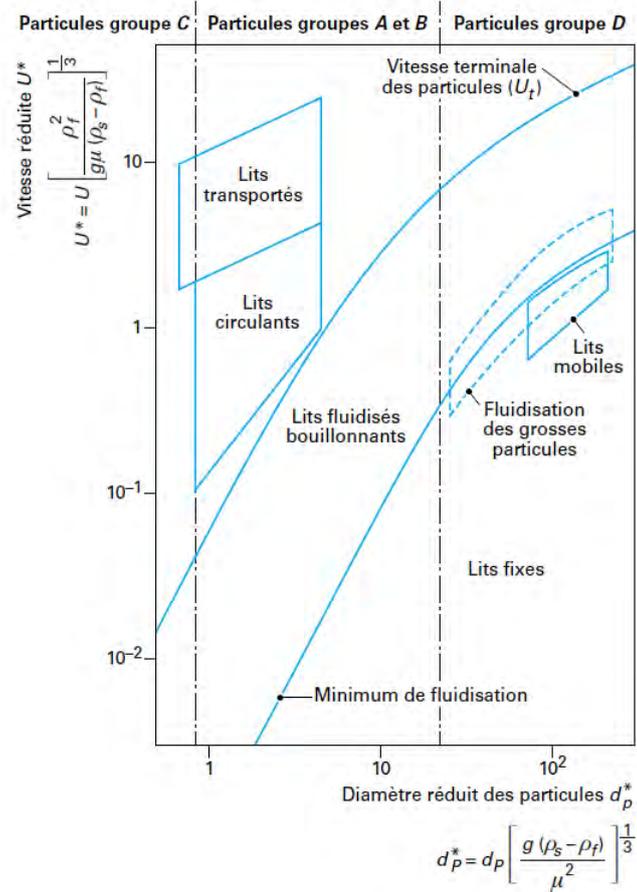


FIGURE 1.5 – Classification de Reh [188].

Il faut mentionner que pour réaliser cette classification, l'ensemble des données collectées par Geldart [79] concernent des fluidisations réalisées à température et pression ambiante, et uniquement fluidisées avec de l'air. Opérer de la fluidisation à haute température et haute pression peut changer le comportement des poudres [135]. Il est observé que l'augmentation de la pression opératoire tend à diminuer $U_{c,mf}^*$ pour les grosses particules et à augmenter le rapport $U_{c,mb}^*/U_{c,mf}^*$ pouvant engendrer un régime de fluidisation particulaire pour des poudres du groupe B [135]. L'augmentation de la température quant à elle, fait apparaître un phénomène de frittage pouvant changer considérablement le régime de fluidisation.

Une classification proposée par Yang [265], qui représente le rapport des masses volumiques $(\rho_d^* - \rho_c^*)/\rho_c^*$ en fonction du nombre d'Archimède Ar permet de délimiter la frontière entre les poudres du groupe A et celles du groupe B et d'expliquer les observations de fluidisation particulaire des groupes B et D à haute pression (voir FIG. 1.6). De manière générale, opérer la fluidisation à haute pression tend à obtenir un comportement des poudres similaire à celui du groupe A [265].

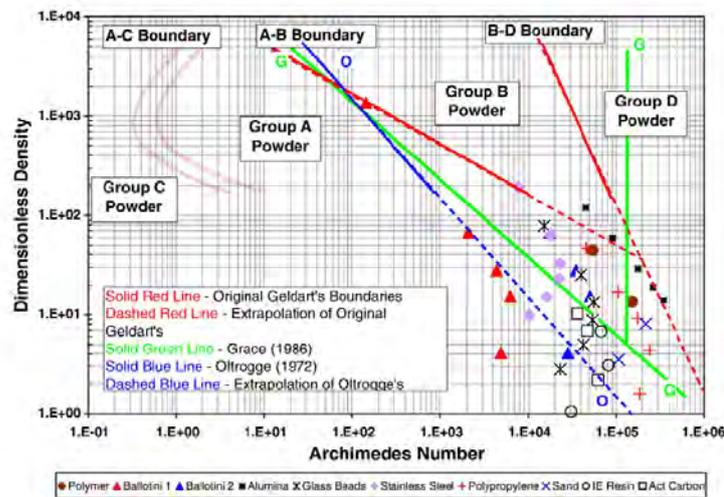


FIGURE 1.6 – Classification de Geldart revue par Yang [265].

1.2.2 Autres types de classification des poudres

Saxena et Ganzha [201] proposent une autre classification des poudres pour les lits fluidisés se basant sur l'écoulement autour d'une particule isolée et l'écoulement dans un lit. L'avantage de cette classification est de caractériser les comportements hydrodynamiques et thermiques des poudres. Cette classification prend comme critère de discrimination le nombre d'Archimède $Ar = g^* d_p^3 \rho_c^* (\rho_d^* - \rho_c^*) / \mu_c^{*2}$. Ce choix est motivé par les données expérimentales, qui suggèrent que le nombre de Reynolds au minimum de fluidisation ainsi que le nombre de Nusselt sont directement dépendants du nombre d'Archimède. Ce dernier nombre est caractéristique de l'interaction fluide-solide et est retenu dans leur étude pour définir les limites entre les différents types d'écoulements autour de sphères lisses et ainsi différencier les types

de poudres [201]. La relation choisie pour relier le nombre de Reynolds au minimum de fluidisation $\mathcal{R}e_{c,mf} = \rho_c^* U_{c,mf}^* d_p^* / \mu_c^*$ au nombre d'Archimède est celle de Goroshko *et al.* [86] :

$$\mathcal{R}e_{c,mf} = \frac{Ar}{1400 + 5.22\sqrt{Ar}} \quad (1.1)$$

Groupe I : $3.35 < Ar < 21700$

L'écoulement autour de ces poudres est laminaire comme le montre le schéma A de FIG. 1.7. La valeur supérieure de Ar correspond à $\mathcal{R}e_{in} = \rho_c^* U_{c,in}^* d_p^* / \mu_c^* = 10$, valeur admise comme limite pour le régime laminaire dans les lits fixes [201]. $\mathcal{R}e_{in}$ définit ici le nombre de Reynolds surfacique, basé sur la vitesse d'injection en fût vide.

Groupe II A : $21700 < Ar < 130000$

Pour ce groupe, la couche limite laminaire devient progressivement turbulente à l'image du schéma B de FIG. 1.7. Un sillage se forme derrière les particules, qui augmente avec la taille des particules. La chute de pression dans le sillage tend à rapprocher les particules les unes des autres. La surface de contact active pour le transfert thermique de la particule augmente avec $\mathcal{R}e_{in}$. La limite supérieure de la gamme pour ce groupe traduit $\mathcal{R}e_{in} = 40$.

Groupe II B : $130000 < Ar < 1.6 \cdot 10^6$

À ce stade, la couche limite autour de la particule devient pleinement turbulente (schéma C de FIG. 1.7). Toute la surface de la particule devient active pour le transfert thermique. Ce dernier est alors principalement contrôlé par la turbulence dans la couche limite thermique et le sillage. La valeur limite de ce groupe revient à $\mathcal{R}e_{in} = 200$.

Groupe III : $Ar > 1.6 \cdot 10^6$

L'écoulement du gaz dans le lit est pleinement turbulent (schéma D de FIG. 1.7). Les forces interparticulaires sont alors négligeables devant le cisaillement du fluide.

Bien que cette classification tente de regrouper les poudres par une approche physique (caractérisation de l'écoulement dans le lit et des transferts thermiques sur un solide immergé dans le lit) plutôt que par une analyse visuelle, elle ne fût que peu reprise par la suite. Le postulat sur l'importance relative des écoulements laminaires ou turbulents autour des particules pour définir le phénomène de fluidisation (comme dans l'équation d'Ergun) proposé par Saxena [201] est repris par Goossens [85] pour classer les poudres à l'aide du nombre d'Archimède. En se basant sur la prédominance des régimes laminaire et turbulent ainsi que l'équation d'entraînement des particules et la loi d'Ergun [63], il met en évidence quatre critères de différenciation des régimes qui délimitent les frontières observées par Geldart [79].

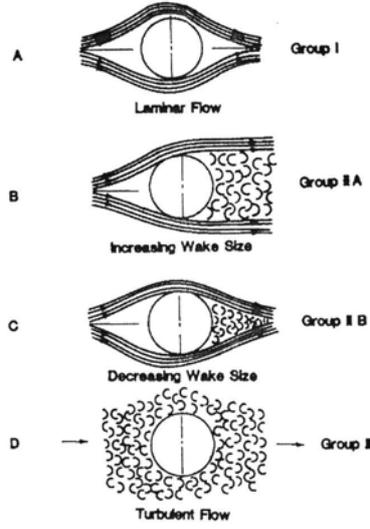


FIGURE 1.7 – Représentation des poudres selon Saxena et Ganzha [201].

1.3 Caractéristiques des régimes de fluidisation

1.3.1 Au minimum de fluidisation

La détermination de la vitesse minimale de fluidisation se fait expérimentalement par le suivi de la perte de charge à travers la couche de particules en fonction de la vitesse superficielle $U_{c,in}^*$. Quand la vitesse minimale de fluidisation $U_{c,mf}^*$ est atteinte, la perte de charge devient constante dans le lit, même si $U_{c,in}^*$ est augmentée. Cette perte de charge doit être égale au rapport du poids des particules par la surface de passage pour fluidiser la poudre.

$$\frac{\Delta P_{mf}^*}{\Delta L_{mf}^*} = (1 - \alpha_{c,mf})(\rho_d^* - \rho_c^*)g^* \quad (1.2)$$

Dans cette expression, $\alpha_{c,mf}$ traduit le taux de vide moyen du lit, L_{mf}^* la hauteur du lit et ΔP_{mf}^* la perte de pression à travers le lit. Toutes ces grandeurs sont définies, ici, au minimum de fluidisation (indice « mf »). La valeur de cette vitesse minimale de fluidisation $U_{c,mf}^*$ peut varier selon que l'on opère à vitesses croissantes ou décroissantes. Plusieurs corrélations sont proposées dans la littérature pour calculer $U_{c,mf}^*$. Lorsque la fluidisation apparaît, la chute de pression à travers la couche fluidisée a été estimée par la relation d'Ergun [63] :

$$\frac{\Delta P_{mf}^*}{\Delta L_{mf}^*} = 150 \frac{(1 - \alpha_{c,mf})^2}{\alpha_{c,mf}^3} \frac{\mu U_{c,mf}^*}{(\phi_s d_p^*)^2} + 1.75 \frac{(1 - \alpha_{c,mf})}{\alpha_{c,mf}^3} \frac{\mu^* U_{c,mf}^{*2}}{\phi_s d_p^*} \quad (1.3)$$

Ici, ϕ_s est le facteur de sphéricité qui traduit le rapport de surface entre une sphère de volume équivalent et celle de la particule considérée (ϕ_s vaut 1 pour des sphères). Le premier terme du membre de droite correspond à la dissipation d'énergie visqueuse, et est prédominant pour des écoulements laminaires ($\mathcal{R}e_{c,mf} = \rho_c^* U_{c,mf}^* d_p^* / \mu_c^* < 10$). Le second terme représente la dissipation d'énergie cinétique et est prépondérant pour les écoulements turbulents ($\mathcal{R}e_{c,mf} > 200$). Substituer l'expression $\Delta P_{mf}^* / \Delta L_{mf}^*$ dans la relation ci-dessus permet de retrouver la formulation proposée par Ergun [63] :

$$Ar = \frac{1.75}{\phi_s \alpha_{c,mf}^3} \mathcal{R}e_{c,mf}^2 + \frac{150(1 - \alpha_{c,mf})}{\phi_s^2 \alpha_{c,mf}^3} \mathcal{R}e_{c,mf} = K_1 \mathcal{R}e_{c,mf}^2 + K_2 \mathcal{R}e_{c,mf} \quad (1.4)$$

La résolution de l'équation 1.4 permet d'isoler directement $U_{c,mf}^*$:

$$\mathcal{R}e_{c,mf} = \sqrt{\left(\frac{K_2}{2K_1}\right)^2 + \frac{1}{K_1} Ar} - \frac{K_2}{2K_1} \quad (1.5)$$

Les constantes K_1 et K_2 sont déterminées expérimentalement. Dans leur étude, Wen et Yu [254] proposent $K_2/2K_1 = 33.7$ et $1/K_1 = 0.0408$. Comme mentionné dans la *Section 1.2.1*, la température ainsi que la pression ont une influence directe sur la vitesse minimale de fluidisation $U_{c,mf}^*$ ainsi que sur le taux de vide moyen du lit $\alpha_{c,mf}$ [135]. C'est pourquoi des travaux se sont intéressés à l'effet de la température sur $U_{c,mf}^*$.

Wu et Baeyens [259] observent que $U_{c,mf}^*$ diminue quand la température du lit augmente. Après fluidisation de chaux, de calcaire et de sable jusqu'à 400°C, ils montrent que les corrélations développées précédemment surestiment $U_{c,mf}^*$ et en proposent une nouvelle basée sur leurs résultats. Botterill [19] observe cette tendance de $U_{c,mf}^*$ pour les particules de classe B alors que les particules de classe D ont un comportement contraire. Cependant, en choisissant une valeur convenable pour $\alpha_{c,mf}$, la corrélation d'Ergun donne de très bons résultats. Formisani *et al.* [77] constatent que la diminution de $U_{c,mf}^*$ lorsque la température du lit augmente, est vraie seulement pour les grosses particules. Selon eux, ce phénomène est lié au changement de la valeur des forces interparticulaires avec la température et la nature de la poudre. Le tableau TAB. 1.1 regroupe un ensemble des relations utilisées pour déterminer la vitesse minimale de fluidisation.

Remarque : Les corrélations présentées précédemment sont valables pour la fluidisation gaz-solide. La vitesse minimale de fluidisation pour les systèmes liquide-solide est souvent estimée à partir de la relation de Riba [189].

$$\mathcal{R}e_{c,mf} = 1.54 \cdot 10^{-2} Ar^{0.66} \left(\frac{\rho_p^* - \rho_l^*}{\rho_l^*} \right)^{0.04} \quad (1.6)$$

TABLE 1.1 – Estimation de $U_{c,mf}^*$ pour des lit mono ou poly-disperse.

Auteurs	Relation
Wen et Yu [254]	$\mathcal{R}e_{c,mf} = \sqrt{33.7^2 + 0.048Ar} - 33.7$
Leva [138]	$U_{c,mf}^* = \frac{7.169 \cdot 10^{-4} d_p^{*1.82} (\rho_d^* - \rho_c^*)^{0.94} g^*}{\rho_c^{*0.006} \mu_c^{*0.88}}$
Goroshko [86]	$\mathcal{R}e_{c,mf} = \frac{Ar}{1400 + 5.2\sqrt{Ar}}$
Wu et Baeyens [259]	$\mathcal{R}e_{c,mf} = 7.33 \cdot 10^{-5} \cdot 10^{\sqrt{8.24 \log Ar - 8.81}}$
Doichev et Akhamedov [59]	$\mathcal{R}e_{c,mf} = 1.08 \cdot 10^{-3} Ar^{0.947}$
Ryu <i>et al.</i> [116]	$U_{c,mf}^* = \frac{2.997 \cdot 10^{-3} d_p^{*1.636} (\rho_d^* - \rho_c^*)^{1.128} g^*}{\rho_c^{*0.0247} \mu_c^{*0.446}}$
ZJC [116]	$U_{c,mf}^* = 0.294 d_p^{*0.584} / \nu_c^{*0.056} (\rho_d^* / \rho_c^* - 1)^{0.528}$
NWC [116]	$\mathcal{R}e_{c,mf} = 0.129 Ar^{0.54}$
Coltters et Rivas [38]	$U_{c,mf}^* = K \left(\frac{d_p^{*2} (\rho_d^* - \rho_c^*)}{\mu_c^*} \left(\frac{\rho_d^*}{\rho_c^*} \right)^{1.23} \right)^{\alpha_c}$

1.3.2 Le régime bouillonnant

Le régime de fluidisation bouillonnante est observé par toutes les classes de particules (voir FIG. 1.4). Les bulles engendrées dans l'écoulements ont été largement étudiées expérimentalement. Ici sera fait un bref rappel des aspects étudiés : Vitesse minimale de bullage et mouvement des bulles dans le lit.

Vitesse minimale de bullage

Au-delà de la vitesse minimale de bullage $U_{c,mb}^*$, la fluidisation hétérogène apparaît. Cette fluidisation se caractérise par l'apparition de bulles dans le lit. Ces bulles se comportent de manière très similaire à celles formées dans les liquides, elles coalescent en montant dans le lit en dessinant le même type de trajectoire. Pour les particules de classe B qui n'observent pas de fluidisation particulière la vitesse minimale de bullage est égale à celle au minimum de fluidisation, $U_{c,mb}^* = U_{c,mf}^*$. Cependant, pour les particules de classe A, $U_{c,mb}^* \neq U_{c,mf}^*$ et dans une série d'études, Abrahamsen et Geldart [1–3] ont proposé des corrélations permettant de calculer $U_{c,mb}^*$. En fluidisant différents types de particules, ils observent que $U_{c,mb}^*$ est dépendante de la fraction massique de particules de diamètre inférieur à $45\mu m$ [1, 3, 4]. D'autres corrélations, telles que celles proposées par Broadhurst et Becker [22] permettent d'estimer la vitesse de bullage (voir tableau TAB. 1.2). Dans ces relations $x_{45\mu m}$ correspond à la fraction de fines particules ($d_p^* < 45\mu m$).

Mouvements dans le lit

Afin de connaître la distribution des bulles dans le lit, Werther et Molerus [255] ont fluidisé du sable, des billes de verre et de la poudre de cuivre dans des lits de diamètres différents. À l'aide de capteurs, ils ont pu déterminer le débit de gaz lié au passage des bulles en fonction du rayon et à différentes hauteurs. Ils mettent ainsi en évidence que les bulles

TABLE 1.2 – Estimation de $U_{c,mb}^*$ pour des lits fluidisés.

Auteurs	Relation
Abrahamsen [1]	$\frac{U_{c,mb}^*}{U_{c,mf}^*} = \frac{2300\rho_c^{*0.126}\mu_c^{*0.523}\exp(0.716x_{45\mu m})}{d_p^{*0.8}g^{*0.954}(\rho_d^*-\rho_c^*)^{0.934}}$
Abrahamsen [4]	$\frac{U_{c,mb}^*}{U_{c,mf}^*} = 4.125 \cdot 10^4 \frac{\mu_c^{*0.9}\rho_c^{*0.1}}{(\rho_d^*-\rho_c^*)g^*d_p^*}$
Broadhurst et Becker [22]	$\mathcal{R}e_{c,mb} = \sqrt{\frac{Ar}{9.8 \cdot 10^4 Ar^{-0.82}(\rho_d^*/\rho_c^*)^{0.22+0.35}}}$

sont initialement localisées en proche paroi au niveau du distributeur, et qu'à mesure qu'elles remontent dans le lit, les bulles se rapprochent du centre. Ils ont de plus, mis en évidence que les bulles situées au centre étaient plus grosses que celles au niveau des parois. Plusieurs comportements, fonction du rapport de la hauteur du lit sur le diamètre de la colonne, sont observés. Le comportement général pour les lits profonds $H^*/D^* > 2$, peut être défini ainsi (voir FIG. 1.8) : au niveau du centre du lit, la circulation de la phase solide se fait selon deux vortex dont les branches descendantes se situent au centre du lit. Le débit gazeux passe lui au niveau des parois. C'est ce qu'on appelle les cônes de Werther [255]. Au-dessus de cette zone, les bulles de gaz commencent à interagir, à coalescer, et se rapprochent du centre du lit. Un mouvement ascendant de la phase solide dans le sillage des bulles est alors observé. Lorsque les bulles arrivent à la surface du lit, elles répartissent le solide qu'elles entraînent sur l'ensemble de la surface en explosant, puis le solide recircule au niveau des parois.

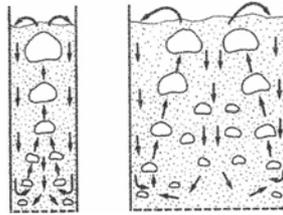


FIGURE 1.8 – Dynamique dans un lit fluidisé

La coalescence des bulles dans le lit fluidisé s'opère principalement au centre du lit [79]. Lors de l'ascension, les bulles forment un sillage avec un angle très grand et sont accompagnées d'un nuage constitué majoritairement de gaz et d'un peu de grains. Ce gaz va en général plus vite que les bulles et passe à travers celles-ci. La recirculation du solide à plusieurs niveaux explique que les lits fluidisés soient réputés pour être de bons mélangeurs, de bons contacteurs, et ayant de bonnes capacités de transferts de masse et de chaleur [135].

Le motif de l'écoulement peut être modifié par la présence de tubes, de chicanes ou par une répartition inégale du gaz au niveau du distributeur. Un phénomène appelé « Gulf streaming » est observé par Merry et Davidson [155]. En injectant un débit gazeux plus important en proche paroi qu'au centre de la colonne, une recirculation à l'échelle de la colonne s'opère alors de l'extérieur vers l'intérieur. Les particules sont entraînées par le sillage des bulles au niveau des parois alors qu'un mouvement descendant est observé au centre de la colonne.

1.3.3 Vitesse maximale de fluidisation

La vitesse maximale de fluidisation caractérise la valeur de débit gaz maximale à partir de laquelle les particules sont entraînées par le courant gazeux. Cette vitesse est approximativement égale à la vitesse terminale de chute libre $V_{d,t}^*$ des particules. Au-delà de cette vitesse, il est admis que les particules peuvent quitter le lit pour les particules de classe B et D de la classification de Geldart. Pour les particules de classe A, les forces de cohésion interparticulaires empêchent le gaz de fluidiser les particules de manière isolées, et le rapport entre vitesse d'entraînement et vitesse terminale de chute d'une particule isolée peut atteindre 10.

En appliquant le principe fondamental de la dynamique à une particule, la vitesse terminale de chute est atteinte lorsque l'accélération de la particule devient nulle. En égalant la poussée d'Archimède, le poids et la force de traînée, il vient :

$$V_{d,t}^* = \sqrt{\frac{4d_p^*(\rho_d^* - \rho_c^*)}{3\rho_c^*C_d}} \quad (1.7)$$

La relation précédente peut être réécrite sous forme adimensionnelle :

$$C_d \mathcal{R}e_t^2 = \frac{4}{3} Ar \quad (1.8)$$

Dans ces équations, C_d est le coefficient de traînée, qui peut être estimé par la corrélation de Haider et Levenspiel [94] (voir équation 1.9) ou toute autre relation en fonction du type de poudre (par exemple Schiller et Naumann [202] pour des sphères, ...). Ici $\mathcal{R}e_t = \rho_c^* V_{d,t}^* d_p^* / \mu_c^*$ est le nombre de Reynolds basé sur la vitesse terminale de chute.

$$C_d = \frac{24}{\mathcal{R}e_t} \left(1 + 8.1716 \exp(-4.0655\phi_s) \mathcal{R}e_t^{0.0964+0.5565\phi_s} + \frac{73.69 \mathcal{R}e_t \exp(-5.0748\phi_s)}{\mathcal{R}e_t + 5.378 \exp(6.2122\phi_s)} \right) \quad (1.9)$$

Le système posé ci-dessus peut-être estimé de manière itérative sur $V_{d,t}^*$ pour des facteurs de sphéricité compris entre $0.5 < \phi < 1$ [94].

Le rapport $V_{d,t}^*/U_{c,mf}^*$ est intéressant puisqu'il permet d'avoir une approximation rapide de la gamme de vitesse de fluidisation pour un type de particules. La valeur de ce rapport dépend de la taille des particules. Ainsi, pour des particules fines $V_{d,t}^*/U_{c,mf}^* = 80$ alors que ce rapport vaut 8 pour des grosses particules [135].

1.3.4 La fluidisation turbulente

Ce type de fluidisation permet un contact élevé entre le gaz et les particules et possède une porosité relativement grande (de l'ordre de 0.7–0.8). Les études expérimentales du régime de fluidisation turbulente indiquent qu'il est délimité par deux vitesses : $U_{c,c}^*$ et $U_{c,k}^*$ [32]. Lorsque $U_{c,c}^*$ est atteinte, les bulles atteignent leur taille maximale et cessent de coalescer pour se séparer en de plus petites bulles et en gaz interstitiel. À mesure que $U_{c,in}^*$ augmente, la formation de grosses bulles et leur éclatement diminuent jusqu'à atteindre le début du

transport caractérisé par $U_{c,tr}^*$. Lorsque $U_{c,k}^*$ est atteinte il n'y a plus de variation de pression et le lit est constitué d'agrégats de particules en mouvement très intense [266]. Cependant, ce changement hydrodynamique est remis en cause par Chebouni [32], pour qui, $U_{c,k}^*$ est équivalente à $U_{c,tr}^*$.

Au niveau expérimental, $U_{c,c}^*$ est déterminée à partir des fluctuations de la perte de pression entre l'entrée et la sortie. $U_{c,c}^*$ correspond à la vitesse à laquelle les fluctuations de pression enregistrées sont les plus importantes. Une autre méthode pour déterminer $U_{c,c}^*$ consiste à repérer la première rupture de pente dans l'évolution de la porosité α_c avec la vitesse. Le tableau TAB. 1.3 regroupe un ensemble de corrélations souvent utilisées pour estimer $U_{c,c}^*$ et $U_{c,k}^*$. La corrélation proposée par Chehbouni [32] est valable pour les poudres des groupes I et IIA de la classification de Genzha (i.e. telles que $0.4 < Ar < 123316$) et pour des diamètres de colonnes $50mm < D^* < 200mm$.

TABLE 1.3 – Corrélations pour les différentes vitesses de fluidisation turbulente.

Auteurs	Relation
	$Re_{c,k} = 1.46Ar^{0.472}$
Tannous [222]	$Re_{c,c} = 3.37Ar^{0.474} \left(\frac{\rho_d^* - \rho_c^*}{\rho_d^*} \right)^{0.222}$
	$Re_{c,k} = 1.081Ar^{0.472}$
Chebouni <i>et al.</i> [32]	$Fr_c = 0.463Ar^{0.145}$

Dans un récent travail, Andreux *et al.* [9] ont identifié que le changement hydrodynamique pour la transition entre le régime de bullage et le régime de fluidisation turbulente apparaît à une vitesse $U_{c,c}^{*'} < U_{c,c}^*$. La valeur de $U_{c,c}^{*'}$ peut être déterminée à la fois par une cassure dans la chute de pression où comme étant la vitesse à laquelle la fréquence dominante de vide local est observée. Cette vitesse semble aussi correspondre à une cassure dans le rapport entre la vitesse des bulles et la vitesse dans la phase émulsion ou dans la fraction de flux gazeux dans les bulles.

1.3.5 La fluidisation rapide et lits transportés

L'entraînement des particules par le courant gazeux prend de l'importance au-delà de $U_{c,k}^*$ et la transition entre les deux régimes s'opère à $U_{c,tr}^*$. La détermination expérimentale de $U_{c,tr}^*$ se fait selon la méthode proposée par Han *et al.* [95] : c'est la vitesse maximale au-delà de laquelle, toute augmentation du débit gazeux entraîne une faible diminution du temps de vidange d'une certaine quantité prédéfinie de solide dans la colonne (voir relations du tableau TAB. 1.4). Tout comme $U_{c,c}^*$, la valeur de la vitesse de transport $U_{c,tr}^*$ dépend principalement de la taille de la colonne et du type de particules fluidisées. La corrélation proposée par Chehbouni [32] est valable pour des diamètres de colonnes $50mm < D^* < 300mm$ et pour toutes les poudres de la classification de Genzha (i.e. $1.18 < Ar < 1.19 \cdot 10^7$).

TABLE 1.4 – Calcul de la vitesse de transport du lit U_{tr}^* selon plusieurs auteurs.

$U_{c,tr}^* = aAr^b(D^*/d_p^*)^c$			
Auteurs	Relation		
	a	b	c
Tannous [222]	1.834	0.448	0
Chehbouni <i>et al.</i> [32]	0.169	0.545	0.3

Au-delà de $U_{c,tr}^*$, il devient difficile de définir les limites des régimes observés. Le régime de fluidisation rapide est très souvent employé pour la réalisation de procédés FCC. Ce régime se caractérise par un écoulement ascendant co-courant d'un mélange gaz–solide, avec la présence d'un lit plus dense dans la partie inférieure et la coexistence d'une région diluée en haut de la colonne [217]. Les particules étant entraînées par le courant gazeux, une boucle de retour est nécessaire pour réintroduire le solide à la base de la colonne.

La fluidisation rapide prend fin à l'apparition du choking de type A (lié aux particules de type A dans la classification de Geldart), où une accumulation de particules en bas de la colonne apparaît. Ceci se caractérise par un changement abrupt dans la porosité. Xu *et al.* [263] ont observé que ce changement était lié à un effondrement de la suspension. Le choix du phénomène de « choking » comme limite entre la fluidisation rapide et le régime DSU (Dense Suspension Upflow) est cependant controversé [252].

Le régime DSU se caractérise principalement par des flux de matières solides plus élevés que pour la fluidisation rapide, des concentrations solides plus élevées et l'absence de flux solide descendant au niveau des parois [87]. Kim *et al.* [126] ont été les premiers à proposer une distinction entre le régime de fluidisation rapide, le régime DSU et le transport pneumatique (TP).

1.3.6 Expansion dans les lits fluidisés

Il existe deux méthodes utilisées expérimentalement pour déterminer la porosité du lit, l'une basée sur la perte de charge et l'autre sur l'expansion du lit. A partir de ces mesures, les travaux ont permis de relier la porosité du lit pour différentes configurations :

- Pour des fluidisations particulières, Richardson et Zaki [191] ont observé l'expansion d'une couche fluidisée par de l'eau.

$$\alpha_c = \left(\frac{\mathcal{R}e_{in}}{\mathcal{R}e_t} \right)^{1/n} \quad (1.10)$$

Une liste de relation pour la valeur du coefficient n en fonction du nombre de Reynolds terminal de chute est fournie par Richardons et Zaki [191]. Ces travaux seront par la suite repris par Rowe [196] ou Khan et Richardson [124] pour l'expression de ce

coefficient (voir équation 1.11).

$$n = 2.35 \frac{2 + 0.175 \mathcal{R}e_t^{3/4}}{1 + 0.175 \mathcal{R}e_t^{3/4}} \quad (1.11)$$

D'autres corrélations plus récentes existent, comme celles proposées par Riba et Couderc [189] et différencient une limite : $\alpha_c = 0.85$.

$$\alpha_c = 1.58 \mathcal{R}e_{in}^{0.33} \left(\frac{g^* d_p^{*3} \rho_c^{*2}}{\mu_c^{*2}} \right)^{-0.21} \left(\frac{\rho_p^* - \rho_c^*}{\rho_c^*} \right)^{-0.22} \quad \text{pour } \alpha_c < 0.85 \quad (1.12)$$

$$\alpha_c = 1.20 \mathcal{R}e_{in}^{0.17} \left(\frac{g^* d_p^{*3} \rho_c^{*2}}{\mu_c^{*2}} \right)^{-0.11} \left(\frac{\rho_p^* - \rho_c^*}{\rho_c^*} \right)^{-0.12} \quad \text{pour } \alpha_c \geq 0.85 \quad (1.13)$$

- Dans le régime de bullage, le taux de vide de la phase émulsion reste approximativement égal à celui au minimum de fluidisation. Cependant, Thonglimp *et al.* [231] quantifient l'expansion du lit induit par la présence des bulles.

$$\alpha_c = 1.57 \mathcal{R}e_{in}^{0.29} Ar^{-0.19} \quad (1.14)$$

2 Transferts thermiques dans les lits fluidisés

En thermodynamique, le transfert thermique traduit la quantité d'énergie transférée par un système entre deux états d'équilibre du fait d'une différence de température avec le système environnant. La première loi de la thermodynamique définit la conservation d'énergie dans le système alors que la deuxième loi de la thermodynamique établit que le transfert thermique se fait des zones chaudes vers les zones froides. Ainsi, lorsque deux corps au repos, de températures uniformes T_1^* et T_2^* , et isolés sont mis en présence, la température d'équilibre T^* atteinte au bout d'un temps plus ou moins long est comprise entre T_1^* et T_2^* . Le corps chaud s'est refroidi et a cédé sa chaleur au corps froid : il y a eu un transfert thermique. Une analyse thermodynamique de cette configuration permet de définir la quantité d'énergie transférée entre les deux états. Cependant, aucune information ne peut être extraite quant à la rapidité, l'intensité ou la sensibilité du transfert à différents paramètres. La description phénoménologique du transfert thermique définit trois mécanismes : la conduction, la convection et le rayonnement [57, 149].

La conduction est le mode d'échange de chaleur entre deux régions d'un milieu matériel du fait de leur différence de température [57, 149]. Au niveau microscopique, les zones de températures élevées sont occupées par des particules de forte énergie cinétique. Le brassage lié au mouvement brownien, va homogénéiser les énergies cinétiques des particules en faisant passer les particules de forte énergie dans les zones de faible énergie. À l'échelle macroscopique, cela se traduit par un transfert de chaleur des zones chaudes vers les zones froides.

La convection est un phénomène faisant intervenir une agitation des particules, mais à une

échelle beaucoup plus grande. Ce phénomène est observé lorsqu'une paroi échange avec un fluide. Les particules fluides transfèrent de la chaleur au niveau de la paroi par conduction, puis sont transportées par le mouvement du fluide [57, 149]. D'autres particules fluides remplacent les précédentes au niveau de la paroi. Le mouvement du fluide peut être imposé (convection forcée) ou généré par des gradients sur une propriété intensive du fluide (convection naturelle).

Le rayonnement est un mode de transmission de l'énergie à distance. Tout corps émet et reçoit des photons quelle que soit sa température. Ces émissions et réceptions de photons entre deux corps se traduisent à l'échelle macroscopique par un transfert de chaleur entre les deux corps.

Chen [33] indique que ces trois types de transferts de chaleur sont présents dans un lit fluidisé. Le transfert conductif se fait entre particules et entre les particules et l'enceinte du lit. Le transfert convectif se fait entre les particules et le gaz, entre la paroi et le gaz et au sein du gaz. Enfin le transfert radiatif intervient entre particules, entre les particules et la paroi, entre les particules et le gaz et entre la paroi et le gaz. Ce dernier type de transfert de chaleur semble pouvoir être négligé pour des températures inférieures à 500°C pour le transfert surface-lit (voir FIG. 1.9) et devient de plus en plus important à mesure que la température opératoire augmente [33]. La contribution des différents modes de transfert et leur prépondérance a été condensée par Fan et Zhu [70]. Dans le cadre des lits fluidisés à températures modérées, il semble que le mode de transfert prédominant soit la convection.

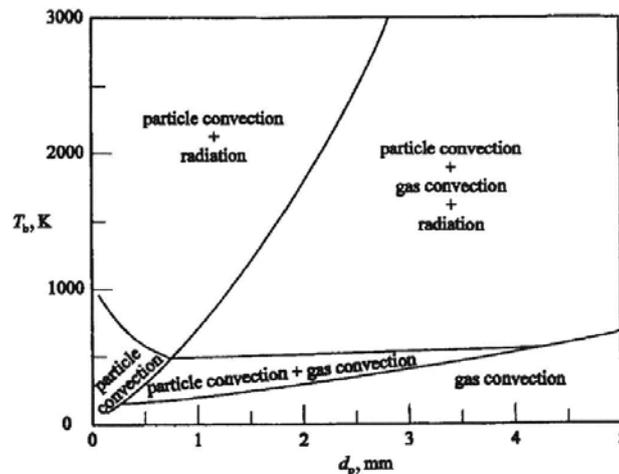


FIGURE 1.9 – Prépondérance des différents modes de transfert thermique Surface-Lit en lits fluidisés [75].

2.1 Préliminaires

Le flux de chaleur échangé par une particule plongée dans un fluide en mouvement est défini comme l'intégrale de la densité de flux thermique sur la surface de la particule [149].

Ceci se traduit, en introduisant la loi de Fourier.

$$Q_{cp}^* = -\bar{q}_{p \rightarrow c}^* \pi d_p^{*2} = \int_S \lambda \nabla T^* \cdot \mathbf{n} dS \quad (1.15)$$

Ici, $\bar{q}_{f \rightarrow p}^*$ représente le flux de chaleur moyen par unité de surface de la particule. Ce même flux de chaleur Q_{cp}^* peut s'écrire en utilisant la loi de Newton avec des grandeurs moyennes sur la surface de la particule :

$$Q_{cp}^* = \int_{S^*} h^* (T_p^* - T_\infty^*) dS^* = \bar{h}^* S^* (T_p^* - T_\infty^*) \quad (1.16)$$

Le nombre de Nusselt est un nombre adimensionnel qui compare les transferts de chaleur convectifs et conductifs. Ainsi, plus les transferts convectifs seront importants, plus le nombre de Nusselt $\mathcal{N}u_p$ sera grand. De même, une valeur asymptotique existe pour le cas de diffusion pure (particule dans un fluide au repos). Ce nombre se définit ainsi :

$$\mathcal{N}u_p = \frac{\bar{h}^* d^*}{\lambda_c^*} \quad (1.17)$$

En combinant les deux expressions précédentes, le nombre de Nusselt de la particule $\mathcal{N}u_p$ peut se réécrire :

$$\mathcal{N}u_p = \frac{Q_{cp}^*}{\pi d_p^* \lambda_c^* (T_\infty^* - T_p^*)} = \frac{-\bar{q}_{p \rightarrow c}^* d_p^*}{\lambda_c^* (T_\infty^* - T_p^*)} \quad (1.18)$$

La résolution du problème de diffusion de chaleur autour d'une particule plongée dans un fluide au repos permet de connaître la valeur asymptotique vers laquelle tend le nombre de Nusselt $\mathcal{N}u_p = 2$. Cependant il n'existe pas de solution analytique lorsque le fluide s'écoule autour de la particule. Les récentes études numériques permettent désormais de remonter au nombre de Nusselt particulaire local $\mathcal{N}u(\mathbf{x}_s)$, avec \mathbf{x}_s un point à la surface de la particule. Les études ayant été faites sur le sujet suggèrent de relier le nombre de Nusselt particulaire global $\mathcal{N}u_p$ à deux autres nombres adimensionnels : le nombre de Reynolds, $\mathcal{R}e = \rho_c^* \|\mathbf{U}_c^* - \mathbf{V}_d^*\| d_p^* / \mu_c^*$ et le nombre de Prandtl $\mathcal{P}r$. Le nombre de Prandtl compare les transferts de quantité de mouvement associés aux forces visqueuses aux transferts de chaleur par conduction. Certains travaux suggèrent de remplacer le nombre de Reynolds par le nombre de Péclet ($\mathcal{P}e = \mathcal{R}e \mathcal{P}r$) qui compare les effets diffusifs du transfert thermique aux effets advectifs.

Le nombre de Nusselt $\mathcal{N}u_p$ est connu de manière assez précise pour une particule isolée. Pour les régimes denses à phase dispersée, les récentes études numériques semblent converger vers des lois régissant le transfert thermique.

2.2 Particule isolée

Le transfert de chaleur à la surface d'une particule plongée dans un fluide à vitesse fixée a été étudié en premier lieu par Ranz et Marshall [187]. La corrélation proposée est la plus souvent utilisée et propose les dépendances de $\mathcal{N}u_p$ en $\mathcal{R}e^{1/2}$ et $\mathcal{P}r^{1/3}$. Ces travaux ont été largement repris dans la littérature et semblent confirmer ces observations.

D'autres corrélations empiriques ont été proposées par Whitaker [256], Clift *et al.* [36], ou beaucoup plus récemment de manière numérique par Feng et Michaelides [72] (voir tableaux TAB. 1.5 et TAB. 1.6).

TABLE 1.5 – Expression du nombre de Nusselt $\mathcal{N}u_p$ selon différents auteurs.

Auteurs	Relation
Ranz–Marshall [187]	$\mathcal{N}u_p = 2 + 0.6\mathcal{R}e^{1/2}\mathcal{P}r^{1/3}$
Clift [36]	$\mathcal{N}u_p = (1 + (\mathcal{P}e)^{-1})^{1/3}\mathcal{R}e^{0.41}\mathcal{P}r^{1/3} + 1$
Whitaker [256]	$\mathcal{N}u_p = 2 + (0.4\mathcal{R}e^{1/2} + 0.06\mathcal{R}e^{2/3})\mathcal{P}r^{2/5}$
Feng [72]	$\mathcal{N}u_p = 0.992 + \mathcal{P}e^{1/3} + 0.1\mathcal{R}e^{1/3}\mathcal{P}e^{1/3}$

TABLE 1.6 – Gammes de validité du nombre de Nusselt $\mathcal{N}u_p$ selon différents auteurs.

Auteurs	Validité
Ranz–Marshall [187]	$\mathcal{R}e \in [1; 10000]$; $\mathcal{P}r \in [0.6; 250]$
Clift [36]	$\mathcal{R}e \in [1; 400]$; $\mathcal{P}r \in [0.25; 1000]$
Whitaker [256]	$\mathcal{R}e \in [3.5; 76000]$; $\mathcal{P}e \in [0.7; 380]$
Feng [72]	$\mathcal{R}e \in [0.1; 4000]$; $\mathcal{P}e \in [0.2; 2000]$

D'autres études [163, 264] introduisent les effets respectifs des nombres de Grashof et de Richardson pour tenir compte de la convection naturelle. Le nombre de Grashof compare la flottabilité aux effets visqueux. Ce nombre adimensionnel apparaît du fait de la réduction de la masse volumique avec une augmentation la température générant un mouvement ascendant du fluide. Le nombre de Richardson est défini pour comparer l'importance relative de la convection naturelle et de la convection forcée. Afin de limiter le champ d'étude, seuls les effets de la convection forcée sur le transfert thermique seront considérés dans la suite. FIG. 1.10 montre que la majorité des corrélations proposées ci-dessus tend vers deux lorsque le nombre de Reynolds tend vers zéro. Ceci correspond au régime de diffusion pure. Seule la corrélation de Feng et Michaelides [72] ne suit pas cette tendance.

Le tracé de l'évolution du nombre de Nusselt en fonction du nombre de Reynolds montre une homogénéité dans les valeurs prédites par les corrélations. Cependant, la dépendance au nombre de Prandtl montre des prédictions plus hétérogènes mais avec des tendances similaires

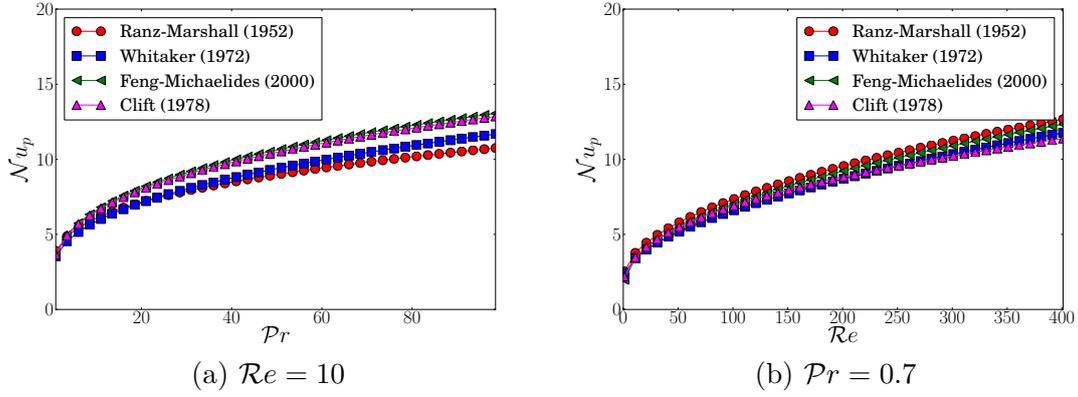


FIGURE 1.10 – Comparaison de l'évolution du nombre de Nusselt pour une particule isolée prévu par les corrélations [36, 72, 187, 256] en fonction du nombre de Reynolds Re .

avec Pr .

2.3 Dans un écoulement gaz–particules

Du fait de la diversité des notations présentes dans les différentes études de la littérature, les choix des notations utilisées ici sont développées dans le tableau TAB. 1.7. La norme de la vitesse superficielle du fluide est notée U_S^* , la vitesse interstitielle ou relative autour des particules est notée $U_r^* = \|\mathbf{U}_d^* - \mathbf{U}_c^*\|$. De fait, pour des particules fixes, $U_r^* = U_S^*/\alpha_c$. Ici α_c représente la fraction volumique de fluide dans le système. La phase dispersée, lorsqu'elle est considérée comme une phase continue est notée à l'aide de l'indice « d ». Au contraire, lorsque les données sont extraites pour chaque particule, les grandeurs sont alors repérées par l'indice « p ». Enfin, la phase fluide est repérée par l'indice « c ».

TABLE 1.7 – Notations utilisées dans les corrélations.

Nom	Notation
Reynolds superficiel	$Re_S = \rho_c^*(1 - \alpha_d)U_r^*d_p^*/\mu_c^*$
Reynolds particulaire	$Re_p = \rho_c^*U_r^*d_p^*/\mu_c^*$

2.3.1 Formulation du problème

L'équation définissant le nombre de Nusselt (équation 1.18) introduit la notion de température « au loin » de la particule T_∞^* . Dans le cas d'une sphère isolée plongée dans un écoulement, il devient naturel de définir cette température comme celle du fluide incident.

Cette température est celle « perçue » par la particule avant d'être mise en contact avec le fluide. De manière transverse à l'écoulement, c'est aussi la température « au loin » à l'altitude de la particule. Pour des systèmes à phase dispersée, la définition d'une température « au loin » devient plus difficile à construire du fait du caractère non conservatif du champ de température : à mesure que le fluide avance dans le système, les particules ne sont pas soumises au même gradient de température.

D'un point de vue génie des procédés, les écoulements fluide-particules ont fait l'objet de nombreux modèles pour rendre compte des transferts thermiques. Deux modèles sont couramment utilisés pour représenter ces écoulements : Piston, Piston-Dispersion. Ce problème peut être rendu adimensionnel en suivant la procédure suivante : $\Theta_i = T_i^*/(T_{d,0}^* - T_{c,0}^*)$ pour la température (l'indice 0 traduit l'instant de mise en contact), $\tau = t^*U_c^*/d_d^*$ pour le temps, $Z = z^*/d_p^*$ pour la distance. La formulation des bilans d'énergie pour chaque phase est rappelée tableau TAB. 1.8. Dans ce tableau ζ_i traduit le terme de transfert d'énergie entre les phases. Le nombre de Nusselt issu de ces bilans est noté \overline{Nu} dans la suite.

TABLE 1.8 – Formulations des bilans enthalpiques pour chaque phase.

$\frac{\partial \Theta_i}{\partial \tau} = -\frac{\partial \Theta_i}{\partial Z} + A_i \frac{\partial \Theta_i^2}{\partial z^2} - \zeta_i(\Theta_i - \Theta_j)$		
Modèle	Phase continue ($A_i =$)	Phase dispersée ($A_i =$)
Piston	0	0
Piston-Conduction	0	$1/\mathcal{P}e_{d,L}$
Piston-Conduction-Dispersion	$1/\mathcal{P}e_{c,L}$	$1/\mathcal{P}e_{d,L}$

$$\zeta_c = \frac{6\alpha_d \overline{Nu}}{\mathcal{P}e} \quad (1.19)$$

$$\zeta_d = \frac{\rho_c^* C_{p,c}^* \alpha_c}{\rho_d^* C_{p,d}^* \alpha_d} \zeta_c \quad (1.20)$$

Ainsi, dans le modèle piston, le coefficient de transfert calculé contient les contributions liées à la conduction et à la dispersion de chaleur. De la même manière, dans le modèle de piston-conduction, le coefficient de transfert contient les effets de dispersion de chaleur dans le gaz. Finalement, seul le modèle de piston-conduction-dispersion contient l'information relative au seul transfert de chaleur. Ici, seuls les bilans sur la phase continue seront développés et la température de la phase dispersée est considérée constante en temps et en espace. Par ailleurs, le terme d'échange ζ_c est maintenant noté ζ .

L'intégration du modèle simple de transfert de chaleur en régime permanent conduit à une évolution de la température de mélange \overline{T}_c^* sous forme exponentielle. La température de mélange est ici définie comme la température moyenne conditionnée par la vitesse de la phase fluide (voir équation 1.21).

$$\overline{T_c^*} = \frac{\int_{A_c^*} \mathbf{u}_c^* T_c^* \cdot \mathbf{n} dS^*}{\int_{A_c^*} \mathbf{u}_c^* \cdot \mathbf{n} dS^*} \quad (1.21)$$

Par intégration de l'équation du bilan enthalpique entre l'entrée et une côte z , l'évolution dimensionnelle de la température de mélange est donnée équation 1.22. Le nombre de Nusselt est alors calculé tel que $\overline{Nu} = \overline{h^*} d_p^* / \lambda_c^*$.

$$\ln \left(\frac{T_d^* - \overline{T_c^*}}{T_d^* - T_{c,in}^*} \right) = - \frac{\overline{h^*} A_d^* z^*}{U_{in}^* \rho_c^* C_{p,c}^*} \quad (1.22)$$

De nombreux travaux traitent du transfert thermique dans des systèmes diphasiques à phase dispersée gaz–particules ou liquide–solide. Ces travaux, souvent expérimentaux, utilisent l'un ou l'autre des modèles proposés. Kunii *et al.* [135] ont reporté les valeurs du nombre de Nusselt de 22 publications pour des lits fluidisés. Il apparaît que pour de forts nombres de Reynolds ($\mathcal{Re}_S > 100$), le nombre de Nusselt devient très important, du fait de la convection autour de la particule, et l'équation de Ranz–Marshall [187] pour une particule isolée devient la limite inférieure des données collectées. Cependant, pour des nombres de Reynolds faibles ($\mathcal{Re}_S < 10$), certains travaux observent que le nombre de Nusselt devient inférieur à celui d'une particule isolée et d'autres affirment que la valeur asymptotique de ce dernier est nulle lorsque le nombre de Reynolds tend vers zéro.

Le modèle piston–dispersion introduit un nouveau terme à modéliser : la dispersion axiale. En utilisant le bilan thermique adimensionnel pour la phase fluide (voir tableau TAB. 1.8) et en définissant la température normée $\Theta = \frac{T_d^* - T_c^*}{T_d^* - T_{c,in}^*}$, il vient, dans le cas d'une température de la phase dispersée constante T_d^* , l'équation 1.23.

$$\frac{\partial \Theta}{\partial \tau} + \frac{\partial \Theta}{\partial Z} - \frac{1}{\mathcal{P}e_L} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial Z^2} + \zeta \Theta = 0 \quad (1.23)$$

La modélisation du terme $\mathcal{P}e_L$ revient à définir la dispersion d'un scalaire passif à travers un lit de particules [50] (ζ est alors nul dans l'équation 1.23). Plusieurs techniques sont employées au niveau expérimental : réponse fréquentielle, réponse à un Dirac ou à un échelon de température / concentration du système [62, 157]. Une approximation largement utilisée pour les régimes d'écoulement intermédiaires est de supposer l'additivité des diffusions moléculaire et mécanique (*i.e.* liée au milieu dispersé) comme indiqué équation 1.24. La tortuosité du milieu est notée τ_u et vaut $\sqrt{2}$ pour des sphères. Pour des systèmes fixes aléatoires, Gunn [90] dérive l'expression d'un coefficient de dispersion axial (équation 2.20). Dans ce modèle, deux zones sont considérées : une où l'écoulement est rapide, et une où le fluide est quasiment au repos. Ici, α_1 représente la première racine de la fonction de Bessel $J_0(u) = 0$ et $\sigma_{u_{c,ax}}^2$ est la variance de la vitesse surfacique. Pour des systèmes denses (*i.e.* où la variance de porosité locale est faible), l'approximation $\sigma_{u_{c,ax}} = 0$ donne des résultats en accord avec les expériences [90]. La probabilité de déplacement axial, notée p , traduit la proportion relative de fluide en écoulement rapide à la quantité de fluide en régime quasi-statique [90]. Les valeurs de p et

τ_u sont proposées pour trois types de particules : sphères, cylindres pleins et creux [90]. Une modification de la dépendance de p avec le nombre de Schmidt / Prandtl (voir équation 2.21) est proposée par Guedes de Carvalho *et al.* [89]. D'autres études se sont proposées d'extraire les coefficients de dispersions axiaux pour les gaz et liquides, parfois avec des formulations lourdes [233] et critiquées par la communauté [91]. Malgré les efforts fournis pour extraire ces coefficients, les valeurs prédites peuvent varier de 20% [50]. Delgado [50] propose de retenir les relations de Gunn [90] et Guedes de Carvalho *et al.* [89] pour des systèmes de particules isométriques aléatoirement disposées. Une représentation des corrélations avec les données de la littérature montre un bon accord même à forts nombres de Péclet en FIG. 1.11. Pour les nombres de Péclet faibles, la dispersion axiale peut être approximée par le coefficient de diffusion de la phase fluide. De la même manière que pour la dispersion axiale, l'estimation du coefficient de dispersion transverse a aussi fait l'objet d'études [50].

$$\frac{1}{\mathcal{P}e_L} = \frac{1}{2} + \frac{1}{\tau_u} \frac{\alpha_c}{\mathcal{P}e} \quad (1.24)$$

$$\frac{1}{\mathcal{P}e_L} = \frac{1}{\tau_u} \frac{\alpha_c}{\mathcal{P}e} + \frac{\sigma_{u_s,ax}^2}{2} + \left[\frac{\mathcal{P}e}{A} (1-p)^2 \right] \quad (1.25)$$

$$+ \frac{(1-\alpha_c)\mathcal{P}e^2}{A^2} p(1-p)^3 \left(\exp\left(\frac{-A}{p(1-p)\mathcal{P}e}\right) - 1 \right) \left(1 + \sigma_{u_s,ax}^2 \right) \quad (1.26)$$

$$p = 0.17 + 0.33 \exp\left(-\frac{24}{\mathcal{R}e}\right) \quad (1.27)$$

$$A = 4\alpha_1^2(1-\alpha_c) \quad (1.28)$$

$$\tau_u = \sqrt{2} \quad (1.29)$$

$$\frac{1}{\mathcal{P}e_L} = \frac{1}{\tau_u \mathcal{P}e} + \frac{\mathcal{P}e}{5} (1-p)^2 + \frac{\mathcal{P}e}{25} p(1-p)^3 \left[\exp\left(-\frac{5}{p(1-p)\mathcal{P}e}\right) - 1 \right] \quad (1.30)$$

$$p = \frac{0.48}{\mathcal{P}r} + \left(\frac{1}{2} - \frac{0.48}{\mathcal{P}r^{0.15}} \right) \exp\left(-\frac{0.75\mathcal{P}r}{\mathcal{P}e}\right) \quad (1.31)$$

$$\tau_u = \sqrt{2} \quad (1.32)$$

À partir de ces corrélations et du bilan équation 1.23, la seule inconnue restante est le nombre de Nusselt. Ainsi, la résolution de ce système donne l'évolution de la température normalisée (voir équation 1.33). La valeur du nombre de Nusselt moyen peut alors être extraite en sortie du système [162]. Avec ce modèle, les valeurs du nombre de Nusselt calculées effacent le décrochage observé pour les faibles nombres de Reynolds [251]. Cependant, la valeur extraite ne représente pas le comportement individuel des particules mais du système [81].

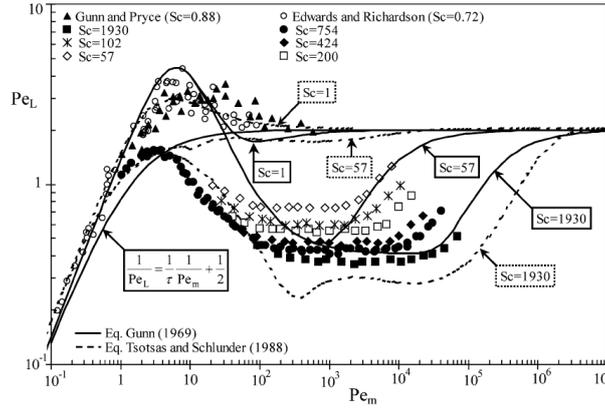


FIGURE 1.11 – Comparaison de l'estimation du coefficient de dispersion axial avec la littérature. Crédits :[50].

$$\Theta(Z) = \exp \left[-Z \left(\sqrt{\frac{\mathcal{P}e_L^2}{4} + \zeta \mathcal{P}e_L} + \frac{\mathcal{P}e_L}{2} \right) \right] \quad (1.33)$$

$$\overline{Nu} = \frac{\mathcal{P}e}{6\alpha_d \mathcal{P}e_L} \left[\left(\frac{\mathcal{P}e_L}{2} - Z \ln(\Theta(Z)) \right)^2 - \frac{\mathcal{P}e_L^2}{4} \right] \quad (1.34)$$

2.3.2 Résultats expérimentaux

La corrélation la plus souvent utilisée pour les transferts thermiques dans les écoulements fluide-particules est celle proposée par Gunn [92]. En combinant une analyse statistique des propriétés de l'écoulement dans les lits fixes avec la solution analytique de l'équation de convection-diffusion pour la chaleur, Gunn [92] propose une corrélation pour l'estimation du nombre de Nusselt ou de Sherwood. Cette corrélation a été obtenue de manière à satisfaire 4 relations limites sur la valeur du nombre de Nusselt. La première est extraite de la solution en série de l'équation de la chaleur pour les faibles nombres de Reynolds, la deuxième traduit le comportement des lits fixes à faibles nombres de Reynolds, et les deux dernières sont les dépendances du nombre de Nusselt à faibles nombres de Reynolds, pour des particules isolées, et les dépendances observées expérimentalement pour des sphères isolées ou des lits fixes avec le nombre de Prandtl à forts nombres de Reynolds. À tout cela s'ajoute une condition sur l'évolution du nombre de Nusselt avec la porosité lorsque celle-ci s'approche de 1. Il est intéressant de noter que la corrélation tient compte de la porosité du lit et est utilisable à la fois pour la prédiction du nombre de Nusselt et du nombre de Sherwood pour le transfert de matière. Cette corrélation est utilisable pour une large gamme de nombres de Reynolds et des systèmes dilués à denses, $Re_S < 1 \cdot 10^5$ et $0.35 < \alpha_c < 1$.

$$Nu = (7 - 10\alpha_c + 5\alpha_c^2)(1 + 0.7Re_S^{0.2}Pr^{1/3}) + (1.33 - 2.4\alpha_c + 1.2\alpha_c^2)Re_S^{0.7}Pr^{1/3} \quad (1.35)$$

Gnielinski [83] part de l'idée que le transfert de chaleur pour une particule de forme quelconque peut être prédit à partir des corrélations pour des plaques planes, à condition d'introduire les bonnes échelles caractéristiques de vitesse et de longueur. Ainsi, pour des particules sphériques en lit fixe ces grandeurs sont la vitesse moyenne dans le pore et le diamètre des sphères. En définissant un facteur d'arrangement $f(\alpha_c)$, Gnielinski arrive à la formulation suivante :

$$\mathcal{N}u_p = (1 + 1.5\alpha_d)\mathcal{N}u_{p,sphere} \quad (1.36)$$

L'expression de $\mathcal{N}u_p$ est calculée de manière à satisfaire $\mathcal{N}u_p = 2$ lorsque $\mathcal{R}e_p \rightarrow 0$ ainsi que les expressions du transfert de chaleur en écoulement laminaire et turbulent pour des plaques planes.

$$\mathcal{N}u_p = 2 + (\mathcal{N}u_{p,lam}^2 + \mathcal{N}u_{p,turb}^2)^{1/2} \quad (1.37)$$

$$\mathcal{N}u_{p,lam} = 0.664\mathcal{R}e_p^{1/2}\mathcal{P}r^{1/3} \quad (1.38)$$

$$\mathcal{N}u_{p,turb} = \frac{0.037\mathcal{R}e_p^{0.8}\mathcal{P}r}{1 + 2.443\mathcal{R}e_p^{-0.1}(\mathcal{P}r^{2/3} - 1)} \quad (1.39)$$

La corrélation précédente reste valide pour :

$$\left\{ \begin{array}{l} 0.1 \leq \mathcal{R}e_p \leq 10000 \\ 0.6 \leq \mathcal{P}r \leq 1000 \\ 0.26 \leq \alpha_c \leq 0.935 \end{array} \right. \quad (1.40)$$

Whitaker [256] a collecté les résultats de plusieurs études sur le transfert thermique en lits fixes constitués de sphères, anneaux de Rashig, selles de Berl, anneaux à partitions, ou cylindres. Bien que les nombres de Nusselt observés dans la littérature varient en fonction de la forme des particules, l'ensemble des données satisfait :

$$\overline{\mathcal{N}u} = \frac{\alpha_d}{\alpha_c} \left(0.5 \left(\frac{\mathcal{R}e_S}{\alpha_d} \right)^{1/2} + 0.2 \left(\frac{\mathcal{R}e_S}{\alpha_d} \right)^{2/3} \right) \mathcal{P}r^{1/3} \quad (1.41)$$

Le taux de vide des études varie entre $0.34 \leq \alpha_c \leq 0.63$, pour des nombres de Reynolds compris entre $100 \leq \mathcal{R}e_S/\alpha_d < 1 \times 10^4$.

L'étude sur le transfert thermique et de matière entre une inclusion au sein d'un arrange-

ment de sphères et un fluide menée par Rowe et Claxton [197] conclut à la corrélation :

$$\overline{Nu} = A + B\mathcal{R}e_S^n Pr^{1/3} \quad (1.42)$$

$$A = \frac{2}{1 - \alpha_d^{1/3}} \quad (1.43)$$

$$B = \frac{2}{3(1 - \alpha_d)} \quad (1.44)$$

$$n = \frac{2 + 0.65\mathcal{R}e_S^{-0.28}}{3(1 + 4.65\mathcal{R}e_S^{-0.28})} \quad (1.45)$$

$$(1.46)$$

Cette corrélation, valable pour les lits fixes et les lits fluidisés, est basée sur le calcul du coefficient de transfert de chaleur pour différents arrangements de sphères maintenues fixes (rhomboédrique, cubique et aléatoire). Des précisions sur la valeur du coefficient B et sur la gamme de validité de la corrélation sont fournies avec l'étude si l'eau et l'air sont considérés séparément (voir tableau TAB. 1.9). Ainsi, des études séparées pour l'eau et pour l'air conduisent à $B = \frac{0.61}{1 - \alpha_d}$ pour l'air et $B = \frac{0.70}{1 - \alpha_d}$ pour l'eau.

De plus, la gamme de nombres de Reynolds sur laquelle est basée la corrélation varie en fonction du réseau étudié mais est comprise entre $130 \leq \mathcal{R}e_S \leq 2000$.

TABLE 1.9 – Gamme de validité de la corrélation de Rowe et Claxton [197].

Réseau	α_d		$\mathcal{R}e_S$	
	Air	Eau	Air	Eau
Rhombohédrique	[0.368; 0.74]	[0.368; 0.74]	[200; 2000]	[200; 2000]
Cubique	0.524	0.524	[130; 1530]	[200; 1150]

Enfin, une série d'études compile les différents travaux de la littérature pour définir de nouvelles relations (voir tableau TAB. 1.10). Ainsi, les données expérimentales collectées par Kunii [135] pour les faibles nombres de Reynolds suivent l'expression empirique proposée par Kothari [135]. Pour sa part, Chen [33] obtient sur le même jeu de données la corrélation montrée tableau TAB. 1.10. Ce tableau regroupe aussi les travaux de Wakao *et al.* [251] pour des lits fixes traversés par de l'air, $Pr = 0.7$ et $15 \leq \mathcal{R}e_S \leq 8500$. Enfin, la relation fournie par Gelperin et Einstein [80] est aussi disponible dans le tableau TAB. 1.10. Il est intéressant de noter que dans toutes ces relations, les dépendances aux nombres de Reynolds et de Prandtl ont des valeurs très proches. Seules les relations de Wakao et Ranz se raccordent au nombre de Nusselt d'une sphère isolée dans les cas dilués. Enfin, seule la relation de Gelperin et Einstein [80] semble indiquer une dépendance du nombre de Nusselt avec la porosité du milieu, comme proposé plus haut.

Enfin, il est intéressant de noter la corrélation proposée par Jeschar [114] applicable pour

TABLE 1.10 – Relations issues de compilations de données pour les transferts thermiques en lits denses.

Auteurs	Relation
Kunii et Levenspiel [135]	$\overline{Nu} = 0.03\mathcal{R}e_S^{1.3}$ pour $0.1 \leq \mathcal{R}e_S \leq 100$
Chen [33]	$\overline{Nu} = 0.0282\mathcal{R}e_S^{1.4}\mathcal{P}r^{1/3}$ pour $0.1 \leq \mathcal{R}e_S \leq 50$
	$\overline{Nu} = 1.01\mathcal{R}e_S^{0.48}\mathcal{P}r^{1/3}$ pour $50 \leq \mathcal{R}e_S \leq 1 \cdot 10^4$
Gelperin et Einstein [80]	$\overline{Nu} = 0.4 \left(\frac{\mathcal{R}e_S}{\alpha_c}\right)^{2/3} \mathcal{P}r^{1/3}$ pour $\mathcal{R}e_S/\alpha_c > 200$
Wakao <i>et al.</i> [251]	$\overline{Nu} = 2 + 1.1\mathcal{R}e_S^{0.6}\mathcal{P}r^{1/3}$
Ranz–Marshall	$\overline{Nu} = 2 + 1.8\mathcal{R}e_S^{1/2}\mathcal{P}r^{1/3}$

des systèmes polydisperses. La valeur du coefficient d'échange de chaleur et le diamètre caractéristique des particules étant variables pour des systèmes polydisperses, ces derniers sont remplacés par leur valeur moyenne (voir équations 1.47 et 1.48). Ceci implique que les nombres de Reynolds et de Nusselt soient aussi moyennés. Pour un jeu de n classes, la fraction volumique de la classe i est notée $\alpha_{d,i} = \frac{V_i^*}{V^*}$ et le diamètre associé à la classe d_i^* .

$$\overline{d^*} = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \frac{\alpha_{d,i}}{d_i^*}} \quad (1.47)$$

$$\overline{h^*} = \sum_{i=1}^n h_i^* \frac{\alpha_{d,i}}{d_i^*} \overline{d^*} \quad (1.48)$$

La prise en compte de la polydispersité se fait via un facteur d'arrangement $f\left(\alpha_n; \frac{d_1}{d_n}\right)$ (f vaut 1 pour un système monodisperse) et le nombre de Nusselt s'écrit :

$$\overline{Nu} = 2f\left(\alpha_n; \frac{d_1^*}{d_n^*}\right) + \left(\frac{\alpha_d}{\alpha_c} \mathcal{R}e_p\right)^{0.5} + 0.005\mathcal{R}e_p \quad (1.49)$$

$$f\left(\alpha_n; \frac{d_1^*}{d_n^*}\right) = \frac{\sum_{i=1}^n \left(\alpha_{d,i} \left(\frac{d_1^*}{d_i^*}\right)^2\right)}{\left(\sum_{i=1}^n \left(\alpha_{d,i} \frac{d_1^*}{d_i^*}\right)\right)^2} \quad (1.50)$$

L'expression est en accord avec la définition des équations 1.47 et 1.48 et la nécessité pour chaque sphère composant le lit de satisfaire $Nu_p = 2$ lorsque $\mathcal{R}e \rightarrow 0$. La corrélation proposée est basée sur des expériences menées avec des gaz $\mathcal{P}r = 0.7$: c'est pourquoi le nombre de Prandtl n'y apparaît pas. En comparant sa corrélation avec les données disponibles dans la littérature, Jeschar trouve que de manière similaire à Gunn et Whitaker, le nombre de Nusselt a une dépendance en $\mathcal{P}r^{1/3}$. Une corrélation corrigée, mais valable uniquement pour des cas monodisperses est alors proposée.

$$\overline{Nu} = 2 + 1.12 \left(\frac{\alpha_d}{\alpha_c} Re_p \right)^{0.5} Pr^{1/3} + 0.0056 Re_p Pr^{1/3} \quad (1.51)$$

2.3.3 Quid des études numériques

Comparativement au transfert de quantité de mouvement, peu d'études numériques, que ce soit en lits fixes ou en lits fluidisés, se sont proposées d'étudier le transfert thermique de particules en interaction avec un fluide. Augier *et al.* [11] se sont intéressés au transfert de chaleur et de matière dans des lits fixes à nombres de Reynolds modérés $1 < Re_S < 80$ et $300 \leq Pr \leq 1000$. Les valeurs de nombre de Nusselt calculées pour une sphère isolée se superposent à la corrélation de Feng et Michaelides [72]. La simulation de l'écoulement pour $Re_S = 30$ autour de deux particules proches dont le diamètre varie $\pm 20\%$ montre un faible impact sur le nombre de Nusselt particulaire $\pm 5\%$. Les moyennes réalisées sur 60 particules choisies aléatoirement dans un lit sont bien représentées par la corrélation de Kunii [135] (voir tableau 1.10).

Coussirat *et al.* [40] ont regardé, pour des lits fixes, l'impact sur la prédiction du transfert de chaleur des différentes modélisations de la turbulence (Eddy Viscosity Models ou Reynolds Stress Models) ainsi que des différents traitements aux murs. Si ces choix (modèle et traitement au mur) influencent la valeur du nombre de Nusselt calculé, les données publiées reproduisent assez fidèlement la corrélation proposée par Wakao et Kaguei [251].

Même pour des géométries moins communes (Composite Structured Packing), Romkes *et al.* [195] réussissent à retrouver par la CFD, avec une erreur de 15%, les valeurs du nombre de Nusselt prédites par les corrélations (propres au type de géométries considérées).

À l'aide d'une étude CFD utilisant le modèle $k - \epsilon$ avec un traitement au mur spécifique, Jang *et al.* [113] ont évalué le nombre de Nusselt et le coefficient de friction pour des fractions volumiques $\alpha_c = 0.4 - 0.5$ et des nombres de Reynolds compris entre 1300 et 11000. Les particules utilisées pour simuler le lit fixe, ont un diamètre compris entre $50 \text{ mm} < d_p < 100 \text{ mm}$. Les corrélations basées sur leur étude prédisent les valeurs du nombre de Nusselt avec une incertitude de 7%.

Des études plus récentes [45, 46, 49, 73, 224, 225, 260], utilisent la Simulation Numérique Directe (DNS) pour quantifier les transferts de chaleur en lits fixes et en lits fluidisés. L'ensemble de ces études utilisent des méthodes aux frontières immergées, seuls les schémas d'interpolation où les méthodes de forçage diffèrent. Ces codes sont, dans un premier temps, comparés à des solutions analytiques (diffusion pure autour d'une sphère [224], écoulement dans un canal carré [225]) ou à des expériences de sédimentation [49, 249, 268].

Pour des sphères isolées [49, 73, 224], les résultats pour le nombre de Nusselt sont comparés aux corrélations de Feng [72], Ranz–Marshall [187] ou Whitaker [256]. L'erreur relative entre la DNS et les corrélations n'excède jamais 10% et Tavassoli *et al.* [224] montrent qu'une résolution $N_p = d_p^*/\Delta x^* = 15$ pour le pas d'espace permet d'obtenir une solution indépendante

de la grille. Ici Δx^* correspond à la résolution spatiale de la simulation et N_p cette même grandeur en termes de nombre de pas d'espace par diamètre. Cette même observation est faite par Feng et Musong [73] pour des régimes d'écoulement où interviennent la convection naturelle et la convection forcée. Xia *et al.* [260] ont comparé l'évolution du nombre de Nusselt local en fonction de la condition limite à l'interface (Dirichlet ou Neumann) et de la méthode d'interpolation à l'interface. Après comparaison de la distribution du nombre de Nusselt avec les résultats publiés par d'autres auteurs, ils observent une précision similaire des solutions pour $N_p = 32$ et $N_p = 24$ respectivement pour une méthode multi-directe et pour une méthode par reconstruction. Aucune corrélation cependant, ne semble être privilégiée par les études menées en DNS.

L'évaluation du transfert de chaleur pour des systèmes à phase dispersée pose plus de problèmes. En premier lieu, la définition du nombre de Nusselt fait intervenir la force qui régit le transfert $T_p^* - T_\infty^*$. Or pour des particules en interaction, toutes ne voient pas la même force motrice du transfert de chaleur. Si les particules en amont du système voient le fluide à sa température d'entrée ce n'est pas le cas des particules en aval, pour lesquelles le fluide a échangé de la chaleur et n'est plus homogène : le nombre de Nusselt particulaire devient alors difficile à évaluer. Une solution [49] consiste à évaluer un nombre de Nusselt moyen sur l'ensemble du domaine, en revenant à la méthode d'évaluation du coefficient de transfert utilisé pour formuler les corrélations (voir équation 1.22).

Le profil de température de mélange est extrait des simulations DNS [49]. La seule inconnue restante est le coefficient de transfert thermique moyen, \bar{h}^* . Ce dernier est alors obtenu par une régression linéaire. Cette méthode est proposée par Deen [49] pour le transfert thermique, puis les coefficients obtenus sont comparés à la corrélation de Gunn [92]. Les coefficients de détermination issus des régressions indiquent que le modèle choisi peut représenter le système (*i.e.* $R^2 \geq 0.998$). Cependant, l'erreur relative avec les prédictions de Gunn dépasse 15% pour $\mathcal{Re}_S < 100$ et croît lorsque \mathcal{Re}_S diminue. Ceci pouvant être imputé à la fois au modèle utilisé pour extraire le nombre de Nusselt et à la corrélation. Cette méthodologie est aussi utilisée par Tavassoli [224] pour $\mathcal{Re}_S \in [0; 100]$. Les simulations ont été réalisées pour trois grilles différentes ($N_p = 10$, $N_p = 15$ et $N_p = 20$) et les résultats ont été extrapolés pour $N_p \rightarrow +\infty$ par la méthode de Richardson [190]. Les écarts relatifs calculés par cette méthode sont similaires à ceux observés par Deen [49]. Les tendances prédites par la corrélation avec \mathcal{Re}_S et α_d sont retrouvées au niveau de la DNS. En rassemblant les résultats de différents travaux [49, 224, 225], Deen *et al.* [46] proposent une correction à la corrélation de Gunn qui représente mieux les résultats DNS :

$$\overline{Nu} = (7 - 10\alpha_c + 5\alpha_c^2)(1 + 0.17\mathcal{Re}_S^{0.2}\mathcal{Pr}^{1/3}) + (1.33 - 2.31\alpha_c + 1.16\alpha_c^2)\mathcal{Re}_S^{0.7}\mathcal{Pr}^{1/3} \quad (1.52)$$

Pour aller plus loin dans la compréhension de ces systèmes, Deen [49], repris par Tavassoli [224] tentent d'évaluer un nombre de Nusselt particulaire. Dans l'équation 1.18, la force motrice du transfert est contenue dans $T_\infty^* - T_p^*$. L'évaluation de la température moyenne locale du fluide T_∞^* est réalisée à l'intérieur de boîtes cubiques centrées sur chacune des particules. La température du fluide aux extrémités de la boîte (*i.e.* loin de la particule d'intérêt), joue un rôle faible dans le transfert thermique. C'est pourquoi, les auteurs introduisent une fonc-

tion décroissante $g(r)$ usuellement utilisée dans le modèle à deux fluides pour l'évaluation des moyennes volumiques [112].

$$\widetilde{T}_c^*(\mathbf{r}^*) = \frac{\int_{V_c^*} g(|\mathbf{r}^* - \mathbf{r}_p^*|) T_c^*(\mathbf{r}^*) d\mathbf{r}^*}{\int_{V_c^*} g(|\mathbf{r}^* - \mathbf{r}_p^*|) d\mathbf{r}^*} \quad \text{avec } g(r) = \exp(-r^*/r_p^*) \quad (1.53)$$

L'opération de moyenne volumique dépend de la taille de la boîte sur laquelle elle est réalisée. Deen *et al.* [49] indiquent qu'une boîte de taille $5d_p^*$ permet d'obtenir une erreur inférieure à 0.5% sur la valeur de la moyenne locale. Grâce à cette méthode, les auteurs arrivent à extraire des distributions de coefficients de transfert thermique particulaire, éléments importants pour une analyse statistique destinée à la modélisation. Cependant, une telle taille de boîte questionne quant à la véritable définition d'une grandeur locale aux vues de la dimension du système utilisé.

Massol [149] étudie l'écoulement et le transfert de chaleur dans une maille des réseaux structurés (cubique, cubique centré, cubique face centrée). Le calcul de la température moyenne dans le volume représentatif est ici défini à l'aide d'une moyenne volumique sur la phase fluide dans l'intégralité du volume de contrôle. Pour les réseaux structurés, Massol obtient les mêmes tendances pour le nombre de Nusselt avec $\mathcal{R}e_S$ et α_d que les corrélations de Gunn [92], Gnielinski [83] et Rowe et Claxton [197]. Cependant, l'ensemble des corrélations semblent sous-estimer la valeur du nombre de Nusselt. Massol a de plus, étudié la distribution de température pour le réseau cubique face centrée. Il apparaît que la variance de température augmente lorsque les nombres de Prandtl ou de Reynolds diminuent, et qu'elle augmente avec α_d .

Feng et Musong [73], ainsi que Xia *et al.* [73, 260] regardent le problème du transfert de chaleur en lit fluidisé ou dans un réseau de particules fixes en définissant le nombre de Nusselt particulaire comme le rapport entre transfert de chaleur à la surface de la particule et la force motrice maximale (i.e. $|T_d^*/(T_d^* - T_{c,in}^*) - T_{c,in}^*/(T_d^* - T_{c,in}^*)| = 1$).

$$\mathcal{N}u_p = -\frac{1}{\pi} \int_{A_d} \nabla T_c^*/(T_d^* - T_{c,in}^*) \cdot \mathbf{n} dS \quad (1.54)$$

Enfin, ils proposent de définir le nombre de Nusselt moyen comme la moyenne arithmétique des nombres de Nusselt particuliers. Cette définition ne permet de pas de comparer les résultats obtenus avec la corrélation de Gunn [92] qui prend en compte la température moyenne locale du fluide [73].

$$\langle \mathcal{N}u \rangle^{N_{part}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{N}u_{p,i} \quad (1.55)$$

Leurs études respectives sur un lit fluidisé et un paquet de particules montrent que le nombre de Nusselt moyen dans leur système est inférieur à celui pour une particule isolée. Pour le lit fluidisé de 225 sphères, Feng et Musong [73] trouvent que le rapport $\langle \mathcal{N}u \rangle^{N_{part}}$

$/\mathcal{N}u_{p,iso}$ varie entre 0.64 et 0.68 pour les différentes vitesses de fluidisation testées. Ce même rapport pour un cluster de 20 sphères est compris entre 0.61 et 0.76 pour des nombres de Reynolds $50 \leq \mathcal{R}e \leq 100$.

En second lieu se pose la question de la représentativité des systèmes étudiés par la DNS. Tout comme les jeux de données sur lesquels sont basées les corrélations au niveau expérimental, il est intéressant de savoir combien de systèmes doivent être étudiés par la DNS pour minimiser les erreurs. Tenneti *et al.* [225] se sont intéressés à minimiser les incertitudes sur la détermination du nombre de Nusselt. Pour des systèmes à $\mathcal{R}e_S \in [1; 100]$ et $\alpha_d = 0.2$ ou 0.4 , les auteurs ont relevé le profil du nombre de Nusselt dans la direction de l'écoulement, ainsi que le rapport de l'aire dédiée au fluide sur l'aire totale de la tranche. L'amplitude des fluctuations pour l'aire est d'environ 7% lorsque la moyenne est réalisée sur 5 simulations indépendantes. Pour réduire ces mêmes fluctuations à 2%, 50 simulations indépendantes sont nécessaires. Des résultats similaires sont observés sur les fluctuations du nombre de Nusselt. Le reste de l'étude se base sur des moyennes pour 5 simulations indépendantes. Enfin, Tenneti *et al.* [225] remontent au nombre de Nusselt moyen (sur l'ensemble des réalisations et sur la hauteur du lit) et retrouvent les tendances prédites par la corrélation de Gunn [92].

En reprenant les systèmes gaz-particules proposés par Tenneti [225], Sun *et al.* [215] montrent l'effet relatif de la diffusion, de la convection et du transport pseudo-turbulent de chaleur pour des régimes modérés ($Re \in [1, 100]$ et $\alpha_d = [0.1, 0.5]$). Le nombre de Nusselt moyen issu de leurs simulations peut être approché par l'équation 1.56 [214]. Une analyse plus poussée [215] montre que l'effet de la diffusion ne peut plus être négligée pour des nombres de Reynolds particuliers inférieurs à 20. Pour les régimes advectifs ($\mathcal{R}e_p > 10$), le transfert thermique est principalement dû à l'advection et au transfert pseudo-turbulent. L'extraction du terme de transfert thermique pseudo-turbulent montre une décroissance exponentielle avec le nombre de Reynolds. À partir de ces observations et des simulations PRS, une estimation de la dispersion axiale est calculée à partir d'un modèle de transport turbulent (équation 1.57).

$$\overline{\mathcal{N}u} = \frac{-0.46 + 1.77\alpha_c + 0.69\alpha_c^2}{\alpha_c^3} + (1.37 - 2.4\alpha_c + 1.2\alpha_c^2)\mathcal{R}e_p^{0.7}\mathcal{P}r^{1/3} \quad (1.56)$$

$$k_{c,L}^* = \frac{4d_p^*(1.4 + \mathcal{R}e_p)\mathcal{P}r}{6\pi\alpha_d\mathcal{N}u} \frac{(0.2 + 1.2\alpha_d - 1.24\alpha_d^2)|\mathbf{u}_c^*|\exp(-0.002\mathcal{R}e_p)}{(1 - 1.6\alpha_c\alpha_d - 3\alpha_d\alpha_c^4)\exp(-\alpha_d\mathcal{R}e_p^4)} \quad (1.57)$$

L'étude de milieux bi-disperses a été menée [162, 223] en utilisant la même procédure que pour les systèmes mono-disperses. Ceci engendre une nouvelle dimension à balayer : la proportion de grosses et petites particules à chargement global fixé. L'extraction du nombre de Nusselt moyen se fait en remplaçant le diamètre des particules dans le bilan 1D par le diamètre de Sauter. Ce dernier définit le diamètre de la sphère de même rapport volume / surface $d_m^* = \frac{\sum_i N_i d_{p,i}^{*3}}{\sum_i N_i d_{p,i}^*}$. Les corrélations de la littérature proposées pour les systèmes mono-disperses en substituant d_p^* par d_m^* sont en bon accord avec les valeurs obtenues par extraction du

coefficient de transfert à partir du profil de température. Cependant, l'étude de la distribution du nombre de Nusselt particulière montre un comportement différent entre larges et petites particules. La valeur moyenne observée par les grosses particules est supérieure à celle des petites particules. Au contraire, l'écart-type des distributions est supérieur pour les petites particules. Les distributions tendent à s'homogénéiser avec le nombre de Reynolds pour les deux classes de particules. Enfin, aucune tendance n'est observée lorsque la proportion relative de classe de particule est changée. Ces conclusions sont valables pour des nombres de Reynolds compris entre 20 et 100 et des chargements solides compris entre 10% et 50%.

Municchi et Radl [162] utilisent des moyennes volumiques locales autour des particules pour extraire le coefficient de traînée et le nombre de Nusselt. L'étude de l'évolution de ces grandeurs menée pour des chargements solides compris entre 20% et 50% pour des systèmes bi-disperses. Ici aussi le diamètre est remplacé par le diamètre de Sauter. Une distribution sous forme de loi log-normale est observée plutôt qu'une loi Gaussienne pour le coefficient de traînée et le nombre de Nusselt. En ajoutant la contribution du gradient de pression local au niveau des particules, une correction à la corrélation de Beetstra [16] est proposée (voir équation 1.58). Ici, $F_{i,B}^*$ correspond au coefficient de traînée proposé par Beetstra [16] sur la particule i . La réintroduction de la dispersion log-normale dans les corrélations se fait par l'ajout d'un terme stochastique à la forme générale de la loi de traînée. Pour un nombre aléatoire ϵ_i , le coefficient de traînée s'écrit sous la forme : $F_i = F_{i,corr}(1 + F_{i,\sigma}(\epsilon_i))$. Le terme fluctuant $F_{i,\sigma}(\epsilon_i)$ correspond à la densité de probabilité de déviation à la corrélation pour une valeur aléatoire ϵ_i . Enfin, supposant un lien direct entre nombre de Nusselt et coefficient de traînée, cette même procédure est appliquée pour le nombre de Nusselt.

$$F_{i,corr}^* = -0.1216 + 1.181F_{i,B}^* + 0.00352F_{i,B}^{*2} \quad (1.58)$$

$$\mathcal{N}u_{i,bi} = 2 + \mathcal{P}r^{1/3} \frac{F_{i,corr}^* - 1}{F_{i,corr}^*} \left(12.2 - \frac{2}{\mathcal{P}r^{1/3}} + 0.312F_{i,corr}^* \right) \quad (1.59)$$

2.3.4 Discussion pour les régimes diffusifs

Les valeurs du nombre de Nusselt reportées dans la littérature peuvent varier de plusieurs ordres de grandeurs, notamment aux faibles nombres de Reynolds. Pour certains, les différences observées sur les valeurs expérimentales du nombre de Nusselt proviennent [143, 192] du modèle d'équilibre des températures utilisé lors de l'analyse des profils thermiques dans le lit. En supposant un lit parfaitement mélangé et un écoulement piston au sein du lit [135], les bilans enthalpiques sur chaque phase peuvent varier selon les hypothèses faites quant aux effets de conduction entre particules et de dispersion au sein du fluide.

Afin d'expliquer les faibles valeurs du nombre de Nusselt observées dans la littérature pour les faibles nombres de Reynolds $\mathcal{N}u \propto \mathcal{P}e^m$ avec $m > 1$, des études [232, 244] ont montré que la dispersion axiale était prédominante pour le transfert de chaleur pour des nombres de Reynolds $\mathcal{R}e_S < 200$. Cependant, les corrélations basées sur ces observations prédisent toujours des valeurs trop élevées du nombre de Nusselt $\mathcal{N}u \propto \mathcal{P}e$. Selon Schlünder [204], pour des faibles nombres de Péclet, les systèmes hétérogènes gaz-particules ne peuvent plus être consi-

dérés comme des systèmes quasi-homogènes. Selon eux, faire cette hypothèse ne permet pas d'extraire correctement le nombre de Nusselt et explique l'incapacité des corrélations issues de ces études à prédire les transferts thermiques dans ces milieux. Cette même observation est faite par Martin [148]. Pour eux, les faibles valeurs du nombre de Nusselt observées dans la littérature sont à attribuer à la présence de passages préférentiels froids, et donc une distribution non-uniforme de l'écoulement dans le lit, liée à une hétérogénéité de la distribution de la fraction gazeuse. Le calcul du coefficient de transfert basé sur la perte de chaleur entre l'entrée et la sortie du lit est alors sous-estimé par la présence de ces courts-circuits.

Pour Nelson et Galloway [165], la valeur limite $Nu = 2$ en régime de diffusion pure est un cas particulier pour une sphère isolée. Cette valeur est obtenue en imposant un gradient thermique nul de la phase fluide à l'infini de la particule. Or, cette condition limite n'est plus correcte lorsque le problème traite d'une sphère en interaction avec d'autres sphères, toutes participant au phénomène de transfert de chaleur. Nelson et Galloway font l'hypothèse d'un gradient de température nul sur une sphère de rayon $R_{\alpha_c}^*$ entourant la particule. Le rayon $R_{\alpha_c}^*$ est choisi de telle sorte que la porosité dans le volume de la sphère soit identique à celui du système étudié. Le problème de diffusion pure est posé de manière à satisfaire la théorie de la pénétration. La résolution du problème permet d'obtenir la corrélation suivante :

$$\overline{Nu} = \frac{2\zeta + \left(\frac{2\zeta^2(1-\alpha_c)^{1/3}}{(1-(1-\alpha_c)^{1/3})^2} - 2 \right) \tanh(\zeta)}{\frac{\zeta}{1-(1-\alpha_c)^{1/3}} - \tanh(\zeta)} \quad (1.60)$$

Dans cette équation, ζ vaut :

$$\zeta = \left(\frac{1}{(1-\alpha_c)^{1/3}} - 1 \right) \frac{\alpha}{2} \mathcal{Re}_S^{1/2} \mathcal{Pr}^{1/3} \quad (1.61)$$

Il est à noter que la constante α dans l'équation 1.61 vaut 0.6 dans leur étude de manière à suivre les dépendances du nombre de Nusselt observées par Frössling. Ainsi, pour des systèmes très dispersés (*i.e.* $\alpha_c \rightarrow 1$), la corrélation proposée tend vers celle d'une sphère isolée proposée par Ranz–Marshall ou Frössling. La gamme de validité de cette corrélation est $0.08 \leq \mathcal{Re}_S \leq 1000$. Enfin, la corrélation proposée permet de retrouver la chute du nombre de Nusselt pour les faibles nombres de Reynolds.

Avec un même jeu de données initial, Riquarts [192] arrive à montrer que les coefficients de transfert calculés avec ou sans l'effet de la dispersion axiale peuvent varier de plusieurs ordres de grandeurs. Les valeurs ainsi produites par chaque modèle pour un même cas sont dans la gamme des résultats publiés pour ces mêmes modèles. En incluant la contribution de la dispersion, les coefficients de transfert calculés sont supérieurs à ceux d'une particule isolée, et ce, même à des nombres de Reynolds très faibles.

De la même manière, Glicksman [81] montre à l'aide d'un modèle piston–dispersion que le nombre de Nusselt effectif du lit est très dépendant des effets diffusifs dans le lit. De même l'inhomogénéité de porosité dans le lit engendre une large diminution du nombre de Nusselt effectif avec ce type de modèle et rejoint en ce sens Martin [148]. Selon eux enfin, le modèle

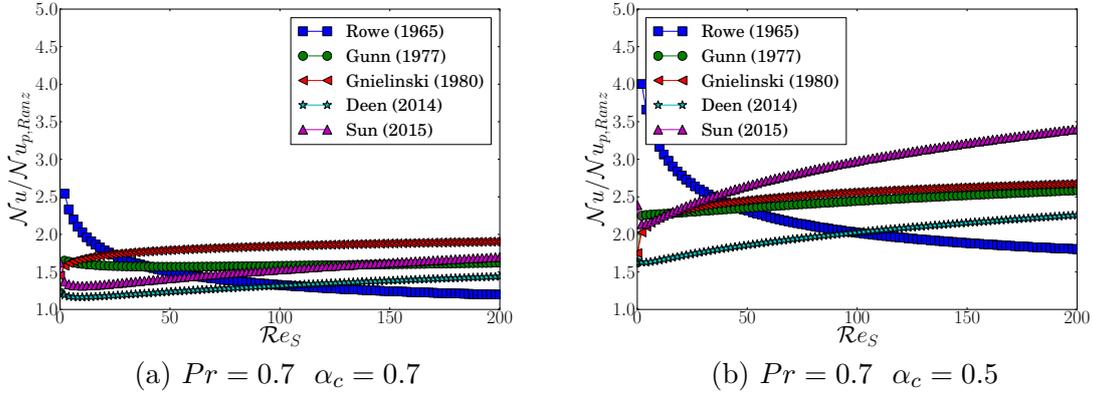


FIGURE 1.12 – Comparaison de l'évolution du nombre de Nusselt prévu par les corrélations [92, 165, 187, 192, 197, 251] en fonction du $\mathcal{R}e_S$.

basé sur la théorie de la pénétration proposé par Nelson et Galloway [165] n'est pas résolu avec la bonne condition limite pour les régimes à faibles nombres de Reynolds. En appliquant une nouvelle condition limite à ce même problème lorsque le temps de diffusion dans la coquille englobant la particule est supérieur au temps de renouvellement du fluide à la surface de la coquille T_{re}^* , une nouvelle solution est proposée [118]. La transposition de cette relation au transfert de matière est assez aisée.

$$\overline{\mathcal{N}u} = \frac{2(d_p^* + \delta)(b - c)}{\delta(b - d_p^{*2} - c)} \quad (1.62)$$

$$b = 2(4\delta^2 + 6\delta d_p^* + 3d_p^{*2}) \quad (1.63)$$

$$c = (8\delta^2 + 11\delta d_p^* + 4d_p^{*2}) \exp \left[\frac{d_p^*(d_p^* + \delta)(12k_c^* T_{re}^* - \delta^2)}{\delta^2(8\delta^2 + 11\delta d_p^* + 8d_p^{*2})} \right] \quad (1.64)$$

$$\delta = d_p^* \frac{1 - (1 - \alpha_c)^{1/3}}{2(1 - \alpha_c)^{1/3}} \quad (1.65)$$

$$T_{re}^* = 2.78 \frac{d_p^{*2} \mathcal{P}r^{1/3}}{\nu_c^* \mathcal{R}e_p} \quad (1.66)$$

2.3.5 Comparaison des corrélations

Il est intéressant de comparer les différentes corrélations présentées précédemment afin de repérer les possibles points d'améliorations de la compréhension des transferts thermiques. Cependant, pour des raisons de lisibilité, les corrélations ayant des formulations proches n'ont pas été reportées dans cette section. De plus, cette comparaison s'intéresse en premier lieu

aux tendances fournies par les corrélations les plus récentes.

Concernant l'évolution du nombre de Nusselt à nombre de Prandtl et fraction volumique fixés, la plupart des corrélations montrent que le rapport $\mathcal{N}u/\mathcal{N}u_{p,Ranz}$ augmente avec le nombre de Reynolds. Ici, $\mathcal{N}u_{p,Ranz}$ correspond au nombre de Reynolds d'une sphère isolée calculé à partir de la corrélation de Ranz–Marshall [187]. Les corrélations prédisent un nombre de Nusselt en milieu dense supérieur à celui d'une sphère isolée (voir FIG. 1.13). Il faut noter que la tendance prédite par la corrélation de Rowe et Claxton [197] pour les faibles nombres de Reynolds n'est pas à prendre en compte. En effet, ces corrélations ont été obtenues respectivement pour $\mathcal{R}e_S \geq 130$ et $\mathcal{R}e_S/\alpha_d \geq 100$.

Si la tendance concernant l'évolution des transferts thermiques avec le nombre de Reynolds est plus ou moins commune à tous les auteurs, les valeurs prédites varient du simple au double pour de faibles chargements solides (voir FIG. 1.13a). Les corrélations issues des études numériques récentes [45, 215] prédisent toutefois des valeurs de nombres de Nusselt proches pour ces configurations comme indiqué en FIG. 1.12a. Les écarts peuvent grimper à 40% pour les chargements denses (voir FIG. 1.12b). Seule la corrélation de Rowe et Claxton [197] prévoit une tendance contraire à celle prévue par les autres corrélations (voir FIG. 1.12).

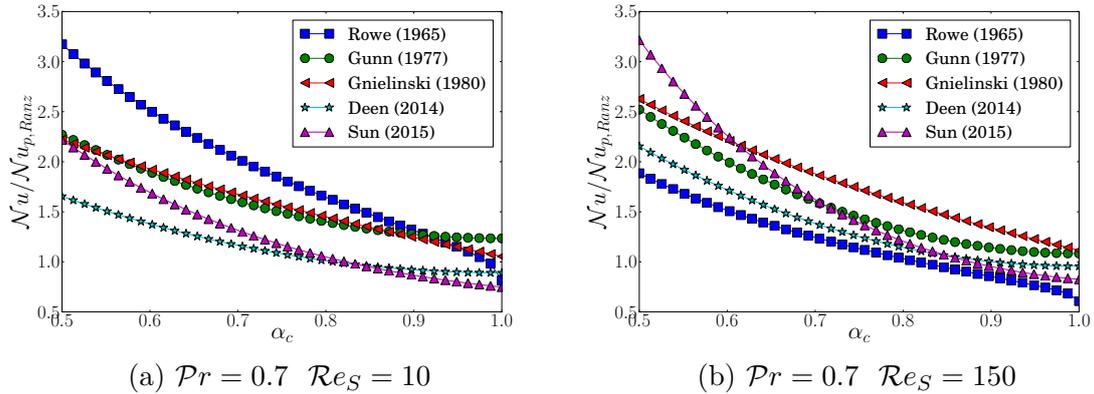


FIGURE 1.13 – Comparaison de l'évolution du nombre de Nusselt prévu par les corrélations [92, 165, 187, 192, 197, 251] en fonction de α_c .

Des divergences apparaissent à nouveau à propos de l'évolution du nombre de Nusselt avec la fraction de phase continue, à nombre de Prandtl et nombre de Reynolds fixés. Ici encore les corrélations retenues montrent une augmentation du rapport $\mathcal{N}u/\mathcal{N}u_{p,Ranz}$ avec le chargement solide. Et ce, à faibles nombres de Reynolds comme pour les régimes advectifs (voir FIGS. 1.13b et 1.13a). Sur ces mêmes figures les valeurs prédites pour les chargements denses varient fortement d'une corrélation à l'autre. De même, lorsque la fraction volumique fluide se rapprochent de l'unité (*i.e.* sphère isolée), seules les corrélations de Gunn [92] et Deen [45] ne prévoient pas un rapport $\mathcal{N}u/\mathcal{N}u_{p,Ranz} \rightarrow 1$ pour les régimes faiblement advectifs.

Dans son étude entièrement numérique, Massol [149] simule l'écoulement et le transfert de

chaleur dans des systèmes de particules en interaction pour des réseaux structurés, et conclut que le rapport $\mathcal{N}u/\mathcal{N}u_{p,Ranz}$ augmente lorsque la fraction de phase dispersée augmente. Ceci tend à valider les corrélations proposées par les différents auteurs retenus. De plus, l'étude montre que ce même rapport diminue lorsque le nombre de Reynolds ou de Prandtl augmente, ce qui confirme les tendances prédites par l'ensemble des corrélations.

3 Modélisation multi-échelles des lits fluidisés

Les caractéristiques des transferts dans les lits fluidisés sont très dépendantes de leur dynamique aux différentes échelles. Cette grande complexité dans les échelles (particules millimétriques, unités industrielles pouvant aller jusqu'à 30m de haut) explique pourquoi le dimensionnement des unités se fait de manière empirique. Les récentes avancées en CFD et parallélisation des codes de calcul permettent la définition d'un nouvel outil pour la simulation numérique de tels systèmes. Simuler finement de si gros systèmes étant actuellement impossible, il a été imaginé de réaliser ces simulations via une approche multi-échelles [46, 48]. En effet, le manque de compréhension de la physique des écoulements particulaires denses, en particulier des interactions fluide-particules (loi de traînée [15, 101, 247, 249]), des interactions particules-particules (collision, agglomération [47, 97, 109, 130]) ou encore des interactions mur-particules [98], empêche la construction de modèles fiables pour les grandes échelles. À ceci s'ajoute la compréhension du phénomène de transfert de matière fluide-particules [48, 52, 205] et de transfert thermique fluide-particules, particules-particules ainsi que mur-particules dans ces écoulements [42, 249]. Trois différentes échelles ont été retenues : microscopique, mésoscopique et macroscopique.

3.1 l'échelle microscopique

C'est l'échelle qui permet la description la plus précise des phénomènes physiques. La résolution de l'écoulement et des transferts se fait sur des échelles plus fines que la taille de la particule : ce type de résolution est appelé simulation numérique directe ou simulation aux particules résolues (DNS ou PRS). Aucune loi de fermeture n'est nécessaire pour ce type de simulation puisque seule une condition de non glissement, de continuité du flux de chaleur/matière ou sur la valeur de la température/concentration, peut être imposée pour le fluide à la surface de la particule. Cette hypothèse est cependant souvent valide dans le cas des lits fluidisés. La gestion de la phase particulaire se base sur des méthodes aux éléments discrets (DEM) développées au début des années 70 [41]. Ces méthodes permettent de suivre les particules manière Lagrangienne par résolution des équations de Newton pour la dynamique et intègrent des modèles pour les collisions particule-particule et mur-particules (sphères dures ou sphères molles). Ce type de simulation permet de représenter jusqu'à quelques milliers de particules [48, 66, 168], permettant de prendre en compte les effets locaux et de groupes. Les dimensions des systèmes pouvant être simulées sont comprises entre $O(10^{-5})m$ et $O(10^{-2})m$.

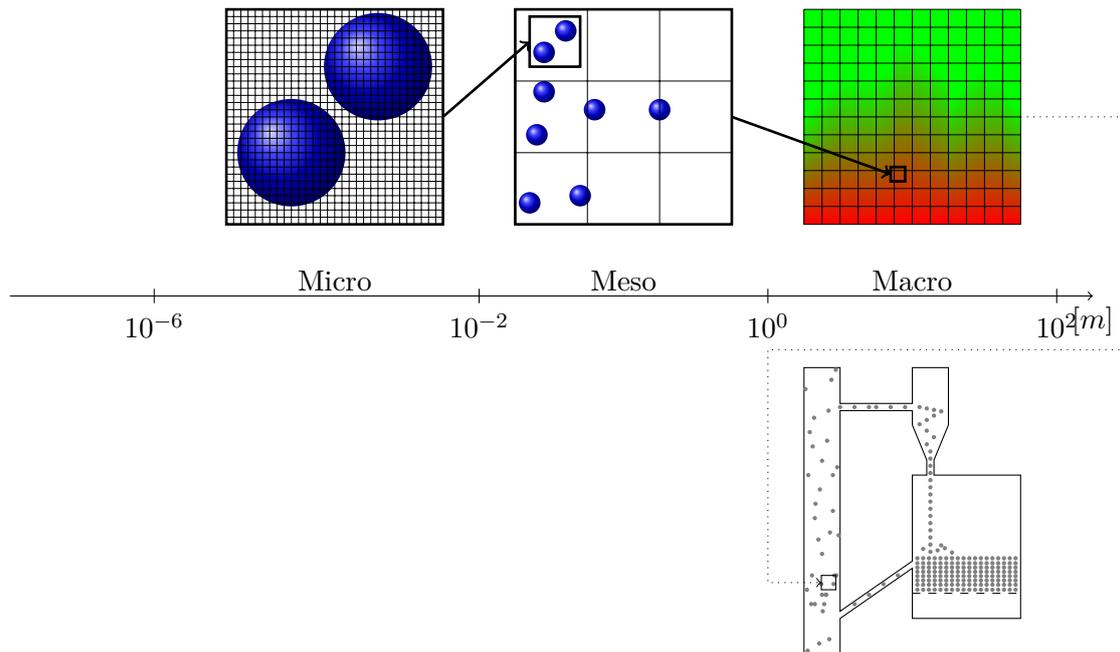


FIGURE 1.14 – Schéma de l'approche multi-échelle.

3.2 l'échelle mésoscopique

Introduite au début des années 90 [235] cette échelle propose de résoudre la partie fluide comme un milieu continu alors que les particules sont suivies tout au long de la simulation (DEM). Tout comme pour l'échelle microscopique, ces dernières peuvent être sphériques ou avoir une forme quelconque [183, 270]. L'échelle mésoscopique suppose de résoudre les équations pour le fluide de manière moyennée sur le domaine : on parle alors de modèle DEM–CFD. Le couplage entre le fluide et les particules se fait par l'ajout de lois de fermeture concernant l'échange de quantité de mouvement, les échanges de matière et thermique. Les gammes d'échelles pouvant être atteintes par la DNS et la DEM–CFD permettent une comparaison directe entre les deux modèles pour validation/amélioration [18, 67]. Les systèmes pouvant être investigués à l'échelle mésoscopique comprennent jusqu'à $O(10^8)$ ou $O(10^9)$ particules [183, 234] pour des dimensions comprises entre $O(10^{-3})m$ et $O(10^{-1})m$.

3.3 l'échelle macroscopique

Dans cette approche, la phase continue et la phase dispersée sont toutes deux vues comme des continua. Si la modélisation de la phase continue (gaz ou liquide) peut être réalisée à partir de modèles déjà connus en CFD pour des problèmes monophasiques, la mise en place d'un modèle fiable pour la phase solide est un défi. Plusieurs méthodes ont été proposées [8] avec de nombreuses formulations pour le tenseur des contraintes solides. La plupart de ces modèles repose sur la théorie cinétique des écoulements granulaires (KTFG) [58]. L'approche multi-échelles permet, grâce aux simulations aux échelles plus petites, d'extraire directement les

termes de fermeture de ces modèles (*i.e.* PRS \rightarrow DEM–CFD et DEM–CFD \rightarrow Euler–Euler). Pour ce type de simulation, des systèmes de l'ordre de $O(10^{-1})m$ à $O(10^1)m$ peuvent être simulés, ce qui correspond à des installations de taille pilote et industrielle. FIG. 1.14 représente les différentes échelles de la modélisation, leur étendue, leur inclusion et leur contributions respective à la compréhension des phénomènes physiques s'y déroulant.

4 Simulation des écoulements fluide–particule à l'échelle microscopique

Dans cette partie, une revue non-exhaustive des méthodes numériques développées au cours des dernières années pour résoudre les équations à l'échelle la plus fine (*i.e.* microscopique) est proposée. À cette échelle, la plateforme PELIGRIFF d'IFPEN utilise une méthode aux Multiplicateurs de Lagrange Distribués couplée à une méthode Domaine Fictif (DLM–FD). Les principes fondamentaux de la méthode utilisée sont présentés.

4.1 Méthodes à maillage adaptatif

Dans cette première catégorie, les inclusions formées par les particules sont extraites du domaine de simulation et les équations de Navier-Stokes sont uniquement résolues dans la partie fluide. De manière à coller au mieux au domaine et aux formes des particules, les maillages sont alors non-structurés. Dans le cas où les particules sont fixes, le maillage n'est généré qu'à l'initialisation de la simulation. Au contraire, si les particules / obstacles sont mobiles, un nouveau maillage doit alors être recalculé.

4.1.1 Euler–Lagrange sur grille non-structurée (ALE)

Deux descriptions sont usuellement utilisées en mécanique pour décrire le mouvement : Lagrangienne et Eulérienne. Le choix de l'une ou de l'autre de ces descriptions conditionne l'algorithme qui sera développé. Les algorithmes basés sur la première description (*i.e.* Lagrangienne) déplacent chaque nœud du maillage initial en fonction du mouvement de la particule solide associée. Ces algorithmes sont largement utilisés en mécanique des structures et permettent un suivi précis des interfaces, le traitement de toutes les formes de solide, mais sont inappropriés pour les fortes déformations. Au contraire, dans les algorithmes basés sur la seconde approche (*i.e.* Eulérienne), le maillage est fixe et les continua bougent sur la grille sans la modifier. Des grosses déformations peuvent ainsi être captées mais ces algorithmes nécessitent une méthode de définition et de suivi de l'interface. Ces algorithmes sont très fréquents en mécanique des fluides.

Du fait de la faiblesse de chacune des approches, une méthode hybride, Description Arbitraire Euler–Lagrange (ALE) a été développée. En mécanique des fluides, cette approche a été utilisée pour les écoulements particuliers dans des fluides Newtoniens ou non [105–107].

La méthode ALE permet ainsi de garder le caractère Lagrangien dans les zones où les mouvements sont faibles et d'adopter le caractère Eulérien là où il ne serait pas possible au maillage de suivre le fluide.

L'implémentation d'une méthode ALE nécessite un processus d'actualisation du maillage pour définir la vitesse et position des nœuds tout au long de la simulation [105]. Lorsque le maillage initial devient trop distordu, un nouveau maillage est généré, et les champs de l'écoulement sont projetés de l'ancien vers le nouveau maillage. Le remaillage peut être obtenu par deux techniques : la régularisation et l'adaptation. La régularisation vise à conserver un maillage régulier le plus longtemps possible et d'éviter la création d'enchevêtrements. Dans la seconde technique, un estimateur d'erreur est nécessaire pour concentrer les points du maillage dans les zones à forts gradients. Les techniques d'adaptation sont souvent préférées puisqu'elles permettent de forts déplacements des frontières sans augmenter la distorsion du maillage mais souffrent d'imprécisions sur les équations de conservation au moment de l'interpolation entre ancien et nouveau maillage. De leur côté, les méthodes d'interpolation (régularisation) surestiment les effets visqueux en introduisant une viscosité numérique pouvant devenir supérieure à celle du fluide.

L'avantage de telles méthodes réside dans ses capacités à traiter tous types d'inclusions dans le domaine fluide. De plus, le caractère conforme des maillages permet d'imposer les conditions limites directement sur la surface des inclusions. L'utilisation de la méthode ALE sur les écoulements particuliers reste marginale. Des simulations en 2D sur 320 cylindres, ou encore 1000 particules non sphériques [151] ainsi que des simulations 3D pour la sédimentation de 90 particules [107] sont référencées dans la littérature. Les capacités de ces méthodes pour la déformation de bulles ont aussi été démontrées [61]. Plus récemment, des simulations appliquées à la magnéto-hydrodynamique ont été réalisées [193].

4.1.2 Déformation du domaine spatial / Stabilisation spatio-temporelle (DSD/SST)

La méthode DSD/SST est initialement introduite par Tezduyar [226]. Le problème régit par les équations de Navier-Stokes est écrit sous sa forme variationnelle sur le domaine espace-temps. Ce formalisme permet d'inclure les variations spatiales du domaine directement dans l'écriture du problème et évite les étapes d'interpolation liées au remaillage. Cette formulation a été appliquée aux écoulements incompressibles à surface libre [227], aux écoulements sanguins [228] ou pour simuler le battement de drapeau [229].

4.2 Méthodes à maillage fixe

Au contraire, les méthodes à maillage fixe résolvent les équations de Navier-Stokes sur l'ensemble du domaine. La présence d'inclusions dans le domaine est prise en compte par le forçage des conditions limites à leur surface. La majorité des codes utilisés pour la simulation des écoulements dynamiques fluide–particules se range dans cette catégorie. L'utilisation d'une grille cartésienne fixe permet une implémentation facile des schémas numériques. La

parallélisation de ces codes est simple et donne de bonnes performances.

4.2.1 Méthodes de frontières immergées (IB)

Le concept de frontières immergées trouve sa source dans le désir de simuler sur une grille Cartésienne des objets de forme quelconque et ne s’adaptant pas nécessairement à celle de la grille. Le solide coupe alors cette dernière et la frontière fluide–solide devient alors immergée. Imposer une condition de non-glissement à la surface devient alors une chose complexe. Les premiers travaux traitant des frontières immergées sont ceux de Peskin en 1972 [175] pour simuler les écoulements sanguins dans le cœur. Cette idée, largement reprise par la suite, a été l’objet d’améliorations constantes par diverses équipes, si bien qu’aujourd’hui, nombreuses sont les variantes de cette méthode.

Le point clé des algorithmes IB est d’imposer la condition aux limites souhaitée sur la surface du solide. C’est aussi ce qui différencie les méthodes les unes des autres [158]. Dans les méthodes IB, les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement sont résolues sur une grille Eulérienne non conforme aux frontières et la condition aux limites est imposée via une modification des équations qui prend souvent la forme d’un terme de forçage. Cette condition de forçage est imposée au niveau des inclusions via des points Lagrangiens à leur surface.

Deux types de forçage existent : continu et direct (discret). Dans le premier, après avoir choisi la forme de la fonction de forçage, ce dernier est directement inclus dans les équations qui sont ensuite discrétisées et résolues sur l’ensemble du domaine (fluide + inclusions). Dans la seconde approche, les équations sont discrétisées et résolues sans prise en compte de la frontière. Ensuite, dans les cellules proches de la frontière, la discrétisation est ajustée pour tenir compte de la présence de l’inclusion (par interpolation). La forme de la fonction d’interpolation utilisée pour transférer des informations entre les deux grilles a été étudiée par Mittal [158].

Ces méthodes ont été largement utilisées et étudiées pour le comportement hydrodynamique avec des sphères [16, 239] et plus récemment pour des formes non régulières [269]. L’extension de ces méthodes IB aux transferts de chaleur en écoulement incompressible [45, 260] est plus récente et utilise des méthodes d’interpolation aux cellules fantômes ou des interpolations multi-quadratiques. Plus récemment, une extension aux écoulements compressibles a été proposée par Luo *et al.* [145].

4.2.2 Méthodes de Boltzmann sur réseau (LBM)

Issues de la théorie des gaz, et moyennant quelques linéarisations sur l’opérateur de collision, les méthodes de Boltzmann sur réseau résolvent la cinématique de fonctions de densités de particules en lieu et place des équations Navier-Stokes. Dans ces méthodes, les variables fluides sont remplacées par des fonctions de distribution. La présence de parois ou de parti-

cules est prise en compte à l’aide d’une méthode de réflexion [18]. L’avantage des équations de Boltzmann est de pouvoir dériver des méthodes pouvant résoudre tous types de problèmes : des écoulements raréfiés aux équations de Navier-Stokes. Ces méthodes sont souvent appelées modèles *DMQN*, où M traduit la dimension et N le nombre de distributions de vitesse utilisées ($N = 9$ en $M = 2$ dimensions, et $N = 15 - 27$ en $M = 3$ dimensions). Initialement mise en place pour des écoulements à phase dispersée [136], cette méthode relativement récente a beaucoup gagné en intérêt ces dernières années [99–101, 141, 213]. L’extension aux transferts thermiques n’est pas encore une question tranchée, notamment pour les écoulements compressibles [178]. Deux approches ont émergé pour construire de tels modèles : i) élargir les distributions de vitesses pour permettre l’isotropie et la conservation d’énergie [216] ii) ajouter un terme *ad-hoc* destiné à annuler l’anisotropie des distributions [179].

4.2.3 Techniques de Pénalisation (PT)

Les méthodes de pénalisation (ITPM) consistent à résoudre les équations de Navier-Stokes sur l’ensemble du domaine et d’imposer le caractère solide du milieu en jouant sur la viscosité après réécriture du tenseur des contraintes visqueuses. Ce tenseur des contraintes peut être écrit en introduisant les contributions de la compression, du cisaillement, de la rotation et de l’élongation [27]. L’intérêt d’une telle décomposition est de pouvoir pénaliser séparément chacun des termes de manière à imposer les contraintes associées.

De telles méthodes permettent un couplage complet entre le fluide et le solide et sont facilement implémentables. Des travaux sur des particules isolées ou non pour la validation des lois de traînée, la lubrification [185, 186] montrent le potentiel de ces méthodes. La simulation de 2133 particules en lit fluidisé a été réalisée et semble donner un bon accord avec les expériences [243]. L’efficacité numérique de ces méthodes reste le point majeur d’amélioration.

4.2.4 Multiplicateurs de Lagrange Distribués (DLM) Domaine Fictifs (FD)

Le forçage de la condition à l’interface fluide/solide sur une grille fixe peut aussi être réalisé par la méthode des multiplicateurs de Lagrange distribués. Ceci a été initialement montré par Glowinski [82] en supprimant les forces et tenseurs hydrodynamiques de la formulation faible des équations étendues au domaine entier (fluide + particules). L’écriture du problème sous forme variationnelle permet de ne pas introduire directement de terme de forçage dans les équations de conservation mais de réaliser le forçage via les multiplicateurs de Lagrange. L’avantage est de pouvoir étendre cette méthode à d’autres phénomènes comme les fluides non-Newtoniens. De plus, la contrainte via les points Lagrangiens impose directement le mouvement de corps rigide à la surface et dans les particules solides. Dans la formulation de Glowinski [82], les collisions entre particules ou entre une particule et une paroi sont autorisées mais sans recouvrement, en introduisant une force de répulsion.

Ces travaux sont ensuite repris par Patankar *et al.* [170] qui proposent de reformuler le mouvement de corps rigide dans les particules en un tenseur de déformation nul afin d’évi-

ter que la vitesse de la particule ne disparaisse de l'équation lorsque le rapport de densité fluide/particules est égal à 1. Cette nouvelle formulation revient à considérer deux fluides non-miscibles à la manière des techniques de pénalisation. Yu [267] étend ensuite cette méthode aux objets flexibles en remplaçant les équations de Newton pour le mouvement des corps rigides par les équations pour un solide déformable. Enfin, Yu *et al.* [268] développent encore cette méthode pour traiter le transfert de chaleur en suivant la même procédure que celle proposée par Glowinski [82]. Bien que la température affecte toutes les propriétés du fluide, seul son effet sur la masse volumique est pris en compte (hypothèse de Boussinesq).

L'écriture sous forme variationnelle est adaptée pour la mise en place de schémas aux éléments finis et est numériquement plus stable que les méthodes IB. L'intégration temporelle de ces équations par Glowinski [82] fait appel à une technique de découpage d'opérateurs de Marshuk-Yanenko qui a pour avantage de traiter séparément les opérateurs physique et numérique. C'est la méthode actuellement utilisée dans PELIGRIFF. Le comportement et la comparaison de différents découpages est proposée par Glowinski [82].

Dans la méthode proposée par Glowinski, le problème d'interaction fluide/solide est de type « selle de cheval » et est résolu par un algorithme des gradients conjugués d'Uzawa. Ceci permet d'obtenir les champs de vitesse et de multiplicateurs de Lagrange de manière itérative. Des améliorations au coût de calcul de cette étape ont été proposées par Patankar [169] ou Yu et Shao [267].

4.2.5 Raffinement de maillage adaptatif (AMR)

Dans cette catégorie de méthodes, le maillage cartésien est raffiné de manière dynamique aux endroits de l'écoulement nécessitant une meilleure résolution spatiale (discontinuité, gradients). Ces zones sont repérées à l'aide d'un critère représentant localement la précision de la solution. À partir du maillage initial, des sous-grilles sont ajoutées dans ces zones de manière à satisfaire le critère fixé sur la précision de la solution. Une étape d'interpolation est nécessaire pour transférer les informations de la grille initiale à la grille raffinée. Au contraire, une étape de moyenne est réalisée lorsque les sous-grilles sont retirées [17]. Suite aux premiers travaux de Berger et Olinger [17], ces méthodes ont été étendues et appliquées en astrophysique [115], pour des écoulements en milieux poreux [123], spray ou des écoulements viscoplastiques [39]. La définition des méthodes AMR est compatible avec les formulations à maillage fixe précédentes. Un couplage AMR/LBM est ainsi proposé [93]. De même, l'étude du transport de particules en conduite ou de la perte de charge à travers un lit de particule à l'aide d'une méthode AMR/DLM–FD a été menée [120, 121]. Des méthodes AMR/IB pour les écoulements compressibles ou non sont proposées pour des configurations simples [119, 194, 242].

5 Plateforme PeliGRIFF

La plateforme PELIGRIFF (Parallel Efficient Libray for GRains in Fluid Flow) [247, 248] est un outil de simulation numérique développé au sein d'IFPEN et permettant de simuler des écoulements fluide-particules aux échelles microscopiques et mésoscopiques. Cette plateforme est couplée à un solveur granulaire Grains3D permettant le suivi Lagrangien des particules et le traitement des collisions. La partie microscopique du code se classe dans les méthodes à maillages fixe et utilise l'approche DLM/FD pour les simulations fluide-particules. Cette formulation permet de traiter toutes formes de particules et a déjà été appliquée avec succès pour des cylindres [60], cubes, tétraèdres [245] ou encore trilobes et quadrilobes [183]. L'extension aux transferts de matière et de chaleur sont plus récents [268].

Les solveurs d'équations différentielles partielles (PDE) utilisés dans PELIGRIFF sont empruntés à la librairie open-source PELICANS. Les parties d'algèbre linéaire sont traitées à l'aide des bibliothèques PETSc, utilisant elles-mêmes les packages BLAS, et LAPACK. Le pré-conditionnement des matrices utilise la librairie HYPRE.

5.1 Modèle à l'échelle microscopique

5.1.1 Hydrodynamique

Cette partie est dédiée à un bref rappel de la méthode DLM/FD utilisée à l'échelle la plus fine. La formulation DLM/FD repose sur l'approche initialement proposée par Glowinski [82]. Dans le cadre d'écoulement incompressible newtonien, la formulation variationnelle des équations de conservation est écrite équation 1.67. Soit Ω un domaine de \mathbb{R}^d de dimension $d \in \{2, 3\}$ et de frontière $\partial\Omega$. De plus, le nombre de particules P_i contenues dans le système Ω est noté N_{part} . Les équations suivantes sont rendues sans dimensions par les normalisations suivantes : L_{ca}^* pour la longueur, V_{ca}^* pour la vitesse, L_{ca}^*/V_{ca}^* pour le temps, $\rho_c^* V_{ca}^{*2}$ pour la pression, V_{ca}^{*2}/L_{ca}^* pour l'accélération de la gravité, $\rho_c^* V_{ca}^{*2}/L_{ca}^*$ pour les multiplicateurs de Lagrange et $\rho_c^* V_{ca}^{*2} L_{ca}^{*2}$ pour les forces de contact. Enfin, $T_p^* - T_{c,0}^*$ est utilisé pour normaliser la température et $\rho_c^* C_{p,c}^* V_{ca}^* (T_p^* - T_{c,0}^*)/L_{ca}^*$ pour les multiplicateurs de Lagrange sur la température. Dans ces notations, T_p^* est la température de référence des particules, et $T_{c,0}^*$, celle du fluide. Les indices «ca» définissent une grandeur caractéristique et «c» celle de la phase fluide.

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} - \boldsymbol{\lambda}, \text{ sur } \Omega \quad (1.67)$$

$$(\rho_r - 1)V_p \frac{d\mathbf{U}}{dt} - \int_{\mathcal{P}} \boldsymbol{\lambda} dx = \sum_j \mathbf{F}_{pp,j} + (\rho_r - 1)V_p \mathcal{F}_r \frac{\mathbf{g}^*}{|\mathbf{g}^*|}, \text{ sur } \mathcal{P} \quad (1.68)$$

$$(\rho_r - 1)(\mathbf{I}_p \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{I}_p \cdot \boldsymbol{\omega}) - \int_{\mathcal{P}} \mathbf{r} \times \boldsymbol{\lambda} dx = \sum_j \mathbf{R}_j \times \mathbf{F}_{pp,j}, \text{ sur } \mathcal{P} \quad (1.69)$$

$$\mathbf{u} - (\mathbf{U} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) = 0, \text{ sur } \mathcal{P} \quad (1.70)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \text{ sur } \Omega \quad (1.71)$$

Dans cette formulation, la particule j est repérée par son volume $V_p = M_p^*/(\rho_p^* L_{ca}^d)$ (M_p^* est la masse d'une particule), sa vitesse de translation \mathbf{U}_j et de rotation $\boldsymbol{\omega}_j$. Son moment d'inertie est noté $\mathbf{I}_p = \mathbf{I}_p^*/(\rho_p^* L_{ca}^{d+2})$, \mathbf{r} désigne le vecteur position par rapport au centre de gravité de la particule et \mathbf{R} le vecteur reliant le centre de la particule et le point de contact. \mathbf{u} , p correspondent à la vitesse et la pression de la phase fluide. De même, $\rho_r = \rho_c^*/\rho_p^*$, avec ρ_c^* et ρ_p^* les masses volumiques de la phase continue et des particules, \mathbf{g} le vecteur d'accélération lié à la gravité. Les multiplicateurs de Lagrange destinés au forçage sur les particules sont écrits $\boldsymbol{\lambda}$. Enfin, $\mathbf{F}_{pp,j}$ correspond aux forces de contacts.

5.1.2 Transferts thermiques

L'extension du modèle DLM/FD aux transferts thermiques a déjà été implémenté [42, 249]. La formulation complète fait alors apparaître le couplage avec le champ de température via les termes d'expansion thermique et de Grashoff. En suivant l'hypothèse de Boussinesq, le changement de température du fluide impacte uniquement la masse volumique du fluide et des particules. Cette hypothèse suppose l'évolution thermique linéaire avec le changement de température [42, 249]. Ces termes n'étant pas pris en compte dans le reste de ce travail, leurs contributions sont donc retirées des équations.

Le problème DLM-FD pour le champ de température est rappelé équation 1.72. De manière similaire à la quantité de mouvement, les multiplicateurs de Lagrange sont notés λ_T .

$$\frac{\partial T_c}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T_c = \frac{1}{RePr} \nabla^2 T_c - \lambda_T, \text{ sur } \Omega \quad (1.72)$$

$$T_c = T_p, \text{ over } \mathcal{P} \quad (1.73)$$

Les équations couplées font apparaître deux groupes de nombres adimensionnels : les

nombres adimensionnels caractéristiques de l'hydrodynamique :

$$\text{Nombre de Reynolds } \mathcal{R}e = \frac{\rho_f^* V_{ca}^* L_{ca}^*}{\mu^*} \quad (1.74)$$

$$\text{Nombre de Froude } \mathcal{F}r^{-1} = \frac{g^* L_{ca}^*}{V_{ca}^{*2}} \quad (1.75)$$

$$\text{Rapport de masses volumiques } \rho_r = \frac{\rho_p^*}{\rho_c^*} \quad (1.76)$$

$$\text{Nombre de Stokes } \mathcal{S}t_k = \frac{\rho_r \mathcal{R}e}{18} \quad (1.77)$$

$$(1.78)$$

Les nombres adimensionnels en relation avec les transferts thermiques :

$$\text{Nombre de Prandtl } \mathcal{P}r = \frac{\mu^* C_{p,c}^*}{k_c^*} \quad (1.79)$$

$$\text{Nombre de Péclet } \mathcal{P}e = \mathcal{R}e \mathcal{P}r \quad (1.80)$$

$$(1.81)$$

Il est porté à l'attention du lecteur pour la suite que dans les configurations fixes, certains termes sont nuls dans ces équations. Le système résolu est alors présenté *Chapitre 2*.

5.1.3 Schéma numérique

Les méthodes de résolution des problèmes couplés ont déjà été discutées et publiées dans de précédents travaux [42, 247–249, 268]. Pour plus de détails, le lecteur est prié de se reporter à cette littérature. Les principales informations sur la résolution des problèmes couplés sont :

- Discrétisation spatiale en volumes finis sur grille décalée d'ordre 2. Les composantes des vitesses sont centrées sur les faces des cellules tandis que les champs de température et de pression sont localisés aux centres des cellules. Les termes diffusifs dans les équations de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie sont discrétisés respectivement à l'aide d'un schéma centré et un schéma TVD.
- La discrétisation temporelle suit un algorithme de découpage d'opérateurs de Marchuk-Yanenko d'ordre 1, ce qui permet de traiter le problème complet en une série de sous-problèmes suivant :
 1. Problème de Navier-Stokes
 2. Problème aux domaines fictifs pour la quantité de mouvement
 3. Problème aux domaines fictifs pour le transfert de chaleur
- Discrétisation temporelle des termes de diffusion et de transport dans les équations de conservation de la quantité de mouvement et d'énergie respectivement à l'aide d'un schéma de Crank-Nicholson semi-implicite d'ordre 2 et un schéma d'Adams-Bashforth explicite d'ordre 2.

- Un algorithme de projection L2 est utilisé pour résoudre les équations de Navier-Stokes.
- Une méthode de reconstruction quadratique est utilisée dans le problème au domaine fictif pour les points Lagrangiens à la surface des particules.

5.2 Modèle à l'échelle mesoscopique

Initialement développé par Bernard [18] dans la plateforme PELIGRIFF, ce modèle a été complété en suivant les travaux de Capecelatro et Desjardins [31] ainsi que par l'ajout de stochastique hydrodynamique [67]. La formulation du modèle DEM–CFD s'inspire des travaux d'Anderson et Jackson [8]. Ici, les équations de Navier-Stokes sont moyennées spatialement sur des cellules dont le volume est d'un ordre de grandeur supérieur à celui d'une particule [18]. Le fluide est ici considéré Newtonien et incompressible. Les équations de continuité et de quantité de mouvement sont rappelées équations 1.83 et 1.82. Les particules suivent quant à elles les équations de Newton-Euler décrites *Section 5.3*. Les informations relatives aux transferts thermiques sont disponibles *Chapitre 4*.

$$\frac{\partial \alpha_c}{\partial t} + \nabla \cdot \alpha_c \mathbf{u} = 0 \quad (1.82)$$

$$\frac{\partial \alpha_c \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_c \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla P - \mathbf{F}_{cp} + \frac{1}{\mathcal{R}e} \nabla \cdot (2\alpha_c \mathbf{D}) \quad (1.83)$$

La fraction volumique de fluide est notée α_c et \mathbf{D} correspond au tenseur des contraintes. La force hydrodynamique fluide–particule est notée \mathbf{F}_{cp} . Cette force provient de l'échange de quantité de mouvement à la surface de la particule. Dans le cas DEM–CFD, une loi de fermeture est utilisée pour définir l'interaction fluide–solide. Cette force est souvent la somme de différentes contributions (traînée, masse ajoutée, Magnus, Saffman, Basset), mais il est admis [66] que la force de traînée est celle qui domine.

5.3 Solveur granulaire

Le solveur Grains3D est un outil massivement parallèle destiné à la simulation des milieux granulaires. Il est basé sur une méthode aux éléments discrets (DEM) initialement développée par Cundall et Strack [41]. La détection des collisions se fait de manière géométrique pour les particules sphériques. Un algorithme de type GJK est utilisé pour les autres formes de particules [182]. La dynamique de chaque particule est déterminée par application de la seconde loi de Newton.

$$\rho_r V_p \frac{d\mathbf{U}}{dt} = \mathbf{F}_g + \mathbf{F}_{pp} + \mathbf{F}_{cp} \quad (1.84)$$

$$\rho_r (\mathbf{I}_p \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{I}_p \boldsymbol{\omega}) = \mathbf{T}_{pp} + \mathbf{T}_{cp} \quad (1.85)$$

Ici, les forces appliquées aux particules dans l'équation 1.84 sont divisées en trois contributions : les forces à distance (ici, la flottabilité) F_{ar} , les forces de contact F_{pp} et les forces hydrodynamiques (traînée, Saffman, histoire, etc . . .) regroupées sous le terme F_{cp} . De même, les moments induits par les contacts sont notés T_{pp} et T_{cp} pour les actions hydrodynamiques (équation 1.85).

5.3.1 Modélisation des forces de contact

Deux approches sont couramment utilisées pour représenter les collisions entre particules : le modèle de sphères dures et le modèle de sphères molles. Dans le premier les collisions sont considérées binaires, élastiques, ponctuelles et instantanées. Le caractère ponctuel et instantané des collisions nécessite l'utilisation d'un pas de temps relativement faible [18]. L'état d'une particule après collision résulte de la conservation de la quantité de mouvement et du moment cinétique. La dissipation d'énergie cinétique durant la collision se fait via l'introduction d'un coefficient de restitution. De même, les lois de Coulomb et de frottement solide permettent de définir complètement le choc entre deux particules.

Le modèle de sphères molles tire son nom de la capacité des objets à se recouvrir légèrement durant le contact. Ceci traduit la déformation du solide au cours du contact. La résolution du contact s'effectue alors sur plusieurs pas de temps. Cette méthode a été proposée initialement par Cundall et Strack [41]. Plusieurs expressions de la force de répulsion interparticulaire ont été répertoriées dans la littérature [208]. Tsuji [235] et plus tard Capecelatro [31] ou Pepiot et Desjardins [174] ont appliqué cette approche pour la simulation de lits fluidisés en 2D et 3D. Zhou *et al.* [270], utilisent aussi ce type de modèle pour la fluidisation de particules ellipsoïdales. Limtrakul *et al.* [142] ont couplé ce modèle avec le transfert de matière en lit fluidisé. Le couplage avec le transfert thermique en écoulement pneumatique ou en lits fluidisés a aussi été réalisé [56, 139]. Enfin, Karimi *et al.* [122] ont réalisé le couplage massique et thermique pour l'étude de la polymérisation du polyéthylène en lit fluidisé. L'étude du nombre de partenaires durant les collisions en lits fluidisés a récemment fait émerger l'introduction d'un modèle hybride sphères dures / sphères molles [25].

Le solveur Grains3D utilise un modèle de type sphères molles pour le traitement des collisions particule-particule et mur-particule. Les contacts sont modélisés à l'aide de trois forces :

1. Une force de répulsion élastique :

$$\mathbf{F}_{el}^* = k_n^* \delta^* \mathbf{n}_{ij} \quad (1.86)$$

Cette force est similaire à celle d'un ressort de constante de raideur k_n^* . Le recouvrement des particules i et j est noté δ^* et \mathbf{n}_{ij} le vecteur reliant le centre des deux particules.

2. Une force de dissipation visqueuse :

$$\mathbf{F}_{dn}^* = -2\gamma_n^* M_{ij}^* \mathbf{U}_n^* \quad (1.87)$$

La masse réduite des particules i and j est définie par $M_{ij}^* = \frac{m_i^* m_j^*}{m_i^* + m_j^*}$. La vitesse relative entre les particules est notée \mathbf{U}_n^* . La valeur du coefficient de l'amortisseur γ_n^* est calculée à partir du coefficient de restitution normal e_n ([246]) $\gamma_n = \frac{\omega_0 \ln e_n}{\sqrt{\pi^2 + (\ln e_n)^2}}$.

3. Une force de friction tangentielle :

$$\mathbf{F}_t^* = -\min\{\mu_{Co} |\mathbf{F}_n^*|, |\mathbf{F}_{dt}^*|\} \mathbf{t}_{ij} \quad (1.88)$$

Cette force traduit les frottements de Coulomb avec μ_{Co} , le coefficient de friction dynamique. $\mathbf{F}_{dt}^* = -2\gamma_t^* M_{ij}^* \mathbf{U}_t^*$ est la force dissipative de frottement, $\mathbf{F}_n^* = \mathbf{F}_{el}^* + \mathbf{F}_{dn}^*$ représente la force normale au contact. De la même manière, γ_t^* et \mathbf{U}_t^* représentent respectivement le coefficient dissipatif de friction tangentiel et la vitesse relative tangentielle. Enfin \mathbf{t}_{ij} est le vecteur unité tangent au contact.

Les contributions des forces de collision agissant sur une particule sont ensuite sommées sur l'ensemble des partenaires de la particule i .

$$\mathbf{F}_{pp,i}^* = \sum_j \mathbf{F}_{pp,ij}^* = \sum_j (\mathbf{F}_{el}^* + \mathbf{F}_{dn}^* + \mathbf{F}_t^*)_{ij} \quad (1.89)$$

5.3.2 Modélisation des forces hydrodynamiques

En simulations PRS, aucun modèle n'est nécessaire pour tenir compte de l'action du fluide sur les particules. Le champ fluide étant résolu au niveau de la particule, cette force est directement calculée par sommation de la contribution des points DLM/FD (voir équations 1.90, 1.91, et 1.92, pour le détail des simulations microscopiques, voir *Section 5.1*).

$$\mathbf{F}_{cp} = \int_{\mathcal{P}} \boldsymbol{\lambda} dx + V_p \frac{d\mathbf{U}}{dt} \quad (1.90)$$

$$\mathbf{T}_{cp} = \int_{\mathcal{P}} \mathbf{r} \times \boldsymbol{\lambda} dx + \mathbf{I}_p \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{I}_p \boldsymbol{\omega} \quad (1.91)$$

$$Q_{cp} = \int_{\mathcal{P}} \boldsymbol{\lambda}_T dx \quad (1.92)$$

À l'échelle mésoscopique au contraire, l'interaction fluide-particule ne peut être directe-

ment calculée et un terme de fermeture est nécessaire. La formulation des lois de traînée a été largement discutée par [18, 149]. Parmi ces lois, celles proposées par Di Felice [54] et Beetstra [16] ont été retenues pour les simulations DEM–CFD [67]. Ces expressions proposées dans la littérature pour une particule isolée ou pour des régimes plus denses, sont généralement normalisées par la force en régime de Stokes pour une particule isolée. Dans le cas d’écoulement à phase dispersée, deux paramètres peuvent être retenus pour exprimer la force de traînée, la fraction volumique de fluide, et le nombre de Reynolds particulaire : $\mathbf{F}_{cp}^*(\alpha_c, \mathcal{Re}_S)$.

$$\mathbf{F}_{cp}^* = \frac{1}{2} C_{d,SN} \rho_c^* \frac{\pi d_p^{*2}}{4} |\mathbf{u}^* - \mathbf{U}^*| (\mathbf{u}^* - \mathbf{U}^*) \alpha_c^{-\gamma} \quad (1.93)$$

$$\gamma = 3.7 - 0.65 \exp\left(\frac{-(1.5 - \log \mathcal{Re}_S)^2}{2}\right) \quad (1.94)$$

$$C_{d,SN} = \frac{24}{\mathcal{Re}_S} (1 + 0.15 \mathcal{Re}_S^{0.687}) \quad (1.95)$$

Dans son étude, Di Felice [54] utilise comme référence la force de traînée agissant sur une particule isolée proposée par Schiller–Nauman [202] (voir équation 1.95). La forme en $\alpha_c^{-\gamma}$ introduite par Wen et Yu définit la présence des particules environnantes. Cette expression souffre cependant de lacune pour les régimes denses [18]. Les corrections apportées par Di Felice [54] permettent de mieux rendre compte des comportements aux régimes denses (voir équations 1.93 et 1.94). D’autres formes de γ peuvent être trouvées pour des régimes fortement advectifs [261]. Pour des systèmes liquide–liquide ou solide–liquide, Mostoufi [160] propose d’introduire le nombre d’Archimède dans l’expression de γ .

$$\mathbf{F}_{cp}^* = 3\pi\mu d_p^* (\mathbf{u}^* - \mathbf{U}^*) g(\alpha_c, \mathcal{Re}_S) \quad (1.96)$$

$$g(\alpha_c, \mathcal{Re}_S) = \frac{10(1 - \alpha_c)}{\alpha_c^2} + \alpha_c^2 (1 + 1.5\sqrt{1 - \alpha_c}) + \frac{0.413\mathcal{Re}_S}{24\alpha_c^2} \left[\frac{\alpha_c^{-1} + 3\alpha_c(1 - \alpha_c) + 8.4\mathcal{Re}_S^{-0.343}}{1 + 10^{3(1 - \alpha_c)} \mathcal{Re}_S^{-(1+4(1 - \alpha_c))/2}} \right] \quad (1.97)$$

La loi proposée par Beetstra [16] est issue de simulations numériques (voir équation 1.97). Son expression repose sur la formulation de la loi de traînée d’Ergun [63] à partir du saut de pression à travers un lit fixe. Cette loi a depuis été étendue pour des systèmes bi-disperses [15, 162]. Une expression proposée par Huilin [108] propose de combiner les approches de Wen et Yu [254] et d’Ergun [63]. Enfin d’autres types de modèles, permettant d’étendre la valeur de la force de traînée à des systèmes liquide–liquide, liquide–solide ou liquide–gaz, introduisent une viscosité de mélange $\mu_m(\alpha_p, \mu_c, \mu_d)$ [13, 14, 111]. La force de traînée est alors calculée à partir du nombre de Reynolds de mélange, $\mathcal{Re}_m = \frac{\rho_c^* d_p^* \alpha_c |\mathbf{u}_c^* - \mathbf{u}_p^*|}{\mu_m^*}$.

Réseaux fixes de particules

Sommaire

1	Introduction	56
2	Numerical model	60
2.1	Mathematical description	61
2.2	Computational scheme	62
3	Detailed validation of the numerical approach	62
4	Analysis of heat transfer in random arrays of spheres	68
4.1	Nusselt number from 1D heat balance	70
4.2	Filtering flow properties by local averaging around particles	72
4.3	Wake effect on local heat transfer	86
5	Discussion and perspectives	90
	Appendices	92
2.A	Accuracy of our DLM/FD-FV/SG method for heat transfer in single sphere configurations	92
2.A.1	A single sphere in a large domain of quiescent fluid	92
2.A.2	On the distribution of Lagrangian points over the spherical particle surface	93
2.A.3	Flow past a single sphere in heat transfer regimes from diffusive to strongly convective	94
2.A.4	Forced convection over an in-line array of 3 spheres in an unbounded domain	97
2.B	Intéraction linéaire de trois sphères : Effet sur l'écoulement et les transferts	101
2.B.1	Préliminaires : Caractérisation de la zone de recirculation derrière une sphère isolée	101
2.B.2	Alignement de 3 sphères : Propriétés du sillage	102
2.B.3	Une unique particule thermiquement active	108
2.B.4	Jet linéaire de 3 sphères : données complémentaires	112
2.C	Études complémentaires sur les lits fixes de particules	120
2.C.1	Extraction d'une loi de fermeture pour le transfert thermique à partir des simulations résolues	120
2.C.2	Une unique particule thermiquement active dans une lit de particules	122
2.C.3	Cas des interactions mur-particules dans des réseaux fixes de particules.	123

This chapter has been submitted for publication to *International Journal of Multiphase Flow* : F. Euzenat, A. Hammouti, P. Fede, E. Climent, A. Wachs, Filtering Particle-resolved simulation data to determine local heat transfer coefficients in a flow through a fixed bed of spherical particles.

We use Particle-Resolved (Direct Numerical) Simulation (PR-DNS or PRS) to investigate momentum and heat transfer in the incompressible flow of a Newtonian fluid through a fixed bed of mono-disperse spheres. We first assess the accuracy of our PRS code based on a Discrete Lagrange Multiplier / Fictitious Domain (DLM/FD) - Finite Volume / Staggered Grid (FV/SG) method on configurations of growing complexity in order to derive guidelines in terms of mesh size for acceptable spatial accuracy of the computed solution. Then, we perform a set of simulations with various porosities ranging from 0.5 to 0.9, Reynolds numbers ranging from 18 to 72 and Prandtl numbers ranging from 1 to 5 and analyzed computed results. All cases are hence in the moderately convection dominated thermal regimes, i.e., Peclet numbers from 18 to 360. Data are locally averaged using different filters. Using simple averages in layers perpendicular to the streamwise direction, we compare locally averaged PRS data to a classical 1D heat transfer model and show that average axial dispersion is required in the 1D model, especially at low Reynolds numbers. Then, we use a collection of different filters centered at each particle mass center and study the effect of the mathematical form of the filter as well as of the filter support size on the particle Nusselt number distribution. While both mathematical form and support size have a limited effect of the average particle Nusselt number, the width of the distribution, i.e., the standard deviation, is strongly influenced by the filter support size. This observation has important consequences for the derivation of new transfer coefficient correlations that incorporate information about the actual particle microstructure beyond the local average porosity.

1 Introduction

Process units involving heat transfer between a fluid phase and a solid dispersed phase are ubiquitous in many sectors of industry [135]. Modeling heat transfer in a reliable fashion in these industrial systems constitutes a key element to design, operate and maintain them. The first step towards an enhanced understanding of heat transfer in particle-laden flows is to quantify the amount of heat that fluid and particles exchange at the scale of a particle. Heat exchange is characterized dimensionlessly by the Nusselt number. Thus, the past decades have seen the development of closure laws in the form of Nusselt number correlations through experimental and numerical studies [72, 92, 187, 214]. Initially developed for a single isothermal sphere immersed in a forced convection flow [187, 256], other authors suggested correlations involving natural convection effects related to density changes [264]. Along with theoretical considerations, the early work of Ranz and Marshall [187] relates the Nusselt number (Nu) to two dimensionless numbers : the Reynolds number (Re) and the Prandtl number (Pr). As well known from any classical Fluid Mechanics textbook, Reynolds and Prandtl numbers quantify the competition between inertial effect and viscous effect, and between momentum diffusivity and thermal diffusivity, respectively.

Another important dimensionless number in heat transfer is the Péclet ($Pe = RePr$) number that characterizes the ratio of convective heat transfer over diffusive heat transfer. Some authors thereby chose to derive correlations in which Nu is a function of Re and Pe [36, 72] instead of Re and Pr . Although the pioneering correlation suggested by Gunn in 1978 [92] applies to systems with solid volume fractions α_d ranging from infinitely dilute to packing and recent works have challenged and/or attempted to enhance this correlation [224], the extension of the numerous existing closure laws for a single sphere in an unbounded domain to dense multi-particle systems is still an open question. In particular, the detailed knowledge of local interactions requires additional attention.

The main limitation of experimental studies is their intrinsic inability to properly measure local features of the flow, i.e., features at the particle scale. In order to overcome this problem, classical heat transfer models describe fluid-particles systems as a whole. These models are often able to predict reasonably well the mean heat exchange in the system [135] but may exhibit large deviations with the actual heat exchange at the local particle scale. Computational Fluid Dynamics (CFD) is a powerful tool to improve our comprehension of fluid-solid transfer mechanisms. The recent progress in numerical methods, parallelization and available computing power make CFD a reliable and mature tool to investigate fluid-particle systems [45, 52, 73]. Among the assorted computational methods for particle-laden flows, Particle Resolved Simulations (PRS) supply detailed velocity and temperature computed solutions at the local particle scale. This precious detailed local information allows for an in-depth comprehension of fluid-particle heat transfer [215]. PRS-based numerical tools have proven to be reliable in the prediction of momentum transfer in both dispersed and dense particle-laden flows [16, 117]. These PRS methods have been easily extended to compute heat (or mass) transfer as conceptually the momentum conservation equation and the energy (or chemical specie mass) conservation equation have the same mathematical form. First applied to convective heat/mass transfer from a single immersed particle in a large domain [73, 260], the use of PRS to study heat transfer in dense particle-laden flows recently gained a substantial interest [49, 214, 215, 224]. Some of these works as, e.g., [49, 224], have shown an acceptable or even satisfactory agreement with experimentally derived correlations as, e.g., Gunn's correlation [92].

PRS methods can be classified into two families of methods : (i) body-fitted mesh methods and (ii) fixed mesh methods. The former family of methods has been used both when the system comprises fixed solid obstacles [11, 195] and when the system comprises moving solid bodies and/or boundaries [61, 107, 193]. It is particularly well suited to fixed solid obstacles as the complicated unstructured mesh is generated only once at the start of the computation. However, some body-fitted mesh methods as the Arbitrary Eulerian-Lagrangian (ALE) method have also been successfully applied to the solution of hundreds of moving particles [107]. Because the mesh always fits solid bodies and boundaries, implementing boundary conditions is straightforward. The main advantage of body-fitted mesh methods is thereby their ability to accurately compute momentum, heat and mass boundary layers as the mesh can be locally refined in these regions of the flow. Unfortunately, the re-meshing and interpolation cost associated to moving solid bodies and boundaries render these methods computationally inefficient (especially in 3D) and unsuitable for fluidized beds or other similar systems with freely moving particles. In the latter family of methods, a constant fixed Cartesian mesh is considered over the whole computation. This choice is mainly motivated by the need to design a computational method that eventually scales well on large

supercomputers. The complexity of the computational model is then transferred to the application of boundary conditions at the surface of the dispersed particulate phase and the modelling of the fluid as a rigid body in regions of the fluid domain occupied by solid bodies. The Immersed Boundary method (IBM) [175] uses Lagrangian points at the particle surface and enforce boundary conditions at the particle surface only by the introduction of an additional forcing term [239]. The accuracy of the computed solution essentially relies on the selected type of interpolation technique (or projection kernel) from Eulerian to Lagrangian nodes and vice-versa [49, 260]. IBM has been straightforwardly extended to examine heat transfer in both dilute and dense particle-laden flows [45, 224]. Another popular computational method, the Lattice Boltzmann method (LBM), solves advection–collision steps of velocity and temperature probability density functions, instead of the corresponding classical conservation equations. At the solid boundaries, a bounce-back condition [136] (or its improved version [153]) scatters back distribution functions into the fluid. LBM has been successfully applied to many particle-laden flow problems, including flows with heat transfer [125, 132]. Finally, the Distributed Lagrange Multiplier / Fictitious Domain (DLM/FD) method introduced by [82] solves the variational form of the combined Navier-Stokes/Newton's equations. Conceptually similar to IBM, the DLM/FD method computes the forcing term in an implicit way using Lagrange multiplier. The method has also been easily extended to heat transfer [42, 249, 268]. Although powerful, using a fixed mesh is both an advantage and a drawback. It is an advantage for parallel computational performance as fixed-mesh methods are generally fast and scale well on large supercomputers. It is a drawback as the mesh cannot be dynamically refined, when necessary, in regions of strong gradients as boundary layers to accurately capture flow features. Adaptive Mesh Refinement (AMR) based methods are a promising alternative computational technique that exhibits flexibility and computational performance. When combined to one of the aforementioned fixed-mesh methods, it becomes very powerful for particle-laden flows [93, 121, 194]. In fact, AMR allows for dynamic spatial grid refinement at desired locations without the heavy computational cost of fully deforming and/or regenerating an unstructured grid. Also, the data structure of the quadtree/octree mesh can be naturally used to speed up the solution of linear systems in a geometric multigrid fashion [177].

1D models represent the classical approach to study fluid-particle heat transfer in a fixed bed of particles. These models are obtained by writing a heat balance across a bed slice perpendicular to the mean flow. The axial conduction term in the fluid phase is often neglected either for simplicity or due to a lack of knowledge of how to close the axial conduction term [135]. This formulation of the heat balance without axial conduction in the fluid was used in most of early works [104, 135]. Neglecting axial dispersion can lead to significant discrepancies in prediction of mean Nusselt number values. At low Reynolds numbers, these discrepancies can be as large as one or two orders of magnitude [81]. As a result, many authors integrated axial dispersion in the heat balance in an attempt to improve 1D models [90, 103, 250, 251]. The challenge, then, is related to the proper estimation of the axial dispersion coefficient [62, 157]. Experimental techniques such as frequency response or pulse/step input supply modeling information to estimate the magnitude of the axial dispersion coefficient [50]. Enhanced 1D models with axial dispersion generally enable one to capture the significant decay of the Nusselt number at low Reynolds numbers [250] that 1D models without axial dispersion exhibit. Assorted valid closures for axial dispersion lead to predictions with 20% difference [50], an uncertainty that is deemed to be acceptable for a closure. As 1D models are homogenized models by essence, the Nusselt number predicted by these 1D

models only defines the effective behavior of the bed [81]. Among many closure laws for fluid-solid heat transfer available in the literature, see, e.g., [83, 135], a particular interest has been given to the theoretical study of Gunn [92]. The transient coupled fluid-heat transfer problem is solved on a succession of cylindrical pipes. The diameter of these pipes follows a probability density function according to the bed porosity. Four limiting cases for the Nusselt number are then used to close the problem [92]. Gunn's correlation is certainly the reference in the scientific literature and in engineering practices and has been shown to perform reasonably well in a wide range of flow regimes, i.e., a wide range of Re and Pr . Note that Gunn's correlation can also be used for particle-fluid mass transfer in the case of mass-transfer-limited chemical reaction at the particles surface, i.e., the chemical specie concentration is imposed constant in space and time at the particle surface [48].

Recent works based on PRS results have put the classical 1D closure laws to the test [45, 49]. Both PRS results for mono-disperse and bi-disperse systems showed good agreement with the literature 1D closure laws. In [45], Deen *et al.* propose a modification of Gunn's correlation [92] for Reynolds numbers around $Re = 10$ based on their PRS results. One may also notice the omission of thermal dispersion in the 1D model used by Deen *et al.* [45]. Axial dispersion from Wakao *et al.* [251] shows its relevance to fit the classical Nusselt number correlations for $40 \leq Re \leq 100$ as noticed by Kruggel *et al.* [132]. Municchi and Radl [162] use the Delgado axial dispersion correlation [50] to define a saturation length used to compute the Nusselt number. Their results match the correlation of Deen *et al.* [45]. Moreover, Tenneti *et al.* followed by Sun [214, 215] use thermally fully developed flows through periodic arrays of fixed spheres. A correlation [214] valid for $1 \leq Re \leq 100$ and $0.1 \leq \alpha_d \leq 0.5$ is then proposed. The relative impact of axial dispersion, pseudo-turbulent heat flux and convection on the overall heat transfer is examined [215].

Momentum, respectively heat, transfer classical correlations assume the existence of an undisturbed velocity, respectively temperature, field around each particle. This is easy to define for a single particle in an unbounded domain as the undisturbed field simply corresponds to the far field. It is however less straightforward in a dense particle-laden flows in which the velocity, respectively temperature, field around a particle is perturbed by the particle itself as well as by surrounding particles. This quantity is then used to normalize the force exerted on / heat exchanged by the sphere. In place of an unambiguous definition of the undisturbed temperature field, the locally averaged fluid temperature around a particle is often used to normalize the heat exchange and extract the Nusselt number. In [45, 46, 49], Deen *et al.* performed volume averaging in a box surrounding each particle and centered at the particle gravity center. A kernel centered at the particle gravity center is added to weigh the contribution of the temperature as a function of the distance from the particle. Probability density functions of Nusselt numbers are extracted from the analysis of the computed results that contribute to estimate the level of scattering of local Nusselt numbers in the bed with respect to the value predicted by a classical correlation for a triplet of (Re, Pr, α_d) in the averaging box. For bi-disperse configurations, Municchi and Radl [162] propose to model the deviation with respect to the mean Nusselt number of the distribution through a stochastic model following a log-normal law. Their results agree with Kunii and Levenspiel's work [135] for the mean Nusselt number.

In the present work, we extend our DLM/FD-FV/SG method for momentum transfer in particle-laden flows [60, 245] to heat transfer in the same fashion as [42, 249, 268]. Our numerical method works both for fixed particles and for freely moving particles but is applied here to fixed particles configurations only. We shortly recall the governing equations of the problem and the main features of our numerical method in *Section 2*. Following [245] for momentum transfer, we first examine the spatial convergence of the computed solution in various configurations in *Section 3*. Complementary results can also be found in *Appendix 2.A*. We then perform both a comparison of our PRS computed results with 1D dispersion models of the literature and carry out an analysis of local heat transfer based on local filtering around each particle in the spirit of [49, 162]. We investigate the effect of filter shape and filter support size on the calculation of the local particle Nusselt number in *Section 4* for systems without wall effects, i.e., systems with bi-periodic lateral boundary conditions. Discussion and perspectives are given in *Section 5*.

2 Numerical model

Our numerical model is based on a DLM/FD formulation of the combined momentum and heat conservation equations. Originally devised by Glowinski and co-workers [82], our own DLM/FD model is implemented with a Finite Volume / Staggered Grid spatial discretization scheme, leading to the so-called DLM/FD-FV/SG scheme presented in [60, 181, 245] for momentum transfer. The method is extended to heat transfer in the same fashion as we did in [42, 249, 268] with a Finite Element spatial discretization scheme.

The principle of the DLM/FD formulation is to write the fluid conservation equations in the whole domain, i.e., both the fluid domain and the domain occupied by particles, and to enforce the coincidence of the fluid velocity (respectively temperature) and the particle velocity (respectively temperature) in the region occupied by particles using Lagrange multipliers. At a post-processing stage, hydrodynamic force and torque, and heat flux can be computed using Lagrange multipliers. When particles are freely moving or their temperature freely evolves over time, the Newton's equations or the temperature equation, respectively, for each individual particle is also solved simultaneously.

The DLM/FD method imposes the coincidence of the fluid velocity (respectively temperature) and the particle velocity (respectively temperature) both on the particle surface and in the particle volume. But the accuracy of the method essentially relies on the velocity (respectively temperature) reconstruction at the points distributed at the particle surface [245]. Following our previous work [245], our DLM/FD-FV/SG for spherical particles is a combination of quadratic reconstruction and homogeneous spiral distribution of the Lagrangian points at the particle surface.

The original formulation of coupled momentum-heat transfer comprises a natural convection term [268]. This term arises from the Boussinesq approximation for the fluid density : temperature gradients produce density gradients that locally modify the fluid flow. In the present work the fluid expansion coefficient is set to zero in order to focus on convective heat transfer. This enables us to decouple the fluid flow problem from the temperature problem. While our method applies to freely moving particles and particles with freely evolving temperature, we consider here particles with

fixed position and temperature only and hence do not need to solve the Newton's and temperature equations for each individual particle.

Finally, the flow regimes we investigate in this work all admit a steady-state solution. For our analysis, we primarily analyze these steady-state solutions while our method is developed for general time-dependent problems. To obtain a steady-state solution, we initialize the solution at the initial time and compute its time evolution until all time derivatives in the governing equations are negligibly small.

2.1 Mathematical description

Let us consider a domain Ω composed of fluid and particles \mathcal{P} , of boundary $\partial\Omega$. We distinguish dimensional parameters from dimensionless parameters by adding a "star" symbol. The governing equations are non-dimensionalized using the following scales : L_c^* for length, U_c^* for velocity, $T_c^* = L_c^*/U_c^*$ for time, $\rho_f^* U_c^{*2}$ for pressure, $\rho_f^* U_c^{*2}/L_c^*$ for velocity distributed Lagrange multiplier, $T_s^* - T_{f,0}^*$ for fluid temperature and $\rho_f^* C_{p,f}^* U_c^* (T_s^* - T_{f,0}^*)/L_c^*$ for temperature distributed Lagrange multiplier. In the above, T_s^* denotes a solid reference temperature, $T_{f,0}^*$ a fluid reference temperature, ρ_f^* the fluid density and $C_{p,f}^*$ the fluid heat capacity. The combined dimensionless mass-momentum-energy problem with the aforementioned assumptions reads as follows :

A fluid flow problem :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} - \boldsymbol{\lambda}, \quad \text{over } \Omega \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad \text{over } \Omega \quad (2.2)$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{0}, \quad \text{over } \mathcal{P} \quad (2.3)$$

A heat transfer problem :

$$\frac{\partial T_f}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T_f = \frac{1}{RePr} \nabla^2 T_f - \lambda_T, \quad \text{over } \Omega \quad (2.4)$$

$$T_f = T_p, \quad \text{over } \mathcal{P} \quad (2.5)$$

with appropriate boundary conditions on (\mathbf{u}, p) and T_f at $\partial\Omega$. In 2.1-2.5, \mathbf{u} denotes the fluid velocity, p the fluid pressure, T_f the fluid temperature, $\boldsymbol{\lambda}$ the vectorial Lagrange multiplier associated to the velocity constraint 2.3, λ_T the scalar Lagrange multiplier associated to the temperature constraint 2.5 and T_p the imposed temperature in particles.

The dimensionless numbers in the set of governing equations 2.1-2.5 above are defined as follows :

$$\text{Reynolds number } Re = \frac{\rho_f^* U_c^* L_c^*}{\mu_f^*} \quad (2.6)$$

$$\text{Prandtl number } Pr = \frac{\mu_f^* C_{p,f}^*}{k_f^*} \quad (2.7)$$

where μ_f^* denotes the fluid viscosity and k_f^* the fluid thermal conductivity. We also define the Prandtl number $\mathcal{P}e$ as

$$\mathcal{P}e = \frac{\rho_f^* C_{p,f}^* U_c^* L_c^*}{k_f^*} = \mathcal{R}e\mathcal{P}r \quad (2.8)$$

Results are analyzed in terms of fluid-particle heat exchange and it is convenient to introduce the dimensionless particle to fluid heat transfer described by the particle Nusselt number $\mathcal{N}u_p$ as follows :

$$\mathcal{N}u_p = \frac{\bar{q}_{p \rightarrow f}^* L_c^*}{k_f^* (T_s^* - T_{f,0}^*)} = \frac{L_c^*}{k_f^* (T_s^* - T_{f,0}^*) |\partial\mathcal{P}|} \int_{\partial\mathcal{P}} -k_f^* \nabla^* T_f^* \cdot \mathbf{n} d\mathbf{S}^* \quad (2.9)$$

where $\bar{q}_{p \rightarrow f}^*$ is the average particle to fluid heat flux per unit area, $\partial\mathcal{P}$ the particle surface (equal to πd_p^{*2} for a sphere) and \mathbf{n} the unit outward normal vector to $\partial\mathcal{P}$. Finally, we denote the solid volume fraction by $\alpha_d \in [0, 1]$ and the fluid volume fraction or porosity by $\alpha_c = 1 - \alpha_d$.

From now on, we take $L_c^* = d_p^*$ where d_p^* is the spherical particle diameter, $U_c^* = U_{in}^*$ where U_{in}^* is the inlet fluid velocity, $T_s^* = T_p^*$ where T_p^* is the particle imposed temperature and $T_{f,0}^* = T_{f,in}^*$ where $T_{f,in}^*$ is the inlet fluid temperature.

2.2 Computational scheme

The detailed description of the whole solution algorithm has already been published in our previous papers (see [42, 247–249, 268]). The main numerical features are listed below :

- A 2^{nd} order Finite Volume/Staggered Grid spatial discretization scheme is used. Normal velocity components are face centered while pressure and temperature are cell centered. In the momentum and energy conservation equations, the diffusive term and the transport term are discretized in space with a central scheme and a TVD scheme, respectively.
- Time discretization is achieved by a first-order Marchuk-Yanenko operator splitting algorithm. This allows us to treat the whole problem as a series of sub-problems as follows :
 1. A Navier-Stokes problem,
 2. A fictitious Domain problem for momentum transfer,
 3. A fictitious Domain problem for heat transfer.
- In the momentum and energy conservation equations, the diffusive term and the transport term are discretized in time with a 2^{nd} order semi-implicit Crank-Nicolson scheme and an explicit 2^{nd} order Adams-Bashforth scheme, respectively.
- A L2-projection algorithm is used to solve the Navier-Stokes equations.
- A quadratic reconstruction is employed in the fictitious domain problems for Lagrangian points lying on the particle surface.

3 Detailed validation of the numerical approach

We investigate the spatial accuracy of our DLM/FD-FV/SG computed solution in terms of heat transfer and temperature field. We carried out a similar study in [245] to investigate the

spatial convergence of our computed solution in terms of hydrodynamic force and velocity field. As the computational method for temperature is conceptually similar to the computational method used for velocity in [60, 181, 245], we expect similar results. However, it is extremely important to check the spatial convergence on classical benchmark test cases in order to make sure that practical guidelines for the selection of grid size derived for velocity still apply to temperature. The other objective is to relate the solution accuracy to the thermal regime defined by \mathcal{Re} and \mathcal{Pr} , or alternatively by \mathcal{Pe} . Similar grid convergence tests are conducted by Xia *et al.* [260] for the Nusselt number profile on the surface of a single sphere in a flow at $\mathcal{Re} = 100$ and Tenneti *et al.* [225] for the wall Nusselt number of a single phase flow in a duct at $\mathcal{Re} = 100$. These flow configurations are not necessarily representative of heat transfer in dense fixed beds. Also, no convergence rate is provided in these two studies, but available data give a first level of information on the computed solution accuracy. Following our previous work [245], we intend to go one step further and examine grid convergence in flow configurations of growing complexity and relevant (especially in terms of porosity α_c) to the cases used for the physical analysis we conduct later in Section 4.

For the sake of clarity, we adopt the following notations thereafter : h^* is the grid space and $N_p = d_p^*/h^* = 1/h$ the number of points per particle diameter where h is the dimensionless grid size. The time-step Δt is selected to satisfy a CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) condition due to the explicit treatment of the transport term in both the fluid momentum and fluid energy conservation equations. For all computations presented in this paper we select Δt such that $CFL \leq 0.3$ is satisfied. In all cases examined in this paper, the flow domain is a box of transverse length $L_T = L_x = L_y$ and streamwise length $L_{ax} = L_z$. Except in the purely diffusive benchmark problem in Appendix 2.A.1, the fluid is assumed to flow upwards in the z direction from the bottom section (inlet) to the top section (outlet). Uniform velocity and temperature profiles are imposed at the inlet section and classical outflow boundary conditions are imposed at the outlet section. The distance between the inlet section and the lowest particle gravity center is denoted L_{in} and called inlet distance. Likewise, the distance between the highest particle gravity center and the outlet section is denoted L_{out} and called outlet distance.

Analytical solutions for unsteady heat transfer in particle-laden flows are limited to purely diffusive heat transfer for a single sphere immersed in a quiescent fluid and asymptotic solutions for the creeping steady flow equivalent [36]. For more complicated problems as the ones we examine in this section, no analytical solution is available to compare the computed solution to. For a quantity ϕ , we thereby define the reference solution ϕ_{extra} for our mesh convergence analysis as the Richardson extrapolation [190] 2.10 of our computed results for different h (or equivalently different N_p) to zero grid size $h = 0$ (or equivalently to infinite N_p). This is a classical approach in the absence of analytical solution [120, 245]. In 2.10, the sign and amplitude of the spatial error is defined by A while the order of convergence m defines how fast the solution ϕ tends to ϕ_{extra} . In that case, the computed error ϵ represents the relative deviation from the extrapolated solution 2.11.

$$\phi(N_p) = \phi_{extra} + AN_p^{-m} \quad (2.10)$$

$$\epsilon_\phi(N_p) = \frac{|\phi_{extra} - \phi(N_p)|}{|\phi_{extra}|} \quad (2.11)$$

For the sake of conciseness, results for (i) a single sphere and (ii) an in-line array of 3 spheres are presented in *Appendix 2.A*. We focus here on multi-sphere configurations with a porosity α_c ranging from 0.9 to 0.5.

The test case is based on the flow configuration proposed by Tavassoli *et al.* [224] and is presented in FIG. 2.1. The domain is periodic in x and y directions. Boundary conditions are as follows :

— Entry

$$\mathbf{u}(x, y, 0) = (0, 0, 1) \quad , \quad T_f(x, y, 0) = T_{f,in} \quad (2.12)$$

— Exit

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z}(x, y, L_z) = \frac{\partial T_f}{\partial z}(x, y, L_z) = 0 \quad , \quad p(x, y, L_z) = p_{ref} = 0 \quad (2.13)$$

— Lateral walls : periodicity

$$\mathbf{u}(0, y, z) = \mathbf{u}(L_t, y, z) \quad , \quad T_f(0, y, z) = T_f(L_t, y, z) \quad (2.14)$$

$$\mathbf{u}(x, 0, z) = \mathbf{u}(x, L_t, z) \quad , \quad T_f(x, 0, z) = T_f(x, L_t, z) \quad (2.15)$$

We set $L_{in} = L_{out} = 1$, $L_T = 6$ and $L_{ax} = 10$. We consider 3 solid volume fractions $\alpha_d = 0.1$, $\alpha_d = 0.3$ and $\alpha_d = 0.5$, corresponding to 55, 165 and 275 spheres in the bed, respectively, and a porosity $\alpha_c = 0.9$, $\alpha_c = 0.7$ and $\alpha_c = 0.5$, respectively. Spheres are randomly distributed into the system such that the inlet and outlet zones remain free of particles. Since a simple random generator fails to position all particles for $\alpha_d = 0.5$, particles positions are initialized by the following two-step procedure : (i) at $t = 0$, particles are first all introduced in the system on a structured array and random translational and rotational velocities are assigned to each particle, and (ii) a purely granular simulation is run until the total kinetic energy of the system has decayed through dissipative collisions below at threshold representative of a quasi-static system. The microstructure of the random array can be characterized by its radial density function plotted in FIG. 2.2. A comparison with the solution of the Percus-Yevik equation proposed by Bravo and Yuste [180] shows a good agreement at low solid volume fractions while limited but noticeable discrepancies exist for high solid volume fractions. A plausible explanation for the observed discrepancy at high solid volume fractions is the small number of particles in the system. Another explanation is that this profile is plotted for a random microstructure only and not averaged over many random microstructure at $\alpha_d = 0.5$. Tavassoli *et al.* [224] compute the value of the mean Nusselt number extrapolated to zero grid size for different flow configurations characterized by $Pr = 1$, $\alpha_d \in [0.1; 0.5]$ and $Re \in [10; 100]$. For each set of dimensionless parameters, the solution is computed for three meshes $N_p = 10$, $N_p = 15$ and $N_p = 20$. The solution is shown to converge but nothing is said about the convergence rate.

Following *Section 2.A.4*, we perform a series of computations with an increasingly refined mesh ranging from $N_p = 16$ to $N_p = 64$. As shown in [245] for momentum transfer with Re and α_c , increasing both Pe and $\alpha_d = 1 - \alpha_c$ increases the magnitude of the error of the computed solution

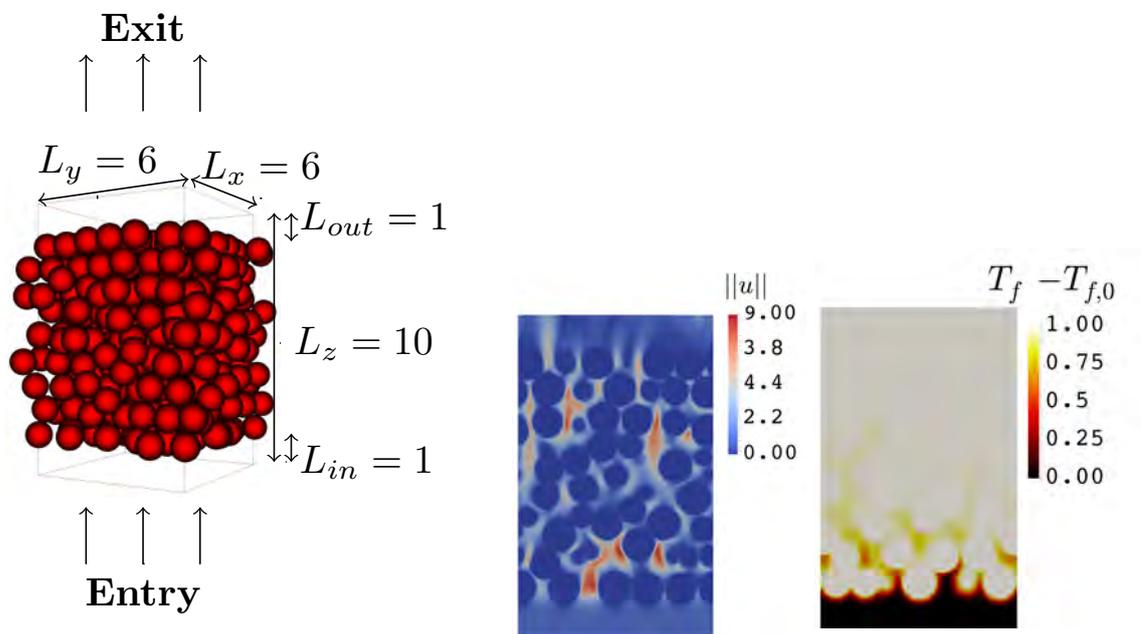


FIGURE 2.1 – Random array of spheres flow configuration : 3D configuration for $\alpha_c = 0.5$ with boundary labels and dimensions (left) and velocity magnitude and temperature contours in a $x = 3$ cut plane (right).

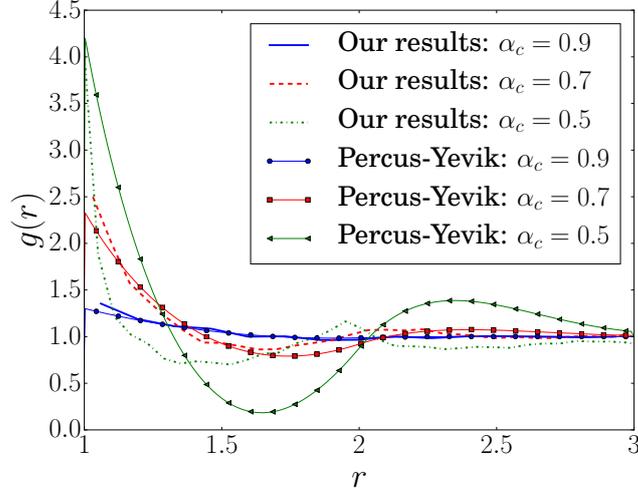


FIGURE 2.2 – Radial density function for the three random arrays of spheres.

with respect to the reference solution. Keeping $\mathcal{P}r = 1$, we hence consider the 3 following sets of $(\alpha_c, \mathcal{R}e)$ parameters : $(0.9, 5)$, $(0.7, 20)$ and $(0.5, 50)$. In doing so, we explore a large range of test cases (low and high $\mathcal{R}e$, low and high α_c) with a limited number of simulations.

Convergence plots for the global Nusselt number $\mathcal{N}u_g$ defined in 2.41 are shown in FIG. 2.3. The dilute and weakly convective regime ($\alpha_c = 0.9$, $\mathcal{R}e = 5$) exhibits a nearly first order convergence $m \sim 0.7$, i.e., less than the order of convergence obtained for momentum transfer in Stokes regimes in [245]. Similarly, the order of convergence for $(\alpha_c = 0.7, \mathcal{R}e = 20)$ and $(\alpha_c = 0.5, \mathcal{R}e = 50)$ is $m \sim 1.7$ and $m \sim 1.3$, respectively, and is also slightly lower than the order of convergence obtained for momentum transfer in inertial regimes in [245]. However, computed errors with respect to the reference solution are an order of magnitude smaller for heat transfer here than those for momentum transfer in [245]. FIG. 2.3 suggests that a resolution of $N_p = 16$ is enough to get a relative error on $\mathcal{N}u_g$ between 0.07% and 1%. The same resolution provides errors between 2% to 20% on the total hydrodynamic force exerted on all particles [245]. There is no particular reason to expect that errors on heat transfer are an order of magnitude smaller than errors on momentum transfer as our numerical model for heat transfer is conceptually the same as the one for momentum transfer. Actually, assessing convergence based on $\mathcal{N}u_g$ (i.e., the total heat flux) is a flawed practice. In fact, considering $\mathcal{N}u_g$ as a relevant criterion to study mesh convergence of the computed solution assumes that all particles converge to their extrapolated values at roughly the same rate and with roughly the same error magnitude. This assumption could be valid for isolated spheres or very dilute systems, but for random and moderately dense to dense arrays of particles, heat transfer experienced by each sphere in the system differs a lot based on their location and is also very much conditioned by the presence of surrounding spheres. In particular, as already touched upon in *Section 2.A.4*, spheres located in the upstream part of the bed exchange much more heat than those located in the downstream part of the bed. This is not the case for momentum transfer as observed variations of exchanged momentum are statistically

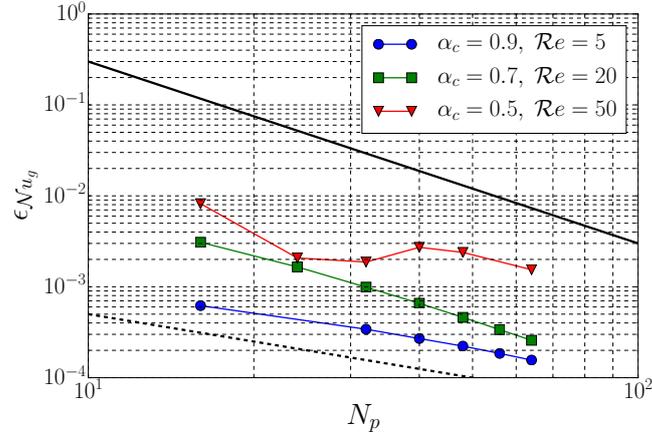


FIGURE 2.3 – Grid convergence for a random array of spheres at $(\alpha_c = 0.9, \mathcal{R}e = 5)$, $(\alpha_c = 0.7, \mathcal{R}e = 20)$ and $(\alpha_c = 0.5, \mathcal{R}e = 50)$, and $\mathcal{P}r = 1$: relative error on global Nusselt number $\mathcal{N}u_g$. Black dashed and solid lines respectively represent first and second order convergence rates.

not correlated to particles positions in the bed.

In the following, we consider each sphere individually. As a first step, a constant order of convergence (equal to the one obtained for $\mathcal{N}u_g$, i.e., $m \sim 0.7, 1.7$ and 1.3 for $(\alpha_c = 0.9, \mathcal{R}e = 5)$, $(\alpha_c = 0.7, \mathcal{R}e = 20)$ and $(\alpha_c = 0.5, \mathcal{R}e = 50)$, respectively) is considered for all spheres. The pre-factor A_i is then computed according to 2.10 and plotted as a function of particle position in the bed in FIG. 2.4. For $(\alpha_c = 0.9, \mathcal{R}e = 5)$, as already noticed for the row of 3 spheres configuration in *Section 2.A.4*, upstream particles converge to their extrapolated values by higher absolute values while downstream particles converge by smaller absolute values. For $(\alpha_c = 0.7, \mathcal{R}e = 20)$, the opposite happens but this is not really relevant. The important point is that computing the Richardson extrapolation of $\mathcal{N}u_g$ is equivalent to implicitly summing all these errors (multiplied by a factor N_p^{-m}) and most of these errors cancel out due to their opposite signs. $\mathcal{N}u_g$ (i.e., the total heat flux) is thereby a biased marker of the computed solution convergence.

In order to get a better estimate of the error, equation 2.10 is applied to each sphere individually. Some examples of convergence for spheres located at various positions in the bed are plotted in FIG. 2.5b for $(\alpha_c = 0.9, \mathcal{R}e = 5)$ and $(\alpha_c = 0.7, \mathcal{R}e = 20)$. It is pretty clear that both convergence rate and error magnitude differ from one particle to another. From Richardson extrapolation on individual spheres, a mean relative error $\bar{\epsilon}$ as well as a global order of convergence \bar{m} can be defined as follows :

$$\bar{\epsilon}_\phi(N_p) = \frac{1}{\overline{\phi_{extra} N_{part}}} \sum_{i=1}^{N_{part}} |A_i| N_p^{-m_i} = B N_p^{-\bar{m}} \quad (2.16)$$

where B controls the magnitude of the mean relative error, N_{part} denotes the total number of particles in the system and $\overline{\phi_{extra}} = \frac{1}{N_{part}} \sum_{i=1}^{N_{part}} \phi_{extra,i}$ where $\phi_{extra,i}$ is the extrapolated value

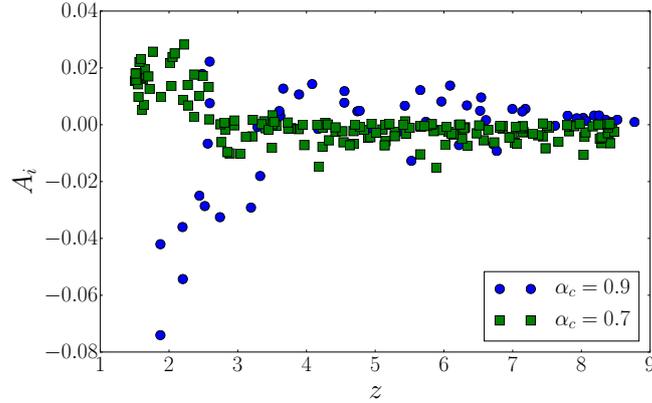


FIGURE 2.4 – Magnitude and sign of relative error on Nusselt number per particle as a function of their streamwise position for $(\alpha_c = 0.9, \mathcal{R}e = 5)$ and $(\alpha_c = 0.7, \mathcal{R}e = 20)$.

for particle i . For the 3 sets of $(\alpha_c, \mathcal{R}e)$ selected, values of $\bar{\epsilon}_{\mathcal{N}u}$, convergence plots following 2.16 are presented in FIG. 2.5a. A smooth convergence is observed in all cases and the respective order of convergence for $(\alpha_c = 0.1, \mathcal{R}e = 5)$, $(\alpha_c = 0.7, \mathcal{R}e = 20)$ and $(\alpha_c = 0.5, \mathcal{R}e = 50)$ is 1.09, 1.31 and 1.56. The magnitude of the error as computed by 2.16 is 5 to 20 times higher than that computed for $\mathcal{N}u_g$. Besides, it is in accordance with errors reported in [245] for momentum transfer for similar flow regimes and solid volume fractions. Increasing $\mathcal{P}e$ leads to higher convergence rate but higher error magnitude. Also, lowering porosity α_c (i.e. higher solid volume fraction α_d) leads to higher error magnitude. Our results indicate that to satisfy $\bar{\epsilon} \leq 2\%$, $(\alpha_c = 0.1, \mathcal{R}e = 5)$, $(\alpha_c = 0.3, \mathcal{R}e = 20)$ and $(\alpha_c = 0.5, \mathcal{R}e = 50)$ require $N_p = 16$, $N_p = 40$ and $N_p = 48$, respectively.

4 Analysis of heat transfer in random arrays of spheres

In *Section 3* and *Appendix 2.A*, a detailed numerical study of convergence is performed on configurations relevant to assorted flow regimes, thermal regimes and porosities, defining thereby the limit of acceptable computational errors. We are hence in a position to carry out a comprehensive analysis of heat transfer in random arrays of spheres based on reliable computed results. In the following section, the systems designed in *Section 3* are used to first analyse the effective behavior of the bed by comparing Nusselt numbers obtained with our PRS data to those predicted by 1D models, with a specific attention to the effect of axial dispersion. Then, we filter our PRS data by performing local volume averaging around each particle using filters with various mathematical forms and various support sizes. We then perform a statistical analysis of the computed particle Nusselt numbers and characterize the distribution in terms of average value and standard deviation.

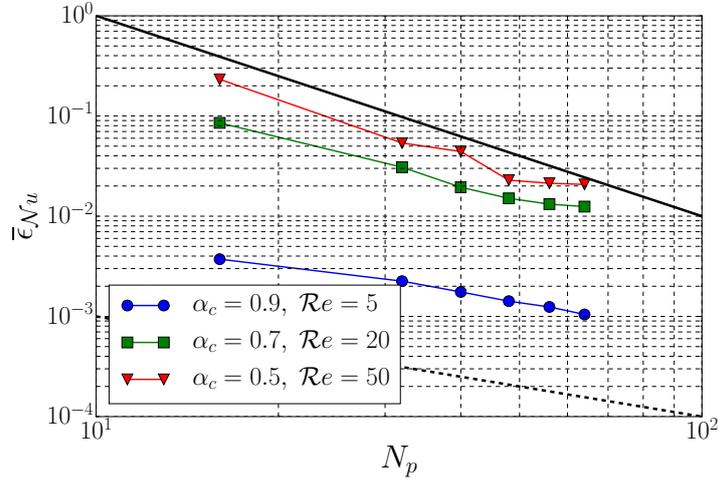
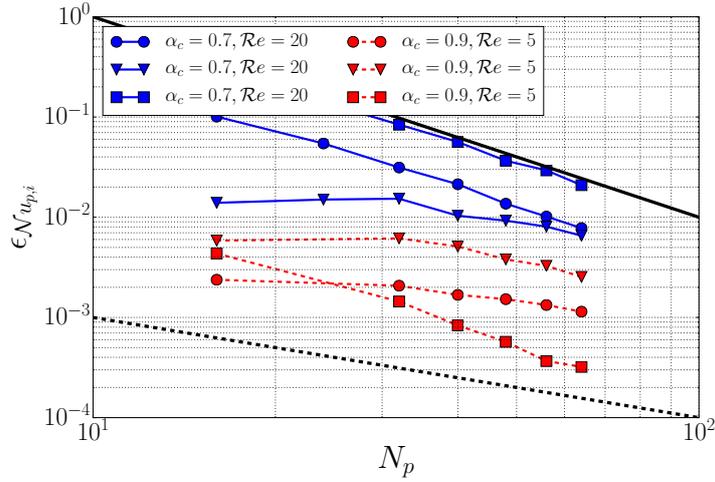
(a) Mean relative error $\bar{\epsilon}_{Nu}$ (b) Individual relative error $\epsilon_{Nu_{p,i}}$

FIGURE 2.5 – Grid convergence for a random array of spheres at $(\alpha_c = 0.9, \mathcal{Re} = 5)$, $(\alpha_c = 0.7, \mathcal{Re} = 20)$ and $(\alpha_c = 0.5, \mathcal{Re} = 50)$, and $\mathcal{Pr} = 1$: (a) mean relative error on Nusselt number $\bar{\epsilon}_{Nu}$ and (b) relative error on individual Nusselt $\epsilon_{Nu_{p,i}}$ for 6 individual particles in the array chosen among the cases $(\alpha_c = 0.9, \mathcal{Re} = 5)$ and $(\alpha_c = 0.7, \mathcal{Re} = 20)$. Black dashed and solid lines respectively represent first and second order convergence rates.

4.1 Nusselt number from 1D heat balance

Using dimensionless notations defined in *Section 2*, two classical 1D models describing heat transfer in particle-laden flow systems are introduced : the plug flow model,

$$\frac{dT_c}{dz} + \zeta(T_c - T_p) = 0 \quad (2.17)$$

and, the plug flow model with axial dispersion,

$$\frac{dT_c}{dz} - \frac{1}{\mathcal{P}e_{ax}} \frac{d^2T_c}{dz^2} + \zeta(T_c - T_p) = 0 \quad (2.18)$$

where T_c represents the cup-mixing or flow-averaged fluid temperature, and is computed as a function of the axial position z as follows :

$$T_c(z) = \frac{\int_{V(z)} \chi(\mathbf{x}) u_{z,c}(\mathbf{x}) T_f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}}{\int_{V(z)} \chi(\mathbf{x}) u_{z,c}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}} = \frac{\int_0^{L_T} \int_0^{L_T} \int_{z-w/2}^{z+w/2} \chi(\mathbf{x}) u_{z,c}(\mathbf{x}) T_f(\mathbf{x}) dx dy dz}{\int_0^{L_T} \int_0^{L_T} \int_{z-w/2}^{z+w/2} \chi(\mathbf{x}) u_{z,c}(\mathbf{x}) dx dy dz} \quad (2.19)$$

where $\chi(\mathbf{x})$ is a binary indicator function that is 1 in the fluid and 0 in any particle. $T_c(z)$ is a volume average temperature in $V(z)$ and is approximated by numerical integration over $V(z)$, where $V(z)$ is a volume spanning the whole cross section of the bed and of width w . The term $\zeta = \frac{6(1-\alpha_c)\overline{Nu}}{\mathcal{P}e}$ stands for the heat transfer rate and contains the desired value of the mean Nusselt number \overline{Nu} . The axial dispersion term $\mathcal{P}e_{ax}$ in 2.18 arises from the mechanical mixing induced by inhomogeneities in the dispersed system. Its value is assumed here to be constant in time and in space. Related to distinct mechanisms, values of $\mathcal{P}e$ and $\mathcal{P}e_{ax}$ are different : $\mathcal{P}e_{ax}$ could be approximated by $\mathcal{P}e$ for very low Péclet numbers while $\mathcal{P}e_{ax} \approx 2$ for high Péclet numbers. Following the recommendations of Delgado [50], the relations of Gunn [92]

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mathcal{P}e_{ax}} &= \frac{1}{\tau} \frac{\alpha_c}{\mathcal{P}e} + \frac{\mathcal{P}e}{A} (1-p)^2 + \frac{(1-\alpha_c)\mathcal{P}e^2}{A^2} p(1-p)^3 \left(\exp\left(\frac{-A}{p(1-p)\mathcal{P}e}\right) - 1 \right) \quad (2.20) \\ p &= 0.17 + 0.33 \exp\left(-\frac{24}{Re}\right) \\ A &= 4\alpha_1^2(1-\alpha_c) \\ \tau &= \sqrt{2} \end{aligned}$$

and Guedes *et al.* [89]

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mathcal{P}e_{ax}} &= \frac{1}{\tau} \frac{\mathcal{P}e}{\mathcal{P}e} + \frac{\mathcal{P}e}{5} (1-p)^2 + \frac{\mathcal{P}e}{25} p(1-p)^3 \left[\exp\left(-\frac{5}{p(1-p)\mathcal{P}e}\right) - 1 \right] \quad (2.21) \\ p &= \frac{0.48}{\mathcal{P}r} + \left(\frac{1}{2} - \frac{0.48}{\mathcal{P}r^{0.15}}\right) \exp\left(-\frac{0.75\mathcal{P}r}{\mathcal{P}e}\right) \\ \tau &= \sqrt{2} \end{aligned}$$

are selected to study, thereafter, their impact on the mean Nusselt number. These relations assume the additive effects of molecular and axial diffusion.

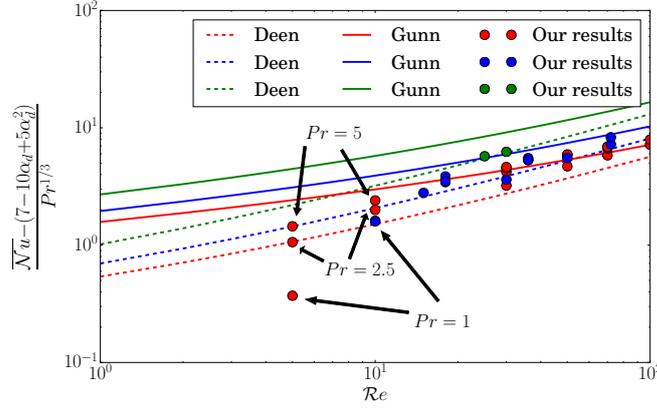


FIGURE 2.6 – Comparison of our computed average Nusselt numbers \overline{Nu} obtained by matching a 1D model for $Re \in [5, 100]$ and $Pr \in [1, 5]$ with the correlations of Gunn [92] and Deen *et al.* [46]. Please note that we actually plot $\frac{\overline{Nu} - (7 - 10/\alpha_d + 5\alpha_d^2)}{Pr^{1/3}}$, i.e., the deviation to the part common to all correlations. Red, blue and green dots/lines correspond to $\alpha_c = 0.9, 0.7$ and 0.5 , respectively.

Assuming an inlet cup-mixing temperature of the fluid $T_c = T_{c,in}$, analytical solutions of equations 2.17 and 2.18 read as follows :

$$\frac{T_p - T_c(z)}{T_p - T_{c,in}} = \exp(-\zeta z) \quad (2.22)$$

$$\frac{T_p - T_c(z)}{T_p - T_{c,in}} = \exp\left(-\frac{Pe_{ax}z}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4\zeta}{Pe_{ax}}} - 1\right)\right) \quad (2.23)$$

As proposed by Tavassoli *et al.* in [224], ζ and hence the mean Nusselt number \overline{Nu} are computed by a linear regression of $T_c(z)$ extracted from our PRS data in order to fit the 1D model temperature profiles 3.39 or 2.23.

From the equation 3.39, our computed values are compared to values from the literature [45, 92] and plotted in FIG. 2.6. A good agreement is shown for high Reynolds numbers. At low Reynolds numbers, our data predict a significantly lower \overline{Nu} . This rapid decrease at low Reynolds numbers (i) leads to a deviation from most if not all correlations available in the literature, which was also noticed by Glicksman [81] and (ii) is in agreement with experimental data (see FIG. 2.7) even when the axial dispersion term is omitted. In our simulation results, the cases $Re = 5$ and $Re = 10$ with $\alpha_c = 0.9$ are very sensitive to the magnitude of the Prandtl number Pr . For instance, at $Re = 5$, FIG. 2.6 underscores that \overline{Nu} markedly increases with Pr . For low $Pr \sim 1$, our data match well Deen *et al.*'s correlation [45] while as Pr increases from 1, our data get closer and closer to Gunn's correlation [92]. For $Re = 5$, the trend is even more visible. Actually, the correction proposed by Deen *et al.* is based on PRS results with a Prandtl number $Pr = 1$ and a minimum Reynolds number $Re = 10$, which may shed some light on the observed discrepancy at

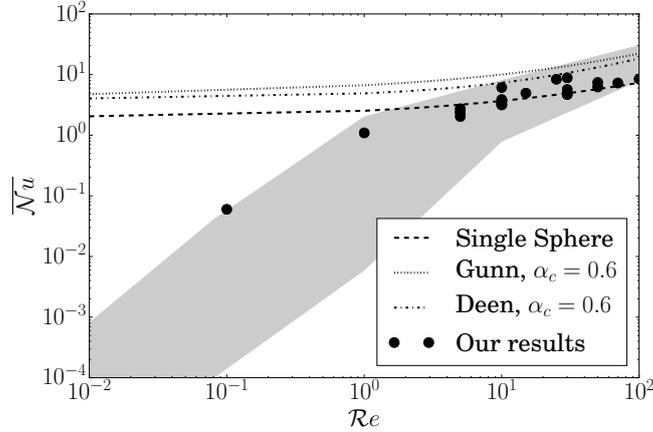


FIGURE 2.7 – Comparison of our computed average Nusselt numbers \overline{Nu} obtained by matching a 1D model for $Re \in [0.1, 100]$ and $Pr \in [1, 50]$ with various correlations and data from the literature (grey area from Kunii [135]).

low Re and for Pr in the range $[1 : 5]$. Let us also point out again that Deen *et al.*'s correlation [45] neglects the effect of dispersion, although the correlation is established in a range of Re over which dispersion is expected to be relevant. In fact, as pointed out in [89], dispersion effects are assumed to be negligible for $Re \geq 100$ only.

Our data in the range $Pr \in [1 : 5]$ and $Re \in [5 : 100]$ seem to indicate that for $Re \gtrsim 10$, \overline{Nu} is mostly controlled by Re and only moderately dependent on Pr , while for low Re , Pr affects significantly \overline{Nu} . In other words, for $Re \gtrsim 10$, \overline{Nu} mostly depends on Re while for $Re \lesssim 10$, \overline{Nu} depends on $Pe = RePr$. The range $Re \lesssim 10$ over which dispersion is a prevailing mechanism has not been explored much in the literature. Thereby, we perform an additional set of simulations at $Re = 0.1$ with Pr in the range $[10; 50]$ and α_c in the range $[0.1; 0.5]$ to verify the importance of dispersion in viscous flows. Results presented in TAB. 2.1 show without any doubt that \overline{Nu} is markedly underpredicted by 1D models without dispersion, up to a factor of 10. Results predicted with the closure law of 2.20 and the closure law of 2.21 for Pe_{ax} show a deviation of 14% only. This is significantly less than the deviation between predictions with and without dispersion. In other words, at that stage, it is rather difficult to discriminate between these two closure laws for Pe_{ax} and both seem to be acceptable. Additional simulations are certainly desirable in low Re flows to further explore this flow regime.

4.2 Filtering flow properties by local averaging around particles

The challenge of the present part is to define the flow properties in the vicinity of each particle. Indeed, both momentum and heat transfer share the need of an undisturbed or far field definition to normalize the force exerted on / heat exchanged by the sphere. The estimation of this field is

TABLE 2.1 – Comparison of mean Nusselt number from plug flow and plug flow with axial dispersion.

α_c	Pr	Re	(1-D) balance	(1-D) balance + dispersion	
				Delgado [50]	Gunn [90]
0.9	10	0.1	1.10	2.42	2.63
0.9	20	0.1	1.76	2.44	2.76
0.9	50	0.1	2.99	3.05	3.48
0.9	0.72	5	2.38	2.56	2.91
0.9	0.72	10	3.49	3.66	3.70
0.7	10	0.1	0.70	2.89	2.86
0.7	20	0.1	0.96	3.42	3.43
0.7	50	0.1	1.52	4.05	3.78
0.5	10	0.1	0.29	3.98	3.78
0.5	20	0.1	0.37	4.32	4.76
0.5	50	0.1	0.51	5.78	5.33

not obvious in the case of dense particle-laden flows. In [45, 46, 49], Deen *et al.* perform volume averaging in a box surrounding each particle and centered at the particle gravity center using an exponentially decaying filtering kernel. This idea of filtering was originally introduced by Anderson and Jackson [8] to derive volume-averaged conservation equations for particle-laden flows. A generic quantity ϕ is filtered as follows [8, 45, 46, 49] :

$$\tilde{\phi} = \frac{\int_{V_{box}} \chi(\mathbf{x}) g(|\mathbf{x}_c - \mathbf{x}|) \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}}{\int_{V_{box}} \chi(\mathbf{x}) g(|\mathbf{x}_c - \mathbf{x}|) d\mathbf{x}} \quad (2.24)$$

A kernel $g(|\mathbf{x}_c - \mathbf{x}|) = g(|\mathbf{r}|)$ centered at the particle gravity center \mathbf{x}_c is added to enhance the relative weight of the presence of close particles, where $|\mathbf{r}|$ denotes the radial distance to \mathbf{x}_c . Thus the choice of the type of kernel and the size of the control volume can have a substantial impact on local fluid properties around particles. We first define kernel functions and then study their impact on heat transfer in configurations ranging from an isolated sphere to a dense bed. The effect of the filter support size on the local fluid properties surrounding each particle is investigated for a simple kernel $g(|\mathbf{r}|) = 1$. We characterize the distribution of $\tilde{N}u_p$ as a function of the filter support size with a particular attention to the standard deviation of the distribution. In the following, we use the ensemble-averaging operator $\langle . \rangle$ and the standard deviation σ , defined for a field ϕ as follows :

$$\langle \phi \rangle = \frac{1}{N_{part}} \sum_{i=1}^{N_{part}} \phi_{p,i} \quad (2.25)$$

$$\sigma_\phi = \sqrt{\frac{1}{N_{part}} \sum_{i=1}^{N_{part}} (\phi_{p,i} - \langle \phi \rangle)^2} \quad (2.26)$$

For fixed beds, we also assess the influence of hindering effects already emphasized in the in-line array of 3 spheres configuration.

4.2.1 Definition of kernel functions

For computational efficiency, we consider cubic control volumes of edge length L_{box} of typically a few particle diameters, and of volume $V_{box} = L_{box}^3$. We also consider three types of kernel as follows :

- A kernel defined as $g = 1$ everywhere in the cubic control volume, named kernel 0 in TAB. 2.2,
- A first group of kernels composed of decreasing functions that vanish at box corners. The actual filter support size is $\frac{\sqrt{3}}{2}L_{box}$ and varies with L_{box} . This group, called "type A", is represented by kernels 1 to 4 in TAB. 2.2.
- A second group of kernels with a fixed quasi finite support based on exponential functions as proposed in Tavassoli *et al.* [224]. The actual filter support size is the length scale L_e associated to the exponential decay rate $exp(-r/L_e)$. Depending on the ratio L_{box}/L_e , these kernels may quasi vanish or may not vanish at the boundary of the box. This group, called "type B", is represented by kernels 5 to 9 in TAB. 2.2.

4.2.2 Effect of averaging process on heat transfer on an isolated sphere

Many heat transfer closure laws in particle-laden flows available in the literature are designed for a single particle in an unbounded domain or for very dilute systems [72, 187]. Indeed, in the case of a single particle in an unbounded domain, the undisturbed field is straightforward to define. It simply corresponds to the far field. Single particle configurations thereby represent a valuable reference case to test filtering procedures. The flow configuration is very similar to the one adopted in Appendix 2.A.3. We set $Re = 150$ and $Pr \in [0.1 : 2]$ such that $Pe \in [15 : 300]$. Following Appendix 2.A, we use $N_p = 40$ such that the error with respect to the solution extrapolated at zero grid size is less than 2%. We compute the steady state $\widetilde{\mathcal{N}}u_p$ using the filtering kernels listed in TAB. 2.2 to determine the average fluid temperature in the cubic control volume surrounding the particle. We vary the size of the control volume, i.e., L_{box} , and then compare the obtained values of $\widetilde{\mathcal{N}}u_p$ to the reference value of $\mathcal{N}u_{p,ref}$ computed with the far field temperature $T_\infty = T_{in}$ as the average fluid temperature surrounding the particle. This reference value can also be interpreted as the value obtained with a control volume of infinite size, i.e., $L_{box} \rightarrow \infty$. For the sake of illustration, we select kernel 0 and kernel 8 and plot the error with respect to the reference value as a function of L_{box} in FIG. 2.8. Kernels of type A, i.e., kernel 1, 2, 3 and 4, yields very similar results to kernel 0 with a slightly higher error magnitude.

Regardless of the kernel type, the error increases with decreasing Pe as the boundary layer thickness increases and hence larger control volumes are required to recover T_∞ as an average temperature. Kernel 0 supplies expected results, i.e., the error computed with kernel 0 decreases as L_{box} increases. This is very basic : as the control volume size increases, the effect of the local perturbation of the temperature field due to the presence of a single particle at a different temperature progressively vanishes and the average temperature in the control volume naturally tends to T_∞ . Type B kernels, i.e., kernels 5, 6, 7, 8 and 9, are not able to compute the correct

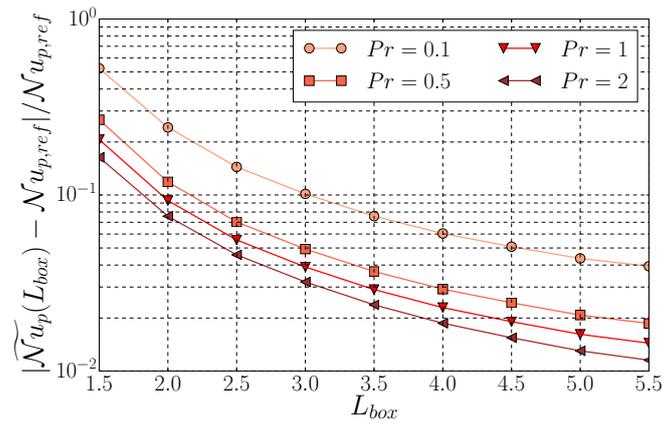
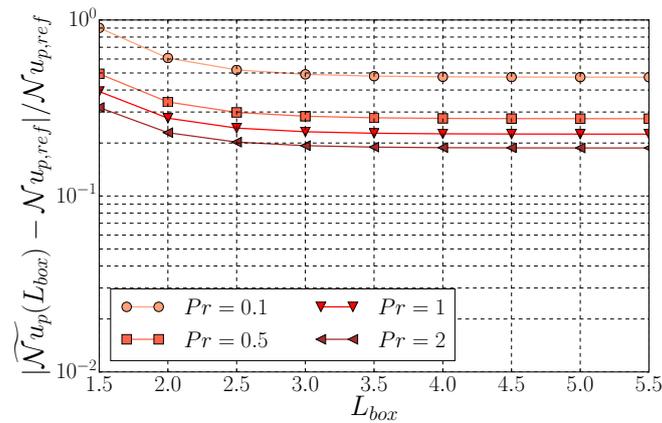
(a) Kernel0 : $g = 1$ (b) Kernel8 : $g = \exp(-4r)$

FIGURE 2.8 – Relative error between $\widetilde{\mathcal{N}}u_p(L_{box})$, the Nusselt number computed with the filtered temperature, and $\mathcal{N}_{u_p,ref}$, the value computed with the correct far field temperature, as a function of the control volume size L_{box} for $\mathcal{R}e = 150$, $\mathcal{P}e \in [0.1, 2]$ and 2 different kernels in the case of an isolated sphere in an unbounded domain.

TABLE 2.2 – Weighting functions used for box fluid volume averaging.

Kernel	$g(r)$
0	1
1	$1 - \frac{r}{\sqrt{3}/2L_{box}}$
2	$\left(1 - \frac{r}{\sqrt{3}/2L_{box}}\right)^2$
3	$\left(1 - \left[\frac{r}{\sqrt{3}/2L_{box}}\right]^2\right)^2$
4	$\left(1 - \left[\frac{r}{\sqrt{3}/2L_{box}}\right]^2\right)^3$
5	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{d_p^*}{2} r^2\right)$
6	$\exp(-2r)$
7	$\exp\left(d_p^* \left(r - \frac{1}{2}\right)\right)$
8	$\exp(-4r)$
9	$\exp(-r)$

average temperature in the control volume owing to their fixed support size independent of L_{box} . Due to their exponential decay, the actual filter support size does not depend on L_{box} but on L_e , the length scale associated to the exponential decay rate. For all type B kernels, increasing the control volume size beyond $\sim 3 - 4L_e$ has thereby no effect, as expected and shown in FIG. 2.8b. It is pretty obvious that such filtering kernels perform very poorly in dilute regimes when the corresponding $\mathcal{N}u_p$ correlation is utilized in an Euler-Lagrange model. This has recently been emphasized in [102, 110] for drag correlations.

The inconsistency between the definition of the closure law and its use, e.g. in Euler-Lagrange models, may lead up to 50% error in the computation of the fluid-particle heat transfer, as emphasized in FIG. 2.8b. A correction is hence required to adapt the Nusselt number definition in that case. For a constant box size L_{box} , errors roughly scale as $\mathcal{P}e^{-0.4}$ to $\mathcal{P}e^{-0.3}$ depending on the kernel function, in line with [215] and with the way the boundary layer thickness around a single sphere scales (i.e., $\mathcal{P}e^{-1/3}$, see *Appendix 2.A.3*). For an isolated sphere, the error between $\widetilde{\mathcal{N}u}_p(L_{box})$ computed with any filtering kernel and a finite size control volume L_{box} , and the reference value $\mathcal{N}u_{p,ref}$ computed with T_∞ can be formulated as follows :

$$\frac{\widetilde{\mathcal{N}u}_p(L_{box}) - \mathcal{N}u_{p,ref}}{\mathcal{N}u_{p,ref}} \simeq (A \exp(-BL_{box}) + C) \mathcal{P}e^{-\eta} \quad (2.27)$$

where the value of parameters A , B , C and η depend on the kernel function type only. The value of η for all kernels computed with our simulation results is in the range $[0.3 : 0.4]$, confirming the scaling with the boundary layer thickness. C is zero for kernel 0 and kernels of type A such that $\widetilde{\mathcal{N}u}_p(L_{box})$ tends to $\mathcal{N}u_{p,ref}$ as L_{box} increases. Conversely, C is non-zero for kernels of type B. In fact, for kernels of type B, as the kernel function does not depend on L_{box} , the correction above saturates to $C \mathcal{P}e^{-\eta}$ for $L_{box} \gtrsim 3 - 4L_e$. 2.27 is however nothing more than an ad hoc correction in dilute regimes and could presumably be useful in Euler-Lagrange/point-particle modelling in the spirit of [102].

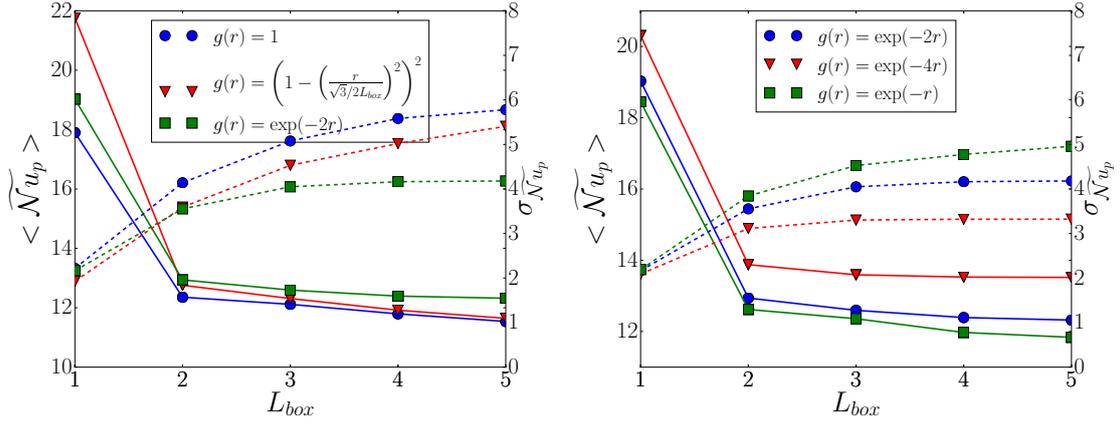
4.2.3 Effect of filtering kernel properties on average heat transfer in a moderately dense bed

We consider a flow configuration with $\alpha_c = 0.7$, $Re = 72$ and $Pr = 1$ as a representative moderately dense bed test case to illustrate the effects of kernel type and support size on the Nusselt number distribution. We select kernel 0, kernel 3 of type A, and 3 kernels of type B with various exponential decay rates, i.e., various actual support size. We plot the mean Nusselt number $\langle \widetilde{Nu}_p \rangle = \frac{1}{N_{part}} \sum_{i=1}^{N_{part}} \widetilde{Nu}_{p,i}$, where $\widetilde{Nu}_{p,i}$ is the filtered Nusselt number around particle i , and its variance $\sigma_{\widetilde{Nu}_p}$ as a function of L_{box} for the 5 selected kernel functions in FIG. 2.9. For all the considered kernel functions, $\langle \widetilde{Nu}_p \rangle$ is almost independent of L_{box} for $L_{box} \gtrsim 2$ while $\sigma_{\widetilde{Nu}_p}$ requires larger control volumes to reach a L_{box} -independent magnitude, of the order of $L_{box} \gtrsim 4$.

As L_{box} increases, Kernel 0 and type A kernels yield an almost similar $\langle \widetilde{Nu}_p \rangle$ while type B kernels lead to values of $\langle \widetilde{Nu}_p \rangle$ showing a maximum of 15% difference (between kernel 6 and kernel 9) depending on the kernel function, as shown in FIG. 2.9a. Let us underscore that the choice of $L_{box} = 1$ is not suitable for obvious geometric reasons as the control volume is of exactly the same size as the particle and hence some parts of the boundary layer are discarded (the 6 poles that touch the 6 control volumes faces) but is plotted here as an asymptotic choice to emphasize the strong impact of the control volume size for small L_{box} , i.e., from 1 to 2. $\langle \widetilde{Nu}_p \rangle$ computed using $L_{box} = 1$ is largely overestimated, confirming the irrelevance of this control volume size and its use as an asymptotic case only.

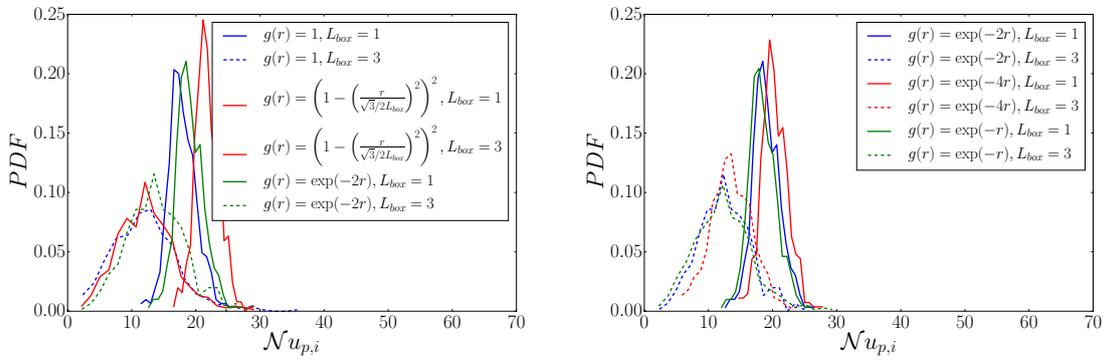
FIGS. 2.9b and 2.9d illustrate the effect of the exponential decay rate, i.e., of L_e , for type B kernels. Kernel 8, that exponentially decays as $-4r$, i.e., $L_e = 0.25$, yields values of $\langle \widetilde{Nu}_p \rangle$ and $\sigma_{\widetilde{Nu}_p}$ independent of L_{box} for rather small values of L_{box} , about $L_{box} \gtrsim 2$. In fact, only the region very close to the particle boundary is actually accounted for to compute the fluid filtered average temperature, the fast spatial exponential decay discarding any contribution located beyond ≈ 1 diameter away from the particle boundary. Collective effect is attenuated as the temperature disturbance related to the neighbouring particles is partly neglected. With kernel 8, as for an isolated particle, the average fluid temperature surrounding a particle is hence over-estimated, leading to an under-estimated temperature difference with the fixed particle temperature, in turn leading to a slightly over-estimated $\langle \widetilde{Nu}_p \rangle$, as highlighted in FIG. 2.9b ($\langle \widetilde{Nu}_p \rangle \simeq 14$ with kernel 8 and $\langle \widetilde{Nu}_p \rangle \simeq 12$ for other type B kernels). Conversely, type B kernels with relatively slow exponential decay yield similar results to those yielded by kernel 0 and type A kernels.

In general, all kernels except type B kernels with fast spatial exponential decay yield similar values of $\langle \widetilde{Nu}_p \rangle$. This observation does not apply to the variance $\sigma_{\widetilde{Nu}_p}$, that exhibits variations of the order of 50%, even if we exclude fast spatial exponential decay kernels as, e.g., kernel 8. While type B kernels with fast spatial exponential decay do not seem to be suitable, it is rather hard at that stage to discriminate the other filtering kernel functions as the correct value of the variance $\sigma_{\widetilde{Nu}_p}$ is unknown. For simplicity, we hence select kernel 0 thereafter and investigate further the impact of the control volume size L_{box} .



(a) Effect of kernel type and of L_{box} on average value and standard deviation

(b) Effect of exponential decay rate for type B kernels and of L_{box} on average value and standard deviation



(c) Effect of kernel type and of L_{box} on PDF

(d) Effect of exponential decay rate for type B kernels and of L_{box} on PDF

FIGURE 2.9 – Effect of kernel type and control volume size L_{box} on the filtered particle Nusselt number distribution, average value and standard deviation.

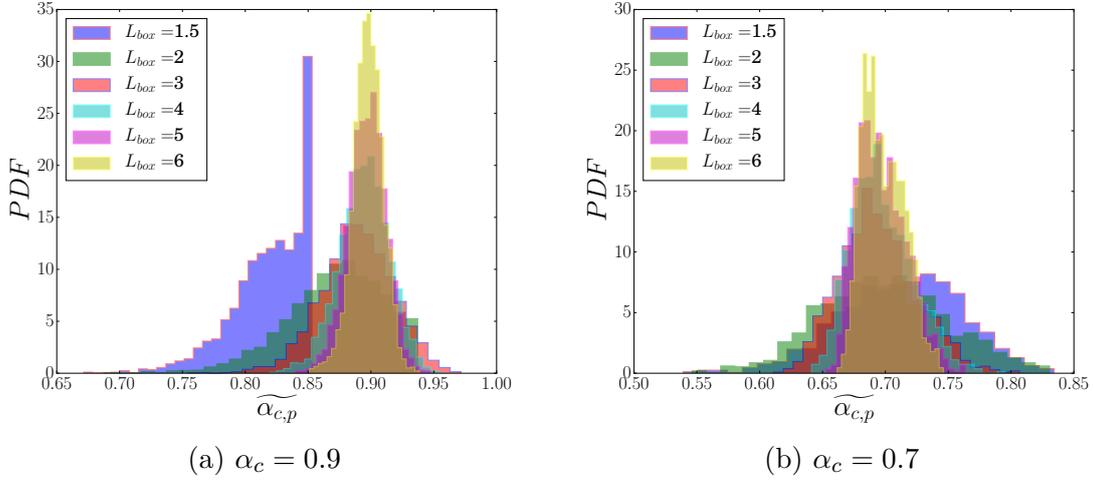


FIGURE 2.10 – PDF of kernel 0 filtered porosity $\widetilde{\alpha}_{c,p}$ as a function of control volume size L_{box} .

4.2.4 Effect of control volume size L_{box} on local properties : hydrodynamics and heat transfer

We select the following cases : $\alpha_c = \{0.7, 0.9\}$, $Re = \{18, 36, 72\}$ and $Pr = \{1, 2.5, 5\}$, use kernel 0 and examine the effect of the control volume size $L_{box} \in [1.5, 6]$ on the following filtered flow properties : porosity, velocity and Nusselt number. Fluid-particle heat transfer depend on the local porosity and the way temperature is transported in the flow. This creates incentives to analyze the effect of L_{box} on porosity and velocity as a premise to heat transfer.

FIGS. 2.10a and 2.10b illustrate the effect of L_{box} on the local filtered porosity for $\alpha_c = 0.9$ and $\alpha_c = 0.7$, respectively. Note that from now on we do not consider the irrelevant asymptotic case $L_{box} = 1$. For the moderately dense system $\alpha_c = 0.7$, all control volume sizes yield the right $\langle \widetilde{\alpha}_{c,p} \rangle = \frac{1}{N_{part}} \sum_{i=1}^{N_{part}} \widetilde{\alpha}_{c,p,i}$, where $\widetilde{\alpha}_{c,p,i}$ is the filtered porosity around particle i . In fact, all PDFs are centered on 0.7 in FIG. 2.10b. For the dilute system $\alpha_c = 0.9$, the same comment applies except for $L_{box} = 1.5$ and $L_{box} = 2$. For these two values of L_{box} , FIG. 2.10a shows that corresponding PDFs are not centered on the right value, i.e., 0.9, and do not exhibit any symmetry with respect to the mean value. This is geometrically straightforward to understand. For too small control volumes, the particle on which the control volume is centered has an over-estimated contribution to the solid volume fraction in the control volume, leading to underestimated porosity. Regardless of the value of α_c , large control volumes yield PDFs that are centered on the expected value of the filtered porosity but with a small $\sigma_{\widetilde{\alpha}_{c,p}}$ (i.e., small width of the distribution). Too large control volumes average too much local filtered properties that thereby become global properties, in other words we loose the very notion of locality. Once again, there are no theoretical arguments to define what should be the upper bound of the control volume size, but at least we can deduce from FIGS. 2.10a and 2.10b what is the lower bound. Based on the above, it seems that an

adequate control volume size for $\alpha_c = 0.9$ and $\alpha_c = 0.7$ is $L_{box} \simeq 3$ to properly capture the local microstructure.

We plot in FIGS. 2.11a and 2.11b the distribution of pairs of filtered $(\widetilde{\alpha_{c,p}}/\alpha_c, \widetilde{u_{z,p}}/\alpha_c)$, where $\widetilde{u_{z,p}}$ is the filtered z (i.e., axial or streamwise) velocity component around a particle, as a function of $L_{box} \in [2, 5]$ for $Re = 18$ and $Re = 72$, respectively. As expected, for both Re and all control volume sizes, the resulting distribution in the 2D plane $(\widetilde{\alpha_{c,p}}/\alpha_c, \widetilde{u_{z,p}}/\alpha_c)$ is centered on $(1, 1)$, i.e., centered on global porosity and imposed dimensionless effective streamwise velocity in the bed. Also, the general trend is an increase of the streamwise velocity with increasing porosity, representative of the well documented channeling effect in flows through a porous media. The distribution of pairs of filtered $(\widetilde{\alpha_{c,p}}/\alpha_c, \widetilde{u_{z,p}}/\alpha_c)$ is once again rather wide, especially for small control volumes, and regions of the flow with low porosity and high streamwise velocity (and vice versa) are not uncommon. The projection of the 2D distribution on the $\widetilde{\alpha_{c,p}}/\alpha_c$ axis (right of each plot) and $\widetilde{u_{z,p}}/\alpha_c$ axis (top of each plot) gives standard 1D PDFs but do not contain the relationship between $\widetilde{\alpha_{c,p}}$ and $\widetilde{u_{z,p}}$ anymore (please note that $\widetilde{\alpha_{c,p}}/\alpha_c$ PDFs on the right of FIGS. 2.11a and 2.11b are the exact same as in FIG. 2.10b normalized by α_c for $L_{box} \in [2, 5]$). FIGS. 2.11a and 2.11b attest of the fact that in the range $Re \in [18, 72]$, there are no fundamental differences in the distribution of pairs of filtered $(\widetilde{\alpha_{c,p}}/\alpha_c, \widetilde{u_{z,p}}/\alpha_c)$. It is highly plausible that a wider range of Re would lead to more tangible differences, but this is beyond the scope of this paper.

We present similar results in FIG. 2.12 but in a slightly different way. First, we plot distributions obtained with $L_{box} = 3$ as deviations to the mean value (dots in FIG. 2.12) as a function of Re and superimpose the ellipsoidal contour of distributions of deviations to the mean value computed with the following L_{box} : black for $L_{box} = 2$, green for $L_{box} = 3$, grey for $L_{box} = 4$ and white for $L_{box} = 5$. Second, we also plot in the same manner the distribution of the deviation of the transverse velocity $\widetilde{u_{T,p}} = \widetilde{u_{y,p}}$ with respect to its mean value $\langle \widetilde{u_{T,p}} \rangle$ (Notes : (i) we select the y -component as representative of the transverse velocity ; we verified that the x -component shows similar results as the domain is transversely bi-periodic, as in [65, 66], (ii) since $\langle \widetilde{u_{T,p}} \rangle = 0$, the deviation corresponds to $\widetilde{u_{T,p}}$ itself, i.e., $\widetilde{u_{T,p}} - \langle \widetilde{u_{T,p}} \rangle = \widetilde{u_{T,p}}$, and we cannot normalize by $\langle \widetilde{u_{T,p}} \rangle$). Both FIG. 2.12a and FIG. 2.12b once again emphasize that Re in the range [18, 72] has a negligible impact on velocity distributions. To be more quantitative, we perform a Principal Component Analysis of our distribution of filtered $((\widetilde{\alpha_{c,p}} - \alpha_c)/\alpha_c, (\widetilde{u_{z,p}} - \langle \widetilde{u_{z,p}} \rangle)/\langle \widetilde{u_{z,p}} \rangle)$ and $((\widetilde{\alpha_{c,p}} - \alpha_c)/\alpha_c, \widetilde{u_{T,p}})$ and compute the 2 eigenvectors. For both $((\widetilde{\alpha_{c,p}} - \alpha_c)/\alpha_c, (\widetilde{u_{z,p}} - \langle \widetilde{u_{z,p}} \rangle)/\langle \widetilde{u_{z,p}} \rangle)$ and $((\widetilde{\alpha_{c,p}} - \alpha_c)/\alpha_c, \widetilde{u_{T,p}})$, the orientation and norm of the eigenvector related to the first principal component changes by less than 5% when Re varies from 18 to 72. We plot in FIG. 2.12a and FIG. 2.12b the 2 eigenvectors shifted such that their origin is at the mean in light blue for $Re = 18$. In FIG. 2.12b, the 2 eigenvectors are quasi aligned with the axis directions, indicating that there is no particular correlation between average transverse velocity and porosity.

We now turn our attention to heat transfer. We plot in FIGS. 2.13a and 2.13b the PDFs of $\widetilde{Nu_p}$ computed with $L_{box} = 3$ as a function of $Pr = 1$ and $Re = \{18, 36, 72\}$, and $Pr = \{1, 2.5, 5\}$ and $Re = 18$, respectively. As predicted by classical correlations, FIGS. 2.13a and 2.13b

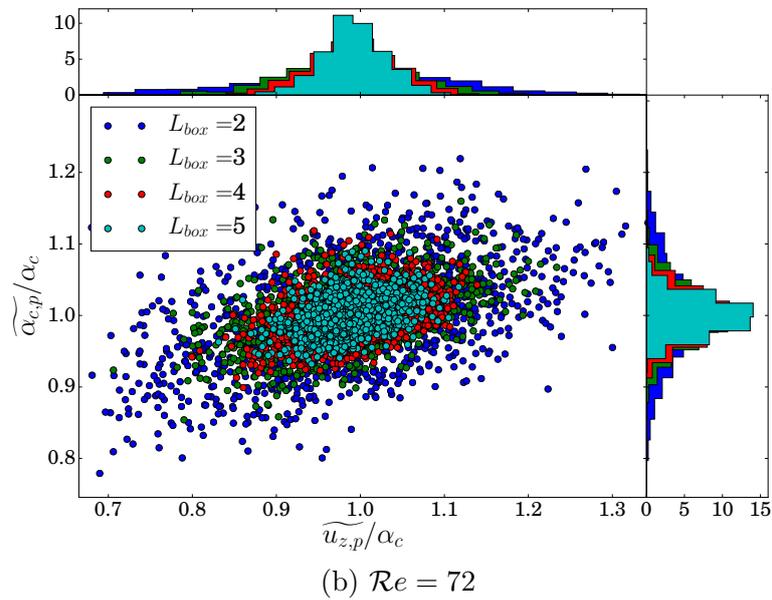
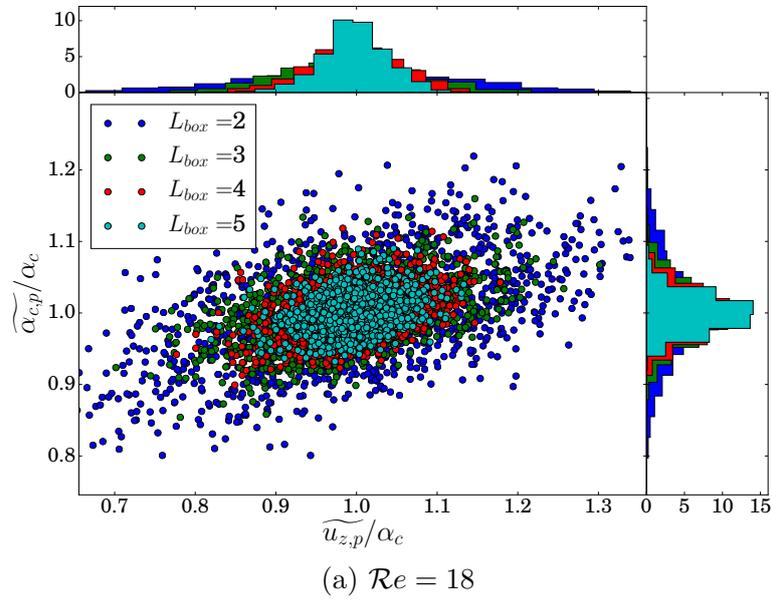
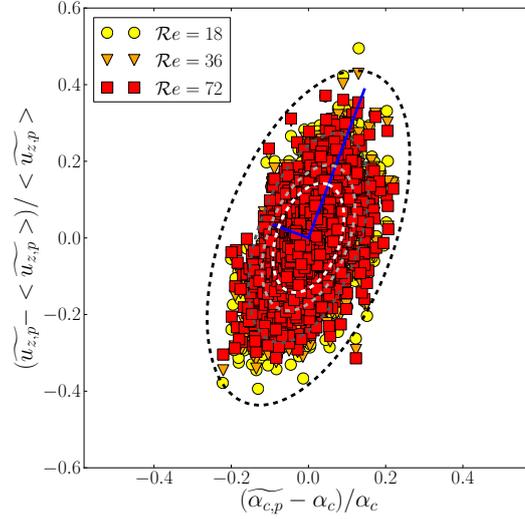
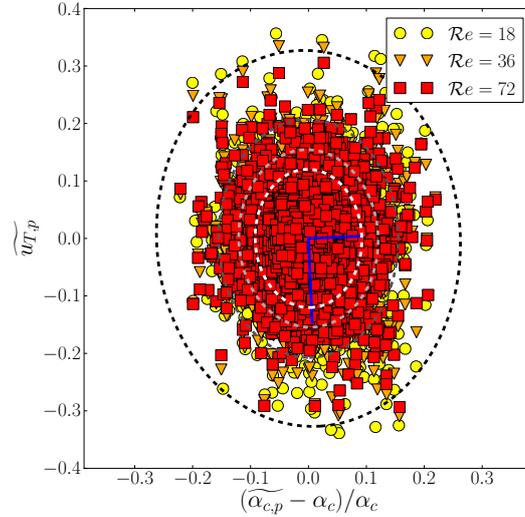


FIGURE 2.11 – 2D distribution of normalized kernel 0 filtered porosity and effective kernel 0 filtered streamwise velocity component as a function of control volume size L_{box} for $\alpha_c = 0.7$, $Pr = 1$ and (a) $Re = 18$ and (b) $Re = 72$.



(a) streamwise velocity component



(b) transverse velocity component

FIGURE 2.12 – 2D distribution of normalized kernel 0 filtered porosity deviation from mean porosity and kernel 0 filtered velocity deviation from mean velocity for $\alpha_c = 0.7$, $Pr = 1$ and $Re = 18, 36, 72$: (a) streamwise velocity component and (b) transverse velocity component. Ellipsoidal contours correspond to different L_{box} : black for $L_{box} = 2$, green for $L_{box} = 3$, grey for $L_{box} = 4$ and white for $L_{box} = 5$.

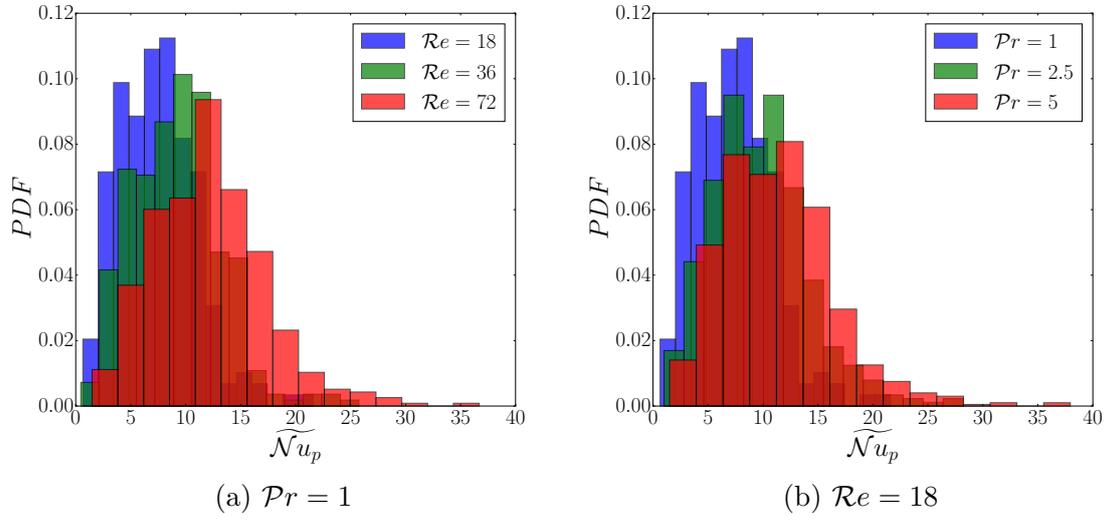


FIGURE 2.13 – PDF of kernel 0 filtered particle Nusselt number computed with $L_{box} = 3$ as a function of (a) Reynolds number and (b) Prandtl number.

attest of the increase of our average filtered Nusselt number $\langle \widetilde{\mathcal{N}}u_p \rangle$ with Re and Pr . It is rather visible that for a fixed control volume size ($L_{box} = 3$ here), Re has a rather limited impact of the standard deviation of the PDF while Pr has conversely a strong impact as shown in FIG. 2.13b. This is related to the scaling of the thermal boundary layer with Pr . In a similar fashion as in FIG. 2.11 for filtered velocity-porosity pairs, we plot in FIGS. 2.14a and 2.14b the distribution of pairs of filtered $(\widetilde{\alpha}_{c,p}/\alpha_c, \widetilde{\mathcal{N}}u_p / \langle \widetilde{\mathcal{N}}u_p \rangle)$ in a control volume around each particle as a function of $L_{box} \in [2, 5]$ for $Re = 18$ and $Re = 72$, respectively. Interestingly, increasing the control volume size L_{box} has a less significant effect on $\widetilde{\mathcal{N}}u_p$ than on the velocity components, i.e., on the filtered \widetilde{Re}_p around a particle. Another remarkable feature is the asymmetry of the $\widetilde{\mathcal{N}}u_p$ distribution. In fact, the projected 1D PDF on the top of both FIG. 2.14a and FIG. 2.14b exhibits a long tail for $\widetilde{\mathcal{N}}u_p$ larger than $\langle \widetilde{\mathcal{N}}u_p \rangle$. To emphasize this feature even more, we plot in FIG. 2.15 the PDF of the deviation to $\langle \widetilde{\mathcal{N}}u_p \rangle$. As observed in previous studies [162, 224], the distribution of $(\widetilde{\mathcal{N}}u_p - \langle \widetilde{\mathcal{N}}u_p \rangle) / \langle \widetilde{\mathcal{N}}u_p \rangle$ follows a log-normal distribution, regardless of the control volume size $L_{box} \geq 2$ (see FIG. 2.15). The standard deviation of this distribution is $\sigma_{(\widetilde{\mathcal{N}}u_p - \langle \widetilde{\mathcal{N}}u_p \rangle) / \langle \widetilde{\mathcal{N}}u_p \rangle} = 0.435$, in very satisfactory agreement with the value provided by Municchi and Radl [162].

Based on our results, we examine for a pair of (Pr, α_c) and different $L_{box} \in [2, 5]$ how the average Nusselt number $\langle \widetilde{\mathcal{N}}u_p \rangle$ correlates with Re in FIG. 2.16 and with Pe in FIG. 2.17. We would like to make the following main comments about these two plots : (i) it is pretty clear that $\langle \widetilde{\mathcal{N}}u_p \rangle$ does not correlate well with Pe , regardless of L_{box} , which justifies why most Nusselt number correlations in the literature are written in terms of (Pr, Re) and not of Pe to account for the distinct effects of Re and Pr (in FIG. 2.17 for a given value of Pe corresponding to different pairs (Pr, Re) there exists different values of $\langle \widetilde{\mathcal{N}}u_p \rangle$), and (ii) the filter size has a non

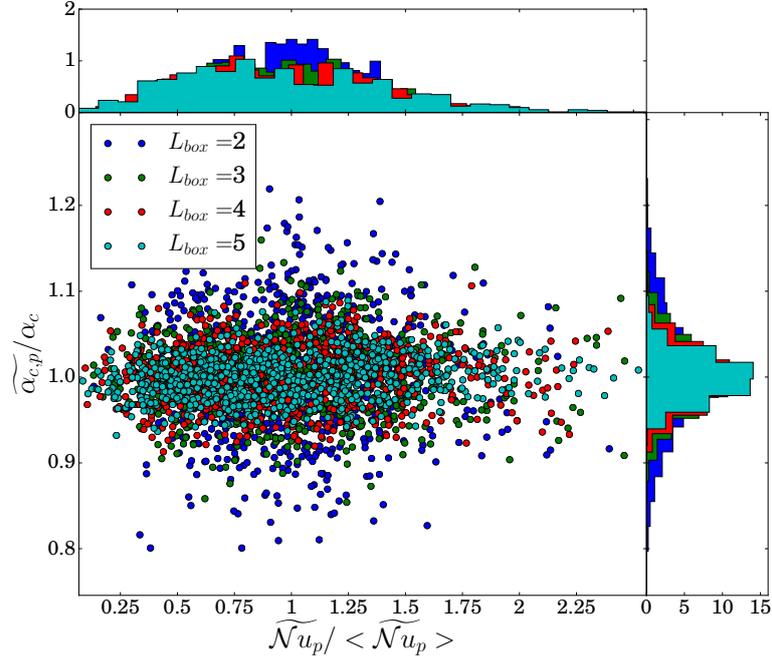
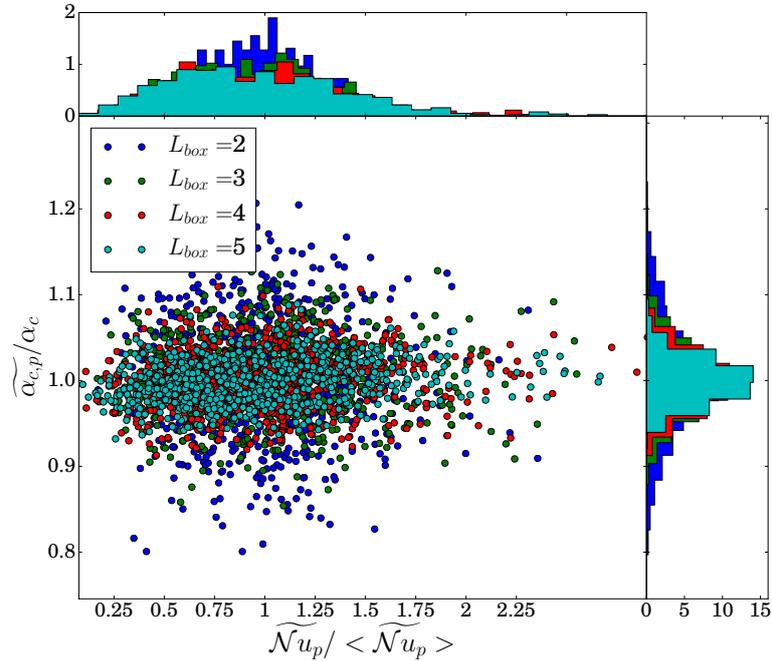
(a) Evolution of $\mathcal{N}u$ with α_c , $Re = 18$ (b) Evolution of $\mathcal{N}u$ with α_c , $Re = 72$

FIGURE 2.14 – 2D distribution of normalized kernel 0 filtered porosity and normalized kernel 0 filtered particle Nusselt number as a function of control volume size L_{box} for $\alpha_c = 0.7$, $\mathcal{P}r = 1$ and (a) $Re = 18$ and (b) $Re = 72$.

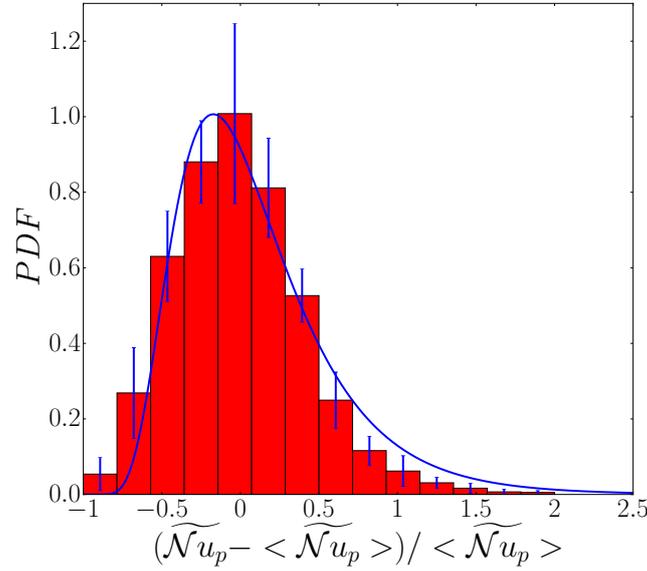


FIGURE 2.15 – PDF of kernel 0 filtered particle Nusselt number normalized deviation from mean particle Nusselt number. The PDF is fitted with a log-normal distribution and its computed standard deviation is $\sigma_{(\widetilde{\mathcal{N}u_p} - \langle \widetilde{\mathcal{N}u_p} \rangle) / \langle \widetilde{\mathcal{N}u_p} \rangle} = 0.435$.

negligible influence on the computed $\langle \widetilde{\mathcal{N}u_p} \rangle$ and this influence diminishes with decreasing α_c and decreasing Re . There is however nothing surprising in these results. High porosity and diffusive heat transfer regimes lead to thicker boundary layers that require large filter sizes to capture the multi-particle interactions. In other words, correlations extracted from PRS intrinsically contain the effect of the way the detailed features of the flow are filtered.

A summary of elements presented in this section is as follows :

- as already suggested in [65, 162] for drag coefficients and in [49, 162] for Nusselt numbers, transfer coefficients for a set of governing parameters form a distribution. For drag coefficients, we showed in [65] that for a pair of local filtered $(\widetilde{\mathcal{R}e}_p, \widetilde{\alpha}_{c,p})$, the drag coefficient does not have a deterministic value but spans a range of values that is well described by a PDF. In [66], we showed that the features of the distribution of filtered properties depend on the filter size. Results presented above for heat transfer follow the same line. The Nusselt number corresponding to a triplet $(Pr, \widetilde{\mathcal{R}e}_p, \widetilde{\alpha}_{c,p})$ does not have a deterministic value but can be described by a distribution. We have shown that both the average value and the standard deviation of these distributions are sensitive to the filter size and that this sensitivity varies with the magnitude of the 3 parameters Pr , $\widetilde{\mathcal{R}e}_p$ and $\widetilde{\alpha}_{c,p}$.
- the filter size affects the way a correlation is constructed as it influences the magnitude of the relevant far-field properties, assuming that the average flow properties around a particle as computed by the filter are indeed the relevant quantities to input in the correlation.
- $\langle \widetilde{\mathcal{N}u_p} \rangle$ correlations inherently predict a deterministic value as they consider an average

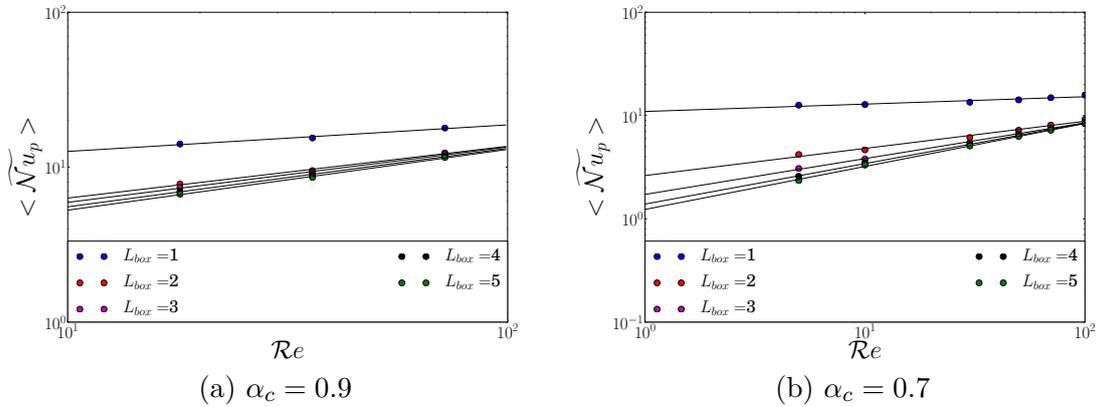


FIGURE 2.16 – Kernel 0 filtered mean particle Nusselt number as a function of Reynolds number and control volume size L_{box} for (a) $\alpha_c = 0.9$ and (b) $\alpha_c = 0.7$.

(filtered) porosity $\widetilde{\alpha_{c,p}}$ around each particle while PRS results suggest a distribution. The existence of such a distribution (for any transfer coefficient) in particle-laden flows stems from the actual local microstructure of the particle assembly around a given particle that is not captured by the average porosity. For a given $\widetilde{\alpha_{c,p}}$, the actual position of neighboring particles matters and different layouts lead to different values of transfer coefficients. This is true for any filter size. The filter size impacts the standard deviation of the observed distribution, not the very fact that this distribution exists. Recent works have tried to account for this fundamental notion of a distribution for drag coefficients (i) by suggesting an ad-hoc stochastic drag model in [64] or (ii) by incorporating pairwise corrections based on the actual positions of neighboring particles (the so-called PIEP, for pairwise interaction extended point-particle, model) in [7]. Obtained results on momentum transfer using the corrected models both in [64] and in [7] show promises for enhanced predictions. The same ideas could easily be extended to the Nusselt number.

4.3 Wake effect on local heat transfer

Following the analysis carried out in *Section 2.A.4* for aligned spheres and in the spirit of the PIEP model of Akiki *et al.* [7], we analyze here wake effects on heat transfer associated to pairwise interactions in our random arrays of spheres. We select the case $\alpha_c = 0.7$ with $\mathcal{R}e \in \{18, 36, 72\}$ and $\mathcal{P}r \in \{1, 2.5, 5\}$, i.e. $\mathcal{P}e \in [18, 360]$. The objective is to gain more insight into the effect of the local microstructure on fluid-particle heat transfer. To quantify pairwise disturbances, we compute the relative difference between the Nusselt numbers of two close particles. Considering a reference particle i and a neighboring particle j , we hence compute $\Delta \mathcal{N}u = (\widetilde{\mathcal{N}u_{p,i}} - \widetilde{\mathcal{N}u_{p,j}}) / \langle \widetilde{\mathcal{N}u_p} \rangle$. For each particle i , we compute the main flow direction in the control volume surrounding the particle and construct conical/torus regions in the wake of particle i defined by an interparticle

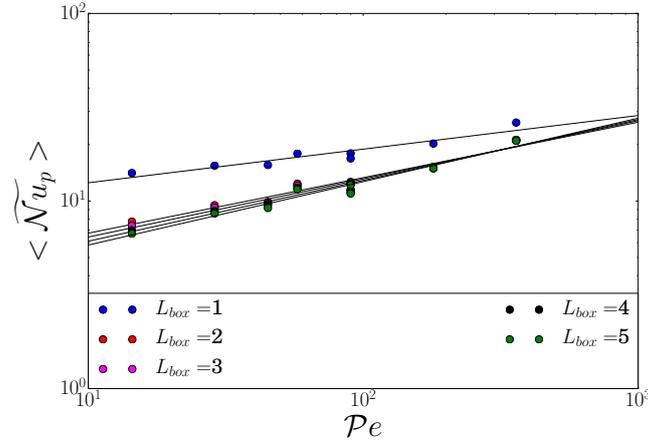


FIGURE 2.17 – Kernel 0 filtered mean particle Nusselt number as a function of Peclet number and control volume size L_{box} for $\alpha_c = 0.7$.

center-to-center distance d_{ij} , a length Δd_{ij} , an interparticle angle θ_{ij} and an aperture $\Delta\theta_{ij}$, as illustrated in FIG. 2.18.

We set $L_{box} = 3$. We perform ensemble averaging over all particles in the bed. The result is a function of d_{ij} and θ_{ij} . We then further average over all functions obtained for a pairs of (Re, Pr) to obtain a master function of d_{ij} and θ_{ij} only, in the range $Re \in [18, 72]$ and $Pr \in [1, 5]$. We plot both the average value of the function $\Delta\mathcal{N}u(d_{ij}, \theta_{ij}) = (\widetilde{\mathcal{N}u_{p,i}} - \widetilde{\mathcal{N}u_{p,j}}(d_{ij}, \theta_{ij})) / \langle \widetilde{\mathcal{N}u_p} \rangle$ and its standard deviation represented with error bars. Results are shown in FIG. 2.19.

In FIGS. 2.19a and 2.19b, we set $\Delta d_{ij} = 0.25$, $\Delta\theta_{ij} = 2\pi/18$, and plot $\Delta\mathcal{N}u(d_{ij}, \pi/18)$ (plain blue line) and $\Delta\mathcal{N}u(d_{ij}, 8\pi/18)$ (dashed red line) as a function of d_{ij} . In the convection dominated regimes considered, FIG. 2.19a reveals that particles located in the close downstream region of another particle can undergo a decrease of up to 15% of their Nusselt number. As expected, this 15% decrease is attained for particles whose position is quasi-aligned with the main flow direction downstream the reference particle (see FIG. 2.19a), a configuration in which the thermal wake of the reference particle interacts the most with the downstream particle as already observed in the perfectly aligned configuration examined in *Section 2.A.4*. This effect also exhibits fast decay with inter-particle distance. In fact, for $d_{ij} > 1.5$, $\Delta\mathcal{N}u(d_{ij}, \pi/18)$ oscillates around or is close to 0, indicating that significant hindering wake effects occur only for short inter-particle distances. $\Delta\mathcal{N}u(d_{ij}, 8\pi/18)$ plotted in FIG. 2.19b is relevant to particles nearly side-by-side and mostly oscillates or is close to 0. This is in line with the convection dominated regimes considered. In more conductive regimes, the decay with the relative angular position would be much slower. FIG. 2.19c complements the general picture by emphasizing the effect of angular position at short inter-particle distance. In fact, we set $d_{ij} = 1.25$, $\Delta d_{ij} = 0.25$ (this corresponds to considering all downstream particles that satisfy $d_{ij} \leq 1.5$, i.e. pairs of particles that are closer than a half diameter), $\Delta\theta_{ij} = \pi/18$ and plot $\Delta\mathcal{N}u(1.25d_p, \theta_{ij})$ as a function of θ_{ij}/π . Once again, only quasi aligned downstream particles feel a significant effect of the reference upstream particle on their

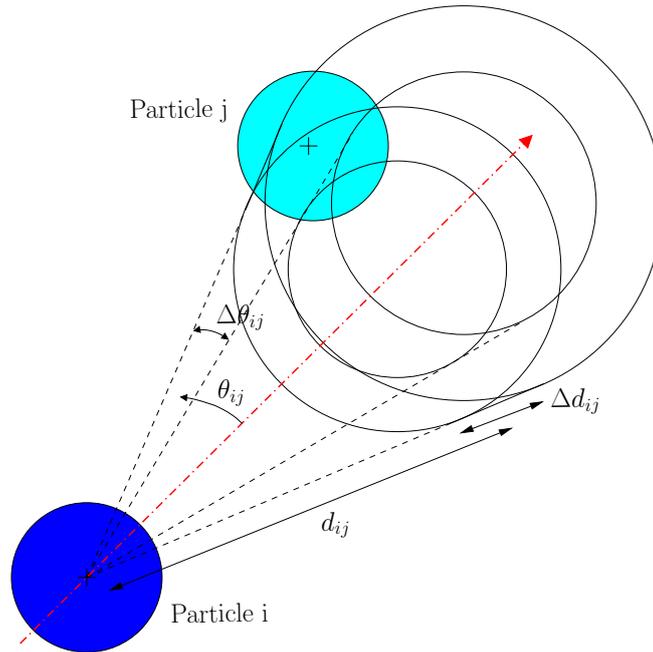
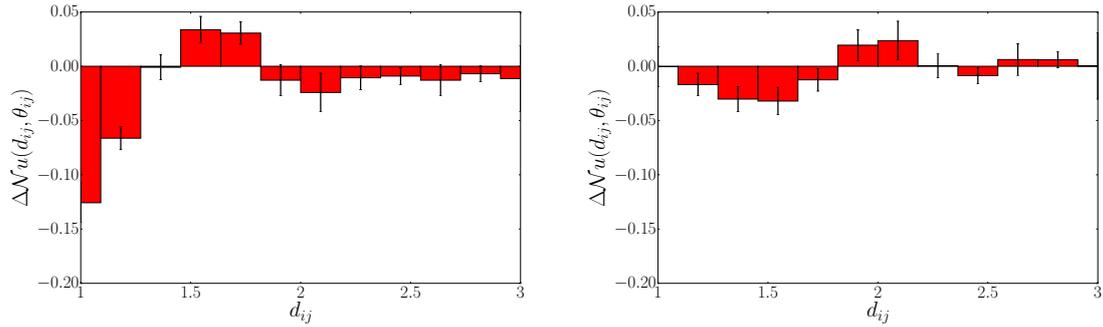


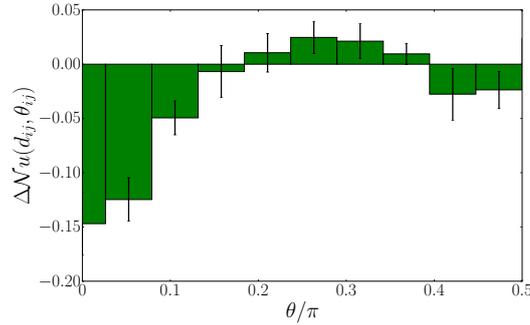
FIGURE 2.18 – Conical/torus regions in the wake of particle i defined by an interparticle distance d_{ij} , a length Δd_{ij} , an interparticle angle θ_{ij} with respect to the main flow direction shown by the dashed-dotted red arrow and an aperture $\Delta\theta_{ij}$.

Nusselt number. The effect decays rather fast with the angular position and for $\theta_{ij}/\pi > 0.1$ is almost insignificant.

This analysis can be easily extended to other flow regimes and porosity. However, results shown above already attest of the importance of the local microstructure on heat transfer, as much as on momentum and/or mass transfer. In convection dominated regimes, thermal wake interactions related to specific particle positions lead to non-negligible change of the magnitude of the Nusselt number. This effect can be captured by the knowledge of the exact particle positions in the bed only, and not by the average porosity around a particle. The PIEP model of Akiki *et al.* [7] proposes to correct the fluid-particle momentum transfer law by incorporating pairwise corrections of the undisturbed velocity field. This approach, that looks promising as it relies on well established theoretical arguments, is susceptible to be extended to heat transfer. The assumption of additive pairwise corrections is central to the model and certainly deserves to be examined further, especially in the context of an extension to heat transfer as the temperature perturbation cannot be strictly added. Nonetheless, the PIEP model has already provided substantial improvements of the predictions of fluid-particle momentum transfer.



(a) $\Delta\mathcal{N}u$ as a function of d_{ij} for quasi-aligned particles . (b) $\Delta\mathcal{N}u$ as a function of d_{ij} for quasi-side-by-side particles.



(c) $\Delta\mathcal{N}u$ as a function of θ_{ij} for $d_{ij} < 1.5$.

FIGURE 2.19 – Difference between Nusselt numbers of two close particles $\Delta\mathcal{N}u = (\widetilde{\mathcal{N}u}_{p,i} - \widetilde{\mathcal{N}u}_{p,j}) / \langle \widetilde{\mathcal{N}u}_p \rangle$: (a) as a function of d_{ij} for $\theta_{ij} = \pi/18$ (quasi-aligned particles) with $\Delta d_{ij} = 0.25$ and $\Delta\theta_{ij} = 2\pi/18$, (b) as a function of d_{ij} for $\theta_{ij} = 8\pi/18$ (quasi-side-by-side particles) with $\Delta d_{ij} = 0.25$ and $\Delta\theta_{ij} = 2\pi/18$, and (c) as a function of θ_{ij} for $d_{ij} < 1.5$ with $\Delta\theta_{ij} = \pi/18$.

5 Discussion and perspectives

We provided novel data on fluid-particle heat transfer in the flow through a fixed bed of particles and addressed the question of filter properties in the analysis of the effect of microstructure on heat transfer. Data were obtained by a PRS simulation tool based on a Finite Volume/Staggered Grid DLM/FD method [245, 249, 268]. The primary result of this study is the effect of the filter support size on the standard deviation of the Nusselt number PDF.

Prior to carrying out the extensive analysis of our set of PRS data, we established the limits of validity of our numerical tool through a mesh convergence study as a function of (α_c, Re, Pr) . We then performed computations in regimes for which our computed data show a sufficient level of confidence, i.e., the error with respect to the solution extrapolated at zero grid size is less than $\sim 2\%$. We also emphasized the weakness of classical 1D models without streamwise thermal dispersion $\mathcal{P}e_{ax}$ in reproducing trends observed by many experimental studies [81, 135, 165], especially at low Re . Incorporating a correlation for $\mathcal{P}e_{ax}$ enables one to recover reasonably good predictions with the 1D model.

The core of this work is the effect of filtering in the process of attempting to extract new, and supposedly more accurate, knowledge from highly resolved simulations. Following previous works in our group on momentum transfer [64–66], we investigated the effect of the local microstructure on fluid-particle heat transfer in a random array of fixed spheres. We considered a large collection of filters and various control volume sizes centered at the particle gravity center. The role of these two parameters, mathematical form of the filter and filter support size, has been partly elucidated and led to the following main comments :

- regardless of the filter properties, it has been confirmed that for a given set of parameters $(\alpha_{c,p}, Re_p, Pr)$, $\mathcal{N}u_p$ is not a deterministic value but forms a distribution [162]. This derives from the loss of information associated to evaluating the average or filtered porosity around a particle. $\alpha_{c,p}$ appears to be a coarse descriptor of the local particle assembly microstructure. The actual microstructure, i.e., the actual position of close neighboring particles, for a given $\alpha_{c,p}$ affects significantly $\mathcal{N}u_p$. Classical $\mathcal{N}u_p$ correlations based on $\alpha_{c,p}$ predict average or mean values and are hence not capable of rendering the effect of the detailed local microstructure.
- both parameters have a limited impact on the mean value of the Nusselt number in the bed, provided the filter support size is not too small. In the flow regimes examined in this study, any filter support size (either L_{box} for kernel 0 and type A kernels, or L_e for type B kernels) larger than 2 – 3 leads to limited deviations of $\langle \widetilde{\mathcal{N}u_p} \rangle$, of the order of 20% maximum. Recent so-called improvements of well established correlations and slight variations of coefficients between different PRS based enhanced correlations [46, 214] may actually be the outcome of various filtering procedures only.
- the filter support size has a strong impact on the standard deviation of the PDF of $\widetilde{\mathcal{N}u_p}$ in the bed. This impact also depends on the thermal regime and how the filter support size compares to the thermal boundary layer thickness.

Beyond the important fundamental question of the relevant fluid temperature to consider around a particle in reconstructing a correlation (disturbed or undisturbed fluid temperature field),

the complementary and equally important question to address is the relevant length scale over which filtering should be performed. While a lower bound of filter support size can be rather easily determined by geometric arguments related to the local porosity, the upper bound is however an open question. Large filter support sizes have the expected tendency to smooth out the flow around a particle and consequently to literally annihilate the very notion of locality, thereby leading to a very narrow distribution of \widetilde{Nu}_p . A step forward may be to define a porosity and thermal regime dependent filter size, i.e., a $(\alpha_{c,p}, \mathcal{P}e_p)$ -dependent filter size. A porosity dependent filter size has already been suggested by Capecelatro *et al.* [28] in the context of Euler/Lagrange modelling of isothermal particle-laden flows. This idea deserves to be exploited further and applied to the filtering of PRS data.

To our opinion, the true challenge lying ahead is not yet another enhanced correlation for the average Nusselt number but most likely to characterize the distribution and to reintroduce the standard deviation into a correlation. Ultimately, these correlations will be used in Euler/Lagrange modelling and Euler/Euler modelling of particle-laden flows with heat and mass transfer. The need to incorporate the actual microstructure into classical transfer coefficient laws is a general issue that applies as much to momentum, to heat as to mass transfer. Recent developments for momentum transfer have tried to incorporate the actual microstructure either (i) through a purely statistical approach and the definition of a stochastic drag law [64] or (ii) through a better estimation of the undisturbed flow field (undisturbed in the sense undisturbed by the particle itself but disturbed by the close neighboring particles) by additive pairwise corrections and the use of Faxen corrections to compute the hydrodynamic force and torque [7]. Both these recent methods can be conceptually extended to heat transfer.

Finally, the notion of coherence of filter size in the construction of a correlation and its use is also an important point that has not been examined in details yet in the literature. As PRS has become an almost read-on-the-shelf simulation tool and modern supercomputers offer unprecedented computing power to massively parallel codes, unlimited amount of detailed data can now be generated and researchers purposely turn their attention to the analysis of these data, which involves filtering towards coarse grained models. A potential improvement may be to construct a correlation from PRS data with a given filter (mathematical form and support size) and to use this correlation in Euler/Lagrange numerical simulations with exactly the same filter (same mathematical form and same support size). This would not solve the problem of relevant average fluid fields (velocity, temperature, mass fractions) around a particle but would presumably bring coherence to the whole procedure.

Future work will include extension of the stochastic model developed for momentum transfer [64] to heat transfer for particle-laden flows with freely moving particles as, e.g., in a fluidized bed. Another active topic of research in our group is filtering PRS data close to walls (further details in *Appendix 2.C.3*). In fact, in this work, we have considered unbounded or periodic domains only and employed simple isotropic filters. Filtering along walls might necessitate to develop more advanced filters or to use mirroring techniques for particles that are closer to a wall than half the filter support size.

Appendices

2.A Accuracy of our DLM/FD-FV/SG method for heat transfer in single sphere configurations

We present here grid convergence results for (i) a single sphere and (ii) 3 spheres, in a large domain in three different heat transfer regimes : purely diffusive, moderately convective and strongly convective. We also shortly address the question of the distribution of Lagrangian points on the particle surface.

2.A.1 A single sphere in a large domain of quiescent fluid

We consider here the case of purely diffusive heat transfer, i.e., $Re = Pe = 0$. A sphere of diameter $d_p = 1$ with constant temperature T_p is immersed at $t = 0$ at the center of a box of length $L_x = L_y = L_z = 10$ filled with quiescent fluid at temperature T_∞ . At the early times $t > 0$, the fluid temperature profile satisfies the same heat equation problem as the temperature profile in an infinite domain $L_x = L_y = L_z \rightarrow \infty$. Introducing a diffusive time scale $\tau_c = d_p^{*2}/\alpha_f^*$ where $\alpha_f^* = k_f^*/(\rho_f^* C_{p,f}^*)$ is the fluid thermal diffusivity, the solution of this purely conductive heat transfer problem is easily derived by writing the problem in spherical coordinates as follows :

$$\frac{\partial T_f}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T_f}{\partial r} \right) \quad , \quad r > 0.5 \quad , \quad t > 0 \quad (2.28)$$

$$T_f(0.5, t) = T_p \quad , \quad T_f(r \rightarrow \infty, t) = T_\infty \quad (2.29)$$

$$T_f(r, 0) = T_\infty \quad , \quad r > 0.5 \quad (2.30)$$

The solution of problem 2.28-2.30 in terms of temperature profile and Nusselt number reads as follows :

$$T_f(r, t) - T_\infty = \frac{1}{2r} \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{r - 0.5}{\sqrt{4t}} \right) \right) \quad , \quad r > 0.5 \quad , \quad t > 0 \quad (2.31)$$

$$Nu(t) = 2 + \frac{1}{\sqrt{\pi t}} \quad , \quad t > 0 \quad (2.32)$$

FIG. 2.A.1 shows a comparison of the solution computed for $N_p = 16$ with the analytical solution at early times when 2.31 is valid. The agreement between the computed solution and the analytical solution is very satisfactory with a maximum relative error of less than 10^{-3} . A grid convergence (not shown here for the sake of conciseness) carried out with four grid resolutions ranging from $N_p = 16$ to $N_p = 36$ reveals that the order of convergence is around $p \approx 1$.

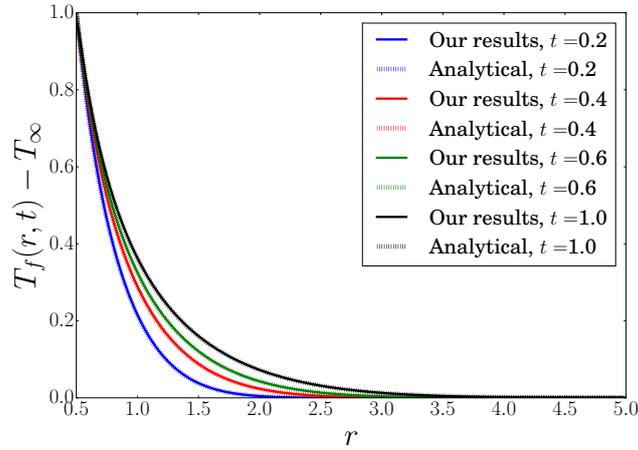


FIGURE 2.A.1 – Comparison of computed and analytical radial temperature profile time evolutions for the case of purely diffusive heat transfer from a sphere in an unbounded domain filled with quiescent fluid.

2.A.2 On the distribution of Lagrangian points over the spherical particle surface

The constraints 2.3 for the velocity and 2.5 for the temperature are imposed both at the particle surface and in the particle volume, contrary to most IBM implementations that only impose conditions on the surface and hence model rigid particles as rigid shells. At the discrete level, the constraints are imposed by a collocation method [82, 245] on a discrete set of points that uniformly cover the particle surface and the particle volume. Interior points are usually chosen as grid nodes while boundary points are distributed as uniformly as possible on the particle surface. The accuracy of the DLM/FD method essentially relies on how boundary point constraints are imposed. In [245], we showed that a quadratic reconstruction of the velocity at the boundary points combined to a distribution for spheres based on a generalized spiral set contribute to improve the accuracy of the computed solution. The free parameter in the generalized spiral set is the average spacing between boundary Lagrangian points. We showed in [245] that the optimal value for the velocity constraint is $s = 2h$. The average spacing between boundary Lagrangian points is found to mostly affect the magnitude of the error and less the order of convergence. D'Avino and Hulsen [44] also show the existence of an optimum number of collocation points to properly impose a boundary condition in a DLM/FD implementation. In their Finite Element implementation, this optimum is around one point per finite element.

Our goal here is to shortly verify that the optimal spacing $s = 2h$ also applies to the energy equation and the temperature constraint. To illustrate that this guideline still holds, we consider heat transfer in the flow past a sphere at $Pe = Re = 40$, i.e., $Pr = 1$. The domain is periodic in x and y directions. Boundary conditions are as follows :

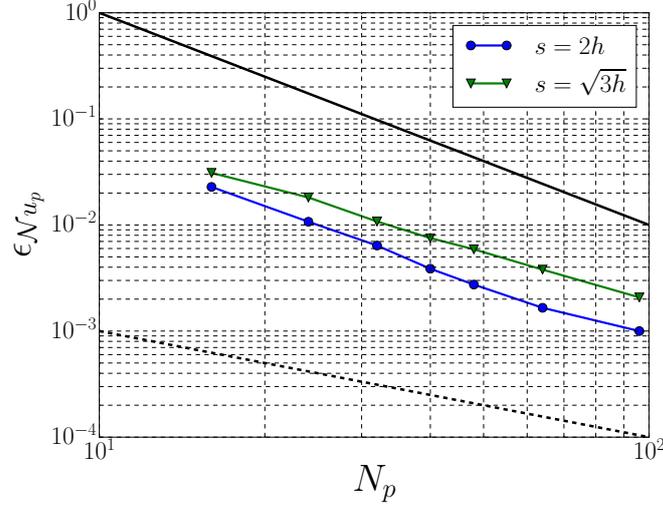


FIGURE 2.A.2 – Effect of average spacing between boundary Lagrangian points s on grid convergence of the computed solution : relative error on $N u_p$ for a single sphere in an unbounded domain at $Re = 40$ and $Pr = 1$.

— Entry

$$\mathbf{u}(x, y, 0) = (0, 0, 1) \quad , \quad T_f(x, y, 0) = T_{f,in} \quad (2.33)$$

— Exit

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z}(x, y, L_z) = \frac{\partial T_f}{\partial z}(x, y, L_z) = 0 \quad , \quad p(x, y, L_z) = p_{ref} = 0 \quad (2.34)$$

— Lateral walls : periodicity

$$\mathbf{u}(0, y, z) = \mathbf{u}(L_t, y, z) \quad , \quad T_f(0, y, z) = T_f(L_t, y, z) \quad (2.35)$$

$$\mathbf{u}(x, 0, z) = \mathbf{u}(x, L_t, z) \quad , \quad T_f(x, 0, z) = T_f(x, L_t, z) \quad (2.36)$$

We set $L_x = L_y = L_T = 6$ and $L_z = 10$. The particle gravity center coordinates are $(3, 3, 3)$. A series of computations with an increasingly refined mesh ranging from $N_p = 16$ to $N_p = 96$ is performed. The convergence of the computed solution is plotted in FIG. 2.A.2 for 2 different spacing between boundary Lagrangian points $s = 2h$ and $s = \sqrt{3}h$. These results confirm that the order of convergence is marginally better only for $s = 2h$ ($m = 1.85$) than for $s = \sqrt{3}h$ ($m = 1.52$) while the magnitude of the error is visibly reduced. From these observations, all our computed results are obtained with $s = 2h$.

2.A.3 Flow past a single sphere in heat transfer regimes from diffusive to strongly convective

We use the same flow configuration as in *Appendix 2.A.2* except that the streamwise length is set to $L_z = 35$. We vary Re and Pr to examine the following three heat transfer regimes : diffusive, moderately convective and strongly convective. We first set $Pr = 1$ and consider the

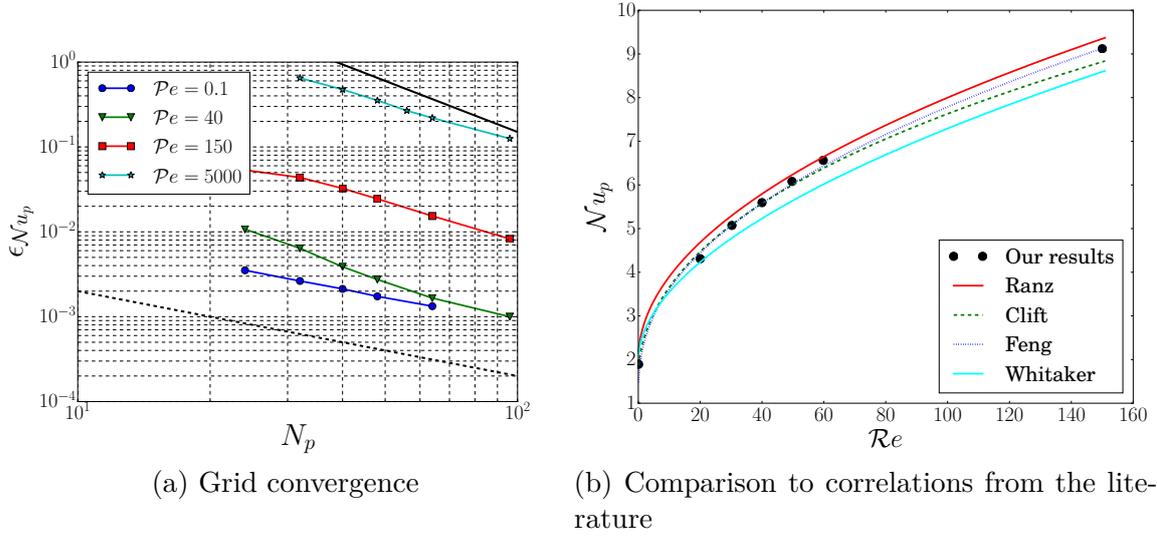


FIGURE 2.A.3 – A single sphere in an unbounded domain at various $\mathcal{P}e$: (a) grid convergence, relative error on $\mathcal{N}u_p$ and (b) comparison of our computed $\mathcal{N}u_p$ with assorted correlations from the literature.

following set of values for $Re = 0.1, 20, 30, 40, 50, 60, 150$ and then set $Pr = 10$ and $Re = 500$, we hence span the following values of $\mathcal{P}e = 0.1, 20, 30, 40, 50, 60, 150, 5000$. For each $\mathcal{P}e$ case, we perform a series of computations with an increasingly refined mesh ranging from $N_p = 16$ to $N_p = 96$.

The convergence of the computed $\mathcal{N}u$ with mesh refinement is shown in FIG. 2.A.3 for 4 values of $\mathcal{P}e$ representative of the different heat transfer regimes. A smooth convergence is observed in all cases, hence once again highlighting the efficiency of our DLM/FD-FV/SG method with a quadratic reconstruction at the boundary points and a spiral distribution of boundary Lagrangian points. In the diffusive regime, the order of convergence is only $m = 1$, i.e., linear, but the magnitude of the error is very small, in accordance with results presented in *Appendix 2.A.1*. In short, the diffusive regime is well captured even with $N_p = 16$ only. In convective regimes, the order of convergence improves to $m = 1.5$ but the magnitude of the error increases significantly with $\mathcal{P}e$. This is in agreement with our findings in [245] on the convergence of the velocity field around spheres and angular particles with the same DLM/FD-FV/SG method. Please note that even with $N_p = 96$, the error is still of the order of 0.1, i.e., 10% for $\mathcal{P}e = 5000$. With an order of convergence of $m = 1.5$, we would need to decrease the grid size up to $N_p \sim 700$ to yield an error of around 1 – 2%. This is absolutely not realistic and underscores the computational limit of a constant grid size approach. In fact, many grid points inside the particle and away from the thin boundary layer would be a waste of computational resources, only to capture the strong temperature gradients within the thin boundary layer and the temperature gradient discontinuity at the particle/fluid interface. In its current constant grid size implementation, our DLM/FD-FV/SG method is capable of supplying computed solutions of good accuracy up to $\mathcal{P}e \sim 500$. Above this

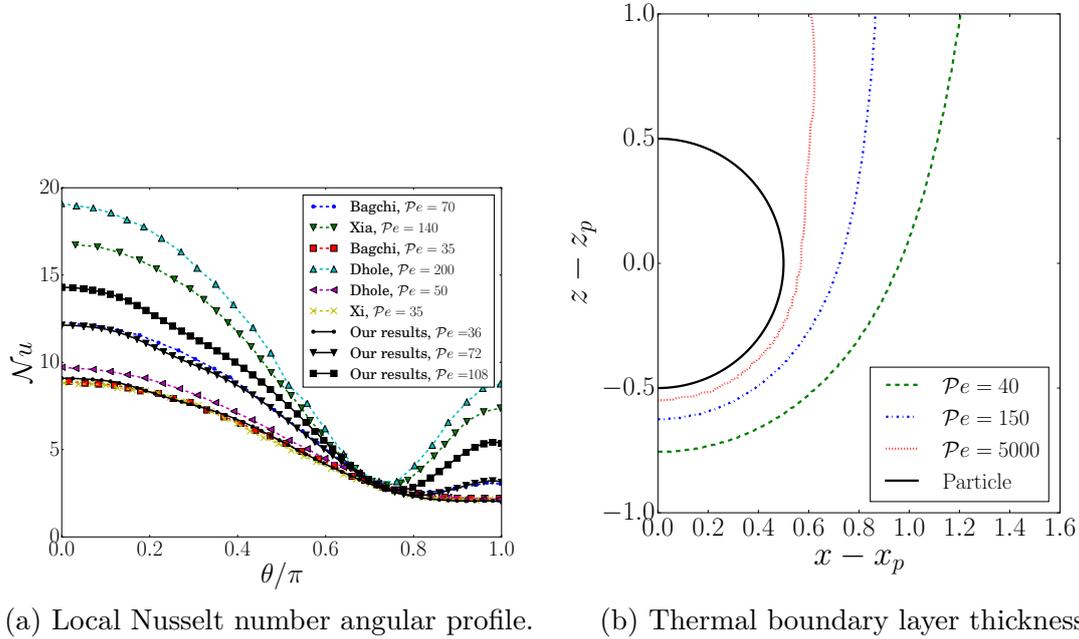


FIGURE 2.A.4 – A single sphere in an unbounded domain at various Pe : (a) profile of local Nu as a function of streamwise angular position, comparison to other results from the literature and (b) thermal boundary layer thickness around the sphere.

value the computational load would be beyond the capacity of most modern supercomputers. For $Pe > 500$, local mesh adaptation is certainly required. For instance, the aforementioned limitation may be circumvented by AMR methods [120, 121]. From the convergence plots, our results for convective regimes indicate a $Pe^{0.3} - Pe^{0.4}$ dependence of N_p to reach a given targeted error of, e.g., 2%, on the Nusselt number. This scaling is related to the thermal boundary layer that theoretically thins as $Pe^{-1/3}$. The accuracy of our computed solution relies on the ability to properly capture this thin boundary layer. From the classical definition of boundary layers [203], we extract from our simulation results the 99% iso-contour of temperature in FIG. 2.A.4b and use this contour to define the boundary layer thickness $\delta_{th,99}$ at an incident angle $\theta = 0$. We compute the Richardson extrapolation of $\delta_{th,99}$ to zero grid size and take this value as a reference (as in all our grid convergence tests). To obtain an error of less than 2% on the mean Nu and hence capture the thermal behavior of the sphere in a reasonably accurate way, a minimum of 4 grid points in $\delta_{th,99}$ is required.

For lower values of Pe , i.e., Pe in the range $[0 : 150]$, FIG. 2.A.3b shows a satisfactory agreement of computed Nusselt numbers with the available literature correlations or numerical results [36, 72, 187, 256]. The agreement is particularly satisfactory with the numerical results of Feng and Michaelides [72]. This has also been observed by Municchi and Radl [162] using OpenFOAM for their computations. The local Nusselt number angular profile over the sphere

surface for Reynolds numbers $Re = 40, 50, 150$ and $Pr = 0.72$ (i.e. $Pe = 36, 72, 108$) is plotted in FIG. 2.A.4a and compared to available literature data [12, 53, 260]. A very satisfactory agreement is observed for $Pe = 36$ and $Pe = 72$.

2.A.4 Forced convection over an in-line array of 3 spheres in an unbounded domain

This test case is inspired by Ramachandran *et al.* [184] and corresponds to forced convection past an in-line array of 3 spheres. A sketch of the configuration is shown in FIG. 2.A.5. Boundary conditions are as follows :

— Entry

$$\mathbf{u}(x, y, 0) = (0, 0, 1) \quad , \quad T_f(x, y, 0) = T_{f,in} = \frac{T_{f,in}^*}{T_p^* - T_{f,in}^*} \quad (2.37)$$

— Exit

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z}(x, y, L_z) = \frac{\partial T_f}{\partial z}(x, y, L_z) = 0 \quad , \quad p(x, y, L_z) = p_{ref} = 0 \quad (2.38)$$

— Lateral walls : free slip

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}(0, y, z) = \frac{\partial T_f}{\partial x}(0, y, z) = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}(L_T, y, z) = \frac{\partial T_f}{\partial x}(L_T, y, z) = 0 \quad (2.39)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y}(x, 0, z) = \frac{\partial T_f}{\partial y}(x, 0, z) = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y}(x, L_T, z) = \frac{\partial T_f}{\partial y}(x, L_T, z) = 0 \quad (2.40)$$

Following [184], the inter-particle gravity center distances $C_{i,j}$ are in the range [2, 6] and all particles exchange heat with the fluid. Other geometric features of our simulations are as follows : $L_{in} = 3$, $L_T = 6$, $L_{out} = 5$ and $L_z = L_{in} + C_{1,2} + C_{2,3} + L_{out}$. As preliminary tests, we carry out a study of the impact of L_{in} and L_{out} on the computed solution. We vary L_{in} between 1.5 and 5 and L_{out} between 2.5 and 10 and observed a maximum change of 3.4% and 0.1%, respectively, on the Nusselt number experienced by the spheres from the lowest values to the largest values of the inlet and outlet distances. Since L_{in} and L_{out} in the ranges investigated have a very minor impact on the computed solution, we set $L_{in} = 3$ and $L_{out} = 5$ thereafter. The primary interest of this flow configuration is the impact of wake effects on heat transfer. Following the work of Ramachandran *et al.* [184], other authors investigated this configuration [162, 224] as well as more complicated variants including wall effects [147], blowing spheres [127] or considering a unique thermally active sphere [24].

Considering different sets of $(C_{1,2}, C_{2,3}, Re)$ for $Pr = 0.72$, we summarize in TAB. 2.A.1 the error in % between our numerical results with $N_p = 32$ and those of [184]. TAB. 2.A.1 attests of a satisfactory agreement with [184] as well as with similar results published in [162, 224]. Then we set $C_{1,2} = C_{2,3} = 2$, $Re = 150$ and $Pr = 10$ and perform a series of computations with an increasingly refined mesh ranging from $N_p = 16$ to $N_p = 80$. The objective is to evidence the role of wake effects on heat transfer and its relationship to the computed solution accuracy. In fact, for the chosen set of parameters, the second and third (in the downstream direction) spheres directly interact with the wake of the upstream sphere. As heat is transported by the fluid velocity, the

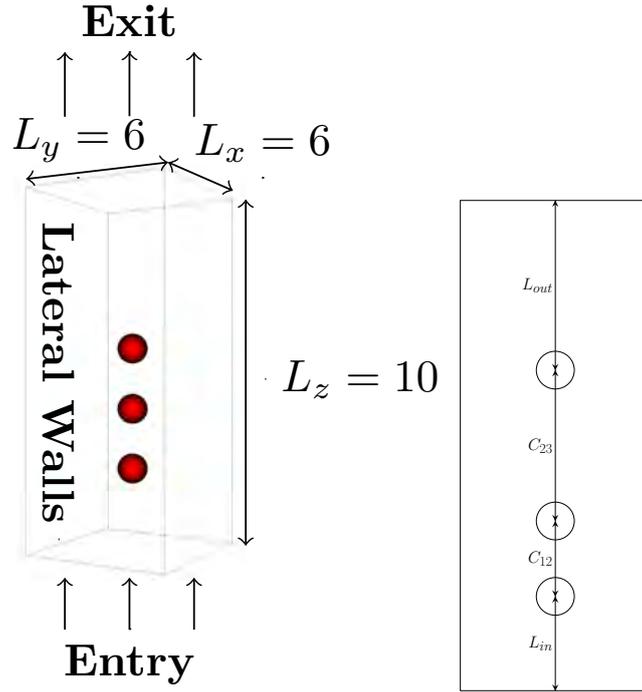


FIGURE 2.A.5 – In-line array of three spheres flow configuration and boundary labels : 3D configuration (left) and streamwise distances shown in a $x = 3$ cut plane (right).

accuracy of the computed temperature solution is thereby linked to the accuracy of the computed velocity solution. However, we are mostly concerned here with the accuracy of the temperature field and corresponding heat transfer (for a comprehensive study of the convergence of the velocity field, please see [245]). Finally, please note that $Pe = 1500$. This is already a pretty high value for our constant grid size method and hence represents a valuable and challenging test case.

We plot the convergence of the computed solution with mesh refinement in terms of global Nusselt number $\mathcal{N}u_g$ in FIG. 2.A.6a defined as :

$$\mathcal{N}u_g = \frac{d_p^* \sum_{i=1}^{N_{part}} \bar{q}_{p \rightarrow f, i}^*}{N_{part} k_f^* (T_s^* - T_{f,0}^*)} = \frac{1}{N_{part} k_f^* (T_s^* - T_{f,0}^*) \pi d_p^*} \sum_{i=1}^{N_{part}} \int_{\partial \mathcal{P}_i} -k_f^* \nabla^* T_f^* \cdot \mathbf{n} d\mathbf{S}^* \quad (2.41)$$

where $\bar{q}_{p \rightarrow f, i}^*$ is the average particle i to fluid heat flux per unit area, and individual $\mathcal{N}u_{p, i}$ per sphere in FIG. 2.A.6b. Here $N_{part} = 3$. The second and third spheres show a smooth convergence (respectively $m = 1.5$ and $m = 1.6$) with similar levels of error. These orders of convergence are typical of convective regimes according to *Appendix 2.A* and [245] for corresponding level of advection in a velocity problem. Due to its high relative contribution (nearly 50%) to the global heat flux, convergence of $\mathcal{N}u_{p, 1}$ show a similar trend as $\mathcal{N}u_g$ with an order of convergence around $p \simeq 1$. For the thinner mesh $N_p = 80$, the magnitude of the relative error on $\mathcal{N}u_{p, 1}$ is 2-3 times larger than that on $\mathcal{N}u_{p, 2}$ and $\mathcal{N}u_{p, 3}$. It seems that heat transfer experienced by the first

TABLE 2.A.1 – Relative error in % between our computed $\mathcal{N}u_{p,i}$ with $N_p = 32$ for Sphere 1, Sphere 2 and Sphere 3, and values reported by [184], as a function of $(C_{1,2}, C_{2,3}, Re)$ for the case of forced convection over a row of 3 spheres in an unbounded domain at $Pr = 0.72$

$C_{1,2}$	$C_{2,3}$	Re	Sphere 1	Sphere 2	Sphere 3
2	2	20	0.92832	2.19774	6.12658
2	2	50	0.20491	3.40438	5.35155
2	2	100	0.72058	5.71099	5.98213
2	2	150	1.70729	8.73954	7.21359
2	4	20	0.44990	0.63932	4.77837
2	4	50	0.25523	1.15299	3.94733
2	4	100	1.15837	2.99363	3.54165
2	4	150	2.11382	5.66081	3.63420
4	2	20	1.08138	0.02019	6.77675
4	2	50	0.50185	0.11702	5.31881
4	2	100	0.21664	0.50046	5.34738
4	2	150	0.39597	0.88257	6.30576
4	4	20	0.55408	1.24509	4.77854
4	4	50	0.01996	1.67095	3.51118
4	4	100	0.73339	1.64776	2.80071
4	4	150	0.91495	1.30746	2.70455
2	6	20	0.28071	0.75209	5.29849
2	6	50	0.41997	0.56747	4.80122
2	6	100	1.31680	1.00047	4.20528
2	6	150	2.26173	3.44607	3.96062
6	2	20	0.63203	6.25496	8.09998
6	2	50	0.16839	7.03254	6.39973
6	2	100	0.47647	7.48600	6.15468
6	2	150	0.68047	7.64666	7.01684

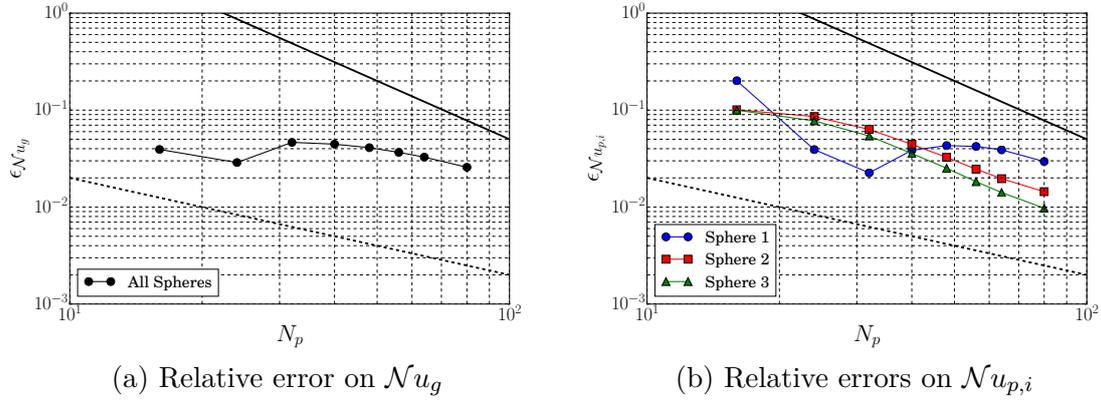


FIGURE 2.A.6 – Grid convergence for an in-line array of three spheres at $\mathcal{R}e = 150$, $\mathcal{P}r = 10$, $C_{12} = 2$, $C_{23} = 2$: (a) relative error on global Nusselt number $\mathcal{N}u_g$ and (b) relative error on Nusselt number per particle $\mathcal{N}u_{p,i}$, $i = 1, 2, 3$. Black dashed and solid lines respectively represent first and second order convergence rates.

sphere is very similar to that of a single isolated particle at equal Péclet number. In single sphere test cases, we observe that the heat flux is underestimated for coarse meshes, then reaches a plateau for moderately refined meshes and finally converges by upper values for fine meshes. The range of grid resolution spanned by these three regions is a function of $\mathcal{P}e$. Our results indicate a scaling of the error magnitude as $\mathcal{P}e^{0.35}$ for $\mathcal{P}e \in [40, 1500]$. This is in accordance with the way the thermal boundary layer thins with increasing $\mathcal{P}e$ (see *Appendix 2.A.3*). Due to the upstream thermal interaction with the first sphere, the generated temperature gradients at the surface of the second and third spheres are less steep, in other words these two spheres exchange less heat. While the first sphere really experiences heat transfer at $\mathcal{P}e = 1500$, the order of convergence and error magnitude for the second and third spheres appear to be relevant to heat transfer at $\mathcal{P}e = 150$ (see FIG. 2.A.3a). From this observation, a twice thinner mesh is necessary to get similar accuracy for the first sphere (i.e., $\sim 3\%$) than for the second and third spheres. As a consequence of overestimation for coarse meshes of the first sphere computed heat flux, the second and third sphere heat fluxes are correspondingly underestimated and tend to their exact value ϕ_{extra} by lower absolute values.

From a hydrodynamic interaction viewpoint, the two downstream spheres also experience a lower hydrodynamic force as they are located in the wake of the first sphere. This is a basic example of drag reduction. However, the mesh convergence of the hydrodynamic force exerted on each sphere at $\mathcal{R}e = 150$ does not exhibit such a different behavior. Indeed, it seems that the notion of available heat potential to each sphere plays an important role, leading to either steep or smooth temperature gradients in boundary layers that are respectively either hard or easy to capture by our numerical method for a given mesh resolution. This observation also indicates that mesh convergence for heat transfer should be looked at individually, i.e., $\mathcal{N}u_p$ per particle, and not as a global Nusselt number $\mathcal{N}u_g$ for a group of particles. We shall follow this guideline when examining the mesh convergence of heat transfer in a random array of spheres in *Section 3*.

2.B Intéraction linéaire de trois sphères : Effet sur l'écoulement et les transferts

Dans cette section, une analyse plus profonde de l'écoulement dans la configuration des 3 particules alignées est proposée. Une comparaison des sillages à celui d'une particule isolée ainsi que du champ de température est le sujet principal de cette partie. Ceci permet de mettre en évidence, dans une configuration relativement simple, des pistes quant aux changements au comportement d'une sphère isolée pouvant s'opérer dans le cas d'interactions hydrodynamiques entre plusieurs particules.

2.B.1 Préliminaires : Caractérisation de la zone de recirculation derrière une sphère isolée

Des études à partir de simulations numériques ou de travaux expérimentaux [20, 117, 146, 164, 220, 253] se sont intéressées à caractériser les traînées hydrodynamiques pour des sphères isolées. Le schéma FIG. 2.B.1 représente les éléments définissant de la zone de recirculation en aval d'une sphère isolée. Certaines études [117] ont montré que la zone de recirculation est en fait tridimensionnelle, cependant la représentation 2D proposée est valable pour les régimes d'écoulement à nombre de Reynolds modérés. La zone de recirculation est caractérisée par l'angle de séparation θ_s . À ce point, un gradient de vitesse axial nul à la surface de la particule est observé [203]. Les autres éléments qui caractérisent la zone de recirculation sont sa longueur, la position des centres des vortex et leur espacement. Le centre des vortex est ici calculé par la méthode des angles d'enroulement [199]. D'autres méthodes basées sur le critère $Q = \frac{1}{2}(|\mathbf{\Omega}|^2 - |\mathbf{S}|^2)$ avec $\mathbf{\Omega} = \frac{1}{2}[\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T]$ le tenseur des contraintes et $\mathbf{S} = \frac{1}{2}[\nabla\mathbf{u} - (\nabla\mathbf{u})^T]$ le tenseur de vorticit , le critère λ_2 ont aussi  t  test es et donnent des r sultats proches : la norme L_2 entre les centres de vortex des diff rentes m thodes est de l'ordre de grandeur du pas d'espace.

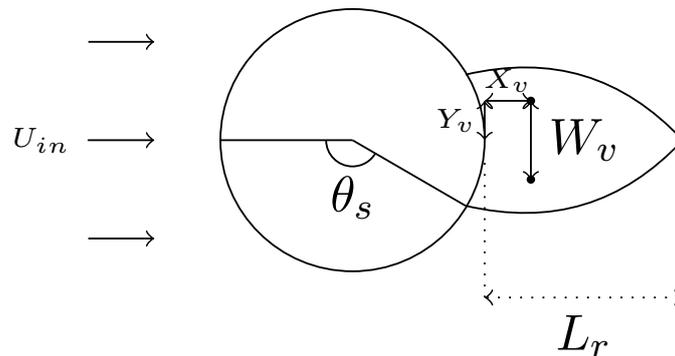
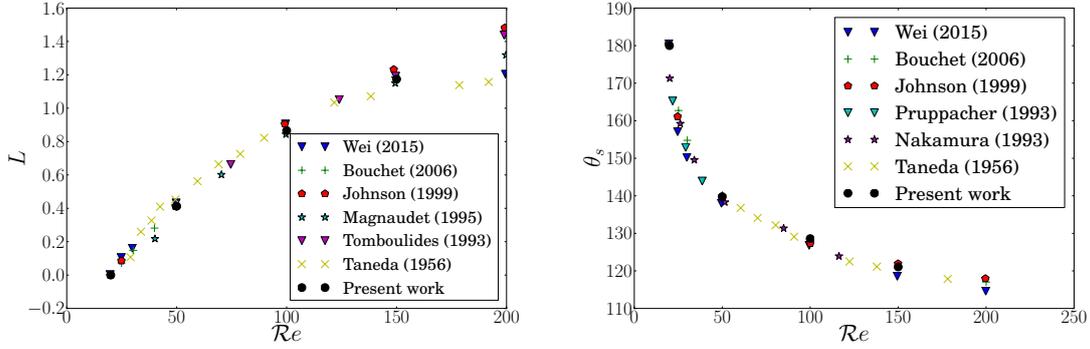


FIGURE 2.B.1 – Param tres du sillage derri re une particule isol e.

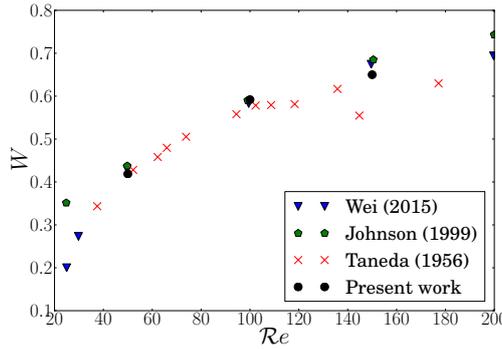
Une comparaison du comportement du code PELIGRIFF aux donn es de la litt rature

sur la zone de recirculation en aval d'une sphère isolée est montrée en FIG. 2.B.2. Un très bon accord avec les données de la littérature est observé pour une sphère isolée (résolution spatiale $N_p = 32$).



(a) Longueur de la zone de recirculation.

(b) Distance centres vortex.



(c) Angle de séparation θ_s .

FIGURE 2.B.2 – Comparaison des caractéristiques de la zone de recirculation avec la littérature.

2.B.2 Alignement de 3 sphères : Propriétés du sillage

Une étude plus approfondie sur le comportement hydrodynamique et l'écoulement derrière chaque sphère est proposée ici. Afin de quantifier l'effet d'interaction hydrodynamique, le rapport du coefficient de traînée à celui d'une sphère isolée [36] est calculé. De même, les propriétés des zones de recirculation derrière chaque sphère sont détaillées. De nouvelles notations sont introduites pour permettre de définir les rapports des grandeurs lorsque les valeurs : $L_{r,iso}$, X_v et Y_v sont nulles pour une sphère isolée (voir FIGS. 2.B.1 et 2.B.3). Les nouvelles définitions (voir FIG. 2.B.3) et l'ensemble des données concernant les rapports $L'_{r,ij}/L'_{r,iso}$, $\theta_{s,i}/\theta_{s,iso}$ et positions des centres de vortex sont disponibles en *Section 2.B.4*. Les résultats sont ici découpés en deux sous-parties, la première correspondant aux cas où le sillage derrière

chaque sphère est uniquement attaché à la sphère l'engendrant, et une seconde où la sphère aval se retrouve piégée dans le sillage de la sphère qui la précède.

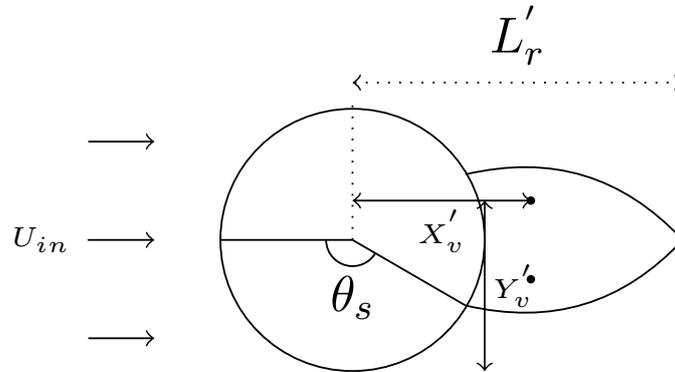


FIGURE 2.B.3 – Paramètres du sillage derrière pour un alignement de particules.

2.B.2.1 Cas sans interaction sillage-sphère aval

Longueur de la zone de recirculation

Dans un premier temps, il est intéressant de noter que pour un nombre de Reynolds donné, la longueur de la zone de recirculation en aval de chaque sphère n'est pas identique et diminue le long de l'écoulement. Lorsque celles-ci sont très éloignées, cette longueur tend à se rapprocher de celle d'une sphère isolée. Ceci montre un effet à longue distance de l'interaction hydrodynamique entre les sphères. Du fait de l'interaction avec la sphère amont, le débit n'est plus uniforme lorsque l'écoulement interagit avec la sphère aval. Des zones de sur-vitesse apparaissent loin des sphères, alors que des zones de sous-vitesse se localisent sur l'axe reliant les sphères. À nombre de Reynolds fixé, le rapport $L'_{r,j}/L'_{r,iso}$ est très dépendant de la distance avec la sphère aval. Trois cas particuliers sont à retenir ici :

- Dans le cas $Re = 20$ et $C_{12} = C_{23} = 2$, une zone de recirculation derrière les sphères 1 et 2 apparaît alors qu'aucune zone n'est observée pour une particule isolée. Ces zones de recirculation derrière la seconde sphère disparaissent lorsque C_{23} augmente.
- Pour des régimes plus advectifs $Re = 50$, $C_{12} > 4$, la longueur de la zone de recirculation derrière la seconde sphère devient 2.5 fois supérieure à celle d'une particule isolée (voir FIG. 2.B.4a). Ce rapport augmente avec C_{12} .
- Dans certains cas, la présence de la seconde sphère fait augmenter le rapport des longueurs de 5% à 12% derrière la première sphère. Ce rapport augmente avec le nombre de Reynolds (voir FIG. 2.B.4a). La plupart des cas où $C_{12} = 2$ rentrent dans la catégorie où une interaction est observée entre le sillage et la sphère aval. L'effet de la distance C_{23} n'impacte que peu la longueur du sillage.

Angle de séparation

Le couplage hydrodynamique impacte aussi l'angle de séparation derrière les sphères. L'effet

est ici regardé pour chaque sphère indépendamment :

- Sphère 1 : Un effet n'est observé que pour $C_{12} = 2$. La présence de la seconde sphère tend à diminuer le rapport $\theta_{s,i}/\theta_{s,iso}$ à $Re = 50$ de l'ordre de 3%. Aucun effet notable de la distance C_{23} n'est observé.
- Sphère 2 : Les distances C_{12} et C_{23} jouent un rôle contraire sur l'angle de séparation de la seconde particule. Du fait de la présence d'une zone de recirculation de plus faible intensité derrière la seconde sphère, l'angle de séparation est observé plus tard et le rapport augmente (3% à 10%). Cet effet est amplifié lorsque l'impact de la première sphère est augmenté (*i.e.* C_{12} diminue). De plus, ce rapport est d'autant plus proche de 1 que C_{23} augmente. En effet, plus C_{23} est grand, plus la sphère se rapproche de la configuration isolée. Enfin, à distances fixées, l'augmentation du nombre de Reynolds fait augmenter l'écart à la sphère isolée.
- Sphère 3 : De manière opposée à la première sphère, la troisième particule est très sensible à la distance C_{23} et peu à C_{12} . Tout comme la seconde sphère, la présence d'une zone de recirculation moins intense fait augmenter le rapport $\theta_{s,i}/\theta_{s,iso}$. Même pour des sphères relativement éloignées, le rapport se rapproche de 1 mais ne tombe jamais sous 3% de déviation. L'augmentation du nombre de Reynolds impacte de la même manière ce rapport que pour la seconde sphère.

Position des centres des vortex

De même, l'effet d'interaction hydrodynamique peut s'observer sur la position des centres des vortex et leur espacement. Ici les observations sont découpées en fonction des tendances observées ci-dessus :

- Diminution de l'intensité de la recirculation : Dans cette configuration, en plus d'une augmentation de la valeur de l'angle de séparation, le centre du vortex associé est situé plus près de la particule dans la direction axiale (X_v). De même sa position transverse (Y_v) est plus proche de l'axe reliant les particules. Ceci correspond aux observations pour une sphère isolée lorsque le nombre de Reynolds incident est diminué.
- Allongement du sillage : Ces systèmes sont engendrés lorsque la particule aval induit des sous-vitesses directement au niveau de la jonction des vortex (voir FIG. 2.B.4a). Ce fluide, moins advecté, peut alors être entraîné par le sillage, ce qui tend à l'allonger. Il est alors observé une augmentation de la position axiale du centre du vortex. En revanche, aucun changement significatif n'est observé sur sa position transverse. Le sillage est uniquement étiré dans le sens de l'écoulement par rapport à une sphère isolée.

À l'aide des résultats publiés dans la littérature sur ces différents paramètres, il est possible d'estimer le nombre de Reynolds générant le même sillage que la réduction / augmentation observée dans le cas d'interaction linéaire. La relation utilisée est celle proposée par Clift *et al.* [36] (2.42). Ainsi, en prenant comme critère l'angle de séparation, l'apparition de la zone de recirculation derrière la première sphère à $Re = 20$ et $C_{12} = 2$ correspond à celui d'une sphère isolée à $Re = 23.95$, soit une augmentation de 19,8%. Les plus grosses variations reportées correspondent à des changements de près de 70% en termes de nombre de Reynolds équivalent. De même, à nombre de Reynolds, $Re = 50$ et $C_{12} = C_{23} = 6$, l'interaction hydrodynamique correspond à une réduction au sillage d'une sphère isolée respectivement de 0%, 20% et 28% pour la première, seconde et troisième sphère. Ces déviations grimpent

à 32.0%, 55.6% et 66.2% à $Re = 150$. L'effet d'interaction hydrodynamique induit donc de fortes perturbations sur l'écoulement à celui d'une sphère isolée, même pour des interactions simples.

$$\theta_s = 180 - 42.5 \left[\ln \left(\frac{Re}{20} \right) \right]^{0.483} \quad (2.42)$$

Un cas particulier est de plus à mentionner ici : pour le jeu de paramètres $C_{12} = C_{23} = 2$ et $Re = 50$, en plus de la zone de recirculation en aval des deux premières sphères, une zone de recirculation en amont de la troisième particule apparaît comme indiqué en FIG. 2.B.4b. Les vortex engendrés sont mis en évidence par les lignes de courant (voir FIG. 2.B.4b). Cette zone de recirculation amont, de taille relativement réduite par rapport au sillage de la sphère amont illustre la complexité de l'écoulement engendré.

2.B.2.2 Cas d'interaction sillage-sphère aval

Dans les cas où la distance interparticule $C_{ij} = 2$ et pour des nombres de Reynolds $Re \geq 50$, les sphères situées en aval interagissent avec la zone de recirculation de la sphère précédente et viennent modifier les positions des centres des vortex. Dans cette configuration, la longueur de la zone de recirculation ne peut plus être estimée. Cependant, un second angle θ_r , correspondant à l'angle de la sphère aval en interaction avec le sillage de la sphère précédente est ici défini.

Angle de séparation

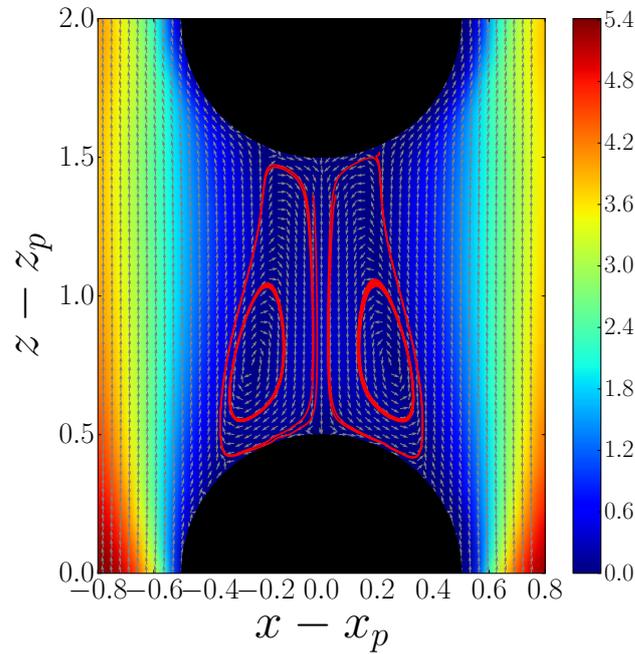
Dans le cas particulier où le sillage derrière la première sphère interagit avec la particule aval, le rapport $\theta_{s,i}/\theta_{s,iso}$ est légèrement inférieur à 1 pour $Re = 50$ et $Re = 100$ (-2.7% et -1% respectivement). La perturbation de l'écoulement par la seconde sphère gêne le développement du sillage. Pour compenser, la zone de fluide entraînée dans le vortex s'élargit de manière transverse à l'écoulement. Au contraire, pour $Re = 150$ ce rapport est supérieur à 1 (+2% à l'angle d'une sphère isolée) : les effets advectifs viennent contre-carrer l'expansion transverse du sillage. En conséquence, l'angle de séparation prend une valeur plus grande que pour une sphère isolée. Du fait de la décroissance de l'intensité de la recirculation le long de l'écoulement, ce phénomène, observé pour la première particule, intervient pour des nombres de Reynolds plus élevés pour la seconde sphère. Seule la partie d'expansion transverse est observée pour cette dernière.

Position du centre des vortex

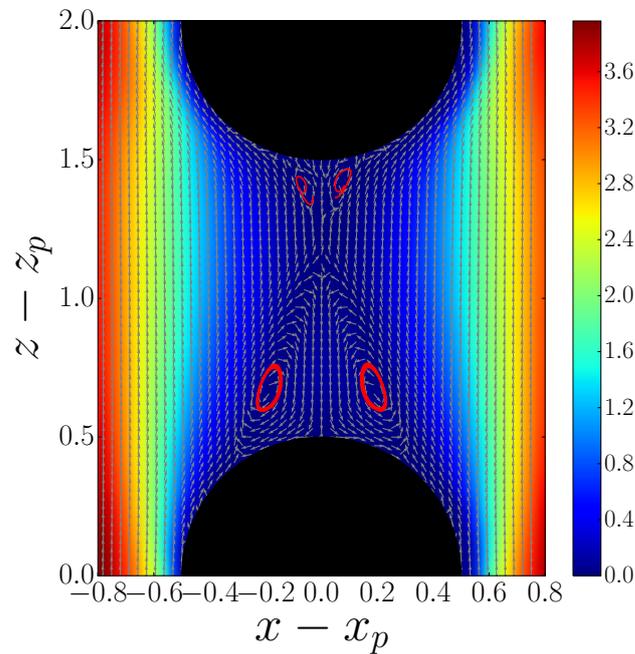
Les justifications proposées pour expliquer les observations ci-dessus sont corroborées par l'évolution de la position des centres des vortex. Lorsque la sphère aval vient perturber la mise en place du sillage, le centre des vortex est déplacé de manière transverse à l'écoulement (voir *Section 2.B.4*). De même, le centre du vortex se situe plus loin derrière la particule dans le sens de l'écoulement. Le déplacement dans l'axe de l'écoulement est cependant bien plus marqué que le déplacement transverse.

Angle d'interaction

Enfin, un nouvel angle est défini dans le cas où une sphère interagit avec le sillage de la particule amont. Ce dernier traduit la portion de la particule aval piégée dans le sillage. C'est aussi la portion de particule sujette au transfert de quantité de mouvement / chaleur conditionnée par la sphère précédente. Cet angle augmente avec le nombre de Reynolds dans la gamme testée. Il est fort probable que cet angle atteigne une valeur limite pour des nombres de Reynolds plus grands. Ici encore, du fait de la décroissance d'intensité de la zone de recirculation à nombre de Reynolds fixé, l'angle calculé est plus faible pour la troisième sphère que pour la seconde. Cet angle peut grimper jusqu'à $\theta_r = 43$ degrés pour la sphère aval.



(a) Sphère 1.



(b) Sphère 2.

FIGURE 2.B.4 – Visualisation des zones de recirculation derrière les sphères 1 et 2 et en amont de la sphère 3, $C_{12} = C_{23} = 2$, $Re = 50$. Champ coloré par la norme de la vitesse fluide $\|\mathbf{u}_c\|$ [184].

2.B.2.3 Coefficient de traînée

Les données issues des simulations permettent d'extraire la valeur du coefficient de traînée dans les différentes configurations. Une normalisation avec le coefficient de traînée d'une sphère isolée, proposé par Clift [36] est réalisée. FIG. 2.B.8 montre clairement l'effet de la perte d'intensité de la zone de recirculation le long de l'écoulement. Cet effet diminue lorsque la distance inter-particule augmente : l'effet d'interaction diminue sous forme exponentielle (voir FIG. 2.B.8). Ce même rapport diminue de manière exponentielle avec le nombre de Reynolds.

2.B.3 Une unique particule thermiquement active

Les travaux expérimentaux et numériques de Buist [24] sur la configuration de Ramachandran [184] tentent de simplifier encore un peu plus le problème en n'opérant le transfert de chaleur que sur une particule (la deuxième). Cette démarche a aussi été menée à l'échelle numérique pour des nombres de Reynolds $0 \leq Re \leq 1000$. Les travaux reportés par Buist [24] se focalisent sur le comportement macroscopique du système en termes de nombre de Nusselt. Une comparaison à l'expérience pour des régimes d'écoulement très advectifs est aussi fournie. Dans la suite, la particule échangeant de la chaleur avec le fluide sera dénommée particule active, les autres étant appelées particule inertes. Ces différents comportements sont obtenus numériquement en laissant la température des particules inertes évoluer temporellement jusqu'à atteindre l'équilibre avec le fluide environnant (*i.e.* le flux de chaleur devient nul). Le système est considéré comme convergé lorsque le rapport du flux de chaleur entre les particules inertes et la particule active devient inférieur à 10^{-8} . Afin de limiter les ressources utiles à la réalisation de cette étude, un nombre de Prandtl $Pr = 1$ est choisi. Le nombre de Reynolds varie entre $Re = 20$ et $Re = 150$, et C_{12} et C_{23} sont compris entre 2 et 6. Ici, les trois particules sont tour à tour thermiquement active (trois simulations par configuration).

2.B.3.1 Rapport $\mathcal{N}u_{p,i}/\mathcal{N}u_{p,iso}$

De la même manière que pour le coefficient de traînée, le nombre de Nusselt particulaire est comparé à celui d'une sphère isolée en FIGS. 2.B.11 et 2.B.10. La valeur de nombre de Nusselt retenue est la valeur extrapolée issue du code PELIGRIF. Les rapports $\mathcal{N}u_{p,i}/\mathcal{N}u_{p,iso}$ sont montrés FIG. 2.B.9a pour certaines configurations. L'analyse des résultats met en évidence 2 types de comportements vis-à-vis des régimes d'écoulement.

- Les cas $C_{12} = 2$ sont les seuls où la première sphère montre une augmentation continue du rapport $\mathcal{N}u_{p,1}/\mathcal{N}u_{p,iso}$ avec le nombre de Reynolds (voir FIG. 2.B.9a). Dans les autres configurations, ce rapport est quasiment constant égal à 1. L'amplitude des variations de ce rapport n'excède jamais 2.5% de $\mathcal{N}u_{p,iso}$ pour la première sphère.
- Les sphères 2 et 3 observent dans toutes les configurations une réduction du rapport $\mathcal{N}u_{p,i}/\mathcal{N}u_{p,iso}$ avec le nombre de Reynolds. Cependant, pour les deux configurations citées plus haut, cette décroissance semble s'estomper lorsque Re augmente, alors

qu'elle s'accroît dans les autres cas. Il est intéressant de noter que sans échange des sphères amont, le rapport $\mathcal{N}u_{p,i}/\mathcal{N}u_{p,iso}$ peut être réduit jusqu'à 21%.

Si ces données sont observées en fonction des distances inter-particulaires, une conclusion déjà largement développée plus haut s'impose : à mesure que les particules sont éloignées, ces dernières tendent à se comporter comme une sphère isolée. Cette observation est d'autant plus vraie que le nombre de Reynolds de l'écoulement est faible. Ainsi, pour le cas extrême ($C_{12} = C_{23} = 6$) le rapport $\mathcal{N}u_{p,i}/\mathcal{N}u_{p,iso}$ n'est pas modifié entre $Re = 20$ et $Re = 150$ pour la première sphère, et passe respectivement de 0.97 à 0.87 pour la seconde sphère et de 0.95 à 0.87 pour la dernière sphère. La diminution observée pour ces deux dernières particules est à attribuer aux effets d'interactions hydrodynamiques seuls : en particulier, la réduction du nombre de Reynolds effectif perçu par la particule.

Nombre de Nusselt local : impact sur la première sphère

L'effet seul de l'interaction hydrodynamique entre particules dans le cas de Ramachandran [184] montre un effet limité sur la première sphère. En effet, la modification de l'écoulement à celui autour une sphère isolée ne s'opère qu'en aval de la première sphère. Les changements observés sur le nombre de Nusselt de la particule sont de l'ordre de 2.5% dans la gamme de nombres de Reynolds étudiée. Afin de mettre en évidence ces modifications en aval de la particule, le nombre de Nusselt local à la surface de la première particule est extrait des simulations en FIG. 2.B.5. Ici, les paramètres d'espacement sont $C_{12} = 2$ et $C_{23} = 6$ pour un nombre de Reynolds $Re = 100$ de manière à minimiser l'impact de la dernière sphère sur le comportement général du couplage sphère1–sphère2. Il apparaît clairement une augmentation du nombre de Nusselt local en aval de la première particule du fait de l'interaction de son sillage avec la seconde sphère. De même, le nombre de Nusselt local minimal apparaît légèrement plus tôt que pour une sphère isolée. Ceci ne semble pas relié à l'angle de séparation qui n'apparaît que légèrement plus tôt ($\theta_{s,i}/\theta_{s,iso} = 0.99$) dans ce cas. Aucune modification du profil du nombre de Nusselt n'est observée pour des angles $\theta/\pi < 0.5$. Enfin, pour des angles $0.5 \leq \theta/\pi \leq 0.7$, la valeur de $\mathcal{N}u(\theta)$ de la première sphère est légèrement inférieure à celle d'une sphère isolée. Dans cette configuration de symétries, le nombre de Nusselt global (voir équation 2.43) donne plus de poids aux valeurs de Nusselt aux angles $0.2 \leq \theta \leq 0.8$. Ainsi, les modifications du transfert local de chaleur à la surface de la particule pour $\theta \geq 0.8$ n'induisent qu'un changement relativement faible du nombre de Nusselt global de la particule. Au contraire la diminution observée pour $0.5 \leq \theta/\pi \leq 0.75$ est bien plus influente. D'un point de vue macroscopique, le nombre de Nusselt moyen est réduit de 0.5%.

$$\mathcal{N}u_p = \frac{1}{2} \int_0^\pi \mathcal{N}u(\theta) d\theta \quad (2.43)$$

Nombre de Nusselt local : impact sur les sphères 2 et 3

Au contraire, les rapports $\mathcal{N}u_{p,i}/\mathcal{N}u_{p,iso}$ et profils locaux du nombre de Nusselt pour les sphères 2 et 3 s'écartent largement d'une sphère isolée. Du fait de l'interaction hydrodynamique, le profil local du nombre de Nusselt en FIG. 2.B.6b induit une large zone $0 \leq \theta \leq \pi/2$ où le nombre de Nusselt local $\mathcal{N}u(\theta)$ d'une sphère isolé est inférieur à celui de la première particule. La longueur de cette zone dépend de la recirculation et semble montrer un point

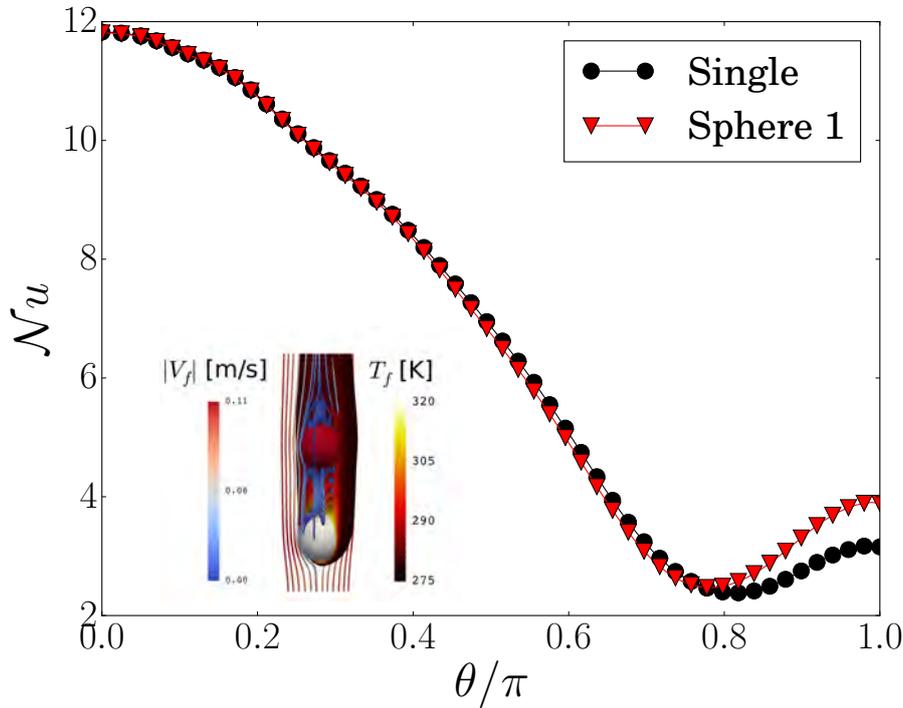


FIGURE 2.B.5 – Comparaison du nombre de Nusselt local pour une sphère isolée et la première sphère (seule particule thermiquement active) en interaction hydrodynamique dans la configuration : $C_{12} = 2$, $C_{23} = 6$, $Re = 100$. Visualisation du champ de température et des lignes de courant.

d'inflexion à $\theta = \theta_r$. De plus, du fait de la réduction de l'intensité de recirculation le long de l'écoulement, l'augmentation de $Nu(\theta)$ pour $0.8 \leq \theta \leq \pi$ observée pour la première particule devient moins importante (voir FIG. 2.B.6a). Ces valeurs plus faibles du nombre de Nusselt angulaire traduisent le comportement général de la sphère à échanger moins qu'une sphère isolée.

Remarques

L'interaction hydrodynamique de sphères alignées induit localement des changements sur les champs de vitesses et de pression. Ces modifications de l'écoulement génèrent ou amplifient des zones de recirculations en aval des sphères. Dans le cas des sphères 2 et 3, l'écoulement est aussi perturbé en amont. Au niveau des transferts thermiques macroscopiques, l'intensification de ces zones de recirculation produit une diminution limitée du rapport de nombres de Nusselt $Nu_{p,i}/Nu_{p,iso}$. Au contraire, les modifications de l'écoulement en amont des particules sont responsables d'une diminution pouvant atteindre 20% de $Nu_{p,iso}$.

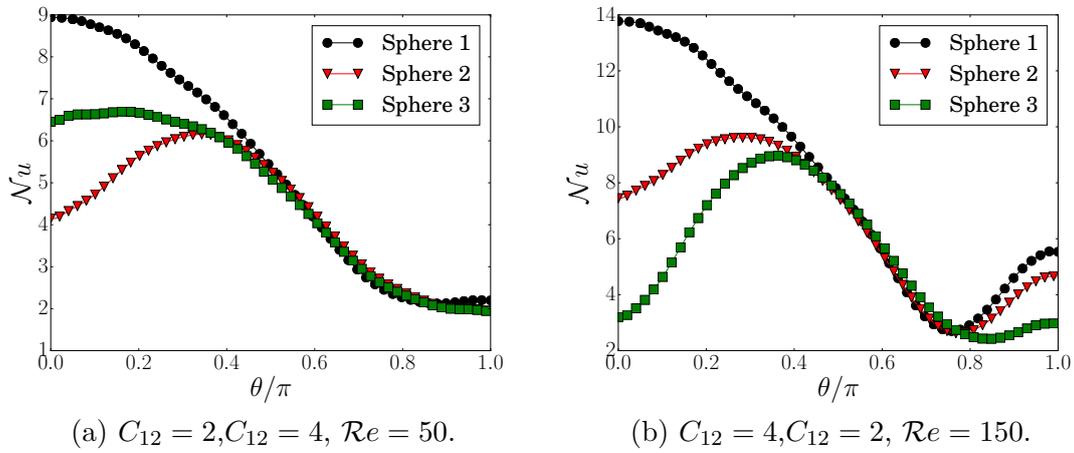


FIGURE 2.B.6 – Nombre de Nusselt local, interaction linéaire.

2.B.3.2 Effet sur le champ de température

Enfin, l'impact de l'interaction hydrodynamique est observé sur le champ de température dans le système. De la même manière que pour une sphère isolée, les contours de température à 99% sont extraits des simulations. Ces derniers mettent en évidence la compétition entre l'advection et la diffusion dans la phase fluide (voir FIG. 2.B.7). Les zones de sous-vitesses en aval de la première sphère à faible nombre de Reynolds (voir FIG. 2.B.7a) réduisent localement le nombre de Péclet. De ce fait, les effets diffusifs deviennent plus importants et le contour du champ de température remonte vers la sphère amont.

Lorsque le sillage interagit avec la sphère aval en FIGS. 2.B.7b et 2.B.7c, la zone de recirculation vient entraîner un peu de fluide chaud vers la sphère amont. Ainsi, le contour de température remonte l'écoulement et peut même, dans les cas extrêmes interagir avec la sphère amont. Lorsque $Re = 150$, la sphère amont finie même à être réchauffée (+2 K, soit 20% de $T_p - T_{c,in}$) via l'interaction thermique de la recirculation liée à son sillage.

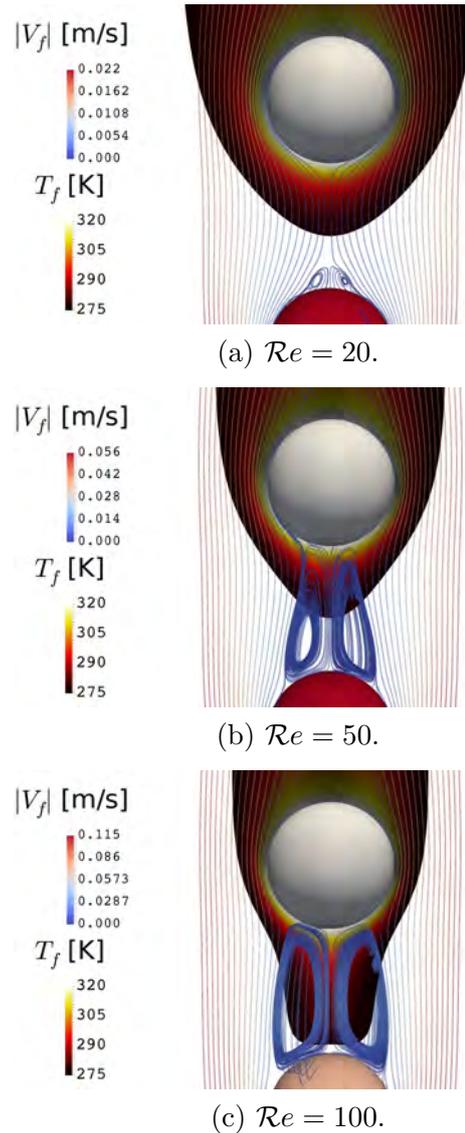


FIGURE 2.B.7 – Contours de température en amont de la seconde sphère, $C_{12} = 2$ et $C_{23} = 6$.

2.B.4 Jet linéaire de 3 sphères : données complémentaires

Les propriétés de la zone de recirculation derrière une sphère isolée sont définies en FIG. 2.B.1. La comparaison des simulations montre un bon accord avec la littérature (voir FIG. 2.B.2). Le calcul de ces paramètres pour un jet linéaire de sphères [184] est reporté ici. Les grandeurs sont toutefois ici calculées à partir du centre de la particule — et notées avec l'exposant « ' », soit $L'_r = L_r + 0.5$ pour la zone de recirculation — de manière à pouvoir définir un rapport lorsqu'une zone de recirculation apparaît pour $Re = 20$ (aucune zone n'est observée pour une particule isolée pour ce régime). Les valeurs pour les angles suivent le schéma en FIG. 2.B.1. Enfin, les centres des vortex sont définis tels que : $X'_v = X_v + 0.5$ et $Y'_v = Y_v + 0.5$

(voir FIG. 2.B.3). Cette section est constituée de quatre tableaux : Longueur de la zone de recirculation L'_r (voir tableau TAB. 2.B.1), l'angle de séparation θ_s (voir tableau TAB. 2.B.2) et les centres des vortex (X'_v, Y'_v) dans le tableau TAB. 2.B.4. Dans le cas d'une interaction entre une sphère aval et la zone de recirculation de la particule amont, un angle θ_r est calculé (voir tableau TAB. 2.B.3). À l'exception de l'angle d'interaction θ_r , ces données sont sans dimensions. Les tendances physiques du coefficient de traînée et du nombre de Nusselt sont comparées à celles d'une particule isolée (voir FIGS. 2.B.8 et 2.B.9). FIGS. 2.B.10 et 2.B.11 montrent l'évolution complexe du rapport du nombre de Nusselt pour les trois sphères.

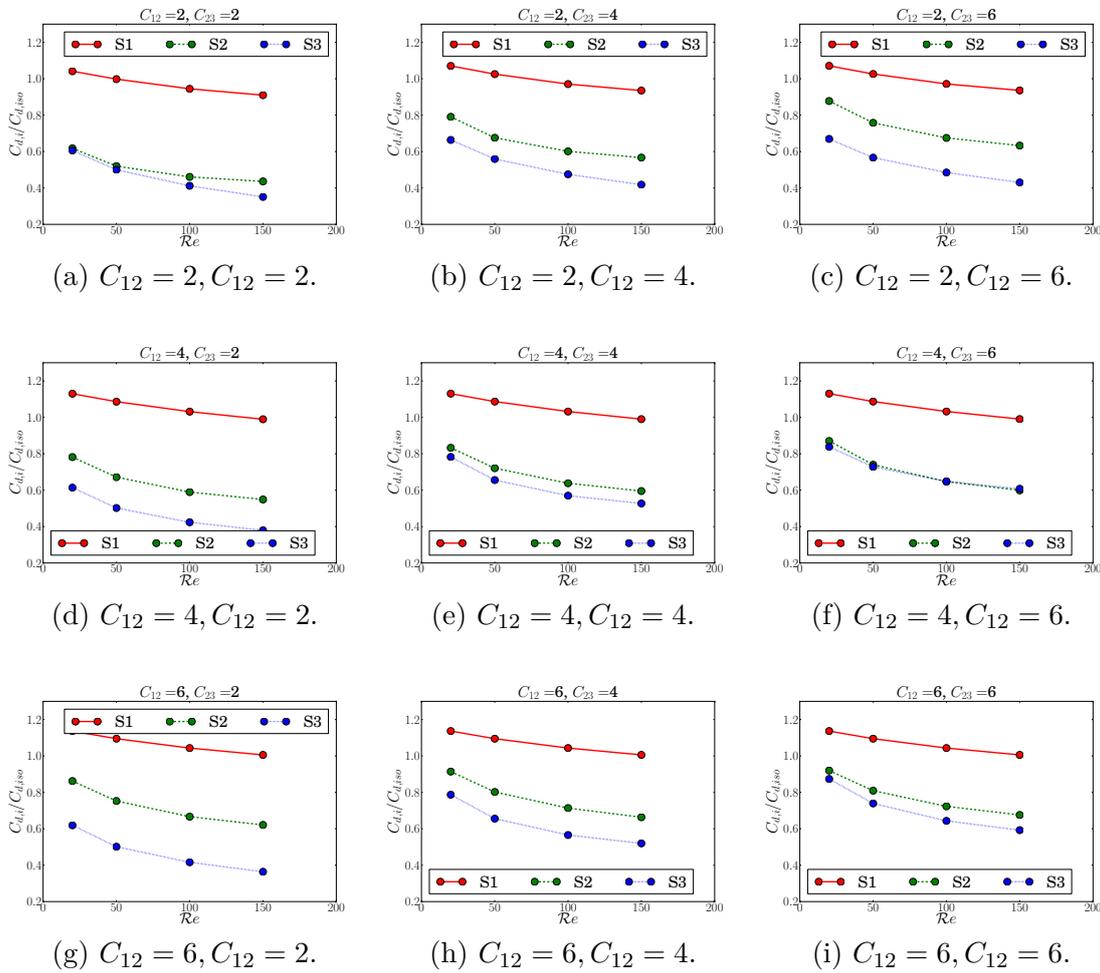


FIGURE 2.B.8 – Rapport de coefficient de traînée. Configurations de Buist [24].

TABLE 2.B.1 – Longueurs des zones de recirculations. Configurations de Ramachandran [184].

C_{12}	C_{23}	Re_p	$L'_{r,1}/L'_{r,iso}$	$L'_{r,2}/L'_{r,iso}$	$L'_{r,3}/L'_{r,iso}$
2	2	20	1.38	1.134	1
2	2	50	1,684151206	1,244383562	0,761643836
2	2	100	1,16675991	0,831888726	0,768667643
2	2	150	0,975230968	0,942954627	0,779546609
2	4	20	1.38	1	1
2	4	50	1,683234953	0,808767123	0,843835616
2	4	100	1,165401441	0,808199122	0,86749634
2	4	150	0,973596673	0,810907679	0,896030585
2	6	20	1.377	1	1
2	6	50	1,68135017	0,789041096	0,871232877
2	6	100	1,166069698	0,779648609	0,900439239
2	6	150	0,973324607	0,769690272	0,937845345
4	2	20	1	1,211	1
4	2	50	1,027945205	1,667735317	0,761643836
4	2	100	1,050512445	1,148431634	0,761346999
4	2	150	1,087183776	0,95688234	0,770586303
4	4	20	1	1	1
4	4	50	1,024109589	0,886027397	0,82739726
4	4	100	1,04795022	0,924963397	0,849194729
4	4	150	1,0830023	1,102117619	0,875123204
4	6	20	1	1	1
4	6	50	1,024109589	0,866849315	0,871232877
4	6	100	1,045387994	0,886530015	0,889458272
4	6	150	1	1	0,922911502
6	2	20	1	1,232	1
6	2	50	1,000547945	1,669991696	0,756164384
6	2	100	0,998535871	1,152903501	0,761346999
6	2	150	1,00206087	0,962322035	0,767599534
6	4	20	1	1	1
6	4	50	1,000547945	0,928219178	0,832876712
6	4	100	0,998535871	0,970351391	0,849194729
6	4	150	1,00206087	1,038200771	0,872136436
6	6	20	1	1	1
6	6	50	1,000547945	0,904109589	0,871232877
6	6	100	0,998535871	0,926061493	0,889458272
6	6	150	1,00206087	0,959350079	0,919924733

TABLE 2.B.2 – Angles de séparation dans les configurations de Ramachandran [184].

C_{12}	C_{23}	Re_p	$\theta_{s,1}/\theta_{s,iso}$	$\theta_{s,2}/\theta_{s,iso}$	$\theta_{s,3}/\theta_{s,iso}$
2	2	20	0,896747607	1	1
2	2	50	0,973163371	1,028461799	1,098012368
2	2	100	0,990151783	1,046039798	1,077231758
2	2	150	1,020148266	1,085007162	1,105206157
2	4	20	0,896557854	1	1
2	4	50	0,972698389	1,076613205	1,061478493
2	4	100	0,990037604	1,068618542	1,04948527
2	4	150	1,020207297	1,102848277	1,077077535
2	6	20	0,896855161	1	1
2	6	50	0,972910242	1,099596168	1,058269004
2	6	100	0,990244581	1,085120371	1,046594267
2	6	150	1,018714362	1,104707885	1,064448919
4	2	20	1	0,938046975	1
4	2	50	1,002659971	1,005462661	1,098348719
4	2	100	1,007365606	1,021769147	1,083008768
4	2	150	1,033971979	1,056442932	1,108842133
4	4	20	1	1	1
4	4	50	1,00288722	1,061291615	1,079625166
4	4	100	1,007548866	1,045712179	1,062032578
4	4	150	1,032412759	1,06854458	1,080927692
4	6	20	1	1	1
4	6	50	1,002925841	1,050807993	1,049750926
4	6	100	1,007588232	1,044014365	1,042130749
4	6	150	1,032471917	1,072069295	1,068319306
6	2	20	1	0,951889723	1
6	2	50	1,006812795	0,999984459	1,120107465
6	2	100	1,010707968	1,017455674	1,0880121
6	2	150	1,036274653	1,04337611	1,10837159
6	4	20	1	1	1
6	4	50	1,006833958	1,032554964	1,065432629
6	4	100	1,010724512	1,030122657	1,05418468
6	4	150	1,036292637	1,055916462	1,082124215
6	6	20	1	1	1
6	6	50	1,006837164	1,037446278	1,049797466
6	6	100	1,010728061	1,033442485	1,042703113
6	6	150	1,036297724	1,059510464	1,069174668

TABLE 2.B.3 – Angles d'interaction θ_r dans les configurations de Ramachandran [184].

C_{12}	C_{23}	Re_p	$\theta_{r,1}$	$\theta_{r,2}$	$\theta_{r,3}$
2	2	20	0	0	0
2	2	50	0	0,385995646	0,155016176
2	2	100	0	0,622519555	0,462035659
2	2	150	0	0,745381511	0,568157877
2	4	20	0	0	0
2	4	50	0	0,381529542	0
2	4	100	0	0,616126018	0
2	4	150	0	0,737278375	0
2	6	20	0	0	0
2	6	50	0	0,372182391	0
2	6	100	0	0,619278286	0
2	6	150	0	0,735922408	0
4	2	20	0	0	0
4	2	50	0	0	0,296438078
4	2	100	0	0	0,530637185
4	2	150	0	0	0,649705091
4	4	20	0	0	0
4	4	50	0	0	0
4	4	100	0	0	0
4	4	150	0	0	0
4	6	20	0	0	0
4	6	50	0	0	0
4	6	100	0	0	0
4	6	150	0	0	0
6	2	20	0	0	0
6	2	50	0	0	0,310224192
6	2	100	0	0	0,554302766
6	2	150	0	0	0,679241248
6	4	20	0	0	0
6	4	50	0	0	0
6	4	100	0	0	0
6	4	150	0	0	0
6	6	20	0	0	0
6	6	50	0	0	0
6	6	100	0	0	0
6	6	150	0	0	0

TABLE 2.B.4 – Centres des vortex. Configurations de Ramachandran [184].

C_{12}	C_{23}	Re_p	$\frac{X'_{v,1}}{X'_{v,iso}}$	$\frac{Y'_{v,1}}{Y'_{v,iso}}$	$\frac{X'_{v,2}}{X'_{v,iso}}$	$\frac{Y'_{v,2}}{Y'_{v,iso}}$	$\frac{X'_{v,3}}{X'_{v,iso}}$	$\frac{Y'_{v,3}}{Y'_{v,iso}}$
2	2	20	1,3323	1,1402	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
2	2	50	1,0284	1,1238	0,9516	1,0733	0,8787	0,8782
2	2	100	1,0374	1,1615	0,9297	1,1668	0,9037	0,9111
2	2	150	1,0513	1,1269	0,9265	1,1167	0,8638	0,9245
2	4	20	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
2	4	50	1,0142	1,0184	0,9445	0,9069	0,9390	0,9288
2	4	100	1,0363	1,1580	0,9151	0,9293	0,9367	0,9575
2	4	150	1,0548	1,1627	0,8741	0,9325	0,9554	0,9433
2	6	20	1,2638	1,1371	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
2	6	50	1,1120	1,0911	0,9036	0,9095	0,9868	0,9538
2	6	100	1,0994	1,0403	0,9454	0,8849	0,9776	0,9519
2	6	150	1,0480	1,1168	0,8794	0,9070	0,9520	0,9691
4	2	20	1,0000	1,0000	1,3128	1,1008	1,0000	1,0000
4	2	50	1,0150	1,0164	1,0571	1,0278	0,8356	0,9184
4	2	100	0,9937	1,0290	0,9461	1,0725	0,8792	0,9302
4	2	150	1,0068	1,0089	1,0011	1,0734	0,9013	0,8955
4	4	20	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
4	4	50	1,0353	0,9831	0,9873	0,9412	0,9461	0,9682
4	4	100	0,9809	1,0201	0,9490	0,9870	0,9312	0,9558
4	4	150	1,0327	0,9931	0,9985	0,9917	0,9482	0,9313
4	6	20	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
4	6	50	1,0085	1,0104	0,9267	1,0030	0,9443	0,9452
4	6	100	1,0359	1,0482	0,9997	0,9999	0,9439	0,9715
4	6	150	1,0227	1,0025	0,9599	0,9480	0,9376	0,9696
6	2	20	1,0000	1,0000	1,3182	1,1000	1,0000	1,0000
6	2	50	1,0025	1,0015	1,1215	1,3343	1,0105	1,1141
6	2	100	0,9956	1,0059	1,0032	1,1364	0,8485	0,9581
6	2	150	1,0034	0,9812	1,0219	1,0806	0,8834	0,9038
6	4	20	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
6	4	50	0,9983	0,9993	0,9568	0,9764	0,9284	0,9299
6	4	100	1,0208	0,9998	0,9733	0,9873	0,9336	0,9501
6	4	150	1,0027	0,9815	0,9921	0,9844	0,9455	0,9311
6	6	20	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
6	6	50	1,0004	1,0183	1,0150	1,0163	0,9393	0,9408
6	6	100	0,9871	1,0115	0,9634	0,9771	0,9466	0,9636
6	6	150	0,9962	0,9813	0,9719	0,9682	0,9609	0,9535

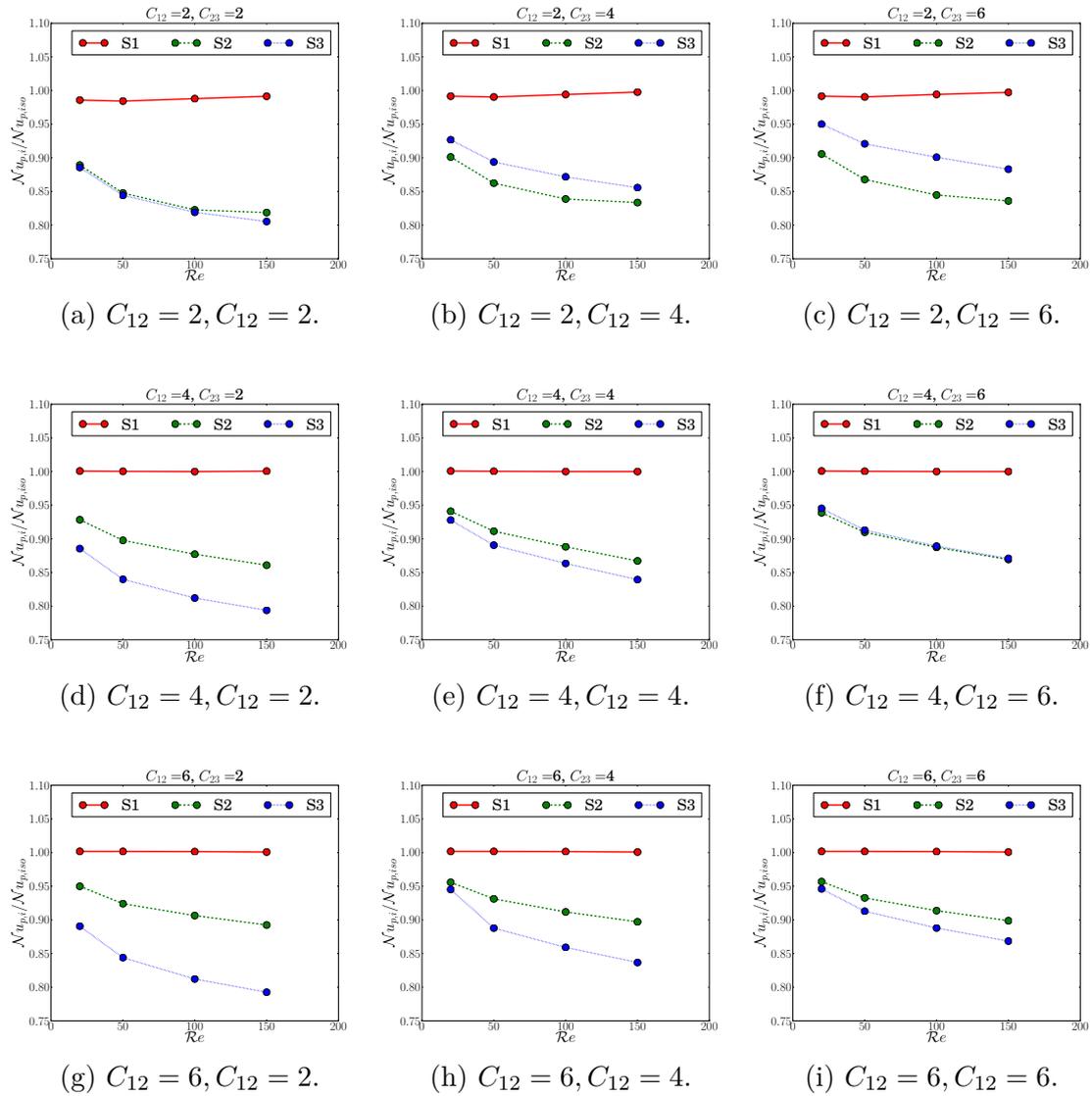
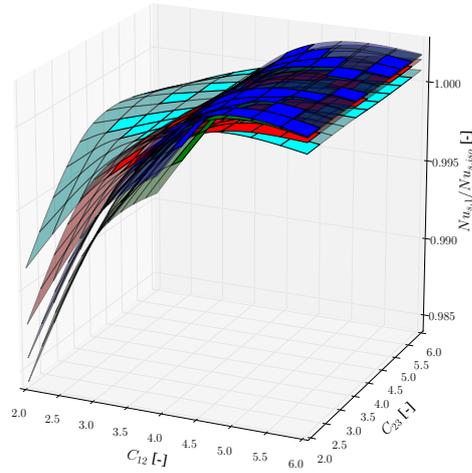
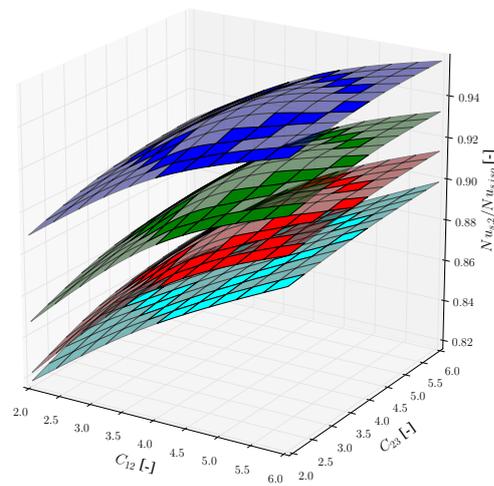


FIGURE 2.B.9 – Rapports de nombre de Nusselt à celui d'une sphère isolée. Configurations de Buist [24].



(a) Première sphère.



(b) Seconde sphère.

FIGURE 2.B.10 – Effets combinés de C_{12} , C_{23} et Re sur le rapport de nombre de Nusselt (sphère 1 et 2). Configuration de Buist [24].
Légende : Bleu= Re : 20, Vert= Re : 50, Rouge= Re : 100 et Cyan= Re : 150.

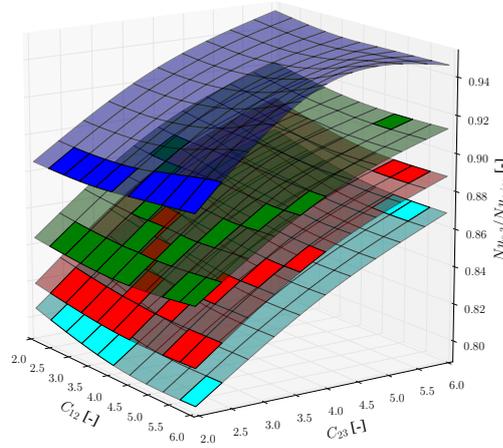


FIGURE 2.B.11 – Effets combinés de C_{12} , C_{23} et Re sur le rapport de nombre de Nusselt (sphère 3). Configuration de Buist [24]. Légende : Bleu= Re : 20, Vert= Re : 50, Rouge= Re : 100 et Cyan= Re : 150.

2.C Études complémentaires sur les lits fixes de particules

Dans cette partie, une série d'études vient compléter les résultats présentés ci-dessus. En particulier, une première partie est dédiée à la mise en place d'une loi de fermeture sur les transferts thermiques en lits fixes. Une seconde partie s'attache à comparer les transferts thermiques d'une particule thermiquement active dans un lit fixe de particules inertes. Enfin, des premiers éléments de caractérisation des interactions mur-particules sont mis en évidence dans les lits fixes.

2.C.1 Extraction d'une loi de fermeture pour le transfert thermique à partir des simulations résolues

La majorité des corrélations disponibles dans la littérature sont extraites en supposant un écoulement piston dans les milieux fluide-particules. Les données PRS disponibles dans la littérature sont ici réunies pour définir une nouvelle forme de corrélation du nombre de Nusselt. Cette étude est motivée par l'écart des corrélations de Gunn [92] et Deen [45] pour les régimes très dilués (sphère isolée). Les résultats des simulations pour une particule isolée montrent un bon accord avec la relation de Feng [72].

$$\mathcal{N}u_{p,iso} = 0.922 + \mathcal{P}e^{1/3} + 0.1\mathcal{R}e^{1/3}\mathcal{P}r^{1/3} \quad (2.44)$$

$$\mathcal{N}u_{dense} = (7 - 10\alpha_c + 5\alpha_c^2)(1 + 0.7\mathcal{R}e^{0.2}\mathcal{P}r^{1/3}) + (1.33 - 2.4\alpha_c + 1.2\alpha_c^2)\mathcal{R}e^{0.7}\mathcal{P}r^{1/3} \quad (2.45)$$

Les deux relations 2.45 et 2.44 montrent une forme très proche et sont constituées de trois termes : le premier est un terme constant qui dépend du chargement solide. Le second terme dans l'équation 2.45 est corrigé par Deen [45] et influence la valeur du nombre de Nusselt pour les faibles nombres de Reynolds. Enfin, le dernier terme est dominant pour les forts nombres de Reynolds. Les trois termes dans l'équation de Feng [72] jouent un rôle similaire. De plus, la dépendance de chaque terme dans les deux relations est similaire avec $\mathcal{R}e$ et $\mathcal{P}r$. Ainsi, l'exposant $\mathcal{R}e^{0.2}$ dans la relation de Gunn [92] est relativement proche de $\mathcal{R}e^{1/3}$ et donc de son équivalent dans la corrélation de Feng $\mathcal{P}e^{1/3}$. De même, l'exposant $\mathcal{R}e^{0.7}$ du dernier terme dans l'équation 2.45 est en fait très proche du terme $\mathcal{R}e^{2/3}$ dans la formulation de Feng [72].

Ces observations nous induisent à chercher une relation sous la forme :

$$\mathcal{N}u_{dense} = A(\alpha_d) + \alpha_c\mathcal{P}e^{1/3} + C(\alpha_d)\mathcal{R}e^{1/3}\mathcal{P}e^{1/3} \quad (2.46)$$

Cette équation se rapproche des dépendances observées avec le nombre de Reynolds et le nombre de Prandtl dans les relations de Gunn [92] et de Feng [72]. La dépendance sous forme $\alpha_c\mathcal{P}e^{1/3}$ dans le second terme est suggérée par les données et permet de réduire le nombre d'inconnues dans la relation. À l'aide des données de Deen [45], Tavassoli [224], Sun [215], Tenneti [225] ainsi que les présentes simulations, les coefficients A et C sont estimés pour chaque chargement solide (voir FIG. 2.C.1). Une nette tendance de ces deux paramètres est observée avec α_d .

La seconde étape consiste à estimer une fonction permettant de reproduire le comportement des paramètres A et C . Le choix de la forme α_c pour le second terme permet de retomber sur la dépendance en $\mathcal{P}e^{1/3}$ dans la relation de Feng [72] pour les régimes très dilués.

Enfin, la forme finale de la corrélation s'écrit comme suit :

$$\mathcal{N}u_{dense} = (0.922 + 6.87\alpha_d - 2.35\alpha_d^2) + \alpha_c\mathcal{P}e^{1/3} + (0.1 - \alpha_d + 3.58\alpha_d^2)\mathcal{R}e^{1/3}\mathcal{P}e^{1/3} \quad (2.47)$$

Cette nouvelle relation suit ainsi la même formulation que proposée par Gunn [92]. De plus, les valeurs produites par la présente relation sont du même ordre de grandeur que dans l'équation 2.45. Une comparaison avec les données est fournie en FIG. 2.C.2. Enfin, cette nouvelle relation à la capacité, par construction, de reproduire le comportement d'une sphère

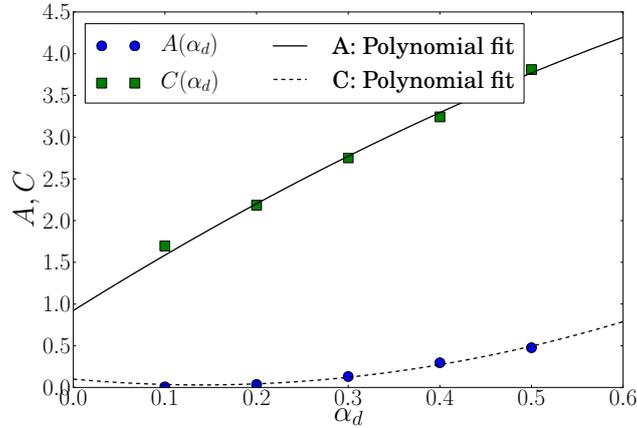


FIGURE 2.C.1 – Évolution des paramètres de la nouvelle corrélation avec le chargement solide.

isolée, contrairement aux relations de Gunn [92] et Deen [45].

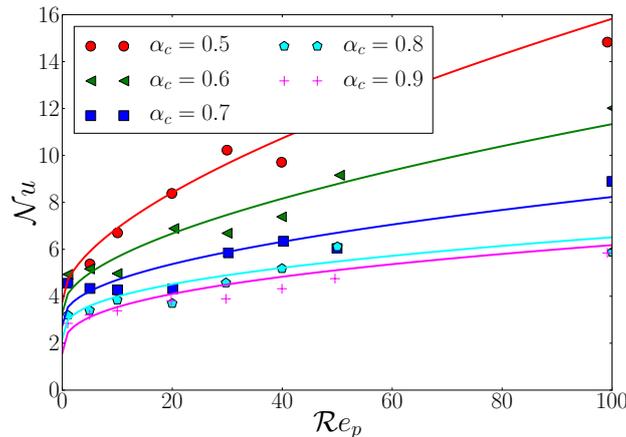


FIGURE 2.C.2 – Comparison of the fitted function with the literature data, $Pr = 0.8$.

2.C.2 Une unique particule thermiquement active dans une lit de particules

Afin de s'affranchir de l'utilisation des bilans 1D ou de la température moyenne locale, une série de simulation de couples $(\alpha_c, \mathcal{R}e_s)$ est réalisée pour un nombre de Prandtl $Pr = 0.72$ dans lesquelles une unique particule située au centre du lit est thermiquement active. La température des autres particules évolue avec le temps de manière à s'adapter à celle du fluide environnant. Pour chaque couple $(\alpha_c, \mathcal{R}e_s)$, 5 configurations sont générées. La particule la plus proche du centre du système est ensuite sélectionnée pour être la particule thermiquement

TABLE 2.C.1 – Comparaison du rapport $\mathcal{N}u_p/\mathcal{N}u_{p,iso}$ pour une particule thermiquement active dans un lit de particules avec les valeurs fournies par les corrélations, $\mathcal{P}r = 0.72$.

α_c	$\mathcal{R}e_s$	$\mathcal{N}u_p/\mathcal{N}u_{p,iso}$	$\mathcal{N}u_{p,Gunn}/\mathcal{N}u_{p,iso}$	$\mathcal{N}u_{p,Deen}/\mathcal{N}u_{p,iso}$	$\mathcal{N}u_{p,Gnielinski}/\mathcal{N}u_{p,iso}$
0.9	5	1.14 ± 0.02	1.05	1.47	1.41
0.8	5	1.22 ± 0.14	1.11	1.56	1.58
0.8	10	1.25 ± 0.12	1.05	1.46	1.54
0.7	5	1.39 ± 0.02	1.23	1.71	1.76
0.7	10	1.35 ± 0.03	1.17	1.61	1.72

active. Du fait du coût de calcul de cette stratégie, seuls 5 couples (soit 25 simulations) $(\alpha_c, \mathcal{R}e_s)$ pour des chargements modérément denses et des régimes d'écoulement à faibles nombres de Reynolds sont choisis. Cette procédure est proche des travaux de Buist [24] dans des réseaux structurés de particules dans lesquels une comparaison simulations/expériences montre un bon accord avec la corrélation de Gunn [92] pour des forts nombres de Reynolds.

Ici, le nombre de Nusselt $\mathcal{N}u_p$ (basé sur le nombre de Reynolds interstitiel et la température d'entrée du fluide) de la particule active est comparé à celui d'une particule isolée (corrélation de Feng [72]). Le rapport de ces deux nombres de Nusselt est enfin comparé à ceux issus des corrélations de Gunn [92], Deen [45] et Gnielinski [83]. Les résultats sont montrés dans le tableau TAB. 2.C.1. Il est intéressant de noter que le rapport des nombres de Nusselt est systématiquement supérieur à celui d'une particule isolée. De plus, les valeurs fournies par les simulations semblent en meilleur accord avec la corrélation de Gunn [92]. Bien que les valeurs d'incertitudes doivent être améliorées à l'aide de nouvelles simulations, les premiers résultats indiquent que l'écart peut atteindre plus de 10% de la valeur moyenne. Ceci rejoint la conclusion précédente d'amélioration des lois de fermeture par caractérisation de ces écarts. Ceci sous-entend la définition d'un outil permettant de décrire la microstructure locale ainsi que l'écoulement. Une autre solution, moins physique, consiste à ajouter cette dispersion à l'aide d'un terme stochastique.

2.C.3 Cas des interactions mur–particules dans des réseaux fixes de particules.

Les configurations de Deen [49] présentées plus haut sont constituées de 1326 sphères dans une boîte munie de parois. Une condition adiabatique est imposée à la surface de ces murs de manière à éviter les pertes thermiques dans le lit. Au niveau hydrodynamique, une condition de non glissement est imposée pour le fluide. En conséquence, une partie des particules du système est en interaction hydrodynamique et thermique avec les parois. Ces particules sont repérées dans la suite, comme étant à une distance mur–particule $d_{w,p}^*$ inférieure à $d_{w,p}^* \leq 0.9d_p^*$. Dans le cas où une particule vérifie ce critère pour deux parois, la particule est classée dans une nouvelle catégorie : interaction avec un coin.

Dans cette partie, la caractérisation de la microstructure, des propriétés de l'écoulement

ainsi que des transferts hydrodynamique et thermique est présentées. Ces valeurs sont comparées dans les trois zones définies dans le lit : murs, coins ou domaine.

Dans un premier temps, les distributions de porosités locales pour les trois classes de particules sont montrées en FIG. 2.C.3a. Il apparaît clairement que la contrainte géométrique liée à la présence des parois a un impact sur la position relative des particules dans les coins et en proche paroi. Cette contrainte géométrique génère des inhomogénéités dans le lit, qui peuvent être responsables de changements des comportements hydrodynamiques et thermiques. En particulier, pour une distribution aléatoire de sphères dans une boîte, la porosité moyenne dans le cœur du lit est autour de $\alpha_c = 0.67$. Cette valeur grimpe à $\alpha_c = 0.7$ en proche paroi et se centre autour de $\alpha_c = 0.73$ pour les particules proches des coins.

Comme indiqué en FIG. 2.C.3b, la force hydrodynamique subie par les particules en proche paroi et dans les coins est 25% supérieure à celle subie par les particules au centre du lit. En suivant ces observations, la présence des murs doit aussi être responsable de modifications de l'écoulement moyen dans ces zones. Une manière de quantifier ces changements consiste à regarder la tortuosité de l'écoulement dans ces zones. La tortuosité d'un écoulement caractérise son écart au mouvement purement convectif selon l'axe principal imposé. À l'aide de la définition fournie par Matyka [150], la tortuosité τ_u autour des particules est calculée dans le lit (voir FIG. 2.C.3c). Du fait d'une plus grande porosité pour les catégories coins et murs, le fluide rencontre moins de difficultés pour s'écouler. Comme aucun obstacle ne vient perturber son mouvement, l'écoulement du fluide est alors plus proche de l'axe imposé en entrée. Ceci se traduit par une réduction de la tortuosité dans les régions « murs » et « coins ».

Les zones « murs » et « coins » peuvent être le siège de passages préférentiels du fluide du fait des contraintes plus faibles mises en évidence plus haut. En revanche, la présence des murs impose des gradients de vitesses dans leur environnement proche, qui réduisent la vitesse locale moyenne du fluide pour les particules situées dans ces zones (et donc le débit de fluide y circulant).

Le calcul des moyennes (vitesse, température) dans ces zones devient compliqué au niveau numérique. En effet, lorsqu'un volume de contrôle dépasse du domaine, ce dernier est tronqué pour ne tenir compte que des cellules contenues dans le milieu fluide. Ainsi, même pour des volumes de contrôles relativement petits, la plus grande portion des cellules prises en compte se situent dans le cœur du lit plutôt que dans la zone proche du mur.

Le tableau TAB. 2.C.2 montre l'écart de la vitesse locale axiale du fluide à la vitesse interstitielle dans le domaine pour une taille de boîte $L_{box} = 1.5$ dans les trois zones du lit. Il apparaît que les particules proches des parois observent une vitesse axiale plus faible que dans le centre du lit. Ceci est lié à la condition de non-glissement aux parois. Cet écart diminue avec le régime d'écoulement car les couches limites hydrodynamiques générées sont moins épaisses lorsque le nombre de Reynolds augmente. D'un autre côté, la porosité locale plus importante autour des particules en proche paroi induit une vitesse axiale plus importante que dans le lit. Si cet écart est faible pour $Re = 18$, sa valeur augmente avec le régime d'écoulement.

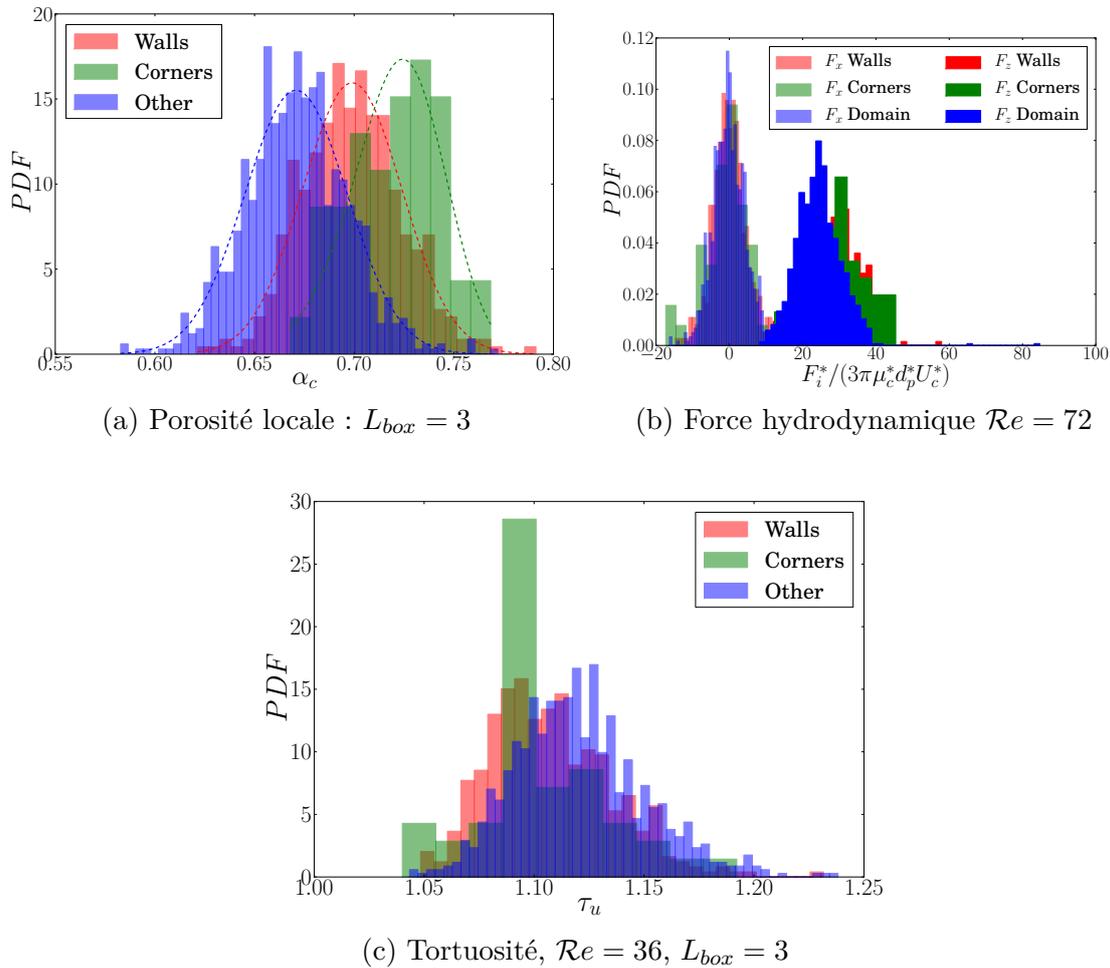


FIGURE 2.C.3 – Evolution des propriétés locales $L_{box} = 2$ de l'écoulement et de la force subie par les particules pour trois zones du lit : cœur du lit, proche parois et proche des coins.

Si les interactions sont maintenant regardées au niveau des transferts thermiques dans chaque zone du lit, aucun changement significatif n'est observé pour le nombre de Nusselt basé sur la température locale ($L_{box} = 2$). Ceci peut être lié à un biais de la méthode employée pour calculer le nombre de Nusselt. Bien que non-représentatif de la microstructure locale, le cas limite de volumes de contrôles $L_{box} = 1$ indique une augmentation de +6% du nombre de Nusselt en proche paroi et de +10% dans les coins. Afin de confirmer cette tendance, le profil des rapports $\langle Q_{cp}^* \rangle^{N_{walls}} / \langle Q_{cp}^* \rangle^{N_{domain}}$ du flux de chaleur moyen des particules en proche paroi à celui des particules dans le cœur du lit est calculé le long de l'écoulement. Ici N_{walls} correspond aux particules de la catégorie « murs » et N_{domain} celles situées dans le cœur du lit. Il est alors observé un flux de chaleur en proche paroi significativement supérieur sur toute la hauteur du lit (+35% par rapport au reste du lit). Ceci semble indiquer la présence d'un « by-pass » thermique proche des murs.

TABLE 2.C.2 – Vitesse axiale locale dans le cas d'interactions avec des parois.

Re	$\alpha_{c,p}\widetilde{u_{z,p}}$	Murs	Coins
18	0.9975	+0.55%	-5.23%
36	0.990	+2.00%	-2.32%
72	0.988	+3.37%	+0.00%

Un élément d'amélioration pour quantifier les transferts thermiques en proche paroi viendrait de la définition d'un outil de moyenne locale de la température pour le calcul du nombre de Nusselt dans ces zones. Les premiers éléments de réponse sur les flux de chaleur tendent à montrer des transferts plus importants en proche paroi.

Lits fluidisés liquide–solide

Sommaire

1	Introduction	127
2	Mathematical modeling and numerical approach	129
2.1	Coupling equations for fluid and particles	130
2.2	Determination of numerical configurations	134
2.3	Effect of the number of particles	138
3	Results on hydrodynamics of fluidized beds	144
3.1	Fluid phase hydrodynamics	145
3.2	Analysis of the particle statistics	148
3.3	Effect of particle agitation on hydrodynamics	154
4	Heat transfer in fluidized beds	155
4.1	Overall heat transfer through the bed	156
4.2	Effect of particle agitation on heat transfer	156
5	Conclusion	167
	Appendices	168
3.A	Auto-perturbation des quantités volumiques locales	168
3.A.1	Méthode de calcul des grandeurs locales	169
3.A.2	Effet sur la vitesse relative / coefficient de traînée	170
3.A.3	Effet sur la température locale et le nombre de Nusselt	171
3.A.4	Impact sur les propriétés des particules voisines	172
3.B	Interactions mur-particules	177
3.B.1	Présence de murs : impact hydrodynamique	178
3.B.2	Présence de murs : Effet sur la thermique	192

This chapter will be submitted for publication :
 F. Euzenat, A. Hammouti, P. Fede, E. Climent, A. Wachs, Direct numerical simulations of heat transfer through liquid-solid fluidized beds. 2017.

1 Introduction

Industrial applications involving particles transported by a flowing fluid together with heat and/or mass transfers are commonly found in chemical, petrochemical, or pharmaceutical processes [135]. Taking advantages of high transfer rates and good mixing properties, fluidized bed

technology is very often selected. During the last decades they have been widely investigated experimentally [76] and numerically [8, 92, 135]. From the simulation point of view, two approaches are commonly used : the multi-fluid approach, also called Two-Fluid Model (TFM) and the Euler-Lagrange approach. On one hand, TFM considers that all the phases are continuous. Such an approach requires closure laws for the inter-phase transfer terms (momentum, agitation, heat and mass transfers), and for fluctuating transport (high order moments). The TFM model has been successfully validated with experiments on lab-, pilot- and industrial-scale geometries [71, 84, 134, 237]. On the other hand, in Euler-Lagrange approach the fluid phase is described by solving the Navier-Stokes equations while the particles are individually tracked in a Lagrangian framework by a Discrete Element Method (DEM) based on Newton's laws. The particle/particle and particle/wall collisions are modeled using a soft- or hard-sphere model. Then simulation approaches split into two categories : Discrete Element Method/Computational Fluid Dynamic (DEM/CFD) [210, 219] and Particle Resolved Simulation (PRS) [46, 82, 214, 239, 243, 247]. The first one uses closure laws to model momentum, heat or mass transfers between the fluid phase and the particulate phase while the second directly solves the balance equations on a mesh much finer than the particle scale for PRS. Boundary conditions are enforced at the particle surface and all transfer mechanisms between the fluid and the particles are then directly computed. The computational cost varies strongly from one approach to the other : PRS are able to handle up to $O(10^4)$ particles on supercomputers for months [67], the DEM/CFD approach only needs few hours on single CPU to simulate the same configuration (with much less spatial accuracy). DEM/CFD simulations can simulate the simultaneous trajectories of $O(10^8)$ particles [182] and for Euler-Euler methods, the target is to deal with the industrial scales and geometries.

The methods used in PRS to resolve both the momentum and heat balance equations for two-phase dispersed flows can be also divided into two categories : body-fitted moving meshes [107] and non-body-fitted fixed meshes [82, 158, 159]. Due to remeshing computing cost at each time step for body-fitted methods, it is very often limited to steady systems (fixed beds), to two-dimensional configurations of moving particles, or very few particles in 3D. The challenge for the second category of methods is to properly impose boundary conditions at the particle surface on a fixed (cartesian grid) which is not fitting the actual shape of the particles. Various techniques have been developed from Immersed Boundary Methods (IBM) [21, 239, 260], Distributed Lagrange Multipliers / Fictitious Domain (DLM/FD) [82, 245, 248], Lattice-Boltzmann Methods (LBM) [101, 141, 230] , Penalty Methods (PM) [27] or Force Coupling Method [37]. These numerical techniques have been validated on reference configurations and compared [10, 260]. If the computing performances (scalability on supercomputers) may vary in the implementation of all these techniques, the accuracy of the flow fields is controlled by spatial and temporal discretizations [66, 68, 245]. It is now clear that all the aforementioned physical properties (*i.e.* flow regime, particle concentration, particle shape, fixed/moving systems) have an influence on the convergence rate of the numerical solution. Another important issue for fluidized bed simulations is the physical time computed to reach statistically steady state and convergence of statistics [67, 167].

Numerical analysis of momentum transfer in both liquid-solid and gas-solid configuration have been performed in the literature. Recent works of Esteghamatian [67] investigated momentum transfer in both liquid-solid and gas-liquid configurations. The authors evidenced anisotropic driving mechanisms of the particle motion into fluidized beds. Both a local diffusive and large scale

convective mechanisms were characterized as well as the correlation time and the fluctuation length extracted from the simulations. Tang [221] studied the effect of particle motion in gas-solid systems by comparing moving and fixed systems. PRS of liquid-solid fluidization composed of a few thousand particles have been recently performed by Ozel *et al.* [167]. The comparison of particle motion and agitation from PRS simulations were in good agreements with the experimental results of Aguilar-Corona [6]. Statistics of particulate flows in turbulence have been reported in [161, 240]. A direct comparison of PRS and DEM-CFD simulations of a gas/solid fluidized bed composed of 7000 particles, have been reported in [230]. Concerning heat/mass transfer, only very few numerical studies exist for fluidized beds. Deen [49] and Feng [73] studied transfers in pseudo-3D systems of respectively 1216 and 225 particles. Due to wall-confinement, the analysis only dealt with macroscopic quantities of the beds. Feng *et al.* [74] studied the fluidization of 1204 spheres in a similar configuration for a homogeneous inlet velocity and a jet flow (spouted bed). The particles velocity distributions are different into the bed cross-section resulting in higher heat transfer rate for the jet flow configuration. Liquid-solid micro-fluidization of particles with mass transfer for high Schmidt number was investigated by Derksen [51]. Heat transfer in sheared suspension flows has been investigated by Metzger *et al.* [156]. The enhancement of heat diffusion through a suspension of particles agitated with a Brownian motion is found to be a function of the Péclet number and porosity. "Rolling-coating" effect on the transport of tracer from the walls to the bulk in a sheared flow of non-Brownian particles has been studied by Souzy *et al.* [211].

We will briefly introduce the PRS numerical methods used for both particles and flow/heat balance equations (see *Section 2*). Some comparisons with literature test cases for PRS including heat transfer are first reported (see *Section 2.2*). Then, considering the previous results on spatial convergence of flow resolution through fixed beds of particles and heat transfer [66, 68], the first aim of this work is to define the minimum numerical configuration of a bi-periodic statistically homogeneous fluidized bed independent of the number of particles (see *Section 2.3*). Based on these, four inlet velocities corresponding to different volumetric concentrations of the particulate phase will be used to study the particle dynamics, flow and heat transfer (see *Section 3* and *Section 4*). A direct comparison of heat transfer coefficients between fixed and fluidized beds gives some insights on the effect of particle agitation on heat transfer (see *Section 4.2*). Conclusion and perspectives are then drawn in (see *Section 5*).

2 Mathematical modeling and numerical approach

In this section, we give the mathematical description of the problem and the numerical approaches to carry out Particle Resolved Simulations. The fluid is assumed to follow Newtonian behavior (constant viscosity and density). The solid phase dynamics is computed in a Lagrangian framework by solving the Newton-Euler equation for each individual particle. The PRS approach to solve the coupled Navier-Stokes equations for the fluid phase and Euler-Newton laws for the particulate phase is based on the DLM/FD formulation proposed by [82] with finite volume discretisation (see [245, 247]).

All parameters in this section are dimensionless, while dimensional variables are distinguished

by a "star" symbol. To make the set of equations dimensionless, the following scales are introduced : L_{ca}^* for length, V_{ca}^* for velocity, L_{ca}^*/V_{ca}^* for time, $\rho_c^* V_{ca}^{*2}$ for pressure (with ρ_c^* the fluid phase density), V_{ca}^{*2}/L_{ca}^* for gravity acceleration, $T_p^* - T_c^*$ for the temperature, $\rho_c^* V_{ca}^{*2}/L_{ca}^*$ for hydrodynamic Lagrange multipliers, $\rho_c^* C_{p,c}^* V_{ca}^* (T_p^* - T_c^*)/L_{ca}^*$ for the temperature Lagrange multipliers and $\rho_c^* V_{ca}^{*2} L_{ca}^{*2}$ for contact force.

2.1 Coupling equations for fluid and particles

The PRS approach to solve the combined Navier-Stokes equations for the fluid phase and Euler-Newton laws for the particulate phase is based on the DLM/FD preliminary formulation of Glowinski [82]. A Finite Volume implementation of this formulation was performed here (see [245, 247]). The dimensionless combined momentum and continuity equations for the entire system Ω (*i.e.* containing both the fluid and the particles) as well as the rigid body motion constraint for the particles \mathcal{P} are as follow :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} - \boldsymbol{\lambda}, \quad \text{over } \Omega \quad (3.1)$$

$$(\rho_r - 1) V_p \frac{d\mathbf{U}}{dt} - \int_{\mathcal{P}} \boldsymbol{\lambda} dx = \sum_j \mathbf{F}_{pp,j} + (\rho_r - 1) \mathcal{F} r V_p \frac{\mathbf{g}^*}{|\mathbf{g}^*|}, \quad \text{over } \mathcal{P} \quad (3.2)$$

$$(\rho_r - 1) \left(\mathbf{I}_p \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{I}_p \cdot \boldsymbol{\omega} \right) - \int_{\mathcal{P}} \mathbf{r} \times \boldsymbol{\lambda} dx = \sum_j \mathbf{R}_j \times \mathbf{F}_{pp,j}, \quad \text{over } \mathcal{P} \quad (3.3)$$

$$\mathbf{u} - (\mathbf{U} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) = 0, \quad \text{over } \mathcal{P} \quad (3.4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad \text{over } \Omega \quad (3.5)$$

In the set of equation above, \mathbf{u} , \mathbf{U} , $\boldsymbol{\omega}$ respectively stand for the fluid velocity vector, the particle translational velocity vector and the particle angular velocity vector. In the present method, rigid body motion on the domain \mathcal{P} is imposed using Lagrange multipliers vectors $\boldsymbol{\lambda}$ at the surface of the particles. Likewise, \mathbf{F}_{pp} represents the contact force and are presented later, $V_p = M_p^*/(\rho_p^* L_{ca}^{*\alpha})$ the particle volume, M_p^* the particle mass, α the number of dimension of the system, $\mathbf{I}_p = \mathbf{I}_p^*/\rho_p^* L_{ca}^{*\alpha+2}$ the particle inertia tensor, \mathbf{r} the position vector and \mathbf{R} the vector connecting the gravity center and the contact point. In the following, L_{ca}^* is set at d_p^* for suspension flows, where d_p^* is the diameter of the particles.

The extension to energy was already implemented in previous studies [42, 249]. The combined heat equation on Ω and \mathcal{P} reads as :

$$\frac{\partial T_c}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T_c = \frac{1}{RePr} \nabla^2 T_c - \lambda_T, \quad \text{over } \Omega \quad (3.6)$$

$$T_c = T_p, \quad \text{over } \mathcal{P} \quad (3.7)$$

With the set of equations above comes the following dimensionless numbers :

Mechanical group of numbers :

$$\text{Reynolds number } \mathcal{R}e = \frac{\rho_c^* V_{ca}^* L_{ca}^*}{\mu_c^*} \quad (3.8)$$

$$\text{Inverse Froude number } \mathcal{F}r^{-1} = \frac{g^* L_{ca}^*}{V_{ca}^{*2}} \quad (3.9)$$

$$\text{Density ratio } \rho_r = \frac{\rho_p^*}{\rho_c^*} \quad (3.10)$$

$$\text{Stokes number } \mathcal{S}t_k = \frac{\rho_r \mathcal{R}e}{18} \quad (3.11)$$

$$(3.12)$$

Thermal group of numbers :

$$\text{Prandtl number } \mathcal{P}r = \frac{\mu_c^* C_{p,c}^*}{k_c^*} \quad (3.13)$$

$$\text{Prandtl number } \mathcal{P}e = \mathcal{R}e \mathcal{P}r \quad (3.14)$$

$$\text{Nusselt number } \mathcal{N}u_p = \frac{\bar{q}_{p \rightarrow c}^* L_{ca}^*}{k_c^* (T_p^* - T_{c,0}^*)} \quad (3.15)$$

where $\rho_{c,0}^*$ denotes the fluid density at reference temperature $T_{c,0}^*$ and μ_c^* stands for the fluid viscosity. k_c^* , $C_{p,c}^*$ are thermal conductivity and heat capacity of the fluid. The equivalent properties for the particles are denoted by replacing the subscript c by the letter p , except for the viscosity since the rigid body motion is applied on \mathcal{P} (*i.e.* $\mu \rightarrow \infty$). Moreover, $\bar{q}_{p \rightarrow c}^*$ stand for the averaged particle to fluid heat flux per unit area.

The set of equations presented above defines the full problem of fluid flow coupled with heat transfer. For problem simplification and driving parameters limitation, the thermal expansion coefficient of both the fluid and particle phases is nullified in the present work. This allows to avoid the Grashof terms in the equations. Thus study will only focus on the convection-diffusion effects in fluidized beds.

Particle dynamics

Particle motion and dynamics obeys Euler-Newton laws as describe in equations 3.16 and 3.17. Here, $\mathbf{F}_b = (\rho_r - 1) \mathcal{F}r V_p \frac{\mathbf{g}}{|g^*|}$ stands for the buoyancy force, while \mathbf{F}_{pp} and \mathbf{F}_{cp} define the inter-particle or particle-wall contact force and the fluid/particle interaction force. The contact-induced and fluid-induced torques acting on the particle are respectively denoted by \mathbf{T}_{pp} and \mathbf{T}_{cp} . The contact force and torque are computed using a spring-dashpot-frictional slider soft-sphere model. For the temperature evolution, Q_{cp} is the heat exchanged with the fluid phase. Neither temperature gradient inside the particle is considered nor the particles temperature change with time are considered in this work. This situation corresponds to large diffusion coefficient into the particle.

$$\rho_r V_p \frac{d\mathbf{U}}{dt} = \mathbf{F}_b + \mathbf{F}_{pp} + \mathbf{F}_{cp} \quad (3.16)$$

$$\rho_r (\mathbf{I}_p \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{I}_p \boldsymbol{\omega}) = \mathbf{T}_{pp} + \mathbf{T}_{cp} \quad (3.17)$$

$$(3.18)$$

The force, torque and heat flux each particle undergoes or exchanges with the fluid is then computed using the Lagrange multipliers through 3.19.

$$\mathbf{F}_{cp} = \int_{\mathcal{P}} \boldsymbol{\lambda} d\mathbf{x} + V_p \frac{d\mathbf{U}}{dt} \quad (3.19)$$

$$\mathbf{T}_{cp} = \int_{\mathcal{P}} (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\lambda}) d\mathbf{x} + \mathbf{I}_p \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{I}_p \boldsymbol{\omega} \quad (3.20)$$

$$Q_{cp} = \int_{\mathcal{P}} \lambda_T d\mathbf{x} \quad (3.21)$$

Particle direct interactions

Two types of models are usually found to treat both inter-particle and particle-wall interactions : the hard-sphere models and the soft-sphere models. The former is however only able to treat binary collisions by solving the momentum exchange at the time the particles collide. The latter uses the Newton-Euler equations and a spring-dashpot frictional model according to the particles overlap. In this part, the soft-sphere model used in the PELIGRIF code is described through three different forces.

1. An elastic restoring force :

$$\mathbf{F}_{el}^* = k_n^* \delta^* \mathbf{n}_{ij} \quad (3.22)$$

Here, k_n^* defines the stiffness of the equivalent spring, δ^* is the overlap distance between particles i and j (which is negative during contact) and \mathbf{n}_{ij} is the unit normal vector along the center-line.

2. A viscous dissipative force :

$$\mathbf{F}_{dn}^* = -2\gamma_n^* M_{ij}^* \mathbf{U}_n^* \quad (3.23)$$

Following the normal direction of the contact. The reduced mass of particles i and j is written $M_{ij}^* = \frac{m_i^* m_j^*}{m_i^* + m_j^*}$ and \mathbf{U}_n^* stands for the normal relative velocity between particles i and j . The damping coefficient γ_n^* is computed based on the dry coefficient of restitution e_n [246].

3. A tangential friction force :

$$\mathbf{F}_t^* = -\min\{\mu_{Co} |\mathbf{F}_n^*|, |\mathbf{F}_{dt}^*|\} \mathbf{t}_{ij} \quad (3.24)$$

that defines the Coulomb frictional limit using μ_{Co} , the Coulomb dynamic friction coefficient. $\mathbf{F}_{dt}^* = -2\gamma_t^* M_{ij}^* \mathbf{U}_t^*$ is the dissipative friction force, $\mathbf{F}_n^* = \mathbf{F}_{el}^* + \mathbf{F}_{dn}^*$ denotes the

total normal force. Likewise, γ_t^* stands for the tangential dissipative friction coefficient, and \mathbf{U}_t^* is the tangential relative velocity between particles i and j and \mathbf{t}_{ij} the tangential unit vector along the tangential relative velocity.

The total contact force applied to the particle i is the sum of all the contact forces with the neighboring particles j :

$$\mathbf{F}_{pp,i}^* = \sum_j \mathbf{F}_{pp,ij}^* = \sum_j (\mathbf{F}_{el}^* + \mathbf{F}_{dn}^* + \mathbf{F}_t^*)_{ij} \quad (3.25)$$

From now, the set of equations is made dimensionless using the following variables $L_{ca}^* = d_p^*$ for distance, $V_{ca}^* = U_{c,in}^*$ for velocity, $T_{ca}^* = d_p^*/U_{c,in}^*$ for time. Here $U_{c,in}^*$ stands for the fluid inlet velocity. $T_p^* - T_{c,0}^*$ for the temperature, with T_p^* is the particle imposed temperature and $T_{c,0}^* = T_{c,in}^*$ the fluid inlet temperature.

The bulk temperature $\overline{T}_c(z)$ is commonly encountered in 1D-heat balance models and represents the flow-averaged fluid temperature at a particular bed height. Such an averaged temperature is computed as follows :

$$\overline{T}_c(z) = \frac{\int_{V(z)} \chi(\mathbf{x}) u_{c,z}(\mathbf{x}) T_c(\mathbf{x}) d\mathbf{x}}{\int_{V(z)} \chi(\mathbf{x}) u_{c,z}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}} \quad (3.26)$$

where $\chi(\mathbf{x})$ is a binary phase indicator function. Namely $\chi(\mathbf{x}) = 1$ in the fluid and 0 in the particle. $\overline{T}_c(z)$ is a volume average temperature in $V(z)$ and is approximated by numerical integration over $V(z)$, where $V(z)$ is a volume spanning the whole cross section of the bed and of width w . Typically, w is set to the cell size height. For any fluid variable, ϕ_c , the unconditioned surface averaged, $\widehat{\phi}_c$ is obtained following equation 3.27.

$$\widehat{\phi}_c = \frac{\int_{V(z)} \chi(\mathbf{x}) \phi_c(\mathbf{x}) d\mathbf{x}}{\int_{V(z)} \chi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}} \quad (3.27)$$

For the analysis let us also define the locally filtered variable, $\widetilde{\phi}_c$ around each particle using a cubic control volume surrounding the sphere. This methodology was previously described by [8, 45, 46, 49] and follows equation 3.28. Here, V_{box} represents the volume of the constructed box around the particles.

$$\widetilde{\phi}_c = \frac{\int_{V_{box}} \chi(\mathbf{x}) \phi_c(\mathbf{x}) d\mathbf{x}}{\int_{V_{box}} \chi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}} \quad (3.28)$$

Following these definitions, a set of Nusselt numbers is written as :

$$Nu_p = \frac{Q_{cp}^*}{\pi d_p k_c^* (T_p^* - T_{c,in}^*)} \quad (3.29)$$

$$\overline{Nu}_p = \frac{Q_{cp}^*}{\pi d_p k_c^* (T_p^* - \overline{T_c^*})} \quad (3.30)$$

$$\widetilde{Nu}_p = \frac{Q_{cp}^*}{\pi d_p k_c^* (T_p^* - \widetilde{T_c^*})} \quad (3.31)$$

To end up with the notations, any quantity may be averaged over the time $\langle . \rangle_t$ and/or averaged over the number of particle into the system is written $\langle . \rangle_{N_{part}}$ as defined in equation 3.32. Finally, the axial component of any quantity is denoted with a subscript ax while the transverse component have a subscript T .

$$\langle \phi \rangle_t = \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} \phi(t) dt \quad (3.32)$$

$$\langle \phi \rangle_{N_{part}} = \frac{1}{N_{part}} \sum_{i=1}^{N_{part}} \phi_i \quad (3.33)$$

2.2 Determination of numerical configurations

Effect of grid resolution on hydrodynamics – Previous studies on the numerical accuracy of the DLM/FD method [66, 68, 245] have been performed on hydrodynamics and heat transfer for fixed and fluidized beds. We recall here the main conclusions : i) the flow or transfer regimes (high Reynolds or high Prandtl numbers) and the concentration of solid increase the level of numerical errors. Convergence analysis has been carried out to find out adequate meshing in terms of Péclet number Pe . ii) Particles located in the upper or bottom part of a fixed bed does not experience the same heat transfer. iii) the Lagrangian statistics of particles in fluidized beds are properly captured with $N_p = 24 - 32$ grid resolution. A focus on the particle motion effect on the heat transfer is addressed in this section. The inlet Reynolds number is defined as $Re_{in} = \rho_c^* U_{c,in}^* d_p^* / \mu_c^*$.

A convergence analysis is carried out based on the case of Feng and Musong [73]. Their configuration consists in a liquid-solid pseudo-2D fluidized bed composed of 225 particles at high Reynolds and Péclet number. The bed dimensions, and physical properties of the fluid and particles are reported in TAB. 3.1. Three out the five inlet velocities presented in Feng and Musong [73] were tested for systematic grid refinement : $Re_{in} = 222.25$, $Re_{in} = 285.75$ and $Re_{in} = 349.25$. The first grid size we tested is very close to the one used in Feng and Musong [73]. Then, a grid refinement is performed by conserving a constant $CFL \approx 0.3$. Four grids where tested $N_p \in [16, 32, 40, 50]$. The inlet velocity is always oriented along the upward direction z and gravity \mathbf{g} is imposed in the opposite direction.

Based on the data from Feng and Musong [73], our results show that mean values computed

TABLE 3.1 – Parameters used in Feng and Musong [73].

Parameter	Value	Unit
Lx	16.2	[–]
Ly	1.08	[–]
Lz	56.7	[–]
d_p^*	0.00635	[m]
ρ_p^*	1140	[kg.m ⁻³]
ρ_c^*	1000	[kg.m ⁻³]
μ_c^*	10 ⁻³	[Pa.s]
$\mathcal{P}r$	7	[–]

TABLE 3.2 – Comparison of the bed height.

$\mathcal{R}e_{in}$	222.25	254	285.75	317.5	349.25
Bed height PeliGRIF	0.162	0.186	0.222	0.259	0.308
Bed height Feng-Musong [73]	0.143	0.171	0.196	0.232	0.274

from $t^* = 6s$ are in good agreement. For a $N_p = 16$ resolution, the deviation from the results of Feng and Musong on the mean bed porosity does not exceed 6.5% (see TAB. 3.2). Different particle collision model could be the source of discrepancies. From the results on the mean velocity and rotation, the global hydrodynamic response of the fluidized bed is well captured for resolutions $N_p = 32$ and $N_p = 40$ respectively for $\mathcal{R}e_{in} = 222.25$ and $\mathcal{R}e_{in} = 349.25$. The velocity PDF are computed for the different spatial resolutions and show good agreement on the mean and rms value of the PDF for similar resolutions FIGS. 3.1a and 3.1b.

Macroscopic physical quantities of the fluid phase were also analyzed in terms of mesh resolution. The bed height is defined as the distance from bottom under which 99% of the particles are located. Time-evolution of the pressure and axial velocity profiles were computed using equation 3.27. Surface average statistics are formed at each cell center. The overall bed pressure drop is defined by interpolating the pressure profile at the desired bed height as follows : $\Delta P_{tot} = \hat{P}(z = 0) - \hat{P}(H_{bed})$. The total pressure drop accounts for the hydrostatic pressure distribution through the bed and wall shear stress. According to table TAB. 3.3 the pressure drop $\Delta P = \Delta P_{tot} - \Delta P_{hy}$ (with P_{hy} the hydrostatic pressure) is not affected by grid refinement contrary to other quantities (and nearly equals the particles weight). According to table TAB. 3.3 a $N_p = 16$ grid overestimates the bed height by nearly 15% compared to $N_p = 40 - 50$. The instantaneous and local axial fluid velocity may vary by 50% around its mean value leading to local strong heterogeneity (see FIG. 3.1a). High axial surface averaged velocity corresponds to lower surface averaged porosity. The mean bed axial velocity $\widehat{u_{c,ax}}$ (i.e. averaged over the bed height) remains however constant in time and is more dependent on the grid resolution (see TAB. 3.3). For fine meshes, the bed height smoothly decreases from $N_p = 32$ to $N_p = 50$ while the axial velocity follows an inverse trend.

TABLE 3.3 – Evolution of bed properties with grid refinement.

N_p	$Re_{in} = 222.25$				$Re_{in} = 285.75$				$Re_{in} = 349.25$			
	$\langle \Delta P \rangle_t$	$\langle H_{bed} \rangle_t$	$\langle \widehat{u_{c,ax}} \rangle_t$	$\langle \Delta P \rangle_t$	$\langle H_{bed} \rangle_t$	$\langle \widehat{u_{c,ax}} \rangle_t$	$\langle \Delta P \rangle_t$	$\langle H_{bed} \rangle_t$	$\langle \widehat{u_{c,ax}} \rangle_t$	$\langle \Delta P \rangle_t$	$\langle H_{bed} \rangle_t$	$\langle \widehat{u_{c,ax}} \rangle_t$
16	55.5	26.5	1.34	35.6	35.9	1.22	24.8	46.3	1.16			
32	55.5	24.0	1.20	35.6	32.4	1.18	24.8	42.0	1.15			
40	55.5	23.1	1.23	35.6	31.0	1.29	24.8	42.4	1.16			
50	55.5	23.4	1.43	35.6	31.0	1.29	24.8	42.7	1.20			

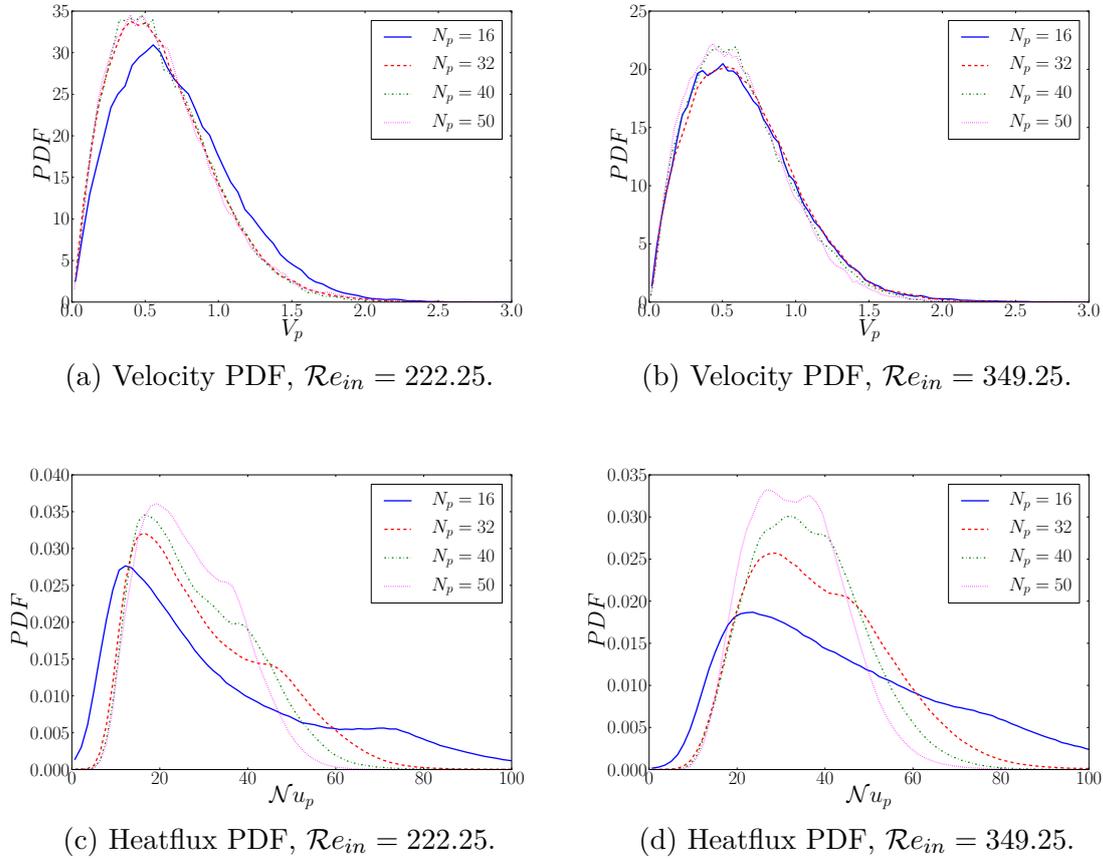


FIGURE 3.1 – Evolution of velocity and heat flux probability density functions with grid resolution.

Based on previous comments, a grid resolution corresponding to $N_p = 40$ is adequate to simulate hydrodynamics and particulate dynamics for fluidized beds with a Reynolds number ranging from 222.25 to 349.25. In the next part, similar study is carried out for heat transfer.

Effect of grid resolution on heat transfer

Thermal properties of the bed show very low convergence rate with spatial resolution (see FIG. 3.2). Here $\mathcal{N}u_g = \langle \mathcal{N}u_p \rangle_t^{N_{part}}$ corresponds to the mean (time and ensemble) Nusselt number of the particles. Despite 1.5 convergence rate (which agrees with [68, 245]) the errors remain above 10% for the thinner mesh due to very high Péclet numbers ($1555.75 < Pe < 2444.75$) corresponding to thin thermal boundary layers. The definition of the Nusselt number proposed by Feng and Musong [73] is directly proportional to the heat flux through the bed (see equation 3.29). The effect of spatial resolution on fluid temperature profiles is shown for $\mathcal{R}e_{in} = 222.25$ and $\mathcal{R}e_{in} = 349.25$ inlet velocities (see FIG. 3.3) where large discrepancies can be observed for the four meshes we tested. This is due to the occurrence of large temperature gradients

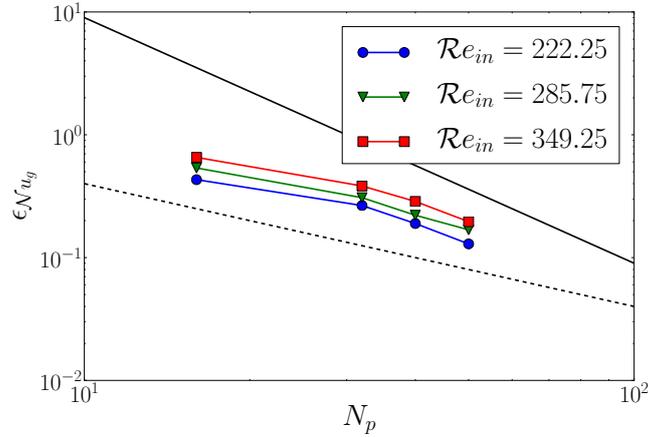


FIGURE 3.2 – Richardson extrapolation on Feng [73] configuration.

at the bottom of the bed for $\mathcal{R}e_{in} = 222.25$. Those numerical errors are conveyed all along the bed and the quantities at the upper bound of the bed are overestimated. Better agreement is observed for $\mathcal{R}e_{in} = 349.25$ at $N_p = 40$ and $N_p = 50$. Actually, two opposite constraints on numerics happen while increasing the inlet velocity into a fluidized bed : i) an increase of inlet velocity increases of Péclet number which requires thinner grid to resolve steeper temperature gradient, ii) an increase of inlet velocity increases bed porosity which is a configuration less demanding in spatial resolution. It seems that the latter argument prevails (see FIGS. 3.1c and 3.1d). Moreover, particle agitation and flow recirculation into the bed yield homogenous repartition of temperature and this is reinforced for large inlet velocities.

2.3 Effect of the number of particles

The determination of the number of particles and domain size is a key problem in PRS simulations of fluidized beds in both gas–solid or liquid–solid configurations. Derksen [52] simulated liquid-solid fixed beds and fluidized beds with 165 particles for $\mathcal{R}e$ in the range $[1;10]$. Recently, the simulation of 2000 particles in bi-periodic fluidized beds has been performed with the present DLM/FD method by Esteghamatian *et al.* [67]. Similar configurations were studied by Kriebitzsch *et al.* [131]. In their numerical study, Tang *et al.* [221] showed that a domain size of a $10d_p^*$ is enough to prevent domain size dependence of results with periodic boundary conditions in the three directions (in that case $\mathcal{R}e > 100$).

The first part of this section aims at defining numerical parameters such as domain size and particle number yield size independent results for fluidized beds. Simulations of liquid-solid fluidization for four beds containing from 500 to 3000 particles are compared (hydrodynamic global and local quantities and heat transfer). Particle diameter is $1mm$ and water inlet vertical velocity is imposed at 4.5 times the minimal fluidization velocity $U_{c,mf}^*$. The density ratio is

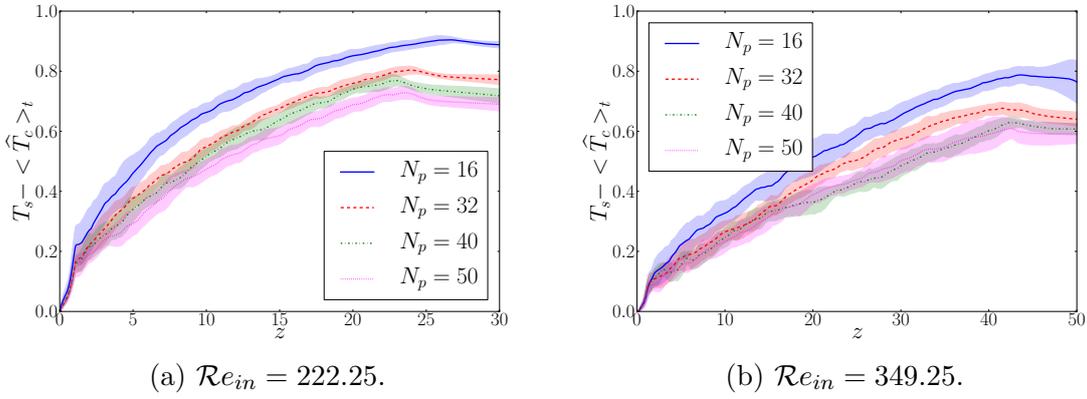


FIGURE 3.3 – Effect of the grid resolution on the fluid temperature vertical distribution. Shaded regions correspond to the standard deviation of the temperature profile. The results are given for two Reynolds number.

fixed to $\rho_p^*/\rho_c^* = 10$ (following Esteghamatian *et al.* [67]) corresponding to $\mathcal{Re}_{in} = 9$ and Stokes number $\mathcal{St}_k = 5$. Periodic boundary conditions are considered on the two horizontal directions. Confinement effect due to walls is then prevented. However, slugging effect or cluster formation may appear if the horizontal cross-section is too narrow. $N_p = 40$ is used in all the simulations. The dimensions of the beds, number of particles and physical properties are respectively defined in TAB. 3.4 and TAB. 3.5. A physical time corresponding to $3\tau_{RTD}$ is necessary to reach the steady state for a constant inlet velocity and temperature. The fluid residence time (τ_{RTD}) is defined by the mean time the fluid stays into the system $\tau_{RTD} = \langle H_{bed} \rangle_t / \langle \widehat{u_{c,ax}} \rangle_t$ where $\langle \widehat{u_{c,ax}} \rangle_t$ stands for the mean fluid interstitial velocity.

Hydrodynamics of the beds

We first compare some statistics relevant of the macroscopic description of the flow : pressure drop, mean bed porosity and axial velocity. Time averaged values of the main flow quantities are reported in table TAB. 3.6. These results are reported for the four sets of simulation increasing the number of particles. With horizontal periodic boundary conditions, the pressure drop across a fluidized bed must balance the bed weight (hydrostatic pressure and particles). As for previously, the bed height is computed as the distance under which 99% of the particles are located. The fluid pressure profile through the bed is computed along the main flow direction (see 3.27) later than $t = 3\tau_{RTD}$. For the four bed sizes we considered, the pressure drop based on the 99% criterion equal the bed weight within a 1% error confirming conservative momentum balance in our simulations. Moreover, less than 2% deviation is observed for the variation of pressure drop $\langle \Delta P \rangle_t / \langle H_{bed} \rangle_t$ throughout the four tests of particle number. Temporal average bed porosity and fluid velocities are also reported in TAB. 3.6. Variations are below 2% for the four simulations which shows that a small system composed of 500 particles is able to reproduce the

TABLE 3.4 – Parameters of the simulations.

L_x	L_y	L_z	N_{part}	\mathcal{Pr}	N_p
8	8	15	500	10	40
10	10	17	1000	20	48
13	13	20	2000	7.5	42
15	15	23	3000	7.5	40

TABLE 3.5 – Fluidized bed physical properties.

Parameter	Value	Units
ρ_c^*	1000	[kg.m ⁻³]
μ_c^*	0.001	[Pa.s]
k_c^*	2.1	[W.m ⁻² .K ⁻¹]
$C_{p,c}^*$	1000	[J.kg ⁻¹]
d_p^*	0.001	[m]
ρ_p^*	10000	[kg.m ⁻³]
k_n^*	500	[N.m ⁻¹]
μ_t^*	50000	[s ⁻¹]
e_n	0.9	[-]

TABLE 3.6 – Effect of particle number on macroscopic fluid quantities of a fluidized bed.

N_{part}	$\langle \Delta P/H_{bed} \rangle_t$	$\langle \widehat{\alpha}_c \rangle_t$	$\langle \widehat{u_{c,ax}} \rangle_t$
500	17.03	0.60	1.64
1000	16.76	0.59	1.64
2000	16.88	0.59	1.64
3000	16.75	0.59	1.64
$maxErr$ [%]	2.11	1.25	1.70

TABLE 3.7 – Effect of the number of particles on the fluid properties.

N_{part}	σ_u	σ_{u_T}	$\sigma_{u_{ax}}$
500	1.8 ± 0.2	0.74 ± 0.05	2.2 ± 0.2
1000	1.9 ± 0.2	0.74 ± 0.05	2.2 ± 0.2
2000	1.9 ± 0.2	0.74 ± 0.05	2.2 ± 0.2
3000	1.9 ± 0.2	0.79 ± 0.05	2.2 ± 0.2
$max_{Err}[\%]$	5.5	8.1	3.9

bed dynamics.

Although the mean Reynolds number within the bed is roughly equal to 9, agitation is occurring due to the motion of the particles (due to hydrodynamic interactions, collective effects and collisions). The fluid velocity variance (see equation 3.34) computed over the whole transverse direction and from $1 < z < H_{bed} - 1$ in the axial direction can be used to represent the fluid agitation around the mean value within the bed. Here, $u'_{c,i} = u_{c,i} - \langle u_{c,i} \rangle^{N_{cell}}$ defines the deviation to the mean fluid velocity into the bed (which corresponds to the time average velocity of a particular cell for a sufficiently long time period), with N_{cell} the number of cells lying in the control volume.

$$\sigma_{u_i} = \langle u'_{c,i} u'_{c,i} \rangle_t^{N_{cell}} \quad (3.34)$$

$$\sigma_{u_T} = \frac{\sigma_{u_x} + \sigma_{u_y}}{2} \quad (3.35)$$

$$\sigma_u = \frac{2\sigma_{u_T} + \sigma_{u_{ax}}}{2} \quad (3.36)$$

Axial $\sigma_{u_{ax}}$, transverse σ_{u_T} and total fluid velocity variance σ_u for the four configurations we tested are reported in table TAB. 3.7. According to these results, a slight increase with the particle number is observed (7% maximum deviation). Additionally, local fluid velocities around particles are computed using a control volume around each particle (see equation 3.28).

Volume average around particles is computed for a box length $L_{box} = 2$ and starts later than $t = 3\tau_{RTD}$. All results including mean fluid velocity, velocity standard deviation along both the vertical and transverse directions are shown in FIG. 3.4. Results are very similar (moments and shape of the distribution) for the four sets of simulation. However, increasing the number of particles slightly widens the distribution (typically below 5 % variations over the 4 fluidized beds). Similar conclusion is drawn for box length : $L_{box} = 1.5$, $L_{box} = 3$, $L_{box} = 4$.

Statistics on the particulate phase

We aim at quantifying the particulate phase dynamics which is particularly important for fluidized beds since formation of local clusters or bed agitation are key phenomena for transfers efficiency of those devices. Size effect on velocity standard deviation is clearly observed on early

TABLE 3.8 – Effect of particle number on macroscopic particle parameters of a fluidized bed.

N_{part}	$\langle F_{p,ax}^*/(3\pi\mu_c^*d_pU_{c,in}^*) \rangle_t$	$\langle V_p \rangle_t$	$\langle \omega_p \rangle_t$
500	13.08	0.538	0.685
1000	13.11	0.533	0.684
2000	13.05	0.567	0.680
3000	13.06	0.578	0.687
$max_{Err}[\%]$	0.45	8.33	1.34

instants of the simulation (see FIG. 3.5a) because at initial condition the bed height is far from its steady value (transient expansion or collapse of the bed from the initial random seeding of particles yield strong variations of the velocity). Mean values of the particle agitation θ_k are computed for long times (deviation around 5%, see equation 3.37). The small discrepancies remain of the same order for standard deviation of the drag force (see FIG. 3.5b). Due to their size, large systems need more time to statistically converge than small systems. We investigate now the dependence of particulate macroscopic properties on the system size (see TAB. 3.8 and more details in *Section 2.3*). It can be observed that mean quantities and standard deviations of the axial component of the hydrodynamic force do not vary significantly (below 1% variation). However similar conclusion holds for particle rotation. More deviations are observed on statistics of the magnitude of velocities in main flow direction (up to 8%), mean and standard deviation slightly increase with the bed size.

$$\theta = \frac{\sum_{i=1}^3 \theta_i}{3} \quad (3.37)$$

$$\theta_i = \langle (V_{p,i} - \langle V_{p,i} \rangle_t^{N_{part}})^2 \rangle^{N_{part}} \quad (3.38)$$

Heat transfer through the bed

The overall heat transfer coefficient is obtained from the bulk temperature profile (see equation 3.39) which is obtained by surface average procedure (see equation 3.26). Following the (1-D) balance solution over the bed height, a linear regression is performed to measure the average heat transfer coefficient [45]. The results on the mean Nusselt number are shown in table TAB. 3.9. The data are collected later than $t = 3\tau_{RTD}$ and the regression coefficients were always above $R^2 = 0.99$.

$$\overline{T_c^*}(z) = T_p^* + (\overline{T_{c,in}^*} - T_p^*) \exp\left(-\frac{6\alpha_p \overline{Nu} z^*}{\mathcal{P}e}\right) \quad (3.39)$$

Nusselt numbers for the two largest beds among the four configurations we simulated show

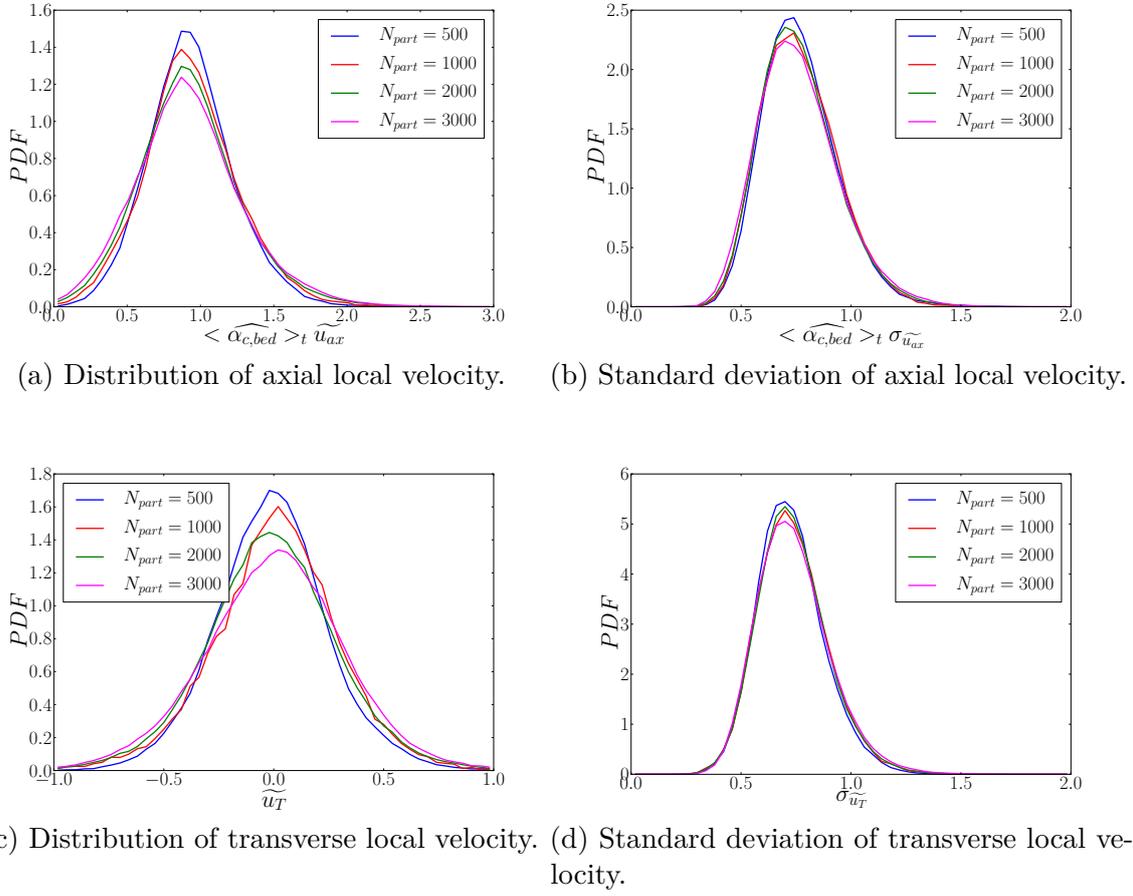


FIGURE 3.4 – Local fluid velocity comparison for different particles numbers, $L_{box} = 2$.

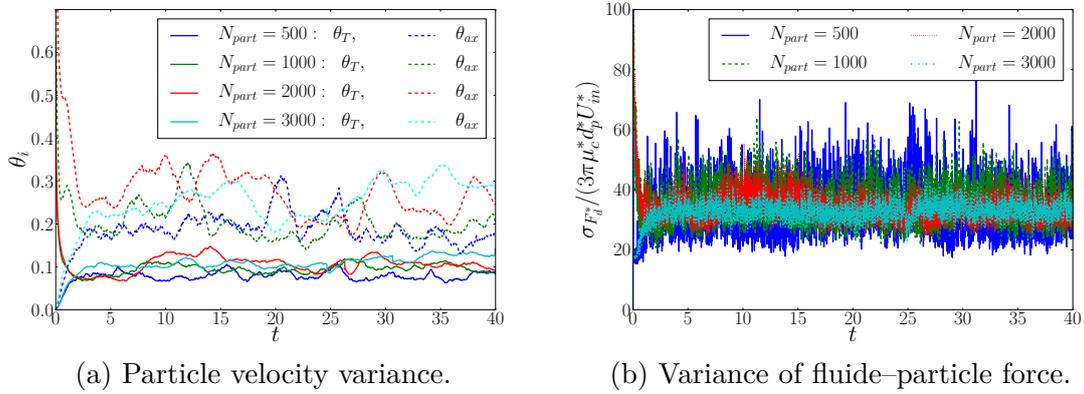


FIGURE 3.5 – Lagrangian statistics for different fluidized beds sizes.

TABLE 3.9 – Effect of the number of particles on the mean Nusselt number.

N_{part}	$\mathcal{P}r$	$\overline{\mathcal{N}u}$
500	10	8.63
500	7.5	7.78
1000	20	11.14
2000	7.5	7.81
3000	7.5	7.83

very good agreement with Deen *et al.* [46] correlation (Prandtl number $\mathcal{P}r = 7.5$). The deviation between the predicted (1-D) balance Nusselt number is below 1% indicating the weak effect of bed size on overall heat transfer. The two other configurations correspond to Prandtl numbers $\mathcal{P}r = 10$ and $\mathcal{P}r = 20$. The present data follow a scaling $\mathcal{P}r^{0.36}$ in agreement with Derksen [52] for liquid-solid beds at $\mathcal{R}e = 10$ for $0.2 \leq \alpha_d \leq 0.3$ (with $\alpha_d = 1 - \alpha_c$). For the sake of completeness, a fluidized bed of $N_{part} = 500$ with a Prandtl number $\mathcal{P}r = 7.5$ was performed and results shows a good agreement with $N_{part} = 2000$ and $N_{part} = 3000$ cases. The error remains very small for all cases (see table TAB. 3.9).

2.3.1 Summary of the numerical set-up

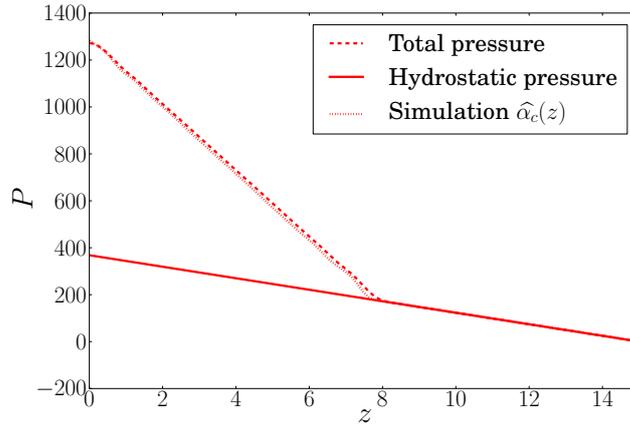
A detailed comparison of simulations carried out in bi-periodic systems with increasing number of particles up to 3000 has led to the conclusion that simulations with 500 particles do not flaw significantly the statistics. The variations remain below 2% for the global properties of the flow but may reach 7% for more local quantities. Especially, the particle and fluid phase agitation show a slight monotonous increase from 500 to 3000 particles. This may indicate a possible confinement for small beds but remains within the level of accuracy of all computed statistics (see TAB. 3.7). Moreover, heat transfer coefficients are only slightly dependent on the system size. Results are in agreement with the $\mathcal{P}r^{1/3}$ scaling from correlations and the numerical results of Derksen [52] for similar flow regimes. Therefore, the rest of the paper will be concerned with analyzing results based on numerical setup corresponding to 500 particles.

3 Results on hydrodynamics of fluidized beds

Based on the requirements for the numerical setup, we have simulated liquid–solid fluidized bed with 500 particles and $L_T = 8$ in order to minimize computing cost and carry out an extensive analysis of results. Four fluid flow regimes corresponding to an inlet velocity ranging from $2U_{c,mf}^*$ to $5.5U_{c,mf}^*$ have been investigated. It corresponds to various solid volumetric fraction in the bed (Reynolds and Stokes numbers respectively vary over the range $4 \leq \mathcal{R}e_{in} \leq 11$ and $2 \leq \mathcal{F}r \leq 6$).

TABLE 3.10 – Effect of the inlet velocity on the macroscopic properties of a liquid-solid fluidized bed.

Re_{in}	$\langle \Delta P_{tot} - \Delta P_{hy} \rangle_t / \langle H_{bed} \rangle_t$	$\langle \widehat{\alpha}_c \rangle_t$	$T_{c,out} - T_{c,in}$
4	116.36	0.467	0.982
6	45.74	0.523	0.950
9	17.03	0.597	0.895
11	10.12	0.637	0.859

FIGURE 3.6 – Comparison of the pressure profiles (total pressure profile from simulations (dash line), hydrostatic pressure in pure fluid (solid line) and theoretical estimate based on the solid volumetric concentration profile $\widehat{\alpha}_c(z)$) (thin line).

3.1 Fluid phase hydrodynamics

We first comment on the evolution of the bed height with fluidization velocity (see TAB. 3.10). Based on momentum balance, the pressure drop across the fluidized bed is equal to the bed weight (hydrostatic pressure variation and particle weight because the lateral boundary conditions are periodic, no friction). This agrees within less than 1% error. The height of the bed is determined when the pressure evolution (time averaged pressure profile is computed by equation 3.27) matches the hydrostatic evolution into the pure fluid (see FIG. 3.6). It is compared to the determination with 99% criterion used in the present simulation. Both agree very well as shown in FIG. 3.7. As defined in the previous section, ΔP_{tot} and ΔP_{hy} in table TAB. 3.10 respectively stand for the total pressure drop and the hydrodynamic pressure drop across the bed. In all cases, the heat ratio at the outlet of the system is over 85%.

When the inlet velocity is under the minimal fluidization velocity, the drag force experienced by particles is lower than their weight and the fluid simply percolates through the packed bed

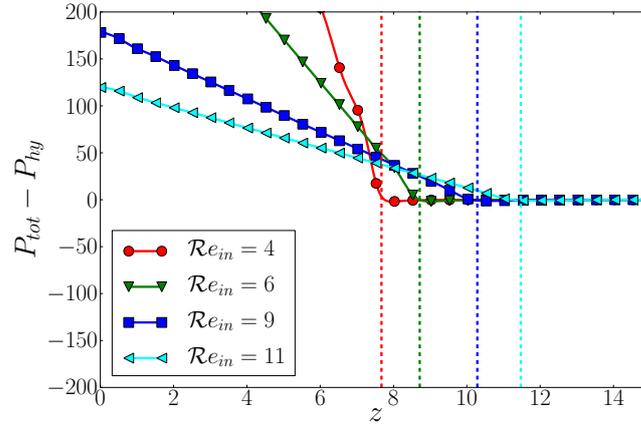


FIGURE 3.7 – Comparison of the bed height computed from pressure drop (lines) and 99% criteria (dashed lines).

(without lift up of the bed). At higher velocity than the minimal fluidization velocity, particles are fluidized leading to slight bed expansion and nearly isotropic particle agitation. Interparticle distance is close to packed bed conditions. As the flow rate increases, the porosity of the bed increases following well-known correlations [73, 191]. In their early works, Richardson and Zaki [191] characterized for liquid-solid fluidization of spherical particles the exponent of a power law relating the inlet velocity to the bed expansion (see 3.40). In this equation, the two parameters A and n are functions of the particle Reynolds number according to the terminal settling velocity for different regimes. Based on their experiments, Richardson and Zaki [191] obtained a good correlation between the value A and U_t , the terminal settling velocity of a single particle in an infinite fluid. Another expression valid for all flow regimes was later proposed by Rowe [196] or Khan and Richardson [124] using the data of Richardson and Zaki (see equation 3.41).

$$\mathcal{R}e_{in} = \mathcal{R}e_t(1 - \alpha_c)^n \quad (3.40)$$

$$n = 2.35 \frac{2 + 0.175\mathcal{R}e_t^{3/4}}{1 + 0.175\mathcal{R}e_t^{3/4}} \quad (3.41)$$

The terminal settling velocity can be predicted using momentum balance on a spherical particle with the drag law proposed by Schiller and Naumann [202]. Then, a linear regression was performed to get A and n values (see FIG. 3.8) from our simulation of fluidized beds. The regression coefficient of the fitting was $R^2 = 0.998$. The values of A we obtained only differ by 15% error from the theoretical estimate of the terminal settling velocity while a 9% error on the power value was obtained with Rowe equation 3.41.

Hydrodynamics in the bed is characterized by the volume average fluid velocity variance (a

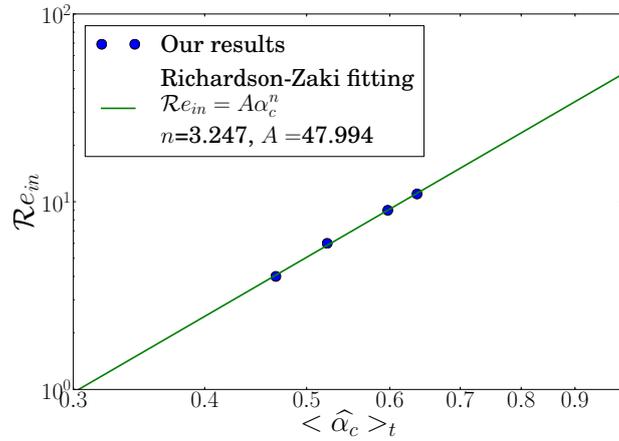


FIGURE 3.8 – Richardson and Zaki [191] fitting law on PRS data of fluidized beds.

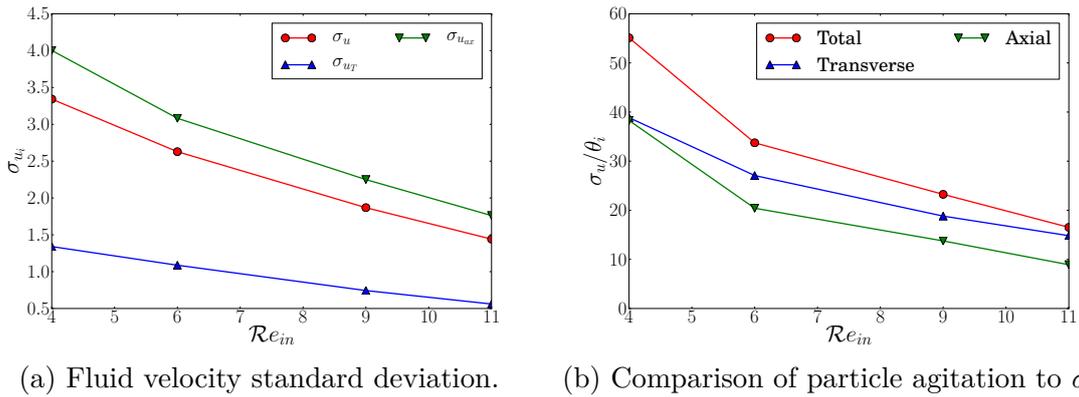


FIGURE 3.9 – Comparison of fluid and particle agitations.

distance corresponding to one particle diameter above the inlet and below the top of the bed was not considered into the statistics, see equation 3.34). This quantity can be compared to the velocity variance of particles.

In order to compare fluid and particle quantities, $2/3\sigma_u$ is used to be consistent with the definition of the fluid phase velocity variance and the particle velocity variance. It can be seen in FIG. 3.9 that the ratio between fluid phase variance of velocity and particle velocity variance decreases with inlet velocity ($\mathcal{R}e_{in}$). This ratio tends to infinity when the fluidization velocity approaches the minimum fluidization velocity (because particles are at rest for a fixed bed, below this critical velocity).

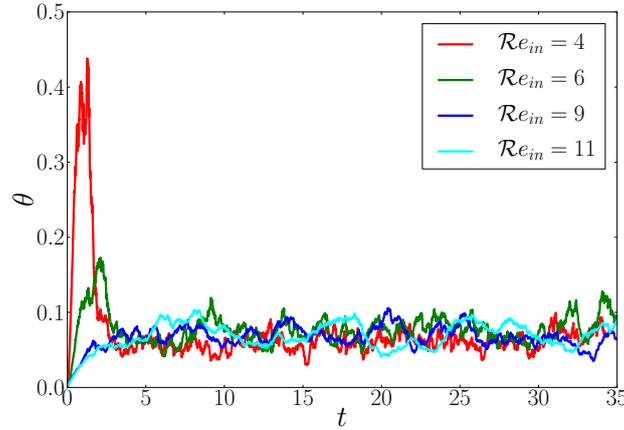


FIGURE 3.10 – Evolution of granular temperature with time for fluidized beds.

3.2 Analysis of the particle statistics

Characterizing the particle agitation in fluidized beds is a key issue in terms of industrial applications. The high level of mixing of the particulate phase is one the major advantages of fluidized beds. We comment on statistics of particle agitation (translation, rotation), collisions and overall dispersion for different regimes of fluidization.

3.2.1 Agitation and rotation

The temporal evolution of the particle velocity standard deviation 3.37 and 3.38 for all fluidizing velocities is shown in FIG. 3.10. As inlet velocity increases, the magnitude of particle fluctuation increases almost linearly yielding constant dimensionless agitation.

Anisotropy of agitation (ratio between axial and horizontal components) is plotted in FIG. 3.11. While the ratio is about 80% for low fluidization regimes, it reduces to 60% at high inlet velocities. This is in good agreement with the results of Corona [6] and Ozel *et al.* [167] although in their configurations the ratio remains nearly constant for all regimes equal to 0.6 for similar flow regimes.

A Reynolds number based on the square root of the velocity standard deviation can be defined as written equation 3.42 following the work of Tang [221]. The evolution of this quantity with respect to the difference of superficial Reynolds number to minimal fluidization Reynolds number is shown in FIG. 3.12.

$$Re_{\theta} = \frac{\rho_c^* \sqrt{\theta^*} d_p^*}{\mu_c^*} \quad (3.42)$$

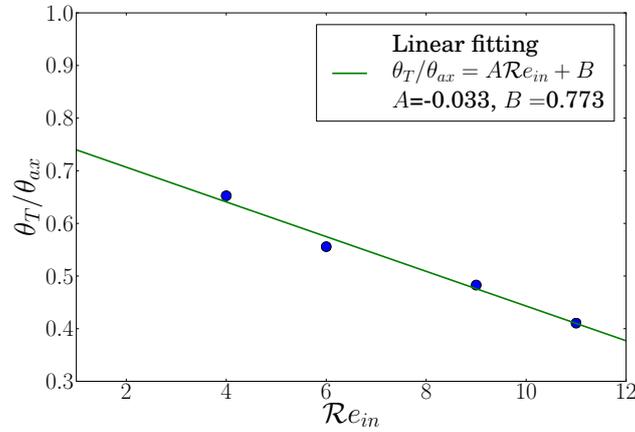
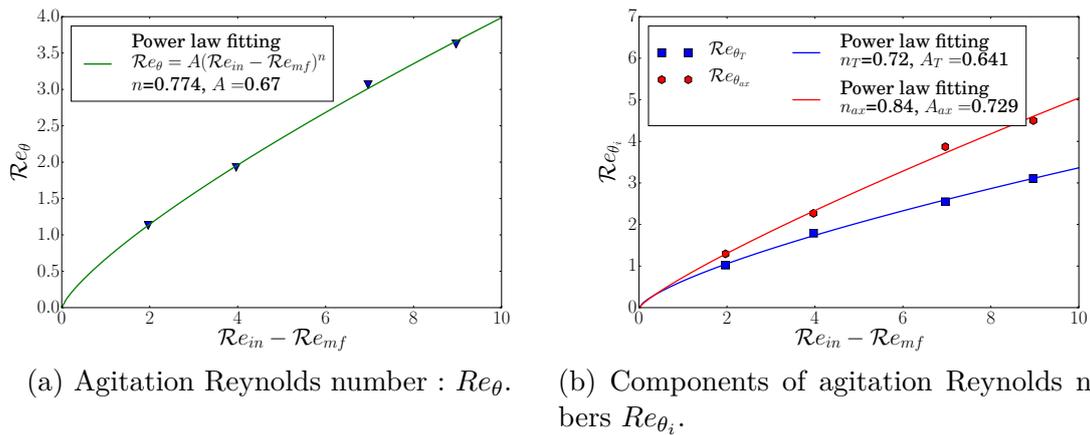


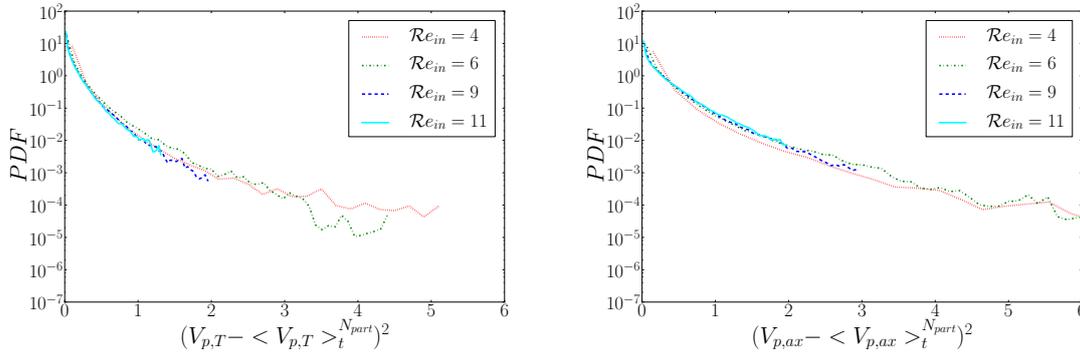
FIGURE 3.11 – Ratio of transverse to axial particle velocity variance.



(a) Agitation Reynolds number : Re_{θ} .

(b) Components of agitation Reynolds numbers Re_{θ_i} .

FIGURE 3.12 – Reynolds number based on particle agitation.



(a) PDF of transverse particle velocity variance. (b) PDF of axial particle velocity variance.

FIGURE 3.13 – Probability density function of transverse (left) and (axial) particle agitation.

Overall agitation or each component agitation can be correlated by a simple power law (see FIG. 3.12). The exponent of this empirical law is higher for the axial component than for transverse agitation. Properly modeling this agitation for mesoscale simulations is a challenging issue ([66]).

$$Re_{\theta} = \begin{cases} 0, & \text{if } Re_s < Re_{mf}. \\ A(Re_s - Re_{mf})^n, & \text{else.} \end{cases} \quad (3.43)$$

The probability density function of particle variance characterizes in details of particle agitation. It has been computed and averaged over time for the four regimes we investigated. The evolutions of the distribution for both transverse and axial components are shown in FIGS. 3.13a and 3.13b. The shape of pdf is very similar for the four inlet velocities highlighting that the similar dynamics of particles over the range on inlet velocity investigated.

It is interesting to compare the relative magnitude of rotation and translation fluctuations since in experiments it is a quantity which is difficult to access and many DEM-CFD simulations neglect this contribution of the particle motion. The ratio of the mean (absolute) particle surface velocity to the (absolute) translation velocity is compared in FIG. 3.14. Interestingly, the particle rotation in a homogeneous fluidized bed is far from being negligible. The particle surface velocity is actually higher than the translation velocity in all the reported cases. For low inlet velocity the particle surface velocity is twice larger than particle translation while it rapidly tends to unity for larger fluidization velocities. Since the fluid phase nearly percolates through the bed at low inlet velocities, the momentum is mainly transferred through shear and particles roll on one another. Neighboring particles also hinder the particle motion through collisions. This results in a larger surface to translation velocity ratio. For the highest inlet velocity (*i.e.* Stokes number) the particles are less subject to local shear and have more freedom to move. These combined effects tend to

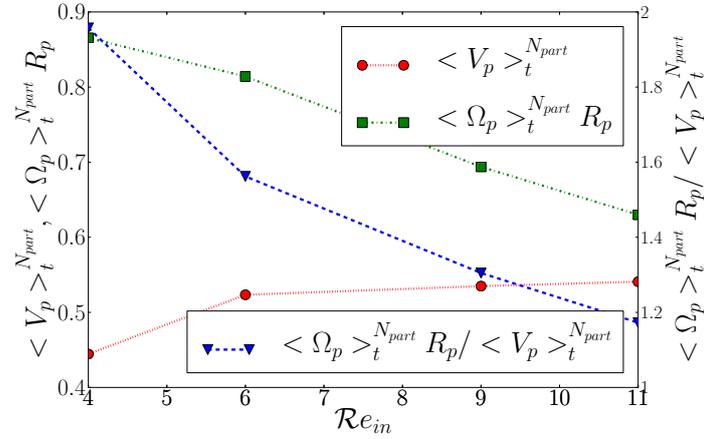


FIGURE 3.14 – Comparison of angular to translation velocity in fluidized beds.

decrease the velocity ratio.

3.2.2 Statistics of collision

For a simple collision in a dilute regime between two particles, the interaction time is defined as the time over which the contact DEM model is enabled. However, for very low fluidization velocities, the particles may roll on one another in a frictional manner. The interaction time is then defined as the time required for two particles to be separated by more than a cell size. The characteristics of particle interactions is analyzed in terms of contact angle distribution. When a pair of particles is colliding, the angle between the two velocity vectors (see FIG. 3.15a) is computed for each configuration. The data shown in FIG. 3.15b highlight that perpendicular pair collisions are dominant. For higher fluidization velocities, the contribution of lower collisions angle $\theta_{col} < \pi$ increases. For such regimes, axial agitation of particles is stronger in axial direction and more anisotropic yielding more frequent rear contacts (see FIG. 3.11). This effect is highlighted in FIG. 3.15a with the prediction of the collision angle distribution for an isotropic particle velocity distribution.

3.2.3 Dispersion of particles

Temporal autocorrelation functions of both axial and transverse velocity are computed for the four inlet velocities (3.44). These statistics aim at understanding the temporal response of particle experiencing fluid agitation and collisions for different fluidization regimes. The velocity autocorrelation functions are shown in FIG. 3.16. The short time behavior is very similar for all fluidization velocities. For short time lag, a decrease is observed for all the inlet velocities with a faster decrease for the highest inlet velocity. The behavior on the long term shows very

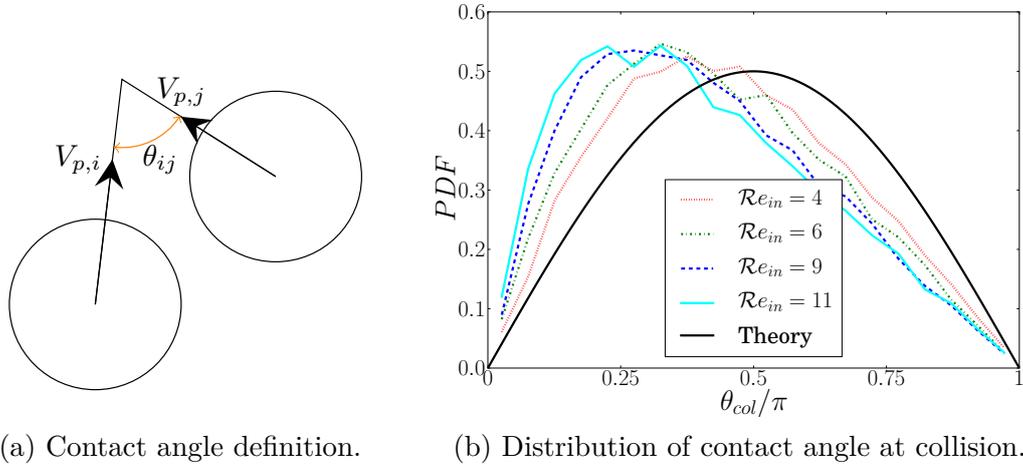


FIGURE 3.15 – Particles collisions in fluidized beds.

different shape with fluidization velocities. For $\mathcal{R}e_{in} = 4$, the autocorrelation function of axial velocity shows anticorrelated velocities and then oscillates around $R(\tau) = 0$. According to [166], a negative correlation and smooth decay are due to development of backflow. This oscillation of the autocorrelation function decreases at $\mathcal{R}e_{in} = 6$. At higher inlet velocities, it vanishes.

$$\phi_i(\tau) = \frac{\langle \phi'_i(t + \tau)\phi'_i(t) \rangle_t}{\langle \phi'_i(t)\phi'_i(t) \rangle_t} \quad (3.44)$$

A typical time scale is defined 3.45 as the integral of autocorrelation functions over the time τ_0 to obtain fully decorrelated data. The integral Lagrangian time is scaled by the convective time scale and it is correlated with agitation Reynolds number ($R^2 = 0.98$).

$$\mathcal{T}_{X,X} = \int_0^{\tau_0} R_{X,X}(\tau) d\tau, \text{ with } R_{X,X}(\tau_0) = 0 \quad (3.45)$$

Self-diffusion coefficients is an important data for modeling fluidized bed. The mean square displacement (see equation 3.46) is computed along the axial $M_{z,z}$ and transverse $M_{tr} = (M_{x,x} + M_{y,y})/2$ directions for the four fluidization regimes (see FIG. 3.17). Self-diffusion coefficient D_{tr} is obtained with the plateau value of M_{tr}/t . All data on D_{tr} are plotted in FIG. 3.17d as a function of the fluidization velocity and follows a linear evolution with the difference to the minimum fluidization regime.

$$M = \langle (\mathbf{x}_p(t) - \mathbf{x}_p(t_0))^2 \rangle \quad (3.46)$$

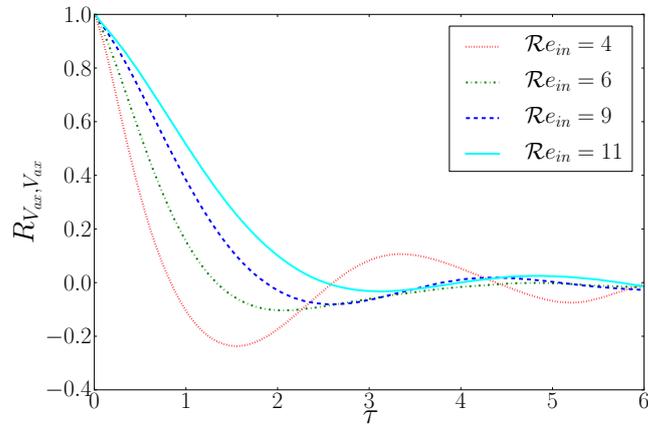
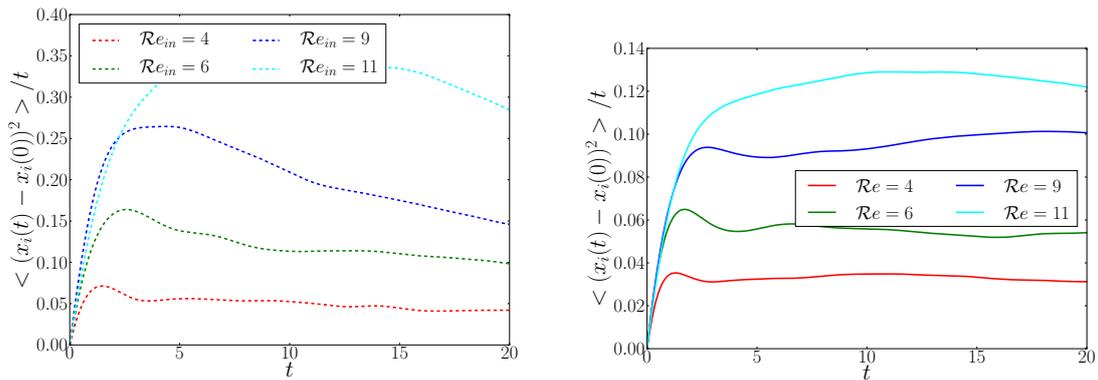
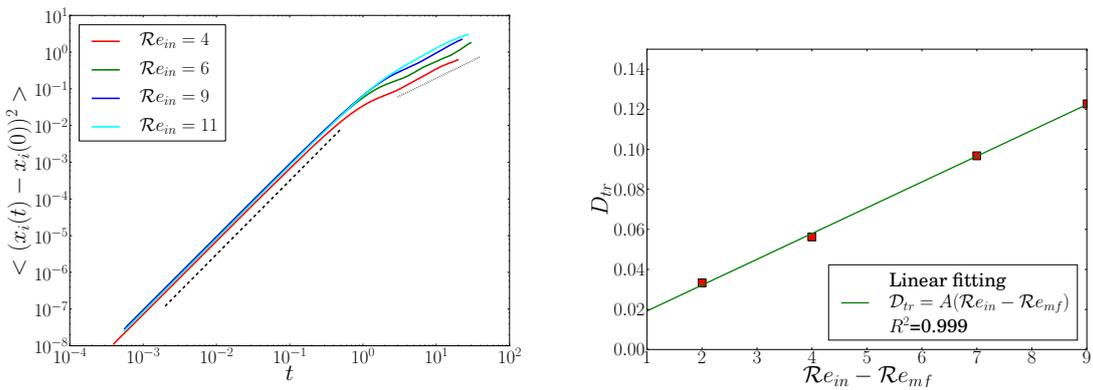


FIGURE 3.16 – Lagrangian autocorrelation functions of particle axial velocity.



(a) Mean square displacement of axial component. (b) Mean square displacement of transverse component.



(c) Mean square displacement. (d) Transverse diffusion coefficient.

FIGURE 3.17 – Mean square displacement into liquid–solid fluidized beds.

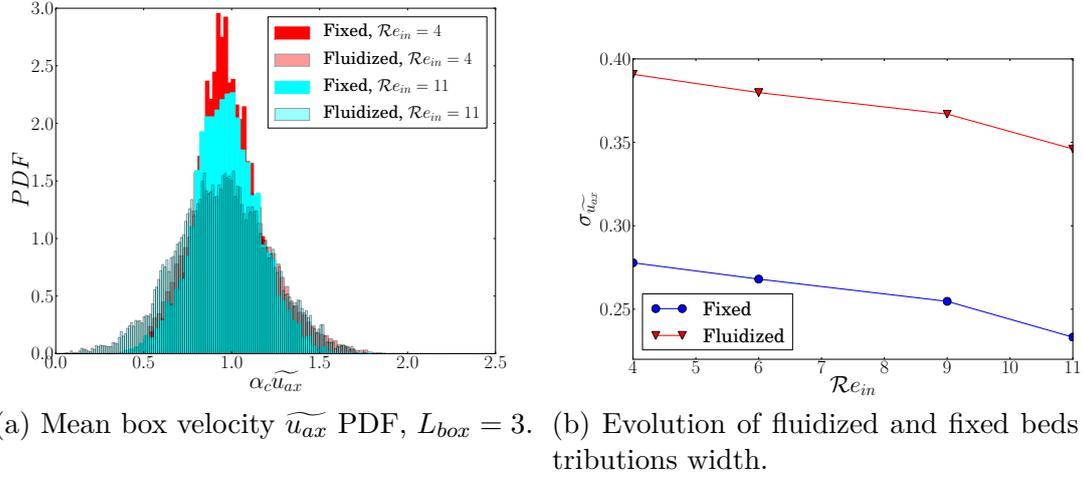


FIGURE 3.18 – Effect of particle motion on the fluid phase.

3.3 Effect of particle agitation on hydrodynamics

The motion of particles is never taken into account explicitly in the drag and heat transfer coefficients. Tang [221] already studied the effect of particle motion on the drag coefficient for high Reynolds numbers. In this section, we propose a direct comparison between statistics of fixed and fluidized beds. The study will focus on hydrodynamic mechanisms. In this part, a direct comparison of the fixed beds and fluidized beds is performed considering both Lagrangian and Eulerian beds statistics. As already showed in Tang [221], the motion of particles can be considered as a perturbation of classic drag laws derived for a fixed array of spheres.

Fluid phase volume average around particles are formed using 3.28 in both fixed and fluidized bed configurations. The distribution of fluctuating velocities is averaged over time later than $3\tau_{RTD}$. For the fixed beds, all the realizations are independent from each others and the distribution is shown in FIG. 3.18a. For the two inlet velocities we considered for fluidized beds, the distribution is wider than in fixed beds. This observation remains valid if other box sizes are used. It can be noted that the center of the distribution is close for the two configurations (fixed and mobile). Indeed, particle agitation in fluidized beds generates stronger velocity fluctuations in the fluid than the only effect of particle random locations of a fixed bed. However, the values of $\sigma_{\widetilde{u_{ax}}}$ are found to decrease with the flow regime, due to homogenization in both configurations. Moreover, the value $\Delta\sigma_{\widetilde{u_{ax}}} = \sigma_{\widetilde{u_{ax,fluidized}}} - \sigma_{\widetilde{u_{ax,fixed}}}$ remains constant with Re_{in} (see FIG. 3.18b).

For each configuration of fluidized beds, a set of 5 independent snapshots of particle positions (generating a fixed bed) is extracted. The total hydrodynamic force exerted on each particles is computed and compared to fluidized beds statistics. The dimensionless drag coefficient is computed by scaling the force by the Stokes drag $3\pi\mu_c^*(V_p^* - u_c^*)d_p^*$. The mean fluid velocity is computed using the plane average procedure (see 3.27) and averaging along the vertical direction. The com-

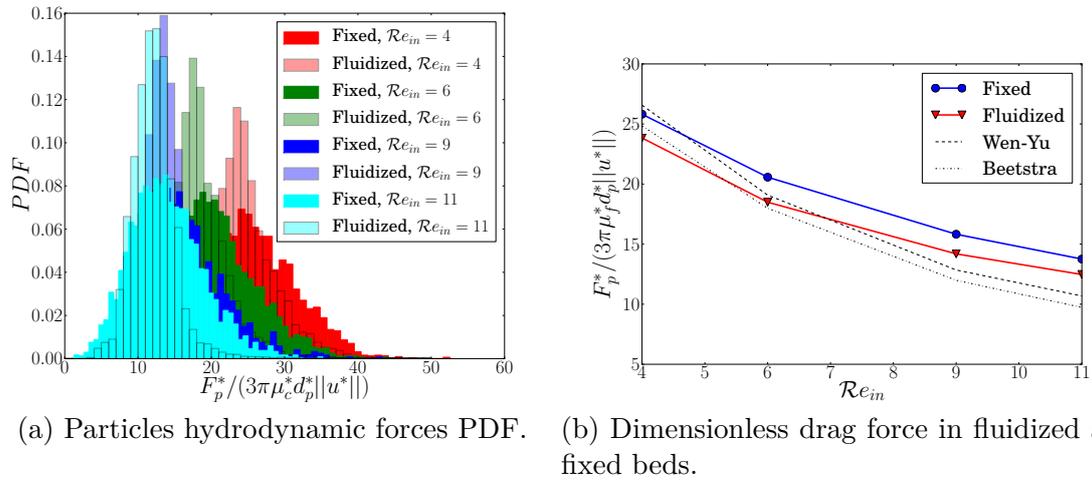


FIGURE 3.19 – Effect of particle motion on the Lagrangian statistics.

parison of the probability density functions of the axial component of the drag force is shown in FIG. 3.19a for $\mathcal{R}e_{in} = 4$ and $\mathcal{R}e_{in} = 11$. It can be observed that both the mean value and the shape of the distribution vary from a fixed to a fluidized configuration. The same observation on the PDF shape can be made when looking at the transverse component of the hydrodynamic force. Due to the particle motion in fluidized beds, the distribution of hydrodynamic force experienced by the dispersed phase is more homogeneous.

A comparison of the evolution of the dimensionless drag force with classic drag laws is presented in FIG. 3.19b. The trend is very similar to the predictions based on correlations. However, the discrepancy is increasing with the inlet velocity. Contrarily to the observations of Tang [221] for gas-solid flows at high Reynolds numbers, for low Reynolds numbers, the hydrodynamic force on a fluidized particle is lower than in a fixed bed. In a recent study, Rubinstein *et al.* [198] show a decrease of the mean drag force for liquid–solid fluidization for decreasing Stokes number. The fixed bed configuration corresponds to an infinite Stokes number and the previous observations on the drag force from the present simulations agree with their conclusions.

4 Heat transfer in fluidized beds

Heat transfer in fluidized and fixed beds can be drastically different because the agitation (of particles henceforth of the fluid) can promote or reduce local inhomogeneities of the temperature field around particles. When considering particulate flows, the effect of particle motion on the mechanisms of heat and momentum transfer is still an open question. Most of the closure laws used in the literature are obtained from fixed beds analysis assuming that dynamic simulations may be considered as a quasi-static succession of fixed beds.

TABLE 3.11 – Effect of inlet velocity on mean Nusselt number in a liquid-solid fluidized bed.

Re_{in}	$\langle \widehat{\alpha}_c \rangle_t$	\overline{Nu}	$\overline{Nu}_{1D+disp}$	\overline{Nu}_{Gunn}	\overline{Nu}_{Deen}	\overline{Nu}_{Sun}
4	0.467	6.746	8.675	12.95	7.97	9.48
6	0.523	7.624	9.012	12.86	8.04	11.77
9	0.597	8.633	9.498	12.65	8.06	14.89
11	0.637	9.277	9.925	12.5	8.06	16.72

4.1 Overall heat transfer through the bed

A constant Prandtl number $Pr = 10$ is fixed throughout the rest of the paper. Recent investigation from Derksen [52] have shown the transition from fixed to fluidized beds through PRS simulations.

A reduction of the mean Nusselt number is observed for fluidized beds compared to fixed beds and particle collision was found to be responsible of this decrease. As the fluid flows through a fixed bed, fluid flow dispersion occurs. This dispersion can be characterized by a dispersion coefficient (axial Péclet number Pe_{ax} into the (1-D) heat balance. Amongst the literature available, Kruggel *et al.* [132] used the closure law provided by Wakao and Kaguei [250] for fixed beds LBM simulations with heat transfer.

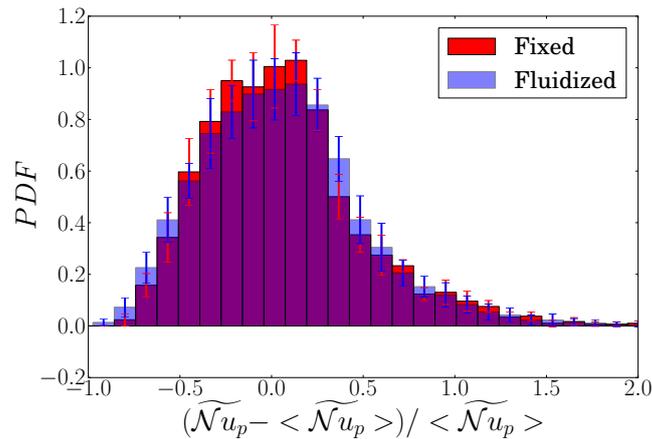
A comparison of our results with correlations on fixed beds of the literature shows a deviation up to 20% (see table TAB. 3.11). In the range of bed porosity we investigated, the correlation of Gunn [92] predicts a slow decrease of the mean Nusselt number with the inlet velocity. On the contrary, the correlations of Sun *et al.* [214] and Deen *et al.* [46] have a better agreement with the evolution of the Nusselt number from our simulations. The present data follows a $\overline{Nu} \propto Re_{in}^{0.31}$ trend. A good agreement is observed with the correlation of Deen *et al.* [46]. For those low Reynolds numbers, the conclusion is similar than for gas–solid fixed random bed [68]. Introducing axial dispersion in the 1D heat balance improves the estimate of mean Nusselt number for low fluidization regimes but has a very limited effect for higher inlet velocities. Agitation is indeed very weak for $Re_{in} = 4$ and the assumption of quasi–static bed seems valid. However, for higher Reynolds numbers, this approximation becomes progressively wrong and deviation of the Nusselt number from estimates increases.

4.2 Effect of particle agitation on heat transfer

The comparison between fixed and fluidized beds is now realised on heat transfer. The overall heat transfer coefficient based on (1-D) balance is computed into the fixed beds (from snapshots of a fluidized bed) and compared to the mean Nusselt number from the fluidized beds (see TAB. 3.12). In the present simulations, the fixed beds have a higher mean Nusselt number than for equivalent fluidized configuration. Despite the bed agitation, the configuration with fixed particles seems to exchange more. The reduction of the Nusselt number for fluidized bed is around 6.6% for $Re_{in} = 4$ and decreases down to 3.8% for the highest velocity tested. These differences agree

TABLE 3.12 – Comparison of Nusselt number between fixed and fluidized beds.

Re_{in}	$\frac{Nu_{Fixed} - Nu_{Fluidized}}{Nu_{Fluidized}}$ [%]
4	6.6
6	4.8
9	5.4
11	3.9

FIGURE 3.20 – Comparison of the Nusselt number distribution into fixed and fluidized beds, $Re_{in} = 6$.

with simulations of Derksen [52] for $1 \leq Re \leq 10$, porosity $0.2 \leq 1 - \alpha_c \leq 0.3$ and density ratio $\rho_p^*/\rho_c^* = 10$. The particle collision was proposed as a possible mechanism responsible of the decrease of the mean Nusselt number.

As proposed for the hydrodynamics, a comparison of the Nusselt number distribution into the fixed beds and fluidized beds is shown in FIG. 3.20. Following the previous conclusions from the (1-D) balance, the distribution are very similar between fixed and fluidized beds at low liquid-solid flow regimes.

The time needed for a particle to reach 90% of its final heat flux is extracted in fixed beds ($\tau_{th,0.1}$ is 10% difference from the final value). Particles have a constant temperature and the fluid temperature is set at $T_c = T_{c,0}$ at the initial time in the whole domain. This time then corresponds to the time needed for a particle to be thermally adapted to its environment. Due to their relative positions into the bed, particles located at the top of the bed need a longer time to reach the steady state than particles located at the bottom of the bed. On the other hand, the adaptation time $\tau_{th,0.1}$ of the particles linearly align with the particle height into the bed with a slope corresponding to 2/3 of the convective time (based on the superficial velocity) in all cases (see FIG. 3.21). These conclusions remain valid if a 5% criteria is considered (the slope

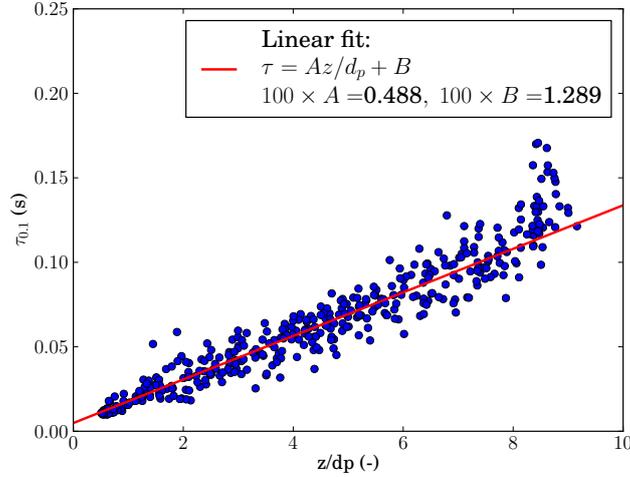


FIGURE 3.21 – Thermal characteristic time scale for a particle to reach 10% of its final heat flux in fixed beds, $\mathcal{R}e_{in} = 6$.

corresponds then to $3/4$ of the convective time scale). Similar analysis has been carried out for $\mathcal{R}e_{in} = 9$ in a statistically steady fluidized bed by changing the fluid conductivity at a specific time. The whole bed heat flux reached $\tau_{th,0.1}$ for a time corresponding to 15% of the fluid residence time. The whole bed heat flux adaptation corresponds to 1.58 times the fluid convective time scale around a single particle of the bed. Therefore, a particle is adapting its heat flux to a new environment more quickly than the renewal of fresh fluid around it. Into the fluidized beds, the particle properties are kept constant so that this time adaptation remains the same. Two other time scales corresponding to the time needed for a particle to move from a region to another of the bed and the lag time needed for a particle to experience a modification of its environment (*i.e.* local porosity renewal) are estimated in fluidized beds. The former is computed as the time needed for a particle to axially move from $1d_p^*$ and the latter corresponds to the minimal uncorrelated lag time of the local porosity autocorrelation function. $L_{box} = 2$ has been used. This corresponds to the smallest box size yielding correct mean bed porosity (if a larger box is used then autocorrelation functions decrease quicker while the time from decorrelation is always greater than the convective time scale, see FIG. 3.22). We can conclude that particle heat flux has a shorter response time to adapt to its environment than the modification of the local microstructure (local bed porosity).

4.2.1 Local statistics on heat transfer

The spatial distribution of Nusselt numbers along vertical direction is computed at each time step. A $1d_p^*$ distance from the top and bottom of the bed was not considered to reduce entrance and exit effects. Probability density functions are then computed and plotted for four different slices along the vertical flow direction. The PDF in each layer fits a log-normal law (see FIG. 3.23) with

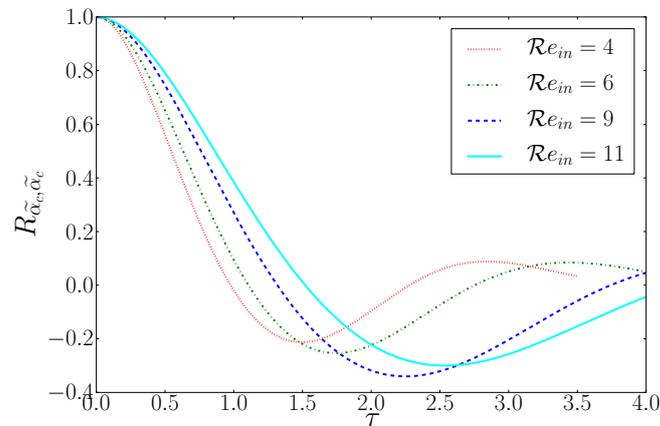


FIGURE 3.22 – Temporal local porosity autocorrelation function for different fluidization velocities : Limiting case of $L_{box} = 2d_p$.

parameters $\mu_{\mathcal{N}u_p}(z)$ and $\sigma_{\mathcal{N}u_p}(z)$. This was done for all the inlet velocities we tested. The Nusselt number distribution at the bottom of the bed is also well described by a gaussian distribution. A comparison of these statistical parameters shows an increase of $\mu_{\mathcal{N}u_p}(z)$ at a fixed height with $\mathcal{R}e_{in}$. Along with this increase, a decrease in $\sigma_{\mathcal{N}u_p}(z)$ is observed. Despite the porosity increase of the bed, particle agitation due to inlet velocity tends to homogenize the Nusselt number at a fixed height. Moreover, the definition of the Nusselt number based on the local temperature $\tilde{\mathcal{N}}u_p$ seems to reduce the width of log-normal distribution.

The Nusselt number can be defined with two fluid temperature references : i) the surface average temperature profile is extrapolated at each particle center : $\overline{\mathcal{N}}u_p$, ii) the local temperature is computed as an average around each particle in a surrounding box : $\tilde{\mathcal{N}}u_p$. Probability density functions of the Nusselt number are shown in FIG. 3.24a and FIG. 3.24b (statistics started at $t = 3\tau_{RTD}$).

It can be seen that $\tilde{\mathcal{N}}u_p$ provides slightly higher values than its counterpart based on the bulk temperature. Moreover, the PDF of Nusselt numbers narrows with the inlet velocity. The particle motion and agitation into the bed is a good candidate to explain this observation. The evolution of the scaled Nusselt number distribution width shown in table TAB. 3.13. The values of $\sigma_{\tilde{\mathcal{N}}u_p} / \langle \tilde{\mathcal{N}}u_p \rangle_t^{N_{part}}$ are found to remain constant (maximum deviation up to 7%) when the control volume is doubled and keeps the same trend with the flow regime. Interestingly, the standard deviation of the Nusselt number is of the same order of magnitude for the two given definitions. According to the present data, a linear fit with the agitation Reynolds number $\mathcal{R}e_{\theta}$ is found over the range of flow regimes investigated.

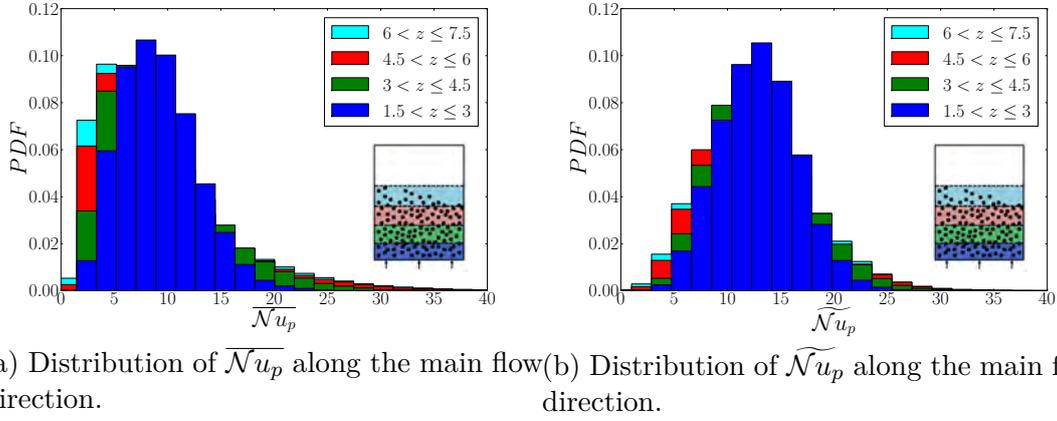


FIGURE 3.23 – Distribution of the local Nusselt number through the bed at different heights.

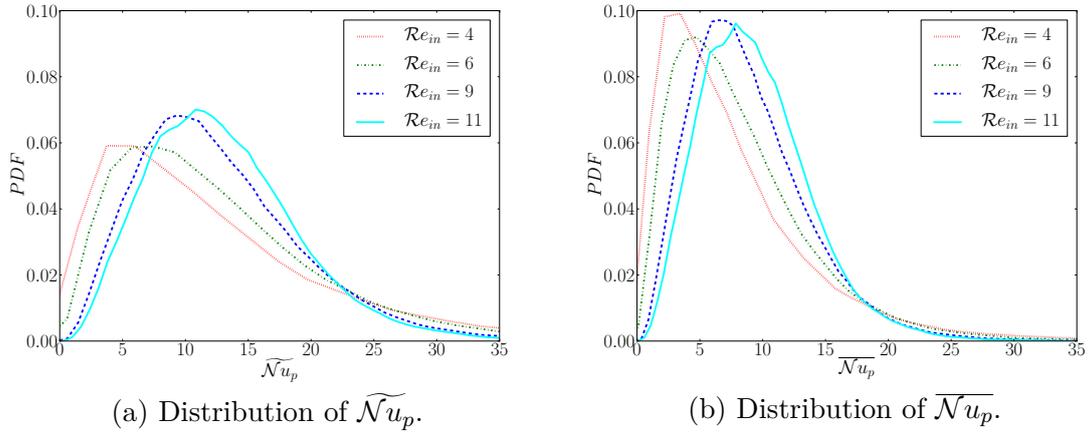


FIGURE 3.24 – Evolution of Nusselt number distribution with fluidization regimes.

TABLE 3.13 – Standard deviation of the Nusselt number distributions ($L_{box} = 2.5$).

$\mathcal{R}e_{in}$	$\sigma_{\overline{\mathcal{N}u_p}} / \langle \overline{\mathcal{N}u_p} \rangle_t^{N_{part}}$	$\sigma_{\widetilde{\mathcal{N}u_p}} / \langle \widetilde{\mathcal{N}u_p} \rangle_t^{N_{part}}$
4	0.89	0.85
6	0.81	0.79
9	0.59	0.57
11	0.53	0.49

TABLE 3.14 – Effect of inlet velocity on Nusselt number integral times.

Re_{in}	$\overline{\mathcal{T}_{\overline{\mathcal{N}u_p}}}/\overline{\mathcal{T}_{V_p}}$	$\overline{\mathcal{T}_{\widetilde{\mathcal{N}u_p}}}/\overline{\mathcal{T}_{V_p}}$
4	1.23	1.19
6	1.19	1.02
9	1.09	0.96
11	1.15	0.84

4.2.2 Dynamics of the heat transfer

Heat transfer between the fluid and the particles is highly dependent on the hydrodynamics of the bed and the transport of temperature by diffusion and convection. At the contrary to fixed beds where the local steady microstructure of the suspension controls the temperature field and heat fluxes, heat transfer in a fluidized bed has its own intrinsic temporal dynamics. As we did for fixed beds, the Nusselt number of each particle of the suspension is computed (see equations 3.30 and 3.31) using the bulk temperature or the surrounding fluid temperature as a reference. The temporal autocorrelation of the Nusselt number along particles trajectories is plotted in FIGS. 3.25a and 3.25b for the four fluidization velocities using the two definitions : $\overline{\mathcal{N}u_p}$ and $\widetilde{\mathcal{N}u_p}$. The temporal autocorrelation of the normalized heatflux $\mathcal{N}u_p$ is also shown in FIG. 3.25c for comparison. The shape of the autocorrelation functions shows a smooth evolution from low to high inlet velocities. For all configurations, the dimensionless integral time increases with inlet velocity (or bed porosity). For the bulk temperature based Nusselt number $\overline{\mathcal{N}u_p}$, the autocorrelation function reaches zero at a time which is ranging from 1 to 2.5 when increasing inlet velocity and then oscillates around zero. The level of negative correlation for $\overline{\mathcal{N}u_p}$ and $\mathcal{N}u_p$ seems to decrease with the flow regime Re_{in} while its time period increases. The evolution of these two quantities is found to evolve in a similar way.

The Nusselt number $\widetilde{\mathcal{N}u_p}$ based on local average temperature smoothly decreases to zero over a time lag equal to 1 to 2 for all inlet velocities. The integral time scale is slightly shorter than for the bulk temperature Nusselt number. A comparison of the integral thermal times scaled by integral time of particle velocity fluctuations is reported in table TAB. 3.14. This allows to directly compare the flow and thermal particle responses. It can be observed that the integral time ratios is nearly constant for the bulk Nusselt number around 1.15 while it decreases linearly for $\widetilde{\mathcal{N}u_p}$ from 1.19 to 0.84. This shows that the temporal response of heat transfer may have its own dynamics when compared to hydrodynamics.

Indeed, for low inlet velocities, the integral time is small due to hindering effect of surrounding particles and collisions. Thus, the autocorrelation function of the particle velocity decreases rapidly due to collisions and frequent hydrodynamic interactions with surrounding particles. During this time, the surrounding temperature environment does not change much. As a consequence, the integral time of the Nusselt number is larger than the particle velocity dynamics. For larger inlet velocities, the velocity autocorrelation time decreases more slowly due to higher porosity of the bed (the dimensionless collision frequency decreases) while temperature field evolves more dynamically.

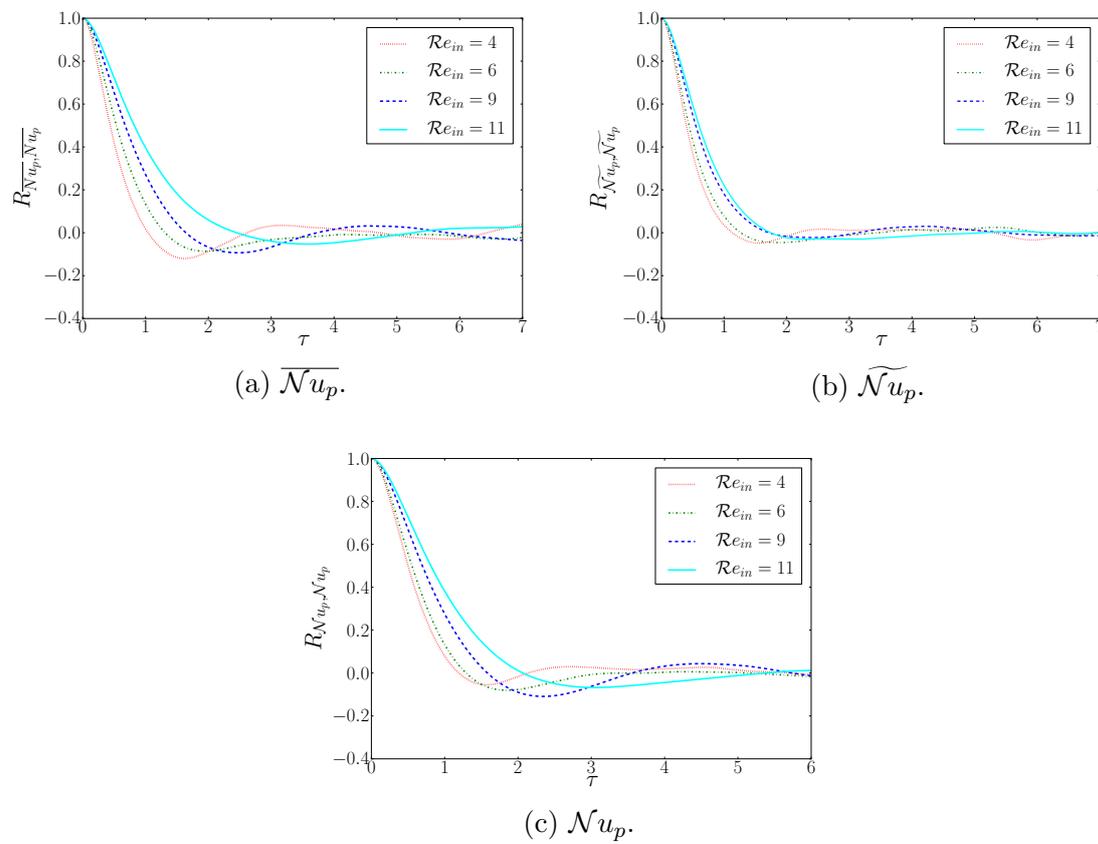


FIGURE 3.25 – Autocorrelation functions of the Nusselt numbers.

For this regime, the thermal environment changes strongly and the Nusselt number correlation time is lower than the particle velocity correlation time.

The Nusselt number is a dimensionless measure of heat flux enhancement by convection. It is the ratio of heat flux Q_{cp}^* by the temperature gradient between the fluid and the particle surface on a typical particle scale (both are varying in time in a fluidized bed). Temperature difference can be calculated with the bulk estimate. The fluctuations of heat flux or temperature used for the autocorrelation function should be taken at the particle height (see equation 3.47).

$$\phi_i(\tau) = \frac{\langle \phi'_i(t + \tau, z_i) \phi'_i(t, z_i) \rangle_t}{\langle \phi'_{i,z_i}(t) \phi'_i(t, z_i) \rangle_t} \quad (3.47)$$

Autocorrelation functions are shown in FIGS. 3.26a to 3.26c. For low inlet velocity regime (*i.e.* $Re_{in} = 4$) a thermal equilibrium between the particle and its surrounding is achieved resulting in a very close shape of the autocorrelation functions of heatflux and the surrounding box temperature \tilde{T}_c . On the contrary, for $Re_{in} = 11$, the evolution of the heatflux at short time decreases more quickly and becomes closer to the interpolated bulk temperature \bar{T}_c . According to the present simulations, the integral time follows a linearly scaling with the box length and the slope increases with the inlet velocity (see FIG. 3.26d).

Estimating the correlation between the local fluid temperature and the particle heat flux gives insight on the thermal behavior of the bed : is the particle heat flux linked to high local fluid temperature gradient and how these two quantities evolve? What is the adaptation time scale for the fluid and the particles to a new environment? Based on the two Nusselt number definitions, the cross-correlation between the heat flux and the temperature difference is computed. The cross-correlation $R_{\mathcal{N}u_p, \bar{T}_c}$ shows a weak correlation even at early times and rapidly decreases and oscillates around zero at time $\tau \approx 1$ (see FIG. 3.27a). The poor correlation between the two quantities is due to the non-local definition of the bulk temperature. However, the cross-correlation $R_{\mathcal{N}u_p, \tilde{T}_c}$ between the local fluid volume average temperature and particle heat flux shows a strong correlation at early times (see FIG. 3.27b). This actually shows the strong relation between the particle heat flux and the local temperature gradient from the particle surface to the surrounding fluid. The correlations decreases similarly than previously observed and become uncorrelated for a time ranging from $1 \leq \tau \leq 2$. It is worth noting that the stronger correlation between the two quantities does not occur at $\tau = 0$ but slightly later.

The cross-correlations $R_{\mathcal{N}u_p, \tilde{T}_c}$ and $R_{\tilde{T}_c, \mathcal{N}u_p}$ are plotted in figure FIG. 3.27c and show a lag time between the two signals. This lag time can be attributed to the high correlation of the local averaged temperature between to time steps due to the small displacement of the particle (the cells involved for the volume average are nearly the same). As mentioned above, the correlation level and adaptation time scale for the fluid is highly dependent on the box width (see Figure FIG. 3.27c). For a box width $L_{box} = 5$ the correlation at early times is similar to $R_{\mathcal{N}u_p, \bar{T}_c}$. An estimate of the adaptation time scale from cross-correlation can be defined as the time necessary to reach the maximum correlation between the heat flux and the surrounding fluid temperature.

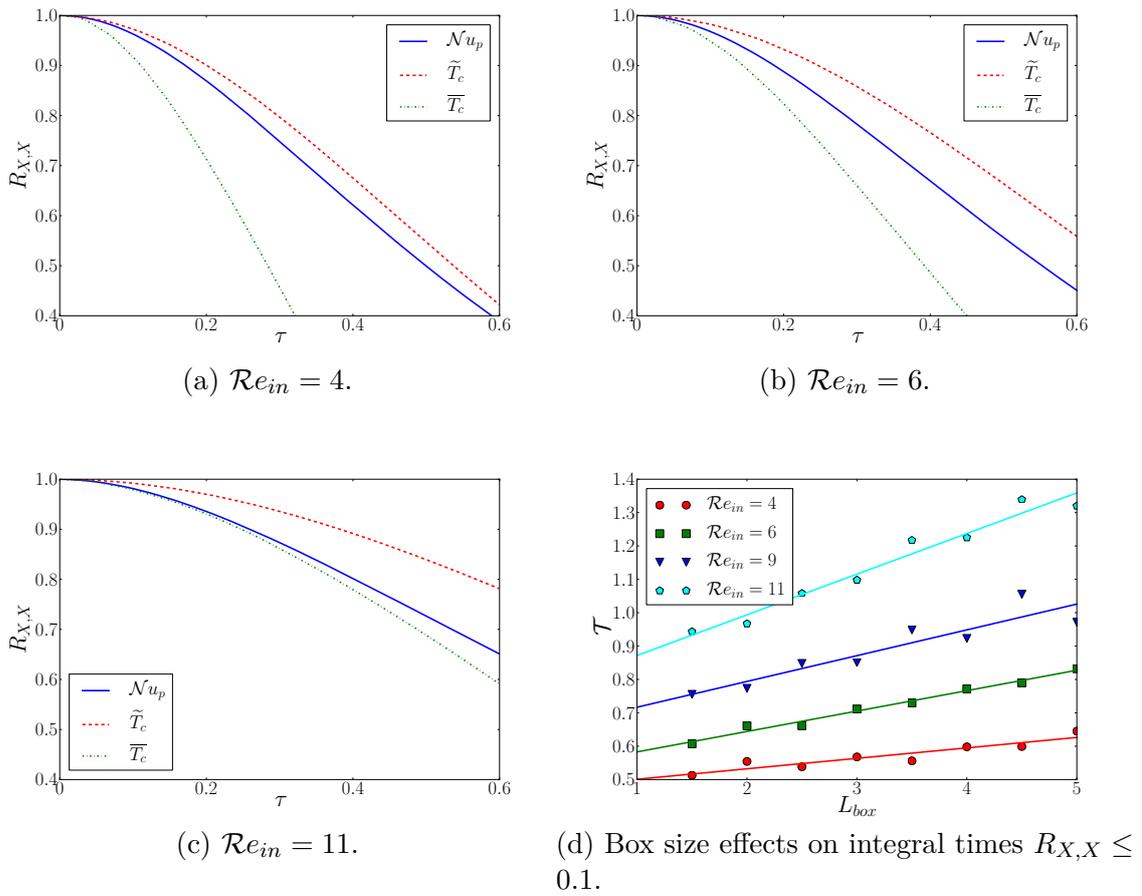


FIGURE 3.26 – Flow and cell size effect of autocorrelation functions.

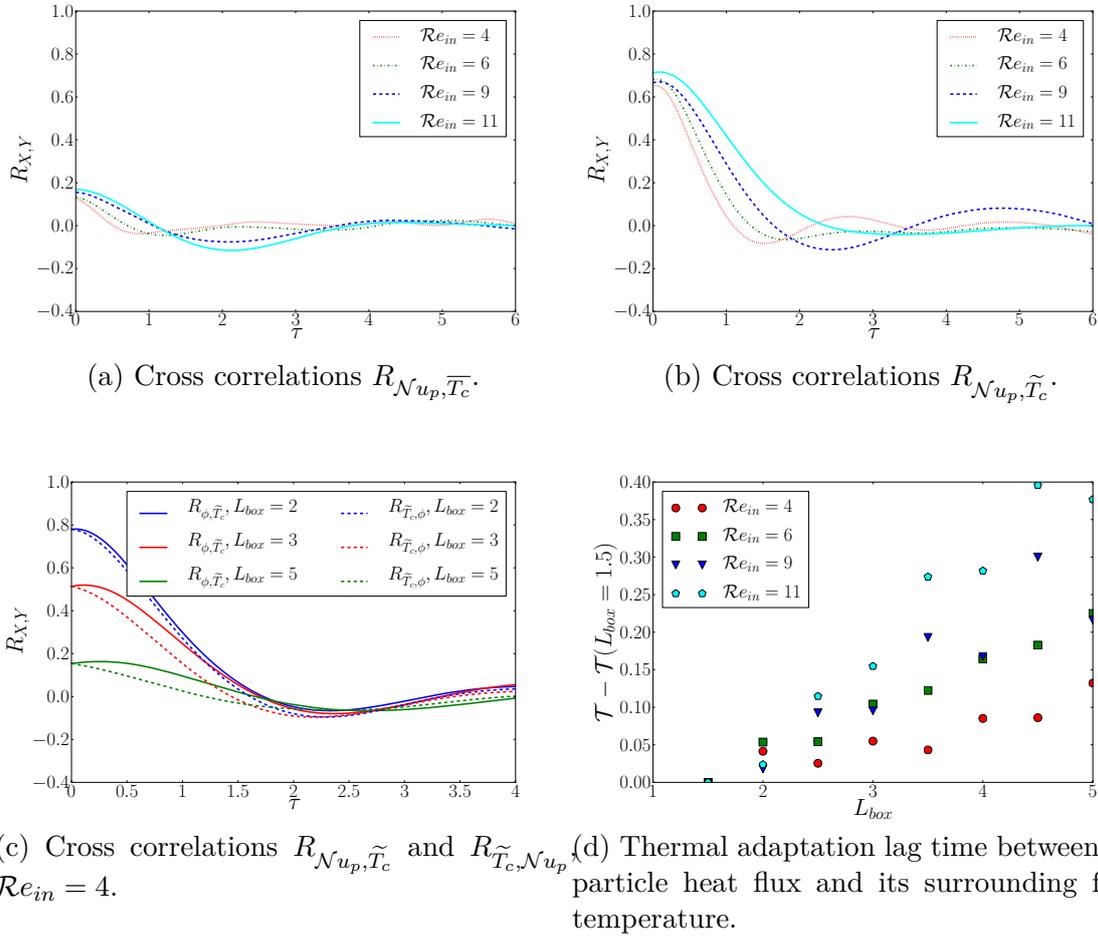


FIGURE 3.27 – Cross-correlation and adaptation lag time between particle and surrounding fluid.

Those quantities have been extracted for all the regimes and plotted in figure FIG. 3.27d.

A spatial correlation of the Nusselt number based on the bulk temperature is shown in FIG. 3.28a. The correlation rapidly decreases and data become uncorrelated for all cases at a distance $d_{ij} = 3$. The spatial correlation however seems to decrease faster for $Re_{in} = 11$ than the other cases. The correlation distance is in good agreement with the observations for the axial particle velocity FIG. 3.28c. The distance for decorrelation of the local average temperature based Nusselt number is shorter ($d_{ij} \geq 1.5$) in FIG. 3.28b. This behavior is actually similar to the hydrodynamic force spatial correlation FIG. 3.28d.

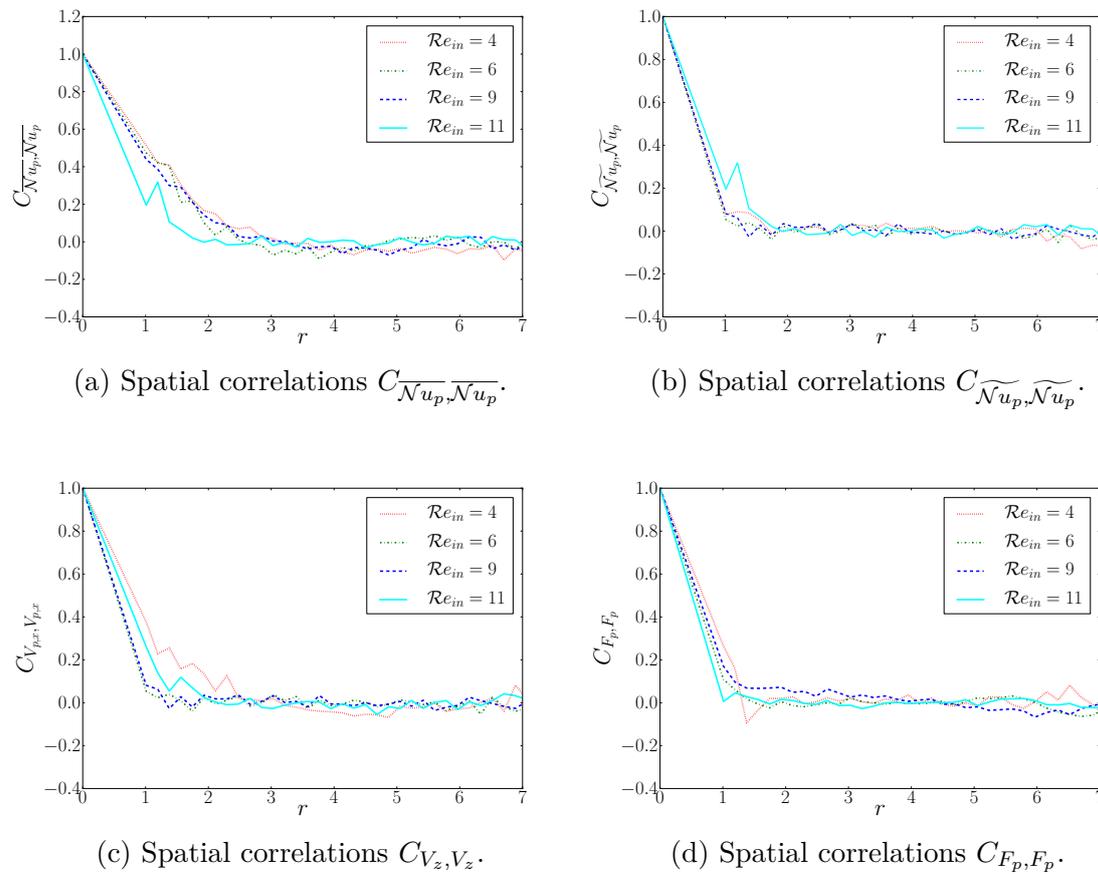


FIGURE 3.28 – Spatial correlation of particulate properties.

5 Conclusion

In the present chapter, we have carried out a study of heat transfer in fluidized beds in order to estimate the specific role of particle agitation compared to reference correlations for fixed beds.

Our numerical parameters were based on previous grid convergence analysis for flow and heat transfer around isolated particles or dense fixed beds [68, 245]. Three regimes at high Péclet and Reynolds numbers were tested and a grid resolution of $N_p = 32$ gives accurate results in accordance with the conclusion of Esteghamatian [66]. Thermal effects are more demanding in terms of spatial resolution for high Péclet numbers. However, the bed expansion yielded by fluidization and subsequent weaker temperature gradient on the large scale of the bed for high inlet velocities make simulations easier. The global Nusselt number is evaluated from the bed mean temperature profile. Based on a detailed analysis of statistics for four liquid-solid fluidized beds composed of 500 to 3000 particles in bi-periodic systems allowed us to select the numerical setup (500 particles) to simulate a range of fluidization velocities. Despite some discrepancies (up to 7%) on particle statistics, all the other physical quantities are well captured with only 500 particles in the fluidized bed.

This configuration is then used to run a set of four fluidization regimes ranging from $Re_{in} = 4$ to $Re_{in} = 11$. Overall flow characteristics such as bed height, pressure drop and the relation between bed porosity and inlet velocity agree with references of the literature or classic empirical laws. The evolution of the agitation Reynolds number based on the velocity standard deviation also agrees with the results of Tang [221] for high Reynolds numbers. Particle agitation was found to slightly decrease the drag coefficient distribution width into the bed when compared to a fixed configuration. Although particle agitation homogenizes the distribution of hydrodynamic forces acting on particles, the distribution of the fluid fluctuations is more narrow. As a consequence, the distributions of axial and transverse velocities in the particle vicinity were found to linearly increase with the particle agitation Reynolds number in the range of configurations we tested. The particles rotational and translational velocities were compared. Particle rotation is dominating more particularly at low Reynolds numbers. The particles actually roll on one another due to local hindering effect of surrounding particles. For more dilute regimes (*i.e.* higher inlet velocity), the larger inter-particle distance reduces the ratio of rotation to translation.

The average heat transfer coefficient of the fluidized beds estimated from classic (1-D) balance shows a good agreement with the correlation of Deen [45]. Moreover, the fixed beds corresponding to snapshots of fluidized regimes have shown to be more efficient in heat transfer by 3% to 6% when compared to the fluidized beds. Similarly to the drag coefficient, Nusselt number distribution is more narrow with particle agitation. No particular difference on the Nusselt number distribution were found with fixed beds configurations. The dynamics of many thermal parameters was also studied. Especially, the Nusselt number definition based on local fluid temperature average or bulk temperature interpolated at the particle height were compared. This helps to understand the specific temporal dynamics of the heat transfer in fluidized beds.

Appendices

3.A Auto-perturbation des quantités volumiques locales

Cette partie vient compléter l'analyse réalisée sur l'impact du noyau de pondération dans les lits fixes de particules du *Chapitre 2*. Une attention particulière est ici dédiée à l'estimation de la perturbation des grandeurs locales (vitesse, température) par la présence des particules lors des moyennes volumiques. Une estimation de cette perturbation pour une particule isolée est réalisée pour la température (voir *Chapitre 2*) et prend alors la forme d'une exponentielle décroissante sur l'estimation de la température.

Plus généralement, la modélisation de la force de traînée dans les écoulements fluide-particules nécessite la définition d'une vitesse relative entre le fluide et les particules $\mathbf{U}_r = \mathbf{V}_p - \mathbf{U}_c$. Ici \mathbf{V}_p représente la vitesse de la particule et \mathbf{U}_c la vitesse du fluide selon la définition du modèle à deux fluides (TFM) (voir équation 3.48). De fait, \mathbf{U}_r correspond à la vitesse moyenne du fluide dans un élément représentatif du système fluide-particules. La définition du coefficient de traînée C_d peut alors prendre différentes formes. Hill *et al.* [99, 100] par exemple, qui utilisent une méthode Lattice-Boltzman pour simuler les écoulements dans des configurations fixes de particules, s'intéressent aux effets visqueux et inertiels du chargement solide sur la force de traînée. Dans leur étude, cette dernière est alors estimée par normalisation de l'interaction fluide-particule par la force de traînée de Stokes $3\pi\mu_c^*U_{c,in}^*d_p^*$. Cette définition est reprise par Beetstra dans des configurations bi-disperses [16] et pour des régimes plus convectifs. Wen et Yu [254] définissent un facteur correctif sur le coefficient de traînée $C_d/C_{d,0}$, avec $C_{d,0}$ le coefficient de traînée de Stokes pour une particule isolée, défini à partir de la vitesse superficielle du fluide. Enfin, d'autres auteurs [160, 261] utilisent la vitesse interstitielle $U_r = U_s/\alpha_c$ pour l'adimensionnement de la force de traînée.

$$\mathbf{F}_{drag} = \frac{1}{8}\pi d_p^2 C_d \|\mathbf{U}_r\| \mathbf{U}_r \quad (3.48)$$

$$\widehat{\phi}_c(z) = \frac{\int_{V(z)} \alpha_c \phi_c}{\int_{V(z)} \alpha_c} \quad (3.49)$$

$$\widetilde{\phi}_{cv} = \frac{\int_V \alpha_c \phi_c dV}{\int_V \alpha_c dV} \quad (3.50)$$

Une seconde approche existe pour estimer les paramètres locaux de l'écoulement et se base sur la formulation de Maxey et Riley [152]. Cette équation décrit le mouvement d'une particule dans un écoulement fluide non-uniforme. Dans le cas de particules ponctuelles, la vitesse du fluide est celle à la position de la particule. Cependant, lorsque la particule a une taille définie, l'approximation de Faxén vient corriger l'équation de Maxey-Riley par intégration de la vitesse fluide sur la surface de la particule et de l'accélération du fluide sur

le volume de la particule. Meller et Liberzon [154] estiment cette vitesse en interpolant la vitesse fluide à l'aide d'une loi puissance inversement proportionnelle à la distance sur leur données PTV. Récemment, Akiki *et al.* [7] utilisent un code spectral pour estimer les vitesses et accélérations du fluide à la position de la particule. Les interactions de paires de particules sur la force hydrodynamique sont ensuite tabulées en fonction de la distance, de l'angle et du régime d'écoulement. L'hypothèse de superposition des contributions de paires de particules [218] dans les systèmes multi-particules montre alors un bon accord dans des configurations simples.

Les lits fixes extraits à partir des positions des particules à des instants précis des configurations mobiles résolues sont repris ici. Pour rappel, ces lits sont bi-périodiques tels que $L_T = 8$ et $L_{ax} = 15$. Le nombre de Reynolds balaye la gamme $4 \leq \mathcal{R}e_{in} \leq 11$ et le nombre de Prandtl est fixé à $\mathcal{P}r = 10$. Dans ces conditions, le taux de chauffe du lit $T_d - T_{c,out}$ varie entre 85% et 97%. Les instants sélectionnés pour figer les particules sont choisis de telle sorte que la porosité locale autour de la particule soit décorrélée entre les deux instants de la simulation. Dans les configurations retenues, 5 particules sont retirées du lit fixe comme suit :

- Les 5 particules sont à une hauteur dans le lit proche de $H_{bed}/2$.
- La particule se situant la plus proche du centre du lit est retirée en premier.
- Les 4 particules restantes sont choisies pour être à une distance $d_{ij} > 3$ de la première dans chaque direction pointant vers les coins du lit. Ici d_{ij} représente la distance entre la particule i et la particule j .

3.A.1 Méthode de calcul des grandeurs locales

Dans cette partie, la définition de la vitesse et de la température locale sont calculées et comparées dans une configuration fixe : i) moyenne surfacique, ii) moyenne volumique locale à l'aide de cube autour des particules de tailles $1 \leq L_{box} \leq 5$. À noter qu'ici, aucun noyau de pondération (soit $g(\mathbf{r}) = 1$) n'est utilisé dans la phase fluide pour les moyennes volumiques.

Ces moyennes sont réalisées pour chaque particule du système. Dans le cas d'une des 5 particules retirées des simulations, une boîte de même taille est créée à l'emplacement de la particule absente et les grandeurs fluides sont ensuite calculées. Ces grandeurs sont une estimation des propriétés fluides non-perturbées par la présence des particules absentes. Pour les grandeurs surfaciques, le profil de la propriété fluide considérée est interpolé à l'altitude de la particule (retirée ou non).

Lorsque les comparaisons des grandeurs sont réalisées, les valeurs du lit fixe « complet » sont prises comme valeurs de références dans le cas des particules n'étant pas retirées. Au contraire, les valeurs non-perturbées issues du lit « incomplet » sont prises comme référence pour les particules extraites du lit. Pour chaque simulation, la valeur moyenne de l'écart pour les particules retirées et non-retirées est calculée.

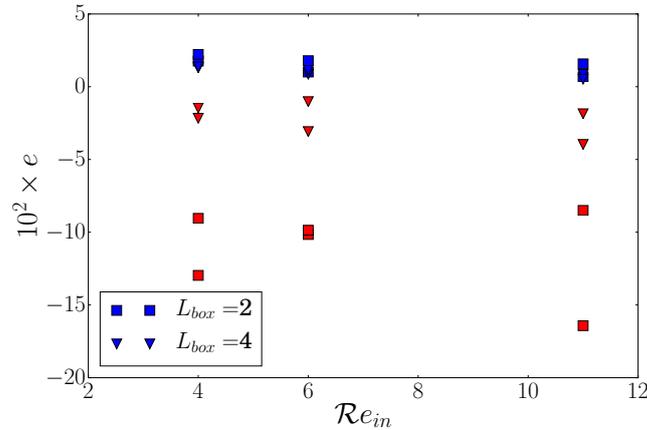


FIGURE 3.A.1 – Effet de l’auto-perturbation d’une particule sur la vitesse environnante $\widetilde{u_{c,ax}}$, $L_{box} = 2$ et $L_{box} = 4$.

3.A.2 Effet sur la vitesse relative / coefficient de traînée

Dans le cas de la vitesse axiale de l’écoulement calculée avec les moyennes volumiques, un effet limité sur la valeur de l’écart est observé pour les particules gardées (voir FIG. 3.A.1). Pour toutes les tailles de boîtes, l’écart entre les simulations n’excède pas 2% sur l’ensemble des particules. Au contraire, pour les particules qui sont retirées du lit, la valeur moyenne de la déviation montre une large dispersion pour $L_{box} = 2$. L’erreur moyenne pour cette taille de boîte se situe autour de 10% dans toutes les configurations. Cet écart tombe à 2% pour un volume de contrôle de $L_{box} = 4$. Cette diminution de l’écart est un effet directement lié à la taille du volume de contrôle. La contribution du volume de particule retiré dans le volume total de la boîte est moins importante à mesure que L_{box} augmente. Ainsi, la contribution de la sphère est de 6.5% du volume total pour $L_{box} = 2$ et chute à moins de 1% pour $L_{box} = 4$. Si la valeur de la vitesse volumique axiale pour les particules retirées est maintenant comparée à la vitesse surfacique axiale du fluide, un écart autour de -10% est observé pour une taille de boîte $L_{box} = 2$. Cet écart tombe à -5.1% pour une taille $L_{box} = 4$, dans la gamme d’erreur produite pour les particules non retirées. Ceci met en évidence que l’omission d’une particule ne change pas le comportement global du lit, mais que la vitesse locale non perturbée par la particule lorsque cette dernière est retirée du système n’est pas équivalente à la vitesse interstitielle. Pour l’ensemble des tailles de boîtes testées, l’écart entre la valeur volumique pour une particule retirée n’excède jamais 20%.

En se rapprochant de la définition de Maxey et Riley pour une particule ponctuelle, un second écart peut être calculé en prenant comme valeur de référence la vitesse du fluide à la position de la particule. Dans le cas présent, cette vitesse correspond à la vitesse moyenne dans un volume de contrôle de largeur $L_{box} = 1$ centré sur la position des particules retirées (voir FIG. 3.A.2). Cette définition traduit la contribution de la présence de la particule sur

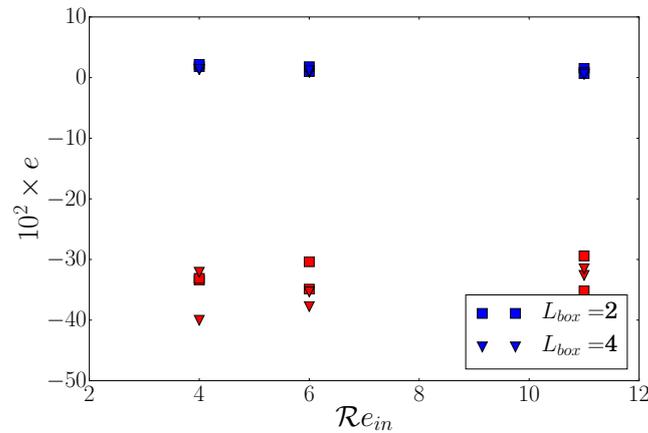


FIGURE 3.A.2 – Erreur de la vitesse environnante $\widetilde{u_{c,ax}}$, à la vitesse non-perturbée, $L_{box} = 2$ et $L_{box} = 4$.

l'écoulement moyen dans son environnement proche. L'erreur basée sur cette définition montre alors une valeur constante autour de 40% pour tous les régimes d'écoulements testés. Cette valeur varie d'ailleurs peu avec la taille de boîte considérée.

La définition du coefficient de traînée de l'équation 3.48 induit que la variation de C_d est directement proportionnelle à celle de U_r . Ainsi, les variations observées ci-dessus pour la vitesse relative sont celles que peuvent subir les valeurs calculées du coefficient de traînée. Ainsi, selon la définition de U_r , le coefficient de traînée peut être modifié de moins de 2% à plus de 40%.

3.A.3 Effet sur la température locale et le nombre de Nusselt

Les mêmes méthodes de moyenne sont utilisées ici pour le transfert thermique. FIG. 3.A.3a montre l'écart observé entre la température perturbée et la température non-perturbée par les particules. Ici la comparaison se fait à des tailles de boîtes comparables. L'effet de la contribution volumique de la particule dans le volume de contrôle déjà mis en évidence pour la partie hydrodynamique est aussi visible ici : la déviation pour $L_{box} = 2$ est plus grande que pour $L_{box} = 4$. Cependant, les niveaux d'erreurs sont bien moins importants que pour l'hydrodynamique et semble augmenter avec la vitesse d'injection : elle passe de 2% à 5% entre $Re_{in} = 4$ et $Re_{in} = 11$ avec une taille de boîte $L_{box} = 2$ et de 0.5% à 2% pour une taille de boîte $L_{box} = 4$. Par définition du coefficient de traînée et du nombre de Nusselt, l'écart observé sur la vitesse relative / la température locale impacte de la même manière les deux quantités. Ainsi, la variation du nombre de Nusselt n'excède pas 5% selon la définition de la température environnante.

Dans le cas où l'écart est calculé avec comme référence la température « à la position

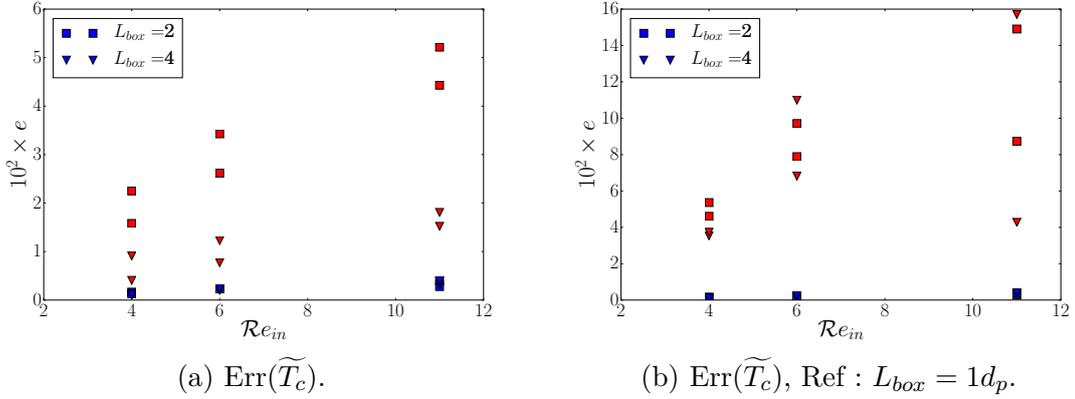


FIGURE 3.A.3 – Effet de l’auto-perturbation d’une particule sur la température environnante \widetilde{u}_c pour $L_{box} = 2$ et $L_{box} = 4$.

de la particule » (*i.e.* boîte de $L_{box} = 1$ centrée sur la particule retirée dans la simulation « incomplète »), les tendances observées ci-dessus restent identiques, mais les niveaux d’erreurs sont plus importants (voir FIG. 3.A.3b). Ainsi, l’écart sur le nombre de Nusselt se trouve autour de 5% à $\mathcal{Re}_{in} = 4$ et proche de 14% pour $\mathcal{Re}_{in} = 11$.

La définition de la température environnante de la particule, et donc, le potentiel d’échange de la particule avec le fluide est, dans les configurations choisies, moins impactant pour le nombre de Nusselt que pour le coefficient de traînée. Les écarts observés entre température non-perturbée et vitesse non-perturbée sont largement réduits sur les aspects thermiques. Cependant, dépendamment de la définition choisie pour la température de référence, les écarts sur le nombre de Nusslet peuvent atteindre 14%.

3.A.4 Impact sur les propriétés des particules voisines

Dans la partie précédente, les propriétés du fluide sont calculées à la position des 5 particules qui sont retirées du système permettant d’estimer l’impact de l’auto-perturbation de la particule sur les champs de la phase fluide. Indépendamment du champ de vitesses ou de température, une taille de boîte $L_{box} \geq 3$ produit des écarts inférieur à 5% sur la valeur du coefficient de traînée ou du nombre de Nusselt. Ici, l’impact de la suppression des particules est regardé sur les propriétés hydrodynamiques et thermiques des particules environnantes.

Les particules considérées dans l’environnement proche des particules sont sélectionnées en utilisant un critère d’intersection avec une sphère fictive centrée sur la position des particules retirées. Un schéma du processus de sélection du voisinage est montré en FIG. 3.A.4. Pour rappel, la procédure de suppression des particules utilise un critère sur la distance entre les deux sphères qui seront retirées. De ce fait, seules les particules comprises entre $1 \leq d_{ij} \leq 2$

sont considérées comme voisines dans cette partie. Ainsi, les effets combinés de deux particules retirées sur des voisines communes sont réduits. Cette hypothèse suppose que l'effet combiné de deux particules supprimées est faible et que l'effet sur les voisines proches est uniquement lié à la suppression de la particule la plus proche. Enfin, pour chaque particule vérifiant le critère de sélection des particules voisines, la distance à la particule retirée la plus proches et l'angle formé entre le centre des particules et l'axe principal de l'écoulement sont calculés (voir FIG. 3.15a) et respectivement notés d_{rj} et θ_{rj} . Ici, l'angle θ_{rj} n'est pas orienté et prend donc des valeurs contenues entre $0 \leq \theta_{rj} \leq \pi$. Ces paires de données (d_{rj}, θ_{rj}) permettent de tracer une carte de l'effet de la suppression sur les propriétés des particules environnantes. Le processus de sélection des particules voisines est réalisé pour chaque particule retirée et les voisines sont toutes rassemblées pour les analyses suivantes.

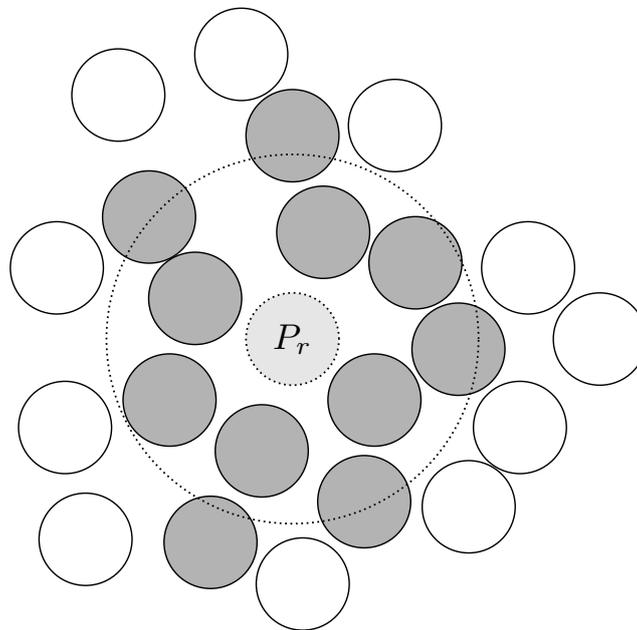


FIGURE 3.A.4 – Méthode de sélection des particules voisines. Particule retirée : P_r ; Gris : Voisines sélectionnées (intersection avec le cercle pointillé) ; Blanc : Particule ne vérifiant pas le critère.

Une comparaison directe de l'écart entre la simulation « complète » et « incomplète » pour la force hydrodynamique et le flux de chaleur des particules voisines est réalisée. Le graphique polaire de l'angle θ_{rj} et de la distance inter-particulaire d_{rj} est coloré par l'écart calculé sur la force axiale hydrodynamique (voir FIG. 3.A.5). Il est dans un premier temps intéressant de noter que le nombre de particules mises en jeu dans chaque configuration varie avec la porosité moyenne locale (cette dernière varie avec \mathcal{Re}_{in} dans les lits fluidisés). Dans le cas concentré $\mathcal{Re}_{in} = 4$ montre une distribution non-homogène des occurrences des voisines. Deux cercles concentriques centrés sur $d_{rj} = 1$ et $d_{rj} = 2$ concentrent la majorité des réalisations.

Cette observation semble décroître pour les porosités plus importantes. La répartition des réalisations est en fait proportionnelle aux solutions de l'équations de Percus-Yevik [180].

Les niveaux d'erreur observés par les particules voisines montrent une nette diminution de la force axiale dans les 3 régimes pour des angles compris $\frac{\pi}{4} \leq \theta_{rj} \leq \frac{3\pi}{4}$. De plus, du fait de la plus grande proximité des particules pour les régimes denses, les niveaux d'erreur observés sont aussi plus importants à $Re_{in} = 4$ qu'à $Re_{in} = 11$. Au contraire, les particules localisées à des angles $\theta_{rj} \leq \frac{\pi}{4}$ et $\theta_{rj} \geq \frac{3\pi}{4}$ sont soumises à une augmentation de la force d'interaction fluide-particule. La création d'un passage préférentiel lors de la suppression d'une particule génère un changement des contraintes sur les particules environnantes. Ces contraintes peuvent être réduites de plus de 30% dans certaines configurations. La création d'un passage préférentiel a pour conséquence d'augmenter la force fluide-particule alignées dans le sens de l'écoulement avec la particule retirée. Au contraire, les particules proches du plan transverse à l'écoulement au niveau de la particule retirée subissent une diminution de l'interaction fluide-particule. L'effet semble de plus s'estomper lorsque la distance d_{rj} augmente.

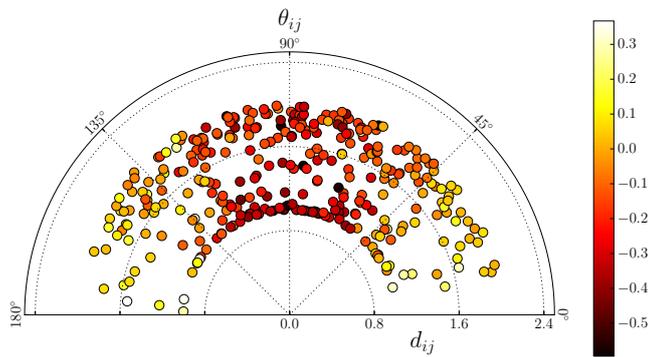
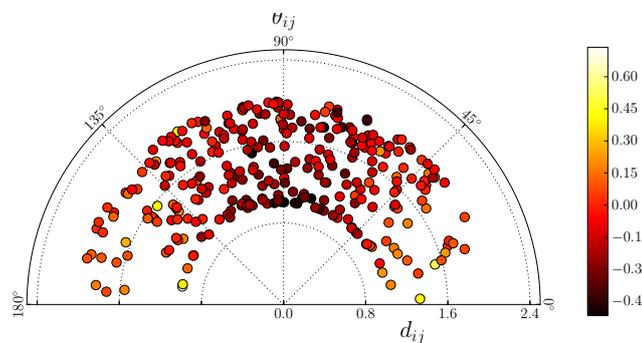
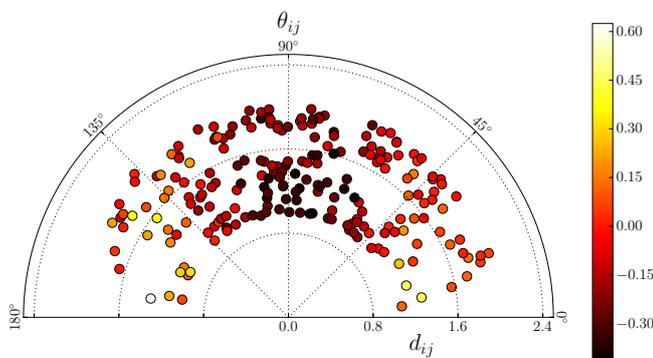
(a) $Re_{in} = 4$, $\alpha_c = 0.467$.(b) $Re_{in} = 6$, $\alpha_c = 0.523$.(c) $Re_{in} = 11$, $\alpha_c = 0.637$.

FIGURE 3.A.5 – Effet de la suppression d’une particule sur la force hydrodynamique F_{ax} des voisins. Coloré par l’écart sur F_{ax} : $e = \frac{F_{i,ax,all} - F_{i,ax,rem}}{F_{i,ax,all}}$.

Les particules voisines des sphères retirées des simulations sont désormais étudiées par l’écart sur le flux de chaleur (voir FIG. 3.A.6) calculé entre simulations « complète » et « incomplète ». Une première observation montre que l’évolution de l’écart est ici principalement

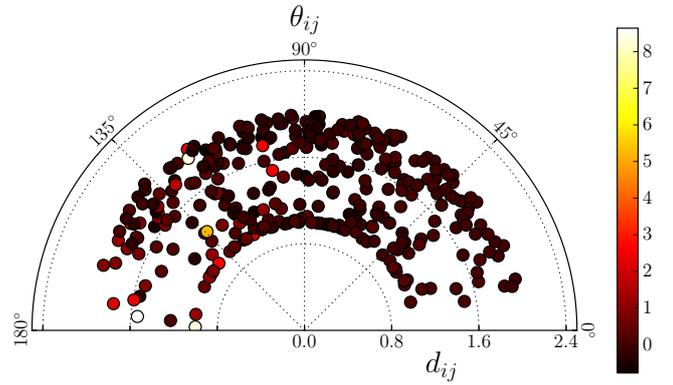
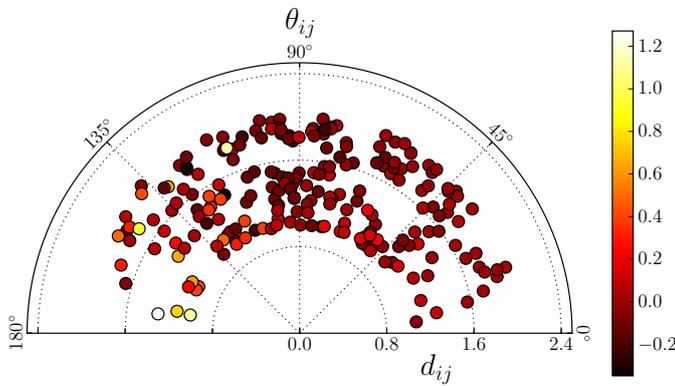
(a) $\mathcal{Re}_{in} = 4$, $\alpha_c = 0.467$.(b) $\mathcal{Re}_{in} = 11$, $\alpha_c = 0.637$.

FIGURE 3.A.6 – Effet de la suppression d’une particule sur le flux de chaleur normalisé \mathcal{Nu}_p des voisines. Coloré par l’écart sur \mathcal{Nu}_p : $e = \frac{\mathcal{Nu}_{p_i,all} - \mathcal{Nu}_{p_i,rem}}{\mathcal{Nu}_{p_i,all}}$.

porté par l’angle de θ_{rj} . Pour les faibles angles, la déviation du flux de chaleur est quasi-nulle et augmente avec l’angle θ_{rj} . Une faible diminution est observée pour $\theta_{p,j} \approx \pi/2$ pour une vitesse d’entrée $\mathcal{Re}_{in} = 11$. Pour les grands angles θ_{rj} la déviation est bien plus importante et le flux de chaleur des particules peut même doubler. La forte interaction thermique pour les régimes denses ($\mathcal{Re}_{in} = 4$) couplée à des nombres de Péclet plus faibles (diffusion thermique dans le fluide plus importante), le flux de chaleur calculé pour les angles proches de $\theta_{rj} = \pi$ peut être multiplié par 8 alors que ce facteur n’excède pas 1.2 pour les régimes moins concentrés. Contrairement à la force hydrodynamique, les changements du flux de chaleur sont dominés par les effets amont–aval et peu par des effets transverses. Ces observations sont en accord avec les résultats obtenus au *Chapitre 2*.

3.B Interactions mur-particules

Une autre question ouverte pour la modélisation Euler-Euler concerne l'interaction avec les parois du lit fluidisé. En particulier, la condition limite à imposer pour les particules au niveau des parois est complexe. Une condition de non glissement revient à considérer que les particules adhèrent au mur ne semble pas satisfaisante. Une autre option consiste à définir une réflexion de la PDF des vitesses après collisions avec un mur dans les équations de Boltzmann. Une telle condition semble plus appropriée mais nécessite de spécifier si cette réflexion est isotrope ou non. Enfin, lorsque les particules sont proches des parois, la gêne stérique est réduite et la porosité locale augmente (voir *Chapitre 2*). Il devient alors intéressant de déterminer quels sont les impacts sur les couches limites thermiques et hydrodynamiques dans ce cas de figure. Enfin, la condition de non glissement fluide aux parois engendre des gradients hydrodynamiques qui impactent la distribution des vitesses des particules. Cette modification doit être une fonction du nombre de Stokes particulaire. Au niveau thermique, le champ de température peut être constant aux parois (chauffe / refroidissement du lit) ou adiabatique. Dans les deux cas, la même problématique que pour l'hydrodynamique se pose sur l'impact pour les transferts de chaleur. Dans le cas d'un écoulement cisailé contenant des particules dont le mouvement est Brownien, Souzy *et al.* [211] montrent numériquement que la diffusion d'un traceur depuis le mur vers le centre est augmentée par la présence des particules.

La configuration en lit fluidisé bi-périodique de 500 particules est reprise ici. Pour un régime de fluidisation $\mathcal{R}e_{in} = 9$, des parois sont ajoutées dans les directions transverses. Tous les paramètres physiques de la phase fluide, les paramètres thermiques et de collisions sont gardés constants et identiques à la simulation bi-périodique. La condition limite thermique dans le cas avec paroi est celle correspondant à des parois adiabatiques : $\partial T_c^* / \partial \mathbf{n} = 0$. Une visualisation des deux configurations est proposée en FIG. 3.B.1.

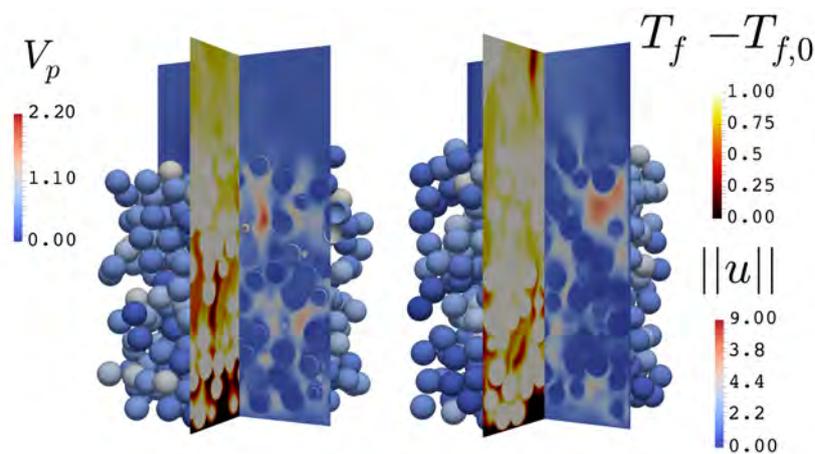


FIGURE 3.B.1 – Comparaison du régime de fluidisation dans un lit de 500 particules : Gauche : Bi-périodique, Droite : Murs.

3.B.1 Présence de murs : impact hydrodynamique

Dans cette nouvelle simulation, la hauteur du lit est calculée de la même manière que pour le lit fluidisé bi-périodique (critère des 99%). La présence des murs contraint la configuration des particules sur les limites du domaine et le lit gagne en hauteur. Pour ce régime de fluidisation, le lit se comporte toujours comme un lit dense homogène. Bien que la présence d'inhomogénéités locales de la phase fluide soit observée, aucun phénomène de pistonage n'apparaît par confinement. Les oscillations de la hauteur du lit sont identiques à celles du lit bi-périodique. Une augmentation de 6.5% de la hauteur moyenne du lit est observée du fait de la présence des murs.

De la même manière que pour les configurations en lits fixes avec parois du *Chapitre 2*, les particules du lit sont réparties à chaque instant en trois familles en fonction de leur place dans le lit : proche d'un coin, d'un mur ou dans le cœur du lit. Le critère retenu dans le cas des lits fixes considère une distance inférieure à $0.9d_p^*$ d'une paroi pour la catégorie « Mur » et de deux parois pour les « Coins ».

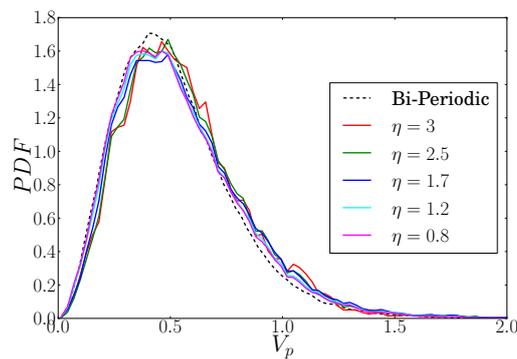
3.B.1.1 Présence de murs : impact sur le mouvement des particules

Dans un canal de section carrée, l'effet de la présence des murs génère une couche limite hydrodynamique dont il est possible d'estimer l'épaisseur en écoulement laminaire. Cependant, lorsque des particules sont présentes dans le fluide, le mouvement de celles-ci va modifier le profil moyen de vitesse dans l'écoulement et en proche paroi. Il est alors difficile d'estimer a priori la distance « mur-particule » au-delà de laquelle le mur n'impacte plus la vitesse des particules dans le lit. De plus, l'agitation moyenne des particules, et en particulier leur nombre de Stokes, va impacter la distance d'effet des murs. Une comparaison des distributions de vitesses est ici réalisée dans les trois zones (*i.e.* « Domaine », « Murs » et « Coins ») en fonction du critère η choisi pour discriminer chaque classe de particule. Ce critère est tel que : si $d_{mur-part} < \eta$, alors la particule est considérée en proche paroi. Si ce critère est vérifié pour deux murs, alors la particule appartient à la catégorie « Coins ». Le lecteur notera que $d_{mur-particule}$ est calculée entre le centre de la particule et le mur considéré (*i.e.* $d_{mur-particule} = 0.5$ au moment d'une collision entre un mur et une particule). Par conséquent, les valeurs prises par le critère de sélection η sont telles que $\eta > 0.5$. Le tableau TAB. 3.B.1 rassemble la valeur des centres des distributions des PDF associées à chaque critère. Le critère de répartition semble avoir un faible impact sur les centres des distributions pour $\eta \geq 0.8$ (variation inférieure à 2%) pour la catégorie « Domaine ». La catégorie « Murs » voit sa distribution se superposer à celle du cœur du lit pour $\eta \geq 2.5$ et perd ainsi son caractère de localisation. L'effet du critère semble plus important pour la catégorie « Coins » : son centre est déplacé de plus de 20% entre $\eta = 1.2$ et $\eta = 3$.

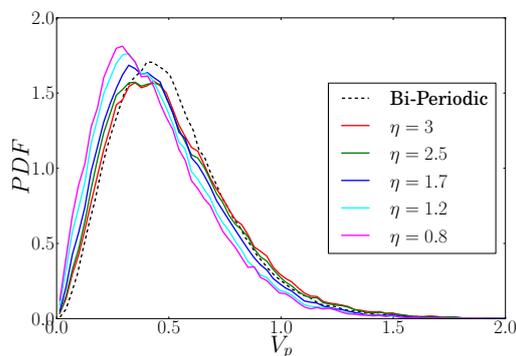
TABLE 3.B.1 – Estimation du critère d’interaction mur–particules : distance critique d’effet pariétal.

η	3	2.5	1.7	1.2	0.8	Bi-périodique
Domaine	0.556	0.556	0.556	0.556	0.533	0.533
Murs	0.533	0.511	0.489	0.444	0.444	0.533
Coins	0.467	0.444	0.422	0.400	0.378	0.533

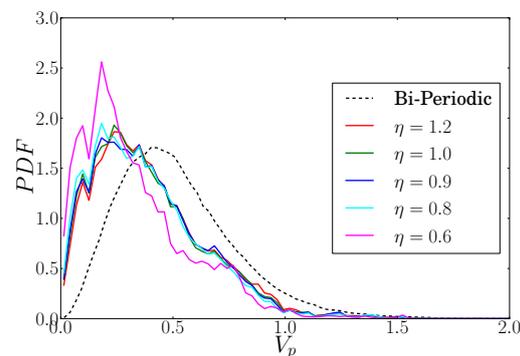
Le critère à sélectionner pour cette catégorie doit contenir un nombre suffisant d’occurrences pour calculer la PDF sans que celle-ci soit perturbée par des réalisations indépendantes de l’effet des parois. Une étude plus fine (voir FIG. 3.B.2) autour de $0.6 \leq \eta \leq 0.9$ montre que la variation de la distribution est faible dans cette gamme pour l’ensemble des catégories (écart de la valeur moyenne inférieure à 5%). Pour des raisons de nombre de réalisations, il est choisi pour la suite le critère : $\eta = 0.9$. Ce critère peut être diminué afin de ne sélectionner que les particules en proche paroi ($0.5 \leq \eta \leq 0.6$) mais demande un temps de simulation plus long pour contenir suffisamment d’occurrences.



(a) Domaine.



(b) Murs.



(c) Coins.

FIGURE 3.B.2 – Effet du critère de répartition sur la distribution autour de $\eta = 0.9$.

Dans le cas où les parois sont présentes, et bien que les vitesses soient proches, la vitesse moyenne des particules en proche paroi et proche des coins est plus faible que pour les particules au centre du lit : cette réduction est de l'ordre de 17% pour les particules proches des murs et de 29% pour les particules proches des coins. Ceci s'observe aussi au niveau des PDF comme montré FIG. 3.B.3a. L'écart-type des distributions est moins impacté par la catégorie des particules (-7% pour la catégorie « Murs » et -12% pour la catégorie « Coins » par rapport au centre du lit). Il est intéressant de noter que la distribution pour les particules au centre du lit est identique à celle du lit fluidisé bi-périodique. Ainsi, la présence de parois génère des gradients de vitesse fluide qui, dans le cas de faibles nombres de Stokes, impacte la dynamique des particules dans leur entourage. Une étude plus précise sur les composantes axiales et transverses des vitesses des particules montre que la distribution des vitesses axiales n'est pas impactée par la présence de murs (voir FIG. 3.B.3b). Au contraire, les distributions de vitesses transverses des particules montre un écart plus important comme indiqué en FIG. 3.B.3c. Les distributions restent de formes Gaussiennes dans le centre du lit mais s'en écarte en proche paroi et dans les coins. L'écart-type des distributions est diminué de 28% dans le cas des particules proches des parois et de 65% pour les particules situées dans les coins. Il est intéressant de noter que la présence des murs et les contraintes géométriques associées dans cette configuration impactent uniquement les composantes transverses des vitesses particulières en proche paroi. Ceci permet de quantifier le changement de la forme de la PDF des vitesses potentiellement lié à la collision avec les murs ou simplement à la gêne engendrée : les fortes valeurs absolues de vitesses normales aux murs sont sous-représentées par rapport au centre du lit.

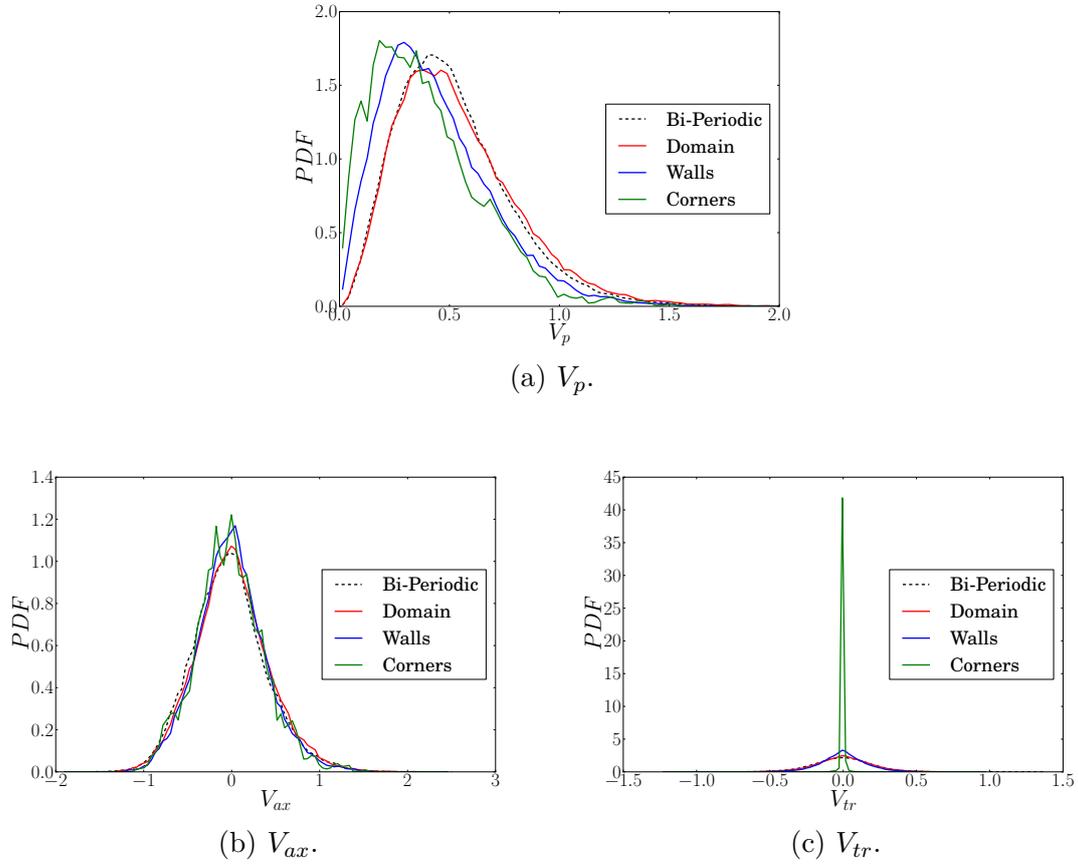


FIGURE 3.B.3 – Fonction de densité de probabilité de vitesses : comparaison bi-périodique et murs.

Le cas particulier des particules en proche paroi peut être divisé en deux sous-catégories : la composante de vitesse transverse normale au mur et la composante de vitesse transverse qui est tangente au mur proche de la particule comme indiqué sur le schéma en FIG. 3.B.4. Ici, V_{\perp} traduit la composante transverse de la vitesse qui est normale au mur, et V_{\parallel} la composante de vitesse transverse parallèle au mur. Pour chaque particule vérifiant le critère de particule en proche paroi, les composantes transverses des vitesses normale et parallèle au mur sont extraites et les densités de probabilités tracées pour l'ensemble des réalisations (voir FIG. 3.B.5). Il apparaît ici que la présence du mur et les possibles collisions avec ce dernier impactent largement la PDF de vitesse transverse normale au mur. Cette dernière est centrée à $V_{\perp} = 0$ et est beaucoup moins étalée que celle de la composante transverse parallèle au mur. Ces distributions ne suivent alors plus des lois gaussiennes mais peuvent être approchées par une loi de Laplace ou par une fonction lorentzienne (voir équation 3.51).

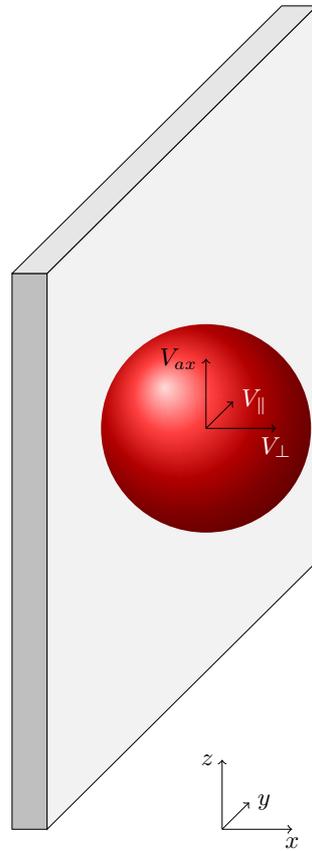


FIGURE 3.B.4 – Distinctions entre vitesse transverse normale et parallèle aux murs pour les particules de la catégorie « Murs ».

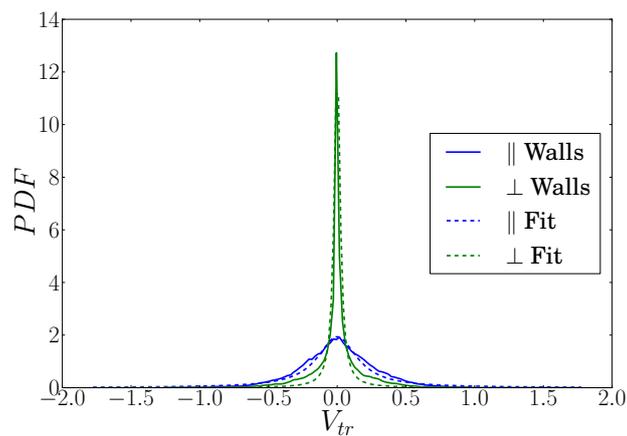


FIGURE 3.B.5 – Fonctions de densité de probabilité des vitesses normales V_{\perp} et transverses V_{\parallel} aux murs pour la catégorie « Murs ».

$$f(V_{\perp}, \mu, a) = \frac{1}{\pi a \left[1 + \left(\frac{V_{\perp} - \mu}{a} \right)^2 \right]} \quad (3.51)$$

Les changements des vitesses observés dans les régions proches des murs et des coins induisent une modification du déplacement moyen des particules dans ces zones et donc de l'agitation locale des particules. Cette anisotropie peut se calculer à partir de l'écart-type des distributions de vitesse selon chaque composante. Du fait de la réduction de l'étalement des vitesses transverses à l'écoulement dans ces zones, l'anisotropie du mouvement moyen des particules est ainsi multipliée par 1.4 pour les particules de la catégorie « Murs » et par 2.85 pour la catégorie « Coins » : l'agitation est alors principalement portée par le seul axe permettant un degré de liberté.

Dans un dernier temps, le processus de classement des particules est étendu pour connaître le coefficient d'autodiffusion dans les trois régions définies. Le calcul de ces grandeurs implique de ne sélectionner que les particules restant un temps suffisamment long dans chaque zone pour connaître l'effet de l'interaction avec les parois sur le coefficient d'autodiffusion : $\Delta t_{res} > \Delta t_{crit}$ (voir FIG. 3.B.6). Or, dans la plupart des cas, les particules arrivent en proche paroi puis ressortent dans un laps de temps Δt_{res} qui peut être calculé, et est dépendant de son environnement proche et de sa trajectoire.

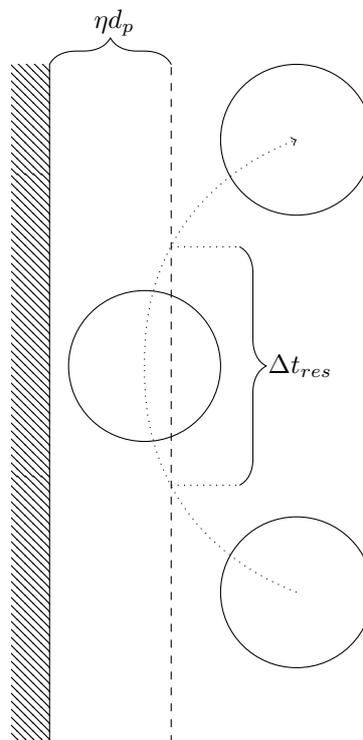


FIGURE 3.B.6 – Définitions du temps de résidence en proche paroi dans un lit fluidisé.

Ainsi, plusieurs « temps de séjour » critiques Δt_{crit} dans chaque zone sont testés de manière à estimer l'impact de ce paramètre sur le calcul du coefficient d'autodiffusion dans ces zones (voir FIG. 3.B.7). Pour un temps de résidence compris entre $\Delta t_{res} = 4.5$ et $\Delta t_{res} = 11.25$, une faible variation du coefficient d'autodiffusion est constatée. Bien que la valeur calculée ne soit pas complètement identique, elle permet d'obtenir une valeur avec une confiance autour de 15%. La valeur calculée pour $\Delta t_{res} = 13.5$ montre un plus grand écart avec les précédentes courbes. Ceci est lié à un nombre de réalisations trop peu important pour ce temps de séjour long. Un temps de résidence de $\Delta t_{res} = 11.25$ est donc choisi pour la suite.

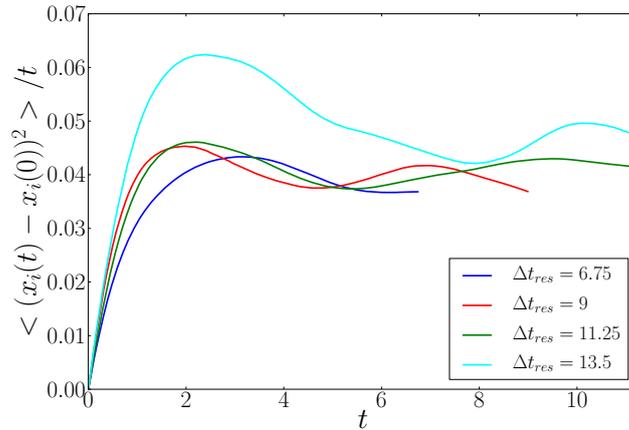


FIGURE 3.B.7 – Impact du temps de résidence dans les zones « Murs » sur l'estimation d'un coefficient d'autodiffusion transverse granulaire.

Les coefficients d'autodiffusion transverses sont montrés en FIG. 3.B.8 pour chaque catégorie de particules et comparés. Les valeurs des coefficients sont fortement impactées par la présence des murs. D'ailleurs, dans le cas des particules proches des coins, le régime n'a plus de caractère diffusif du fait de la contrainte générée par les murs. Le régime balistique est d'ailleurs bien plus court dans cette zone que pour les deux autres régions (ce dernier est aussi légèrement plus court pour la zone en proche paroi que dans le lit). Dans le cas des particules en proche paroi, le coefficient est inférieur à celui dans le lit. Une étude pour un temps de séjour plus long doit être réalisée pour confirmer que cette classe ne subit pas les mêmes contraintes que la catégorie « Coins » pour des temps plus longs. Enfin, il doit être noté ici que le coefficient de diffusion transverse dans le cœur du lit est très proche de celui calculé dans le cas bi-périodique (voir FIG. 3.17). Cette observation tend à valider le caractère qualitatif des valeurs calculées ainsi qu'à confirmer le comportement similaire des deux simulations dans cette zone.

Le tableau TAB. 3.B.2 rassemble les coefficients d'autodiffusion pour les trois zones du lit. Le coefficient d'autodiffusion est réduit d'environ 50% dans la région proche paroi comparativement au cœur du lit. Ceci traduit l'effet de la réduction des distributions des vitesses transverses dans cette zone : les particules sont moins agitées et le milieu diffuse moins dans ces

directions. La répétition de cette procédure pour d'autres régimes d'écoulement permettrait de mettre en avant l'effet du nombre de Stokes et de la lubrification.

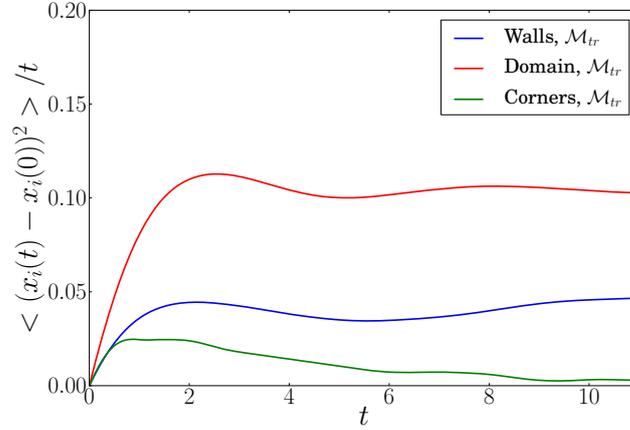


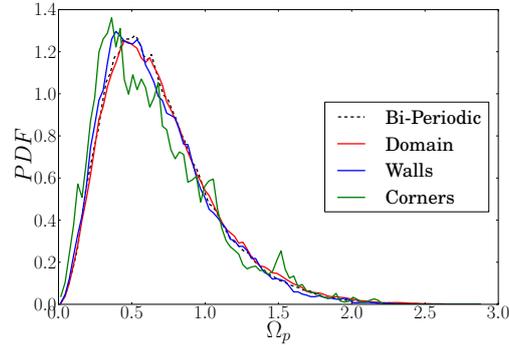
FIGURE 3.B.8 – Estimation des coefficients d'autodiffusion dans le cas avec parois.

TABLE 3.B.2 – Estimation des coefficients d'autodiffusion granulaire : impact des parois.

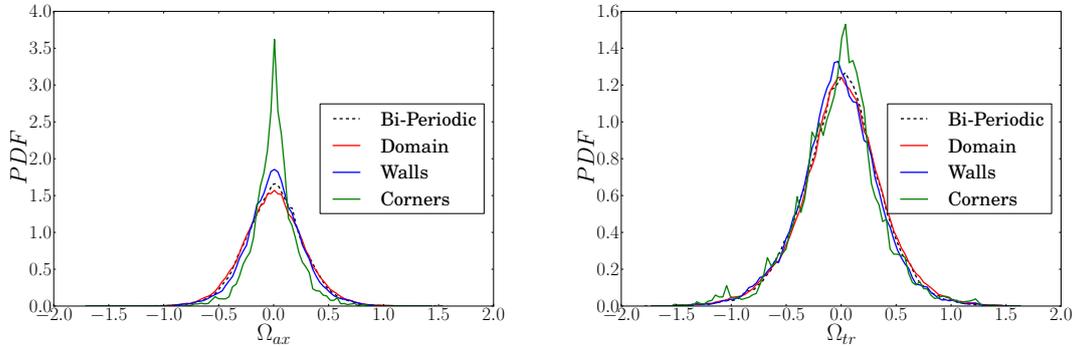
	Bi-périodique \mathcal{M}_{tr}	Domaine \mathcal{M}_{tr}	Murs \mathcal{M}_{tr}
D_{tr}	0.10	0.10	0.045

La distinction des propriétés des particules proches des parois ou dans le lit peut aussi se faire au regard de la rotation des particules. Les vitesses de rotations sont ici comparées pour les trois classes de particules : « Murs », « Coins » et « Domaine » (voir FIG. 3.B.9). De manière similaire aux PDF des vitesses, les PDF des vitesses de rotation sont légèrement réduites pour les particules proches des murs et des coins, comparées au système bi-périodique. La diminution est cependant moins marquée que pour les vitesses de translation : -13% pour les particules dans la catégorie « Murs » et -16% pour les particules de la catégorie « Coins ». L'écart-type semble encore une fois, peu impacté par la catégorie de particules et suit une loi de type log-normale. Ici encore, une différence entre les composantes axiales et transverses peut être effectuée comme montré en FIGS. 3.B.9b et 3.B.9c. Contrairement aux composantes des vitesses de translation des particules, la rotation transverse est peu impactée par la présence des murs. Au contraire, la rotation axiale montre une distribution moins étalée pour les catégories « Murs » et « Coins » que pour la partie bi-périodique ou dans le lit.

Les potentielles collisions ou la simple présence des murs dans le lit fluidisé liquide–solide tendent à augmenter l'anisotropie des distributions des vitesses de translation et de rotation. Les vitesses transverses ainsi que la rotation axiale sont moins importantes. Le mouvement dans ces zones est plus caractérisé par un mouvement axial (ascendant ou descendant) lié à la recirculation des particules. Aucune augmentation de la vitesse axiale moyenne dans ces zones n'est cependant observée. Le mouvement en proche paroi est cependant moins rapide en



(a) Distribution de la rotation des particules.



(b) Distribution de la composante axiale de la rotation des particules.

(c) Distribution de la composante transverse de la rotation des particules.

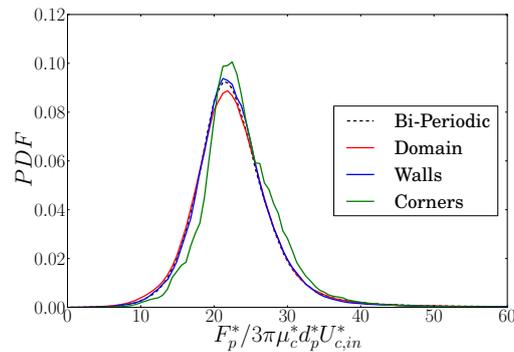
FIGURE 3.B.9 – Fonction de densité de probabilité de vitesses : comparaison bi-périodique et murs.

valeur absolue moyenne qu'au cœur du lit du fait du mouvement plus lent dans les directions transverses. Ces phénomènes sont amplifiés pour les particules de la catégorie « Coins » du fait de la contribution des deux parois dans la réduction des vitesses de translation et de rotation.

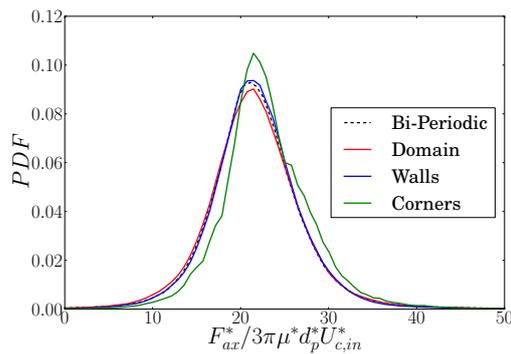
3.B.1.2 Présence de murs : impact sur la force fluide-particule

Le changement de mouvement dans les trois zones considérées modifie aussi l'action du fluide sur les particules dans ces zones. Ainsi les distributions de la force d'interaction fluide-particule sont extraites pour chaque particule selon la zone à laquelle elle appartient. La moyenne temporelle de ces distributions est montrée en FIG. 3.B.10. Ces paramètres ont été observés en lits fixes et montrent ici les mêmes tendances : la force subie par les particules proches des coins est légèrement plus importante que pour les deux autres catégories (+9%). Il est intéressant de noter que le critère retenu ne permet pas de distinguer les catégories

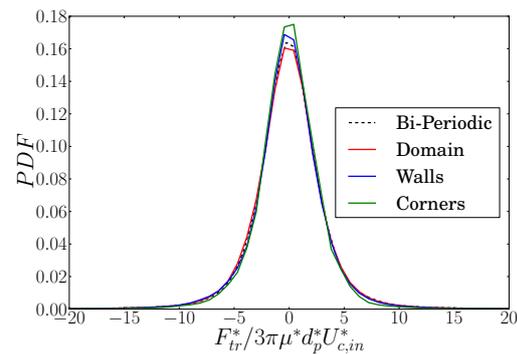
« Domaine » et « Murs ». Ceci indique que le changement de la forme de la distribution des vitesses dans cette région n'est pas relié aux forces hydrodynamiques, mais à des effets de configuration ou de lubrification liés aux murs.



(a) Distribution de la force hydrodynamique.



(b) Distribution de la force hydrodynamique axiale.



(c) Distribution de la force hydrodynamique transverse.

FIGURE 3.B.10 – Fonction de densité de probabilité de vitesses : comparaison bi-périodique et murs.

Comme déjà mis en évidence dans les lits fixes, la valeur de la force fluide-particule observée par les sphères proches des coins est principalement portée par la composante axiale de l'écoulement (voir FIG. 3.B.10b). La largeur de la distribution semble aussi indépendante de la catégorie des particules. Il est de plus à noter que la distribution des forces transverses n'est quasiment pas impactée par la position des particules dans le lit comme affiché en FIG. 3.B.10c. Il a été mis en évidence au-dessus que dans ces zones, le mouvement est majoritairement axial et que la contrainte de configuration liée aux murs peut être responsable de passages préférentiels pour le fluide. Le fluide s'écoule alors plus vite dans ces zones et la force subie par les particules se trouve aussi plus importante.

3.B.1.3 Présence de murs : Effect sur la dynamique des collisions

La connaissance de la position des particules à chaque instant permet de déterminer les collisions avec les murs et d'extraire les vitesses et angles à l'impact et post-collisions. De la même manière que pour les lits bi-périodique, les interactions sont repérées en utilisant le critère suivant : $\|\mathbf{x}_{wall} - \mathbf{x}_p\| < r_p + \delta$. Ici δ définit la distance à laquelle les forces de lubrification, qui ne sont pas prises en compte ici, deviennent inférieures aux interactions fluide-particule. À des fins de vérification, trois valeurs de δ sont testées pour définir le début et la fin des interactions et semblent n'impacter que légèrement la forme de la distribution des angles à l'impact (voir FIG. 3.B.11). Cette observation indique que l'approche des particules lors des interactions de type mur-sphère se fait à un nombre de Stokes suffisamment grand pour ne pas être impacté par le critère choisi dans la gamme $d_p^*/40 \leq \delta \leq 8d_p^*/40$.

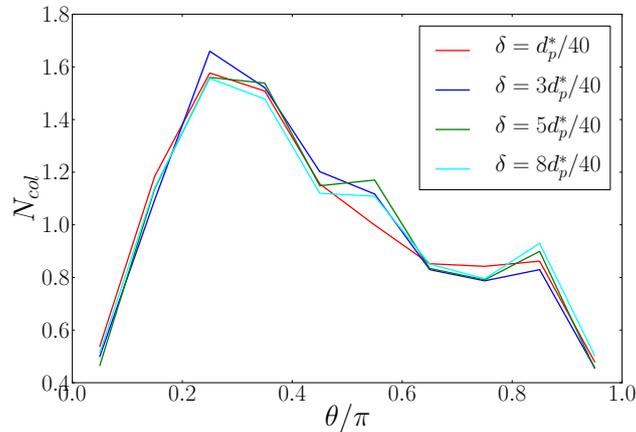


FIGURE 3.B.11 – Influence du critère de détection des collisions sur l'angle d'impact.

L'objectif est ici de mettre en évidence l'impact des murs sur les collisions dans un lit fluidisé liquide-solide. Ainsi, pour chaque particule, le temps de présence Δt_{res} dans chaque zone est extrait ainsi que le nombre d'interactions avec des particules, $N_{c,PP}$ et avec des murs $N_{c,WP}$ subies durant son temps de séjour dans chaque zone. Une interaction commence lorsque la distance particule-particule ou mur-particule vérifie le critère : $r_p + \delta$. De même, l'interaction prend fin lorsque la distance devient supérieure à ce même critère. Le nombre d'interactions de chaque type est extrait pour chaque particule sur l'ensemble du régime permanent du lit fluidisé. De cette manière, il est possible d'estimer une fréquence d'interaction $f_{int} = (N_{c,PP} + N_{c,WP})/\Delta t_{sim}$ pour chaque zone du lit (voir tableau TAB. 3.B.3). Les distributions sont toutes de forme gaussienne mais une large différence est observée sur la valeur moyenne entre les trois zones du lit. La présence des murs réduit significativement la fréquence d'interaction entre les particules $f_{int,PP}$. Au contraire, les interactions de type mur-particule $f_{int,WP}$ sont moins fréquentes qu'entre particules en proche paroi. Ces modifications peuvent avoir trois sources : modification de la porosité moyenne (problème d'arrangement des particules proches des parois), de la vitesse moyenne et de l'agitation des particules. Dans les

faits, la présence des murs fait varier tous ces paramètres en même temps et une étude plus poussée est nécessaire pour extraire l'effet relatif de chaque variable. Les travaux de Buffières [23] et Corona [5] semblent indiquer que la théorie cinétique des écoulements granulaires doit être modifiée pour les faibles nombres de Stokes et suggèrent un effet de la porosité sur la fréquence de collision sous la forme $(\alpha_d/\alpha_{d,max})^2(1 - \alpha_d/\alpha_{d,max})$, avec $\alpha_{d,max}$ la compaction maximale du lit (ici, α_d est la fraction volumique des particules). Il est de plus intéressant de noter ici, que l'agitation des particules est peu modifiée entre les trois zones du lit alors que la fréquence d'interaction est fortement réduite (voir FIG. 3.B.3a). Par ailleurs, l'utilisation de moyenne locale centrée autour des particules dans chaque zone avec $L_{box} = 2$ montre un écart respectif de 5% et 8% à la porosité moyenne dans le lit pour les zones « Murs » et « Coins ». Le paramètre observant la plus grande variation est la vitesse moyenne des particules (écart supérieur à 15%) à qui la différence observée peut-être majoritairement attribuée.

TABLE 3.B.3 – Fréquence d'interactions moyenne pour les trois zones du lit.

	$f_{int,PP}$	$f_{int,WP}$	$f_{int,tot}$
Domaine	93 ± 22	–	93 ± 22
Murs	61 ± 17	9 ± 6	70 ± 18
Coins	39 ± 13	13 ± 8	48 ± 15

Les vitesses et angles à l'impact sont aussi calculés. Dans le cas d'une collision mur-particule, deux angles sont extraits : l'angle par rapport à l'axe principal de l'écoulement $\theta_{col,ax}$, et l'angle transverse $\theta_{col,tr}$ comme indiqué en FIG. 3.B.12.

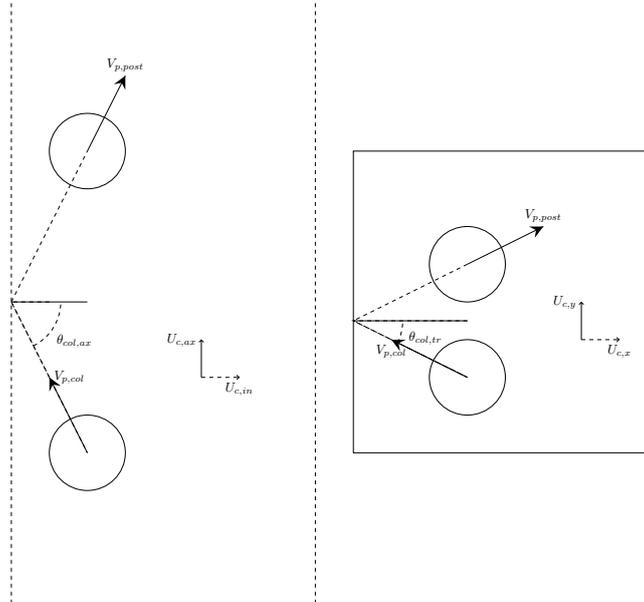


FIGURE 3.B.12 – Définitions des vitesses et angles d'impacts.

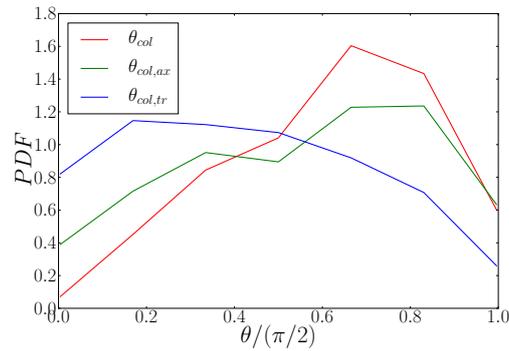
FIGS. 3.B.13a et 3.B.13b montrent l'évolution de l'angle d'impact pour les interactions de types mur-particule et particule-particule. Il apparaît que les interactions entre particules montrent une dominante des angles compris entre $0.2 \leq \theta/\pi \leq 0.6$ comme observé pour les lits bi-périodiques. Les trois zones d'intérêt montrent un aplatissement des distributions pour les particules de la catégorie « Murs » et « Coins » (voir FIG. 3.B.13b). Les impacts alignés avec l'axe principal de l'écoulement voient leurs proportions augmentées. La présence des murs et la contrainte stérique associée tendent à homogénéiser la distribution des angles lors de l'impact : la dominance des angles $0.2 \leq \theta/\pi \leq 0.6$ est réduite.

Dans le cas des interactions de type mur-particule, l'angle d'impact varie dans la gamme $0 \leq \theta_{col} \leq \pi/2$. La distribution des angles met en évidence des impacts majoritairement compris entre $0.6 \leq 2\theta/\pi \leq 0.8$: la gêne stérique ainsi que le mouvement principalement axial des particules dans l'écoulement sont responsables de ces observations. Une distinction entre l'angle dans le plan de l'écoulement principal θ_{ax} et dans le plan transverse au mur θ_{tr} montre des comportements opposés : l'angle θ_{ax} suit la même tendance que précédemment alors que θ_{tr} montre des collisions portées par les faibles angles $2\theta/\pi \leq 0.5$. L'absence d'écoulement principal transverse, cette distribution est d'ailleurs plus homogène que celle dans l'axe de l'écoulement.

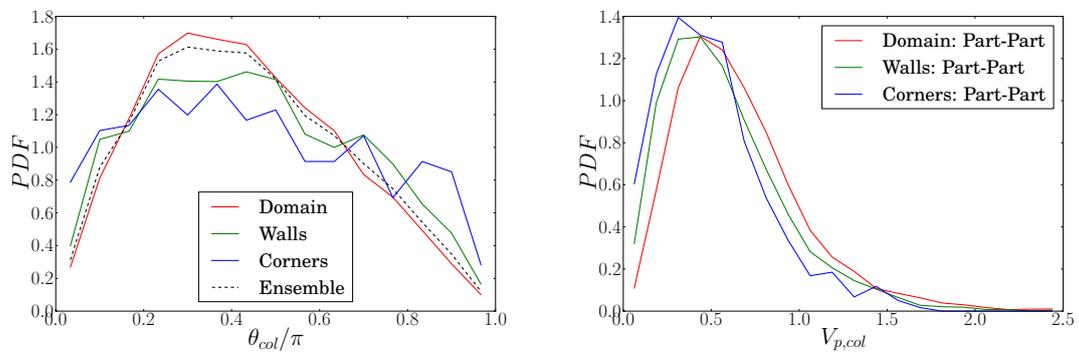
Enfin, la distribution des vitesses à l'impact est montrée en FIG. 3.B.13c. Comme observé au début de cette étude, les vitesses dans les zones « Murs » et « Coins » sont légèrement plus faibles qu'au centre du lit. Cependant, l'écart observé entre les trois zones est plus faible que pour les distributions de vitesses moyennes dans chaque région comme indiqué en FIG. 3.B.3a.

3.B.1.4 Présence de murs : impact sur les corrélations temporelles

Les modifications des distributions mises en évidence au-dessus peuvent influencer sur les temps Lagrangiens de relaxation des particules dans ces zones. Ces temps caractéristiques sont importants dans le cadre de la modélisation DEM-CFD des écoulements fluide-particules. Esteghamatian *et al.* [66] utilisent ces derniers dans un modèle stochastique permettant de réintroduire l'agitation perdue à l'échelle DEM-CFD. À l'aide des positions des particules et de la définition de la fonction d'autocorrélation, chaque particule ayant un temps de résidence $\Delta t_{res} > 6.75$ dans chaque zone est considérée comme une réalisation (voir FIG. 3.B.6). Ce temps de résidence, défini à partir des simulations bi-périodiques, permet d'obtenir le temps du premier « zéro » des fonctions d'autocorrélation.



(a) Mur-particules : distribution des angles d'impact.



(b) Particule-Particule : distribution des angles d'impact. (c) Particule-Particule : distribution des vitesses d'impact.

FIGURE 3.B.13 – Angles et Vitesses d'impact : effets des parois.

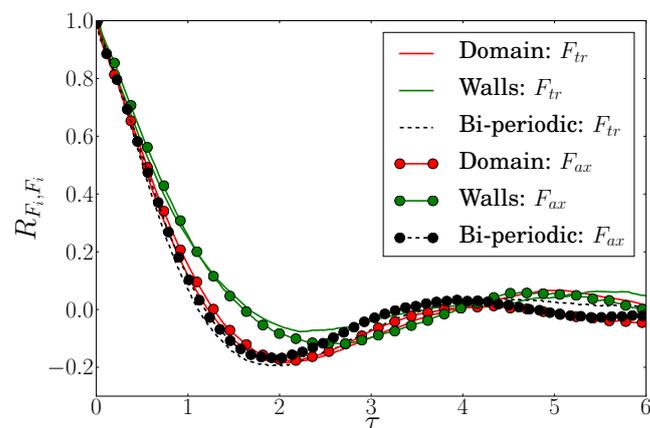


FIGURE 3.B.14 – Fonctions d'autocorrélations dans le lit et en proche paroi pour la force hydrodynamique.

FIG. 3.B.14 montre l'effet des parois sur les fonctions d'autocorrélation de la force hydrodynamique transverse et de la force axiale. Il est à noter la proximité entre les fonctions au cœur du lit avec parois et dans le lit bi-périodique. Un bon accord de la forme des fonctions d'autocorrélation d'Esteghamatian *et al.* [67] est observé ici. De plus, le niveau de corrélation des fonctions est identique dans le lit et en proche paroi pour les temps courts. Au contraire, le temps nécessaire pour atteindre une autocorrélation nulle est plus élevé en proche paroi que dans le cœur du lit. Ceci est à relier avec les variations de vitesses des particules dans cette zone : réduction de la vitesse et du nombre de collisions total en proche paroi. Les trois fonctions d'autocorrélation ont la même forme et oscillent autour de zéro aux temps longs. Cependant, les particules en interaction avec un mur montrent un déphasage de ces oscillations avec les autres parties du lit.

Les temps intégraux Lagrangiens \mathcal{T} sont extraits à partir des fonctions calculées ci-dessus et comparés à ceux pour les particules au centre du lit tableau TAB. 3.B.4. La présence des murs et l'interaction avec les particules sont responsables d'une augmentation des temps intégraux sur la force et la vitesse. Cette augmentation est de l'ordre de 10–20% pour l'ensemble des propriétés testées.

TABLE 3.B.4 – Rapport des temps intégraux Lagrangiens hydrodynamiques entre le centre du lit et en proche paroi.

	$V_{p,tr}$	$V_{p,ax}$	$F_{p,tr}$	$F_{p,ax}$
$\mathcal{T}_{Walls}/\mathcal{T}_{Domain}$	1.3	1.1	1.2	1.2

3.B.2 Présence de murs : Effet sur la thermique

Dans cette partie, une attention est portée à l'impact des murs sur la partie thermique de l'écoulement. Il a été mis en évidence un impact des parois sur la dynamique des particules en proche paroi, notamment sur la vitesse des particules et la force exercée par le fluide. Ces changements s'accompagnent d'une augmentation de la porosité locale au niveau des particules liée à la gêne configurationnelle générée par les murs. La combinaison de ces changements locaux doit avoir un impact direct sur le transfert de chaleur entre le fluide et les particules dans ces zones. Ainsi, la procédure de répartition des particules utilisée pour les aspects hydrodynamiques est reproduite ici pour le transfert thermique. Le flux de chaleur et la température environnante locale sont normalisés $\mathcal{N}u_p(z)/\langle \mathcal{N}u_p(z) \rangle_t^{N_{part}}$ par rapport aux profils moyens relevés dans le lit. Ceci permet de mettre en évidence et de quantifier les zones du lit s'écartant de ce profil moyen. Ici encore, les particules sont classées en trois zones en fonction de leur position dans le lit. L'effet du critère de répartition η sur les distributions du flux de chaleur et de la température volumique moyenne autour des particules pour la catégorie « Murs » est montré en FIG. 3.B.15. Il est observé en FIG. 3.B.15a que la distribution du flux de chaleur en proche paroi est très peu modifiée par le critère de répartition et rejoint les observations faites plus haut pour les paramètres hydrodynamiques. Au contraire, la température autour des particules pour une taille de boîte $L_{box} = 2.5$ montre une plus grande variation pour $\eta \geq 0.9$: en-deçà, les variations sont limitées (voir FIG. 3.B.15b). Le

critère $\eta = 0.9$ est donc retenu pour ces raisons et par souci de cohérence entre les observations. Une estimation de l'effet de la taille de boîte montre que la valeur moyenne de la distribution normalisée n'est pas impactée par le choix de L_{box} mais que ce paramètre influe sur l'étalement et la forme de la PDF.

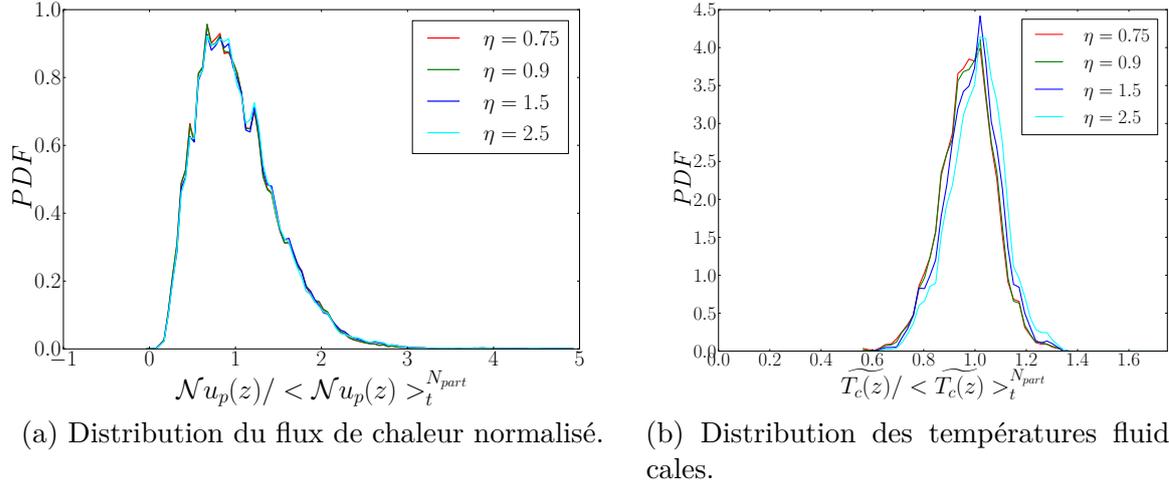


FIGURE 3.B.15 – Impact du critère de répartition η sur les grandeurs thermiques pour la catégorie « Murs ».

À l'aide du critère retenu, les distinctions des grandeurs thermiques pour les trois catégories sont montrées en FIG. 3.B.17. Aucune différence nette n'est observée entre les trois zones du lit pour la distribution du flux de chaleur normalisé. Chaque zone du lit est le lieu d'un même spectre de transferts thermiques entre le fluide et les particules autour de la valeur moyenne, ce qui suggère un effet très limité des parois dans ce cas. De plus, ces observations sont en contradictions avec la diminution de la vitesse des particules dans ces zones. Cependant, si le potentiel d'échange dans ces zones est plus important, les distributions du flux de chaleurs peuvent être équivalentes. Une autre hypothèse pour expliquer ces observations est liée à un critère d'interaction η trop grand par rapport à la distance d'effet des parois. Cependant, FIG. 3.B.15b montre que la distribution n'est pas changée entre $\eta = 0.75$ et $\eta = 0.9$ ne semble pas confirmer cette hypothèse (un essai pour $\eta = 0.61$ vient appuyer cette affirmation).

Au contraire, la distribution des températures normalisées $\widetilde{T}_c(z) / \langle \widetilde{T}_c(z) \rangle_t^{N_{part}}$ montre un écart plus important entre les trois zones du lit. Les particules situées dans le lit ont une densité de probabilité centrée autour du profil moyen tandis que les températures locales autour des particules dans les catégories « Murs » et « Coins » voient leurs densités moyennes être légèrement inférieures au profil moyen (potentiel d'échange plus important). Il doit être noté ici que lorsque le volume de support des moyennes volumiques intersecte une paroi, cette dernière est coupée et le volume est tronqué (voir FIG. 3.B.16). Ainsi, les conclusions précédentes peuvent être biaisées par cette procédure (cf *Chapitre 2*). Le seul support de

moyenne ne souffrant pas de cette potentielle source d'erreur correspond à $L_{box} = 1$. Bien que non représentatif de la microstructure locale, la procédure est effectuée pour ce support. La distribution moyenne des températures normalisées pour $L_{box} = 1$ montre un écart similaire entre la catégorie « Murs » et « Domaine » à celui observé pour le support $L_{box} = 2.5$ (voir FIG. 3.B.18). Cette dernière observation soutient l'idée d'un effet local des parois sur la température environnante et non un artefact numérique.

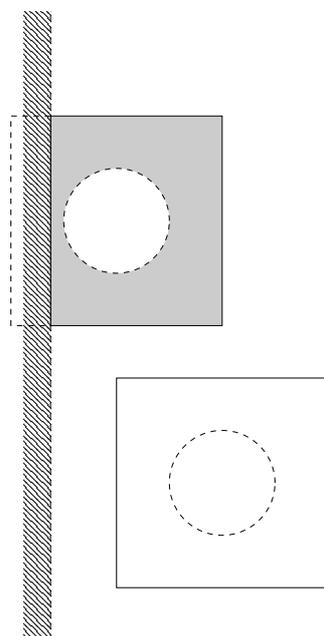
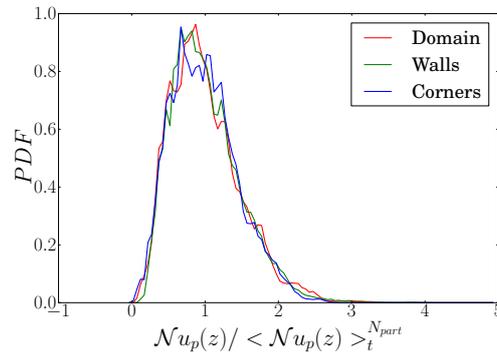
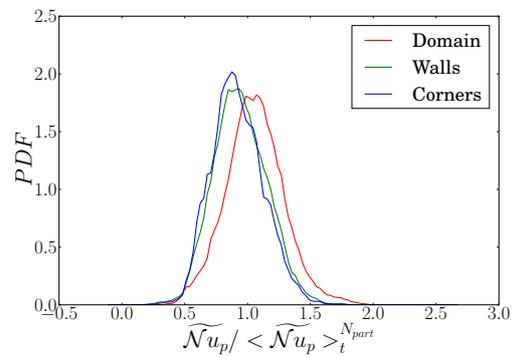
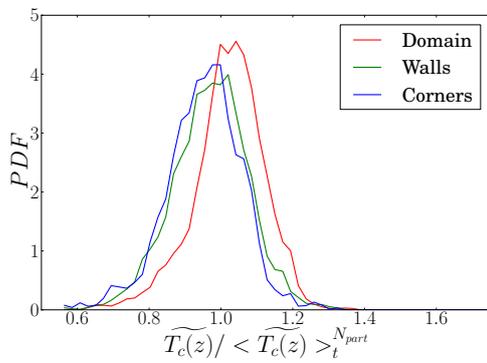


FIGURE 3.B.16 – Troncature du volume de contrôle pour les particules en proche paroi.

Par construction, le nombre de Nusselt basé sur la température volumique moyenne est proportionnel au rapport des deux distributions observées ci-dessus. Aucune différence notable n'étant observée pour le flux de chaleur, le nombre de Nusselt suit donc la tendance de la température volumique environnante. Il est alors observé une diminution du nombre de Nusselt moyen lors d'une interaction avec une paroi adiabatique. Cette observation va de pair avec les aspects hydrodynamiques. La diminution locale de la vitesse moyenne des particules ainsi que l'augmentation de la porosité locale sont deux paramètres agissant sur une réduction du nombre de Nusselt moyen.



(a) Distribution du flux de chaleur normalisé.



(b) Distribution de la temperature volumique (c) Distribution du nombre de Nusselt. $L_{box} = 2.5$.

FIGURE 3.B.17 – Comparaison des transferts thermiques entre zones du lit.

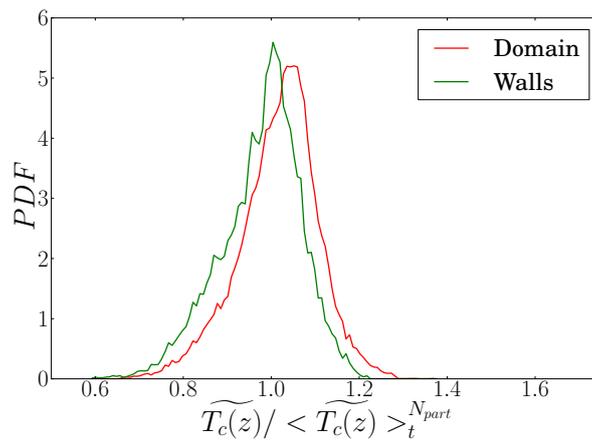


FIGURE 3.B.18 – Distribution des températures locales : $L_{box} = 1$.

Comparaison des échelles PRS / DEM–CFD

Sommaire

1	Description du modèle thermique DEM–CFD	198
1.1	Description mathématique du couplage thermique	198
1.2	Description numérique du couplage DEM–CFD	199
2	Validation du modèle	203
2.1	Phase continue	203
2.2	Couplage fluide-particule : particule isolée	204
2.3	Couplage fluide-particule : lit de particules	209
3	Comparaison DEM–CFD / PRS	210
3.1	Lits fixes	210
3.2	Lits fluidisés	215
4	Conclusions/Synthèse	220

Actuellement l’approche DEM–CFD est très utilisée pour comprendre les mécanismes physiques se déroulant dans les écoulements particulaires et en particulier dans les lits fluidisés [55, 171, 172, 200, 235, 236, 262]. Par rapport aux approches Euler-Euler, ou approches multi-fluides, la DEM–CFD ne nécessite pas de modèle de fermeture pour le transport turbulent ni pour les termes de collisions. Cependant, le nombre de trajectoires de particules calculées par la DEM–CFD est rapidement un élément limitant. À notre connaissance, certains codes DEM–CFD peuvent traiter jusqu’à 10^8 particules [183]. Ce grand nombre de particules fait du modèle DEM–CFD un bon candidat pour la simulation de réacteurs à l’échelle du laboratoire ou bien à l’échelle du pilote. Pour l’échelle industrielle, la taille des réacteurs (plusieurs mètres de diamètre) et la masse de particules utilisée rendent impossible le calcul de toutes les trajectoires de particules. Cependant la DEM–CFD est un outil précieux pour améliorer les modèles de type Euler-Euler qui sont eux bien adaptés pour l’échelle industrielle.

Afin que la DEM–CFD soit utilisée en tant qu’outil de référence/prédiction cette dernière doit être à même de reproduire la physique observée dans les simulations PRS. Cependant très peu d’études s’attachent à faire des comparaisons directes PRS/DEM–CFD excepté celle effectuée par Esteghamatian [67] sur l’hydrodynamique seule. Cette étude met en évidence des écarts sur l’agitation des particules en fluidisation liquide-solide entre la PRS et la DEM–CFD. Tennesi *et al.* [225] montrent qu’une corrélation directe entre les fluctuations de l’accélération

des particules et les fluctuations de la vitesse axiale est observée à l'échelle PRS sans pouvoir être prédite par la DEM-CFD. Des formulations sous la forme stochastique sont alors proposées pour pallier ces problèmes [66, 162].

Malgré ce constat sur l'hydrodynamique, l'approche DEM-CFD a été étendue et utilisée pour étudier les transferts thermiques et les réactions chimiques. Par exemple, Ku *et al.* [133] développent la DEM-CFD pour analyser la pyrolyse de la biomasse en lits fluidisés. Une autre étude proposée par Liu *et al.* [144] sur la combustion du char et du propane met en évidence l'effet du passage des bulles sur les transferts thermiques via la DEM-CFD. De leur côté, Patil *et al.* [172] s'intéressent à la modélisation des transferts thermiques dans les bulles des lits fluidisés et observent un bon accord avec le modèle de Davidson et Harrison [43] pour les particules de petites tailles.

Dans ce chapitre, les résultats issus des simulations numériques à l'échelle locale (voir *Chapitre 2* et *Chapitre 3*) sont comparés aux résultats obtenus par une approche DEM-CFD. On montre que, comme pour l'agitation des particules, la variance de température est sous-estimée par la DEM-CFD. L'approche stochastique proposée par Esteghamatian [67] est ici étendue aux transferts thermiques.

1 Description du modèle thermique DEM-CFD

1.1 Description mathématique du couplage thermique

Cette partie présente dans un premier temps le modèle thermique implémenté dans la plateforme PELIGRIFF ainsi que les différentes méthodes d'interpolation des champs de la phase fluide à la position des particules et les méthodes de projection des propriétés Lagrangiennes sur la grille de résolution des équations du fluide. Les équations de la partie hydrodynamique se trouvent au *Chapitre 1* tandis que les aspects validations sont largement discutés dans les travaux de Bernard [18] et Esteghamatian [67].

L'équation de conservation de l'énergie pour la partie fluide est donnée par l'équation :

$$\frac{\partial \alpha_c \rho_c C_{p,c} T_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_c \rho_c \mathbf{u} C_{p,c} T_c) = \nabla \cdot (\alpha_c k_c \nabla T_c) + Q_d(\mathbf{x}) \quad (4.1)$$

où la masse volumique de la phase fluide est notée ρ_c , sa capacité calorifique massique $C_{p,c}$ et sa conductivité thermique k_c . L'équation 4.1 est monophasique aussi nous pouvons légitimement nous poser la question de la modification de la conductivité thermique du fluide par la présence des particules dans les simulations DEM-CFD. Par exemple, Patil [171] introduit une conductivité effective qui est donnée en fonction de la fraction volumique locale du fluide. Cette approche n'a pas été retenue dans notre étude. Enfin, Q_d est le flux de chaleur total provenant des particules. La phase granulaire n'étant pas considérée comme un fluide, un indice p repère les grandeurs particulaires.

Au niveau granulaire, le flux de chaleur d’une particule est donné par l’équation

$$Q_{p \rightarrow c}(\mathbf{x}_p(t), t) = m_p C_{p,p} \frac{T_p}{dt} = k_c \mathcal{N} u_p d_p [T_c(\mathbf{x}_p(t), t) - T_p] \quad (4.2)$$

où $T_c(\mathbf{x}_p(t), t)$ est la température à la position des particules. Pour obtenir cette température il faut interpoler la température du fluide depuis la grille Eulerienne où elle est résolue à la position des particules. Ici, $Q_{p \rightarrow c}$ est uniquement lié au transfert thermique convectif entre le fluide et la particule : aucun transfert par conduction entre les particules n’est considéré dans cette partie.

Le flux de chaleur Q_d dans l’équation 4.1 doit, lui aussi, avoir un traitement particulier. En effet, il correspond au flux de chaleur des particules contenues dans la cellule de calcul considérée, et éventuellement, selon la méthode choisie, des particules résidant dans les cellules voisines.

1.2 Description numérique du couplage DEM–CFD

Le transfert d’informations entre les équations 4.1 et 4.2 est l’étape clé du couplage DEM–CFD et conditionne la précision de la solution. Le lecteur doit noter que deux types d’échanges d’informations sont à distinguer : Euler \rightarrow Lagrange et Lagrange \rightarrow Euler. Ces deux catégories de transferts sont respectivement appelées interpolation et projection. Dans nos simulations numériques, l’interpolation consiste à évaluer la température à la position des particules. Son formalisme est appelé équation 4.3.

$$T_c(\mathbf{x}_p(t), t) = \frac{\int_{\Omega} T_c(\mathbf{x}, t) \kappa(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p(t)) d\mathbf{x}}{\int_{\Omega} \kappa(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p(t)) d\mathbf{x}} \quad (4.3)$$

Pour sa part, l’étape de projection consiste à distribuer l’ensemble des flux de chaleur sur le maillage où est résolue l’équation de la température du fluide (équation 4.1). Ainsi, le flux de chaleur total Q_d dans une cellule fluide n’est autre que la somme des contributions de l’ensemble des particules du système issues des projections.

$$Q_d(\mathbf{x}, t) = \frac{\sum_{i=1}^{N_{part}} \kappa(\mathbf{x}_{p_i}(t) - \mathbf{x}) Q_{p \rightarrow c}(\mathbf{x}_{p_i}(t), t)}{\int_{\Omega} \kappa(\mathbf{v} - \mathbf{x}) d\mathbf{v}} \quad (4.4)$$

Dans les équations 4.3 et 4.4, κ traduit un noyau destiné à pondérer la contribution de la température des cellules environnantes $T_c(\mathbf{x}, t)$ dans le cas de l’interpolation, et des particules $Q_{p \rightarrow c}(\mathbf{x}_p, t)$ dans le cas de la projection.

Les méthodes d’interpolation et de projection implémentées dans la plateforme PELI–GRIFF peuvent être retrouvées dans les références suivantes : [18, 64]. Les méthodes employées sont plus tard désignées par « cubes englobants » et « filtrage spatial » (voir descrip-

tion conceptuelle en FIG. 4.3). Une description de ces opérations est rappelée dans le cas du transfert d'informations thermiques.

1.2.1 Méthodes d'interpolation

Méthode des « cubes englobants »

Dans la méthode dite des « cubes englobants », un cube de côté d_p est construit autour de chaque particule. Ce choix est motivé par la facilité à calculer le volume d'intersection avec les cellules fluides environnantes. Cependant, le volume de ce cube n'est pas identique à celui de la particule qu'il englobe. L'interpolation de la température fluide à la position de la particule $T_c(\mathbf{x}_p(t), t)$ est réalisée à l'aide d'une interpolation trilineaire (voir FIG. 4.1).

$$T_c(\mathbf{x}_p(t), t) = AC \quad (4.5)$$

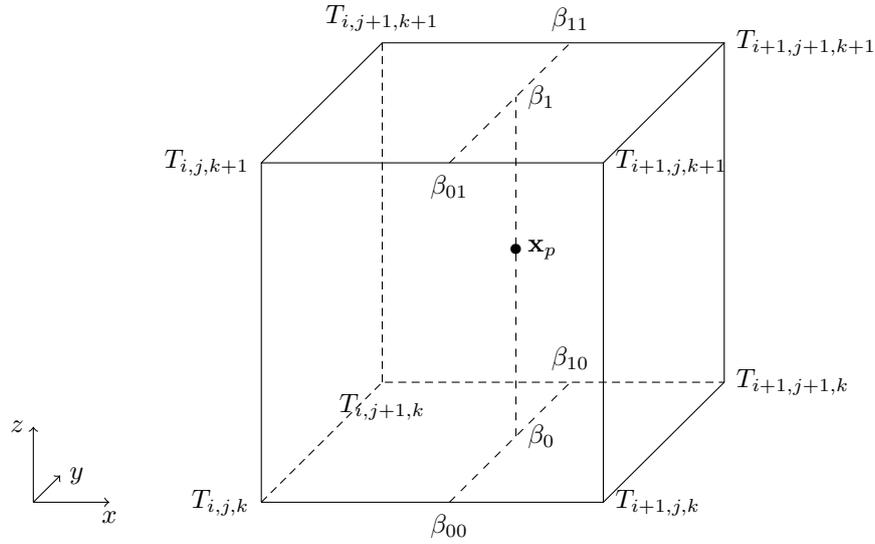
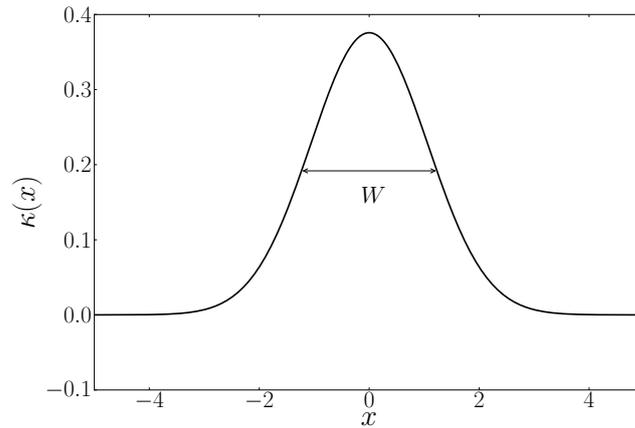
$$A = \begin{bmatrix} 1 & \delta x & \delta y & \delta z & \delta x \delta y & \delta y \delta z & \delta x \delta z & \delta x \delta y \delta z \end{bmatrix} \quad (4.6)$$

$$C = \begin{bmatrix} T_{i,j,k} \\ T_{i+1,j,k} - T_{i,j,k} \\ T_{i,j+1,k} - T_{i,j,k} \\ T_{i,j,k+1} - T_{i,j,k} \\ T_{i+1,j+1,k} - T_{i,j+1,k} - T_{i+1,j,k} + T_{i,j,k} \\ T_{i,j+1,k+1} - T_{i,j,k+1} - T_{i,j+1,k} + T_{i,j,k} \\ T_{i+1,j,k+1} - T_{i,j,k+1} - T_{i+1,j,k} + T_{i,j,k} \\ T_{i+1,j+1,k+1} - T_{i,j+1,k+1} - T_{i+1,j,k+1} - T_{i+1,j+1,k} + T_{i+1,j,k} + T_{i,j,k+1} + T_{i,j+1,k} - T_{i,j,k} \end{bmatrix} \quad (4.7)$$

Dans cette équation $\delta x = (x_p(t) - x_i)/(x_{i+1} - x_i)$, $\delta y = (y_p(t) - y_j)/(y_{j+1} - y_j)$, $\delta z = (z_p(t) - z_k)/(z_{k+1} - z_k)$, traduisent les distances relatives aux cellules environnantes.

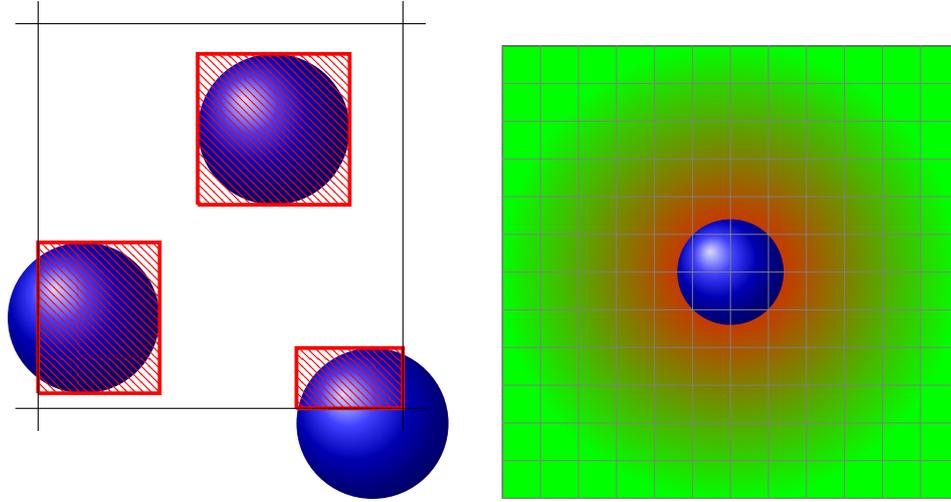
Méthode de filtrage spatial

Lorsque le filtrage spatial à support gaussien est utilisé, l'interpolation de la température du fluide environnant se fait en pondérant la contribution de chaque noeud utilisé pour l'interpolation par la valeur du filtre gaussien à la distance séparant la cellule et la particule. La formulation du noyau Gaussien est rappelée équation 4.8. Dans cette équation, σ_{gk} est l'écart-type de la distribution et peut être défini à partir de la longueur W , correspondant à l'étalement spatial pour lequel la fonction atteint la moitié de sa valeur maximale (voir équation 4.8 et FIG. 4.2).

FIGURE 4.1 – Schéma d'interpolation tri-linéaire à un instant t .FIGURE 4.2 – Exemple 1D du noyau Gaussien, $W = 2.5$.

$$\kappa(\mathbf{x}) = \frac{\exp(-\mathbf{x}^2/(2\sigma_{gk}^2))}{(\sigma_{gk}\sqrt{2\pi})^3} \quad \text{avec} \quad \sigma_{gk} = \frac{W}{2\sqrt{2\ln(2)}} \quad (4.8)$$

Pour des raisons de coûts de calculs, le nombre de cellules N_{cells} utilisé pour sommer les contributions du fluide (voir équation 4.9) est défini pour chaque particule dans une zone de largeur $2W$ autour du centre de la particule considérée. Cette approximation montre une bonne estimation des grandeurs projetées à partir de tailles de cellules $\Delta = W/2$ [67]. Dans le cas des interactions avec parois, le domaine de calcul du noyau est tronqué au numérateur



(a) Méthode des « Cubes englobants ». (b) Méthode à kernel Gaussien.

FIGURE 4.3 – Schéma des méthodes d'interpolation à l'échelle DEM-CFD.

et au dénominateur pour l'opération d'interpolation.

$$T_c(\mathbf{x}_p(t), t) = \frac{\sum_{i=1}^{N_{cells}} T_c(\mathbf{x}_i, t) \kappa(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_p(t)\|)}{V_{ker}} \quad (4.9)$$

1.2.2 Méthodes de projection

Méthode des « cubes englobants »

Si la particule i est à cheval sur plusieurs cellules, le rapport de volume du « cube englobant » intersectant chaque cellule environnante j au volume total du cube (d_p^3) est calculé, $\beta_{i,j}$ (équation 4.10). Ces coefficients $\beta_{i,j}$ servent ensuite à pondérer la contribution de la particule au flux de chaleur reçu par les cellules environnantes (équation 4.11). Dans cette équation, Q_p est le flux de chaleur total apparaissant dans l'équation fluide 4.1. N_{part} est le nombre de particules dans le système et $V_{cell} = \Delta^3$ le volume de la cellule fluide à la position \mathbf{x}_j .

$$\beta_{i,j} = \frac{V_{inter}}{d_p^3} \quad (4.10)$$

$$Q_d(\mathbf{x}_j, t) = \frac{1}{V_{cell}} \sum_{i=1}^{N_{part}} \beta_{i,j} Q_{p \rightarrow c}(\mathbf{x}_{p_i}(t), t) \quad (4.11)$$

Méthode de filtrage spatial

Pour la méthode du filtrage spatial, la projection des grandeurs Lagrangiennes sur la grille Eulerienne est rappelée équation 4.12. Ici, V_{ker} traduit le volume total du noyau de pondération discrétisé, et V_p le volume de chaque particule.

$$Q_d(\mathbf{x}_j, t) = \frac{1}{V_{ker}} \sum_{i=1}^{N_{part}} Q_{p \rightarrow c}(\mathbf{x}_{p_i}(t), t) \kappa(\|\mathbf{x}_{p_i}(t) - \mathbf{x}_j\|) V_{p,i} \quad (4.12)$$

Le cas particulier des interactions avec les parois s'effectue ici en redistribuant dans le domaine par « effet miroir » la contribution du support situé à l'extérieur du domaine [67]. Pour ces particules, le noyau κ est alors constitué de la somme de deux supports : i) la partie du support centré sur la particule et situé dans le domaine, ii) la portion du support résidant dans le domaine issu du noyau centré sur le clône symétrique de la particule par rapport à la paroi (clône situé à l'extérieur du domaine) mais dont le support s'étend à l'intérieur du domaine.

2 Validation du modèle

Dans cette partie l'extension thermique du modèle DEM-CFD est validée sur des configurations simples. La validation de la partie hydrodynamique a été traitée par Bernard [18]. Les cas de validations ont été choisis afin de valider indépendamment les équations régissant l'évolution de la température des particules et celle du fluide.

2.1 Phase continue

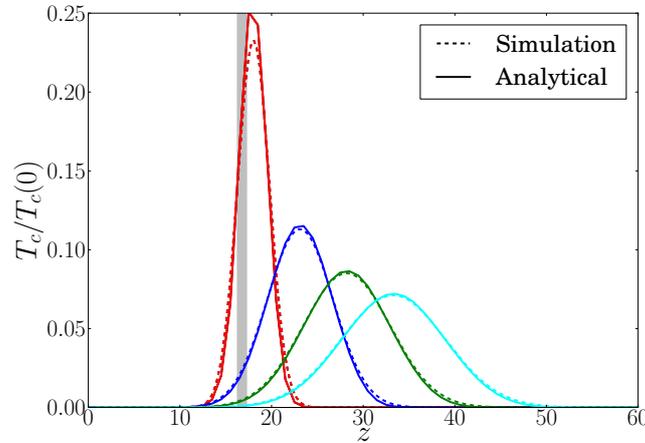
L'objectif ici est de valider la résolution de l'équation d'évolution du champ de température fluide. Pour cela nous étudions l'évolution d'un « Dirac » de température dans un champ fluide uniforme (sans murs). La configuration est celle d'un milieu fluide bi-périodique de dimensions $L_x/\Delta = 30$, $L_y/\Delta = 60$. Le Dirac de température est imposé sur une rangée de cellules du système à $t = 0$. Les paramètres physiques de la simulation sont rappelés dans le tableau TAB. 4.1. Une solution analytique de l'équation d'advection-diffusion régissant le profil de température dans cette configuration est :

$$T_c(x) = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{x + (U_{c,in}t + \delta)}{\sqrt{4k_c t}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{x - (U_{c,in}t + \delta)}{\sqrt{4k_c t}} \right) \right] \quad (4.13)$$

Dans l'équation 4.13, δ est la largeur du Dirac imposé, $U_{c,in}$ la vitesse du fluide et k_c sa conductivité thermique. La comparaison du profil issu des simulations DEM-CFD avec la solution analytique est présentée en FIG. 4.4. Les profils montrent une bonne proximité pour l'ensemble des temps testés.

TABLE 4.1 – Paramètres physiques utilisés pour valider la partie fluide du code DEM-CFD.

Paramètre	Valeur	Unités
δ	0.00025	m
L_x/Δ	30	[-]
L_y/Δ	60	[-]
$U_{c,in}$	0.005	m.s ⁻¹
ρ_c	1000	kg.m ⁻³
μ_c	0.005	Pa.s
$C_{p,c}$	4.2	kg.m ⁻³ .K ⁻¹
k_c	0.01	W.m ⁻¹ .K ⁻¹

FIGURE 4.4 – Evolution temporelle d'un Dirac de température dans un champ de vitesse uniforme. Rouge : $t = 0.15s$, Bleu : $t = 0.65s$, Vert : $t = 1.15s$, Cyan : $t = 1.65s$. La zone grisée correspond à l'étalement du Dirac de température à $t = 0$.

2.2 Couplage fluide-particule : particule isolée

On s'intéresse ici au cas d'une particule isolée immergée dans un fluide. Deux types de validation sont effectuées, tout d'abord avec seulement le couplage du gaz vers les particules puis le couplage complet gaz/particules.

2.2.1 Couplage fluide \rightarrow particule (one way)

Dans un premier test, une sphère est positionnée au centre d'un domaine bi-périodique. Les dimensions du domaine de calcul sont $L_x = L_y = 8d_p$ et $L_z = 15d_p$. Le maillage est uniforme et la taille des cellules est choisie telle que $\Delta/d_p = 4/3$. Le fluide et la particule sont initialement à la même température T_{ini} et le fluide entre à la base du domaine avec une vitesse $U_{c,in}$ et une température $T_{c,in} < T_{ini}$. Les paramètres utilisés pour la réalisation

TABLE 4.2 – Paramètres physiques dans le cas du refroidissement d’une sphère par convection.

Paramètres	Valeurs	Unités
T_{ini}	290	K
L_x/d_p	8	[–]
L_y/d_p	15	[–]
Δ/d_p	4/3	[–]
d_p	0.001	m
ρ_p	10000.	kg.m ⁻³
Re_p	9	[–]
$C_{p,p}$	5000	kg.m ⁻³
k_p	2	W.m ⁻¹ .K ⁻¹
$U_{c,in}$	0.045	m.s ⁻¹
ρ_c	1000	kg.m ⁻³
μ_c	0.005	Pa.s
$C_{p,c}$	4200	kg.m ⁻³ .K ⁻¹
k_c	2.1	W.m ⁻¹ .K ⁻¹
$T_{c,in}$	280	K

de ce cas de validation sont donnés dans le tableau TAB. 4.2. Dans cette configuration, la température de la particule est alors régie par l’équation 4.2 et admet la solution analytique suivante :

$$T_p(t) = T_{f,in} + (T_{ini} - T_{f,in}) \exp \left[-\frac{k_c \mathcal{N}u_p d_p}{m_p C_{p,p}} t \right]. \quad (4.14)$$

Trois tests sont alors effectués. Dans un premier, la valeur du nombre de Nusselt est fixée sur la particule ($\mathcal{N}u_p = 2$). Pour les deux autres, le nombre de Nusselt n’est pas fixé et est calculé par la loi de Ranz-Marshall [187] puis celle de Feng [72]. FIG. 4.5 compare les résultats des simulations numériques et les valeurs théoriques données par l’équation 4.14. Le modèle DEM–CFD montre un bon accord avec la solution analytique et vient valider la partie granulaire du problème. FIG. 4.5 montre qu’il existe de petits écarts entre la solution numérique et la solution analytique. Ces écarts proviennent de la méthode d’interpolation utilisée.

2.2.2 Couplage fluide ↔ particule (two way)

Ce cas de validation concerne le couplage thermique complet entre la phase fluide et la phase particulaire. Ce couplage est tout d’abord vérifié à l’aide d’un bilan d’énergie sur une particule à température fixe. À nouveau, le système est ici bi-périodique de largeur $L_x = L_y = 20$ et $L_z = 60$. Le maillage est uniforme avec une taille de cellule $\Delta/d_p = 2$. La condition de stabilité du pas de temps (CFL) est dégradée et prise à 0.1.

L’évolution temporelle de la norme L_2 , calculée entre deux itérations successives, des champs de vitesses et thermique est montrée FIG. 4.6. Le régime permanent est atteint lorsque

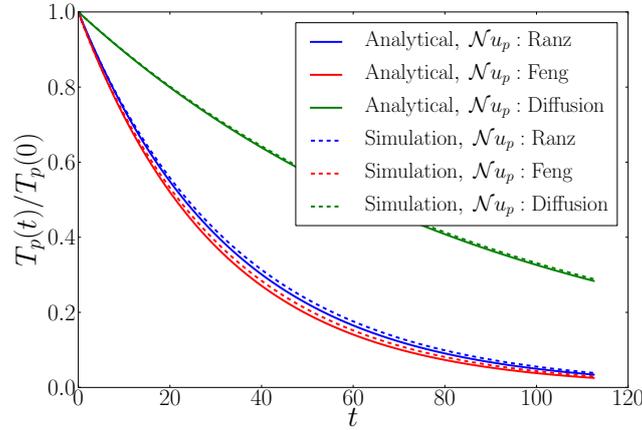


FIGURE 4.5 – Evolution temporelle de la température d’une sphère refroidie par un fluide : comparaison DEM–CFD / solution analytique.

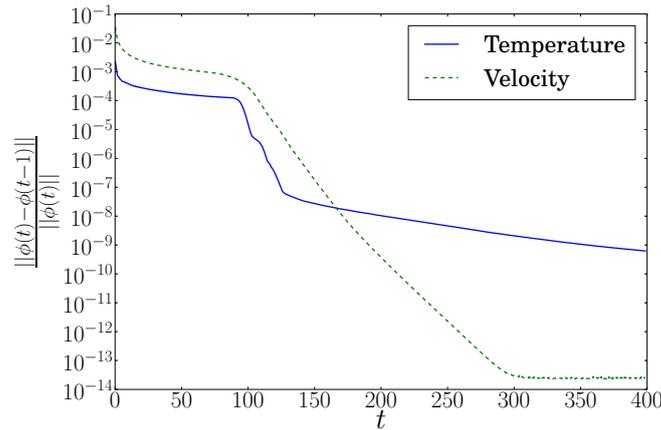


FIGURE 4.6 – Evolution temporelle de la norme L_2 de la vitesse et de la température du fluide. Cette norme est calculée entre deux itérations successives.

la variation temporelle devient inférieure à 10^{-6} .

Ce cas de validation permet de faire une analyse fine des méthodes numériques utilisées. En effet, dans cette configuration il est possible d’estimer l’erreur commise sur le calcul du nombre de Nusselt de la particule et de la température interpolée à la position de la particule. Les paramètres physiques sont les mêmes que ceux donnés dans le tableau TAB. 4.3.

Le tableau TAB. 4.4 montre l’écart entre le bilan chaleur entrée/sortie de la phase fluide et le flux de chaleur de la particule du système pour différents schémas d’interpolation. Les schémas d’interpolation testés sont : Bounding Cubes (BC), Gaussian Kernel avec une taille

TABLE 4.3 – Paramètres physiques dans le cas du transfert thermique pour une particule isolée.

Paramètre	Valeur	Unités
d_p	0.0005	m
ρ_p	8400	kg.m ⁻³
$C_{p,p}$	385	J.kg ⁻¹ .K ⁻¹
k_p	0.025	W.m ⁻¹ .K ⁻¹
L_x	0.02	m
L_y	0.06	m
$U_{c,in}, Re = 50$	0.1	m.s ⁻¹
$U_{c,in}, Re = 5$	0.01	m.s ⁻¹
ρ_c	1000	kg.m ⁻³
μ_c	0.001	Pa.s
$C_{p,c}$	4187	kg.m ⁻³ .K ⁻¹
k_c	0.5	W.m ⁻¹ .K ⁻¹

TABLE 4.4 – Pourcentage d’erreur entre la chaleur échangée dans le fluide et le flux de chaleur de la particule du système. Calculs effectués avec trois méthodes d’interpolation : Bounding Cube (BC), Gaussian Kernel avec une taille de filtre de 1 diamètre (GK-W1) et Gaussian Kernel avec une taille de filtre de 3 diamètres (GK-W3).

BC	0.5%
GK-W1	0.5%
GK-W3	0.5%

de filtre de 1 diamètre (GK-W1) et Gaussian Kernel avec une taille de filtre de 3 diamètres (GK-W3). Le tableau TAB. 4.4 montre qu’avec les trois schémas d’interpolation l’erreur est de 0.5%.

L’effet du schéma d’interpolation peut être différent selon le nombre de Reynolds particulaire. Pour tester ce point, des simulations pour deux régimes d’écoulements à $Re_p = 5$ et $Re_p = 50$ ont été réalisées (voir paramètres physique tableau TAB. 4.3). Lorsqu’on augmente le nombre de Reynolds le maillage peut aussi jouer un rôle. Ainsi plusieurs rapports Δ/d_p sont considérés. La loi de fermeture pour le nombre de Nusselt est donnée par la corrélation de Feng [72]. Côté hydrodynamique, la loi de fermeture du coefficient de traînée est donnée par la corrélation de Schiller-Naumann [202].

L’écart entre le nombre de Nusselt basé sur les propriétés de l’écoulement et la valeur calculée sur la particule est donné dans les tableaux TAB. 4.5 et TAB. 4.6. Ces tableaux contiennent aussi l’écart entre la valeur de température fluide interpolée sur la particule et la température infinie pour une particule isolée.

Pour le nombre de Reynolds $Re_p = 5$, l’écart entre valeur théorique du nombre de Nusselt et valeur calculée sur la particule montre une sous-estimation autour de 10% pour une taille de maille de l’ordre du diamètre de la particule $\Delta/d_p = 1$. Cette erreur diminue rapidement

lorsque la taille de maille augmente et tombe sous 1% pour $\Delta/d_p = 5$. Seule la méthode du support Gaussien avec un support de largeur suffisamment grand (GK-W3) permet de retrouver des valeurs proches du cas théorique même à petits maillages. L'évolution de la température interpolée à la position de la particule montre une tendance similaire mais avec des erreurs plus petites. Il est intéressant de noter que pour le cas $Re_p = 5$, le rôle plus important de la diffusion de chaleur dans le fluide fait augmenter l'écart de la température interpolée sur la particule. Au contraire dans des régimes fortement convectifs, cet écart est grandement réduit.

Pour les régimes convectifs, $Re_p = 50$, la même tendance au maillage est observée, mais les niveaux d'erreurs commises sont moins importants. La réduction des effets diffusifs augmente la précision de l'estimation de la température loin de la particule et donc du nombre de Nusselt. Les noyaux Gaussiens à larges supports sont ici avantaés par rapport à la méthode des cubes englobants.

Bien que cette configuration constitue un cas limite de l'utilisation de l'échelle DEM-CFD, les fortes interactions locales entre particules pour les régimes plus denses vont avoir tendance à réduire les écarts observés. Cependant, à la vue des résultats pour ce cas extrême, le support Gaussien est préféré pour la suite avec un étalement du support d'une largeur de 2 diamètres. Ceci constituant un cas intermédiaire et qui se rapproche des paramètres utilisés par Esteghamatian *et al.* [66].

TABLE 4.5 – Comparaison de l'erreur du nombre de Nusselt et de la température interpolée au centre d'une particule isolée aux valeurs théoriques basées sur les paramètres de simulations : $Re_p = 5$.

	BC		GK-W1		GK-W3	
	Err_{Nu_p} [%]	$Err_{T_{c,int}}$ [%]	Err_{Nu_p} [%]	$Err_{T_{c,int}}$ [%]	Err_{Nu_p} [%]	$Err_{T_{c,int}}$ [%]
$\Delta/d_p = 1.0$	11.78	2.59	11.49	9.38	3.29	1.27
$\Delta/d_p = 2.0$	11.21	2.67	11.21	4.16	4.28	0.32
$\Delta/d_p = 2.7$	5.65	3.48	7.52	2.13	4.43	0.48
$\Delta/d_p = 4.0$	1.57	4.01	1.89	0.64	2.29	0.45
$\Delta/d_p = 5.0$	0.45	4.15	0.56	0.34	0.44	0.05

TABLE 4.6 – Comparaison de l'erreur du nombre de Nusselt et de la température interpolée au centre d'une particule isolée aux valeurs théoriques basées sur les paramètres de simulations : $Re_p = 50$.

	BC		GK1		GK3	
	Err_{Nu_p} [%]	$Err_{T_{c,int}}$ [%]	Err_{Nu_p} [%]	$Err_{T_{c,int}}$ [%]	Err_{Nu_p} [%]	$Err_{T_{c,int}}$ [%]
$\Delta/d_p = 1.0$	5.50	1.46	5.47	1.44	1.54	0.06
$\Delta/d_p = 2.0$	4.67	0.81	4.67	0.34	1.47	0.12
$\Delta/d_p = 2.7$	2.23	0.66	3.04	1.59	1.57	0.26
$\Delta/d_p = 4.0$	0.56	0.26	0.73	0.46	0.81	0.32
$\Delta/d_p = 5.0$	0.13	0.02	0.25	0.24	0.13	0.02

2.3 Couplage fluide-particule : lit de particules

Un dernier cas est extrait des travaux de Patil [171] sur la chauffe d'un lit de particules de cuivre par de l'eau. Les paramètres physiques sont disponibles dans le tableau TAB. 4.7. Le lit est constitué d'un arrangement fixe de $25 \times 25 \times 125$ particules de diamètre $d_p = 3.95\text{mm}$. Le système est ici composé d'une boîte parallélépipédique de dimensions $L_x = L_y = 0.1\text{m}$, $L_z = 1\text{m}$, la porosité globale du système est $\alpha_c = 0.77$. Des parois adiabatiques sont définies sur les extrémités du domaine. La loi de fermeture pour la force hydrodynamique est donnée par Di Felice [54]. De même, le nombre de Nusselt est ici estimé à partir de la corrélation de Gunn [92]. Les équations couplées du bilan transitoire 1D (modèle d'écoulement piston

TABLE 4.7 – Paramètres physiques dans le cas du transfert thermique pour un lit fixe de particules.

Paramètre	Valeur	Unités
d_p	0.00395	m
ρ_p	8400	kg.m^{-3}
$C_{p,p}$	385	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
k_p	0.025	$\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$
L_x	0.1	m
L_y	1	m
$U_{c,in}$	0.1	m.s^{-1}
ρ_c	1000	kg.m^{-3}
μ_c	0.001	Pa.s
$C_{p,c}$	4187	$\text{kg.m}^{-3}.\text{K}^{-1}$
k_c	0.5	$\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$

simple) de l'évolution de la température de chaque phase (voir équation 4.15) complétées des conditions limites et initiales sur la température des deux phases peuvent être résolues analytiquement [171]. Dans ce système, la température adimensionnelle de chaque phase Θ_i évolue avec le temps. Pour la phase fluide, un terme d'échange $\zeta = \frac{6\alpha_p \mathcal{N}u_p}{Pe}$ (comme déjà vu *Chapitre 2*) apparaît dans le bilan. L'évolution de la température de la phase solide est, quant à elle, proportionnelle à la quantité de chaleur échangée côté fluide. Le terme $\chi = \frac{\rho_c C_{p,c} \alpha_c}{\rho_p C_{p,p} \alpha_p}$ qui apparaît dans le bilan enthalpique de la phase dispersée traduit le rapport de capacité thermique volumique des deux phases.

$$\begin{cases} \frac{\partial \Theta_c}{\partial \tau} = -\frac{\partial \Theta_c}{\partial Z} - \zeta(\Theta_c - \Theta_p) \\ \frac{\partial \Theta_p}{\partial \tau} = \zeta \chi (\Theta_c - \Theta_p) \end{cases} \quad (4.15)$$

L'évolution du profil de la température de la phase solide au cours du temps est montrée en FIG. 4.7. Seules les particules situées au cœur du lit et donc indépendantes des effets des parois sont affichées ici. Une comparaison avec la solution analytique du bilan 1D (équation 4.15) est fournie en trait plein pour différents instants. Un très bon accord est observé entre

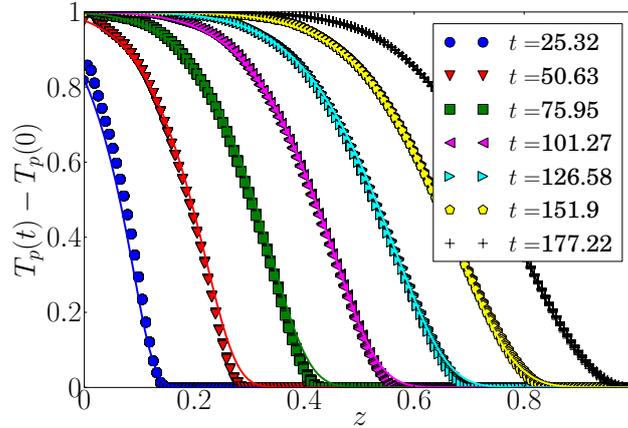


FIGURE 4.7 – Comparaison de l'évolution temporelle du profil de température de la phase solide dans un lit fixe de particules. Symboles : DEM-CFD, Traits plein : Solution du bilan (1D).

les profils simulés et la solution du bilan 1D. De même, un bon accord est aussi observé si la comparaison est faite pour la phase fluide.

3 Comparaison DEM-CFD / PRS

Le modèle DEM-CFD développé dans la plateforme PELIGRIFF, et validé ci-dessus, est à présent utilisé pour effectuer une comparaison avec les simulations à l'échelle microscopique (PRS) (voir *Chapitre 2* et *Chapitre 3*). Dans un premier temps, on s'intéresse à comparer les modèles pour les configurations en lits fixes, puis, dans une seconde partie, pour les lits fluidisés. Comme pour le reste des travaux présentés dans ce manuscrit, l'accent est mis sur les transferts thermiques. L'intérêt de cette démarche est de distinguer les effets du fluide seul et de ses fluctuations locales (configurations fixes) au niveau de la DEM-CFD pour estimer les paramètres thermiques, puis de réintroduire l'agitation des particules et son effet sur les champs de la phase fluide (lits fluidisés). Ainsi, en s'affranchissant des fluctuations liées au mouvement des particules en lits fixes, il est mis en évidence la fluctuation manquante intrinsèque au modèle DEM-CFD. Enfin, l'ajout d'un terme fluctuant vient corriger les fluctuations locales hydrodynamiques et thermiques.

3.1 Lits fixes

L'ensemble des « petits » lits fixes définis en *Chapitre 2* ne sont pas suffisamment grands pour une comparaison directe entre les résultats de la PRS et ceux obtenus par la DEM-CFD. Ainsi, seuls les lits fixes inspirés de la configuration de Deen [49] sont retenus. Pour rappel,

TABLE 4.8 – Paramètres physiques pour les lits fixes dans la configuration de Deen *et al.* [49].

Variable	Valeur	Unité
d_p	0.006	m
T_p	393	K
$T_{c,\infty}$	293	K
$C_{p,c}$	100	J.kg ⁻¹ .K ⁻¹
ρ_c	1	kg.m ⁻³
μ_c	210 ⁻⁵	Pa.s
k_c	0.025	W.m ⁻¹ .K ⁻¹
Δt	[10 ⁻³ ; 10 ⁻⁵]	s
$L_x = L_y$	8 d_p	m
L_z	33 d_p	m
$U_{c,in}$	[0.06; 0.24]	m/s

ces lits sont composés de 1326 sphères fixes de diamètre 6mm (voir tableau TAB. 4.8). La simulation DEM-CFD de cette configuration soulève un problème. En effet, la largeur du lit fixe est de 8 fois le diamètre des particules (voir tableau TAB. 4.8). Or, si comme cela est recommandé, nous imposons dans la DEM-CFD, une taille de maille telle que $\Delta/d_p \approx 1.5$, alors le nombre de cellules de calcul, dans la largeur du lit, est de l'ordre de 5. Ceci est insuffisant pour résoudre correctement les équations de transport du fluide et de sa température. Pour cette raison, on impose seulement, $\Delta/d_p = 1$ ce qui conduit à avoir 8 cellules dans la largeur du lit. Notons que dans la hauteur du lit nous avons $L_z \approx 33d_p$, ainsi $\Delta/d_p = 1$ conduit à 33 cellules.

Il est bon de noter que pour la simulation DEM-CFD, une zone de d'épaisseur égale à 2 cellules de calcul est placée sous la grille d'injection (partie basse du lit). Cette zone a deux avantages. Tout d'abord elle permet d'imposer proprement les conditions d'entrée de l'écoulement (vitesse et pression). Et deuxièmement elle permet de s'affranchir de problèmes numériques liés à l'interpolation et la projection dans la zone proche de la grille.

Le principal avantage à simuler des configurations fixes en DEM-CFD, provient du fait que seules les fluctuations locales du fluide sont responsables de la distribution des paramètres thermiques (flux de chaleur, nombre de Nusselt). Ainsi, les différences observées entre la PRS et la DEM-CFD proviennent uniquement de la formulation moyennée des équations du fluide. Le terme manquant est uniquement lié à la fluctuation de sous-maille non résolue.

Les étapes de projection et d'interpolation sont réalisées à l'aide du noyau Gaussien muni d'un support de largeur $W = 2d_p$, comme cela a été retenu après l'analyse des cas de validations (voir section précédente). De plus, les lois de Gunn [92], Sun [214], Gnielinski [83], Rowe [197], Jeschar [114] et Whitaker [256] sont utilisées pour fermer le problème thermique (voir tableau TAB. 4.9). Ces lois sont choisies car elles présentent des formulations différentes de la contribution de α_c , $\mathcal{R}e_p$ et $\mathcal{P}r$ sur le nombre de Nusselt. Les différences sont alors plus facilement mises en évidence au niveau de la DEM-CFD qu'entre les formulations de Deen *et al.* [45] et Gunn [92] par exemple. À ces lois s'ajoute une fonction extraite des simulations

TABLE 4.9 – Comparaison du nombre de Nusselt moyen dans un lit fixe de particules avec les données issues de la PRS.

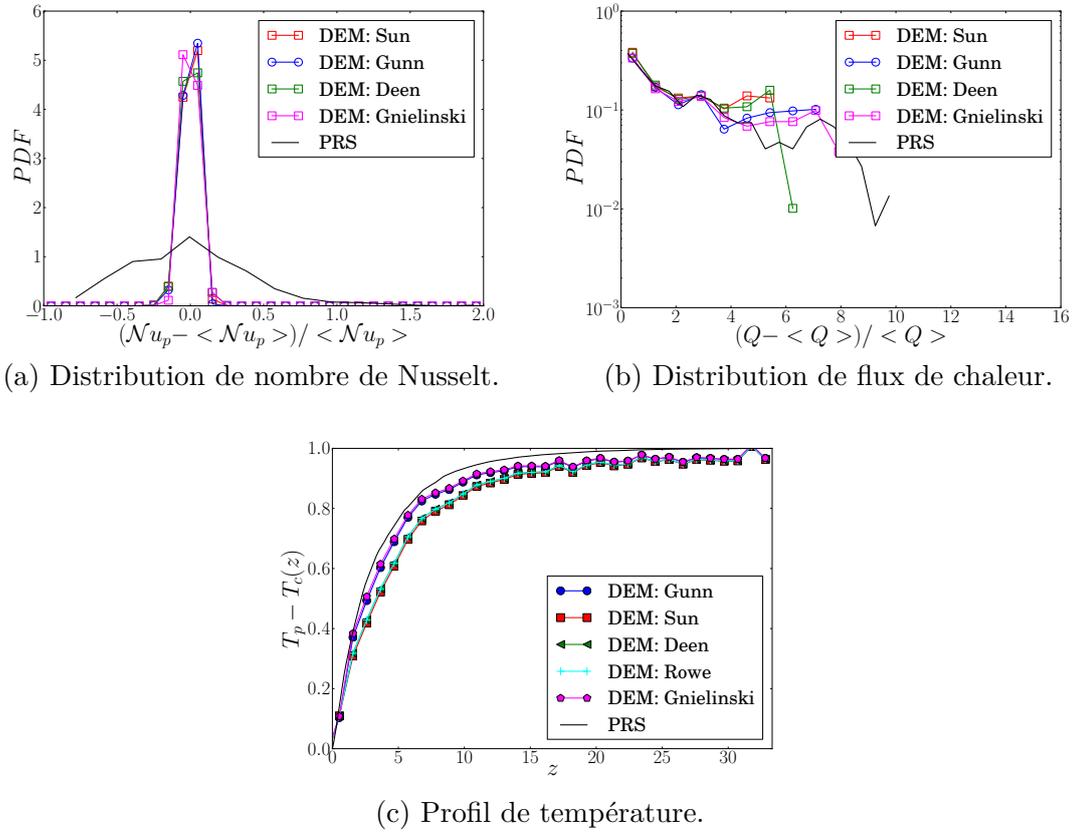
Auteur	$\langle \mathcal{N}u_p \rangle$	$\sqrt{\langle \mathcal{N}u_p'^2 \rangle}$
Gunn	10.30	0.45
Deen	8.25	0.45
Sun	8.12	0.42
Jeschar	7.84	0.35
Gnielinski	10.27	0.51
Rowe	11.31	0.28
Whitaker	5.94	0.19
PRS (1D-balance)	9.18	-
PRS ($\widetilde{T}_c(L_{box} = 2)$)	11.67	5.08

PRS (voir *Chapitre 2*) ayant la meilleure corrélation avec les distributions moyennes observées.

3.1.1 Comparaison directe DEM–CFD/PRS

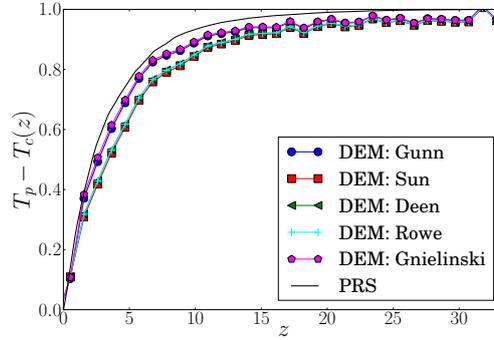
Les simulations avec le modèle DEM–CFD ont été réalisées pour trois nombres de Reynolds : $Re_s = 18, 36$ et 72 et deux nombres de Prandtl : $Pr = 1$ et 5 . Dans le cas isotherme, Esteghamatian *et al.* [67] observent une meilleure estimation de la force hydrodynamique par la loi de Di Felice [54]. Cette loi est donc celle que nous utilisons pour la simulation des lits fixes DEM–CFD.

Dans un premier temps on s'intéresse au comportement thermique macroscopique du lit. Une première caractérisation consiste à comparer le nombre de Nusselt moyen, interpolé à la position des particules, avec les résultats des simulations PRS extraits à l'aide du modèle 1D et des moyennes volumiques locales. Ces résultats, donnés dans le tableau TAB. 4.9, mettent en évidence que les lois de Gunn [92], Deen [45], Gnielinski [83] et Sun [215] sont les plus adaptées pour le cas étudié. De plus, la seconde colonne du tableau TAB. 4.9 montre que la dispersion du nombre de Nusselt particulaire est très faible en DEM–CFD. Ceci est lié à la répartition homogène des sphères dans le lit : une faible dispersion de la porosité et du nombre de Reynolds sont alors interpolés à la position des particules. De plus, les lois de fermeture utilisées sont déterministes et ne produisent qu'une valeur précise pour un couple de données. Ces deux éléments conjoints vont générer une très faible dispersion du nombre de Nusselt dans le lit DEM–CFD. Pour les corrélations choisies ci-dessus, FIG. 4.8a montre les distributions du nombre de Nusselt particulaire mesurées dans le lit fixe. Les résultats des PRS sont aussi représentés pour la comparaison. Nous pouvons remarquer que toutes les corrélations prédisent le même étalement. En revanche, cet étalement est fortement sous-estimé par rapport à celui mesuré dans les PRS. Il semble donc que les flux de chaleur sur les particules soient localement sous-estimés mais que le transfert total, lui, soit correctement prédit par la DEM–CFD. Ceci est confirmé en FIG. 4.8c où nous pouvons voir que la distribution verticale de température



(a) Distribution de nombre de Nusselt.

(b) Distribution de flux de chaleur.



(c) Profil de température.

FIGURE 4.8 – Comportement thermique du lit fixe : comparaison PRS/DEM-CFD.

du lit est relativement bien prédite par la DEM-CFD.

En conséquence, la DEM-CFD n'est pas en mesure de prédire la distribution du flux de chaleur dans le lit (voir FIG. 4.8b). En particulier, les forts écarts au flux de chaleur moyen ne sont pas bien captés. Ainsi, la forme moyennée des équations vient supprimer les effets de sillages et d'interactions de paires générant une moins grande dispersion des valeurs. Ceci induit que la variabilité du nombre du Nusselt observée en PRS n'est pas atteignable par la DEM-CFD dans cette configuration. Afin d'appuyer cette observation, les données issues de la PRS sont filtrées autour du couple de données présentant la valeur moyenne de porosité et nombre de Reynolds du lit : $(\alpha_c, Re_p) = (0.7, 72)$. Une tolérance de 1% autour de la valeur cible de la porosité et de 5% sur le nombre de Reynolds est prise en compte afin de générer suffisamment de données (voir FIG. 4.9). Dans cette figure, le trait plein correspond à la valeur de la corrélation déterministe pour le couple cible choisi. Les traits pointillés correspondent quant à eux, aux valeurs prédites par cette même corrélation en considérant les incertitudes sur Re_p et α_c considérées (respectivement 5% et 1%). Enfin, la distribution du nombre de Nusselt issue de la PRS est montrée en bleu. Il apparaît clairement que la corrélation n'est pas en mesure de reproduire les écarts observés sur le nombre de Nusselt en PRS pour le jeu de données choisi. Le caractère déterministe de la corrélation thermique a le même défaut

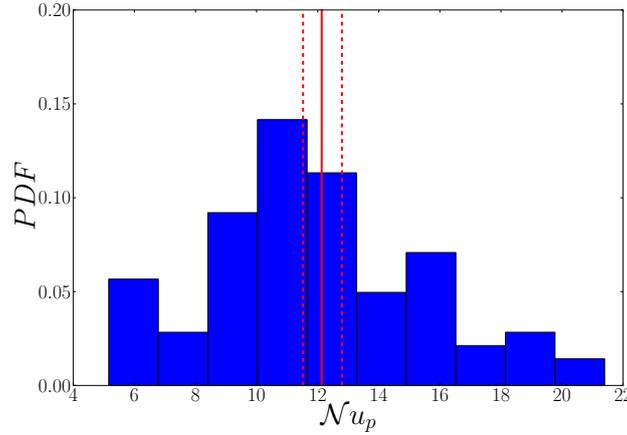


FIGURE 4.9 – Comparaison de la distribution de nombre de Nusselt issue de la PRS avec les valeurs de la corrélation de Gunn [92] autour du couple $(\alpha_c, Re_p) = (0.7, 72)$.

que l'équation fluide moyennée en DEM-CFD : il ne traduit que le comportement moyen des transferts et ne caractérise pas la distribution autour de cette moyenne.

3.1.2 Amélioration du modèle DEM-CFD

Afin de reproduire les fluctuations du nombre de Nusselt observées dans les PRS on propose de les modéliser par une approche stochastique. Dans le cas des lits fixes (voir *Chapitre 2*) les distributions du nombre de Nusselt et de la force peuvent être approchée par une forme Gaussienne ou log-normale.

Dans les deux cas, l'écart-type de la distribution est estimé, puis réintroduit dans la DEM-CFD sous forme d'une fluctuation par rapport aux lois de fermeture définie par $\mathcal{N}u'_p = \mathcal{N}u_p - \mathcal{N}u_{p,corr}$ et $F'_p = F_p - F_{p,corr}$ [162]. Il est important de noter que la déviation est définie par rapport à la valeur de la corrélation au niveau de la particule, et que cette dernière dépend des grandeurs locales α_c et Re_p . Le modèle stochastique doit être à moyenne nulle et d'écart-type équivalent à celui mesuré dans les PRS.

Dans les cas d'une distribution Gaussienne ou log-normale les fonctions de distributions sont données par

$$F'(\psi) \text{ tel que } \begin{cases} \psi = \int_{-\infty}^{F'} f(y) dy = \frac{1}{2} \left(1 + \operatorname{erf} \left(\frac{F'}{\sigma\sqrt{2}} \right) \right), \text{ Gaussienne} \\ \psi = \int_{-\infty}^{F'} f(y) dy = \frac{1}{2} \left(1 + \operatorname{erf} \left[\frac{\ln(F')}{\sigma\sqrt{2}} \right] \right), \text{ Log - normale} \end{cases} \quad (4.16)$$

À partir du tirage d'un nombre aléatoire $\psi \in [0, 1]$ selon une loi uniforme, les expressions de l'équation 4.16 permettent de remonter à la valeur de F' en définissant une distribution qui suit la forme désirée (voir équations 4.18)[162]. L'inconvénient de cette méthode vient de l'es-

timation de l'inverse de fonction erreur $\operatorname{erf}^{-1}(x)$ qui peut prendre du temps numériquement. Cependant, Winitzki [257] propose :

$$\operatorname{erf}^{-1}(x) \approx \left[-\frac{2}{\pi a} - \frac{\ln(1-x^2)}{2} + \sqrt{\left(\frac{2}{\pi a} + \frac{\ln(1-x^2)}{2} \right)^2 - \frac{1}{a} \ln(1-x^2)} \right] \quad (4.17)$$

L'auteur précise que cette approximation donne une erreur relative de $2 \cdot 10^{-3}$ sur la gamme $x \in [0, 1]$ pour une valeur $a = 0.147$.

Une seconde solution consiste à générer directement des distributions du nombre de Nusselt (ou de la force hydrodynamique) suivant la densité de probabilité souhaitée comme la méthode de Box-Muller pour la distribution Gaussienne. Cette méthode peut d'ailleurs être utilisée pour générer la distribution de $\ln(X)$ dans le cas d'une distribution log-normale.

Des tests montrent que les deux méthodologies (voir équations 4.16 et méthode de Box-Muller) donnent un très bon accord entre les distributions générées et la distribution analytique. La méthode Box-Muller prend cependant plus de temps que la méthode décrite ci-dessus avec l'approximation de Winitzki [257] et est donc écartée.

Ainsi, les fluctuations de la force hydrodynamique et du nombre de Nusselt s'écrivent en fonction d'un nombre aléatoire ψ comme indiqué équation 4.18 [162]. Les valeurs de σ_F et $\sigma_{\mathcal{N}u_p}$ sont extraites des simulations numériques PRS (voir *Chapitre 2*).

$$F'(\psi) = \begin{cases} F' = F_{corr} \sqrt{2} \sigma_F \operatorname{erf}^{-1}(2\psi - 1), \text{ Gaussienne} \\ F' = F_{corr} \exp \left[\sqrt{2} \sigma_F \operatorname{erf}^{-1}(2\psi - 1) \right], \text{ Log - normale} \end{cases} \quad (4.18)$$

Cette formulation stochastique est implémentée dans le code PELIGRIF et une comparaison de l'effet de l'inclusion de ce terme est montrée en FIG. 4.10. Il est intéressant de noter que, comme attendu, le terme stochastique ne modifie pas le comportement macroscopique du lit à l'échelle DEM-CFD et reste en bon accord avec la simulation résolue. Les distributions du nombre de Nusselt et du flux de chaleur dans le lit se trouvent cependant nettement améliorées comme indiqué FIGS. 4.10a and 4.10b. Ceci montre la bonne capacité de la méthode dans ce cas.

3.2 Lits fluidisés

À présent nous nous intéressons à la comparaison du modèle DEM-CFD avec les simulations PRS sur les configurations de lits fluidisés liquide-solide. Bien que moins répandus dans les applications industrielles, ils ont l'avantage de produire une fluidisation homogène et qui ne souffre pas d'effets de confinements pour les dimensions atteignables en PRS. Le caractère de pistonage pouvant être observé en cas de confinement dans les PRS ne reflète pas de phénomène physique et n'est donc pas souhaitable pour une analyse de ce genre. De plus, le caractère homogène de ce type de fluidisation permet de réduire la complexité déjà

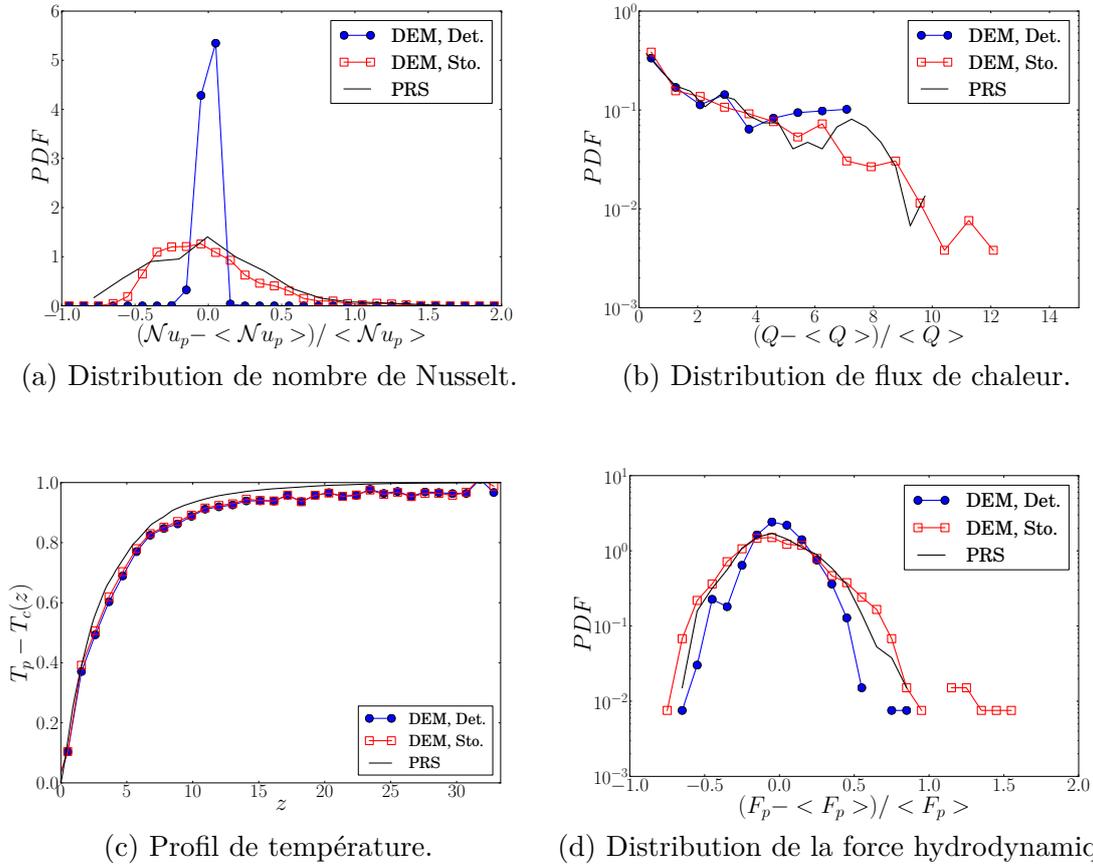


FIGURE 4.10 – Comportement thermique du lit fixe : comparaison PRS/DEM-CFD avec terme fluctuant.

grande du problème où les particules sont mobiles. Les régimes de fluidisations correspondent à des nombres de Reynolds surfaciques compris entre $4 \leq \mathcal{R}e_{in} \leq 11$ pour un nombre de Prandtl $\mathcal{P}r = 10$. Dans cette gamme, la fluidisation est homogène avec des chargements très denses compris entre 0.47 et 0.64. De la même manière que pour les lits fixes, les différences mises en évidence entre les deux échelles tenteront d'être comblées dans une dernière partie. Ici, les fluctuations de vitesse fluide liées au mouvement des particules sont réintroduites à l'échelle DEM-CFD et il devient alors difficile de distinguer la contribution des fluctuations fluides seules et des particules sur les distributions thermiques observées. Cependant, la partie précédente a mis en évidence qu'une partie des fluctuations manquantes est liée à un terme de sous-maille non modélisé en DEM-CFD.

3.2.1 Comparaison directe DEM-CFD/PRS

Les travaux d'Esteghamatian *et al.* [66] sur ces mêmes configurations montrent que la loi de fermeture hydrodynamique de Beetstra [16] est la plus adaptée. De plus, les auteurs

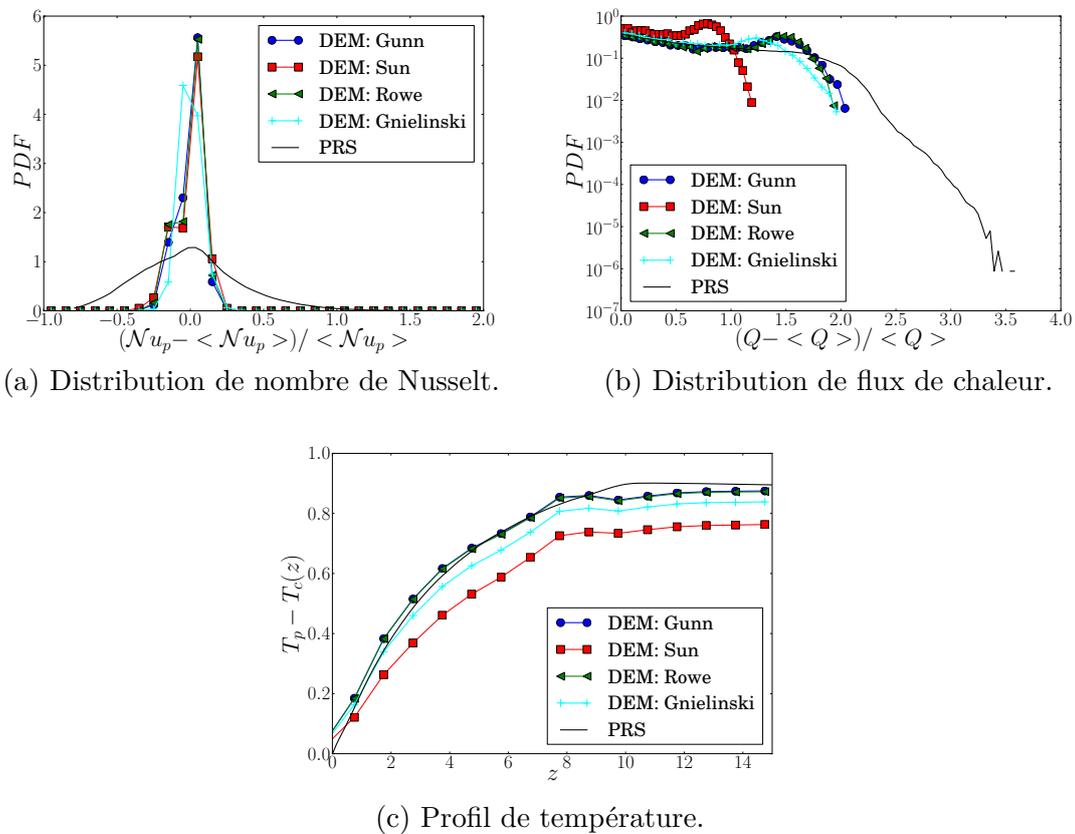


FIGURE 4.11 – Comportement thermique du lit fluidisé $U_{in} = 4U_{mf}$: comparaison PRS/DEM-CFD.

mettent en évidence une sous-estimation de l'agitation des particules dans les simulations DEM-CFD.

De la même manière que pour les lits fixes, les lois de fermeture de Gunn [92], Sun [214], Gnielinski [83] et Rowe [197] sont comparées aux résultats obtenus dans les simulations PRS. FIG. 4.11c indique que les profils de température issus des lois de fermeture de Gunn [92] et Rowe [197] montrent un meilleur accord avec le profil de température PRS que les corrélations de Sun [214] et Gnielinski [83].

Tout comme dans les cas des lits fixes, une large dispersion autour de la valeur moyenne du nombre de Nusselt est observée en simulation résolue alors que la distribution reste centrée dans le cas de la DEM-CFD. L'évolution de l'écart-type sur le nombre de Nusselt est montrée en FIG. 4.11a et met en évidence le caractère constant de cette dispersion et l'incapacité du modèle DEM-CFD à reproduire cette dispersion. De même, la distribution des flux de chaleur n'est pas bien captée à cette échelle (voir FIG. 4.11b).

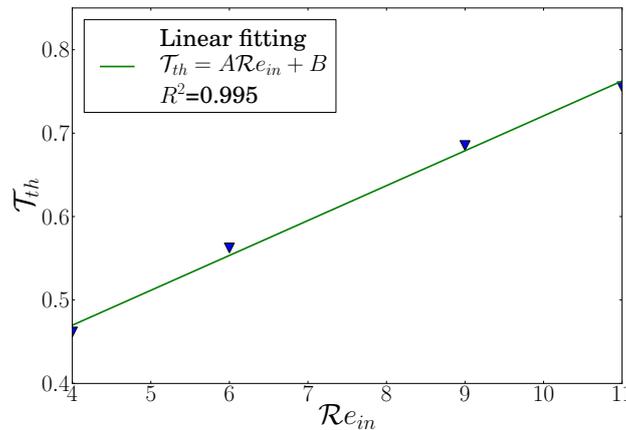


FIGURE 4.12 – Évolution des temps Lagrangiens thermiques en lits fluidisés.

3.2.2 Amélioration du modèle DEM–CFD

Dans cette dernière partie, une amélioration du modèle DEM–CFD est mise en place pour pallier les différences observées entre les échelles PRS et DEM–CFD. En particulier, l’analyse de l’évolution temporelle du flux de chaleur est comparée à l’évolution du mouvement des particules dans le lit.

Pour ce faire, la fonction d’autocorrélation dans les simulations PRS, $R_{\phi,\phi}$, est calculée pour le flux de chaleur des particules dans le lit (voir *Chapitre 3*). Le comportement global de cette fonction suit celle observée pour la force d’interaction fluide-particule : un comportement de mouvement aléatoire aux temps courts et un mouvement convectif à l’échelle du lit fluidisé aux temps longs [67]. Cependant, le temps nécessaire à l’obtention d’une décorrélation complète du flux de chaleur est plus long que dans le cas de la force d’interaction fluide-particule. En conséquence, le temps intégral de décorrélation tel que défini par Esteghamatian [64] \mathcal{T}_{th} du flux de chaleur d’une particule est supérieur aux temps hydrodynamiques \mathcal{T}_{hy} et suit une loi linéaire avec le nombre de Reynolds dans la gamme balayée (voir FIG. 4.12).

Dans les simulations PRS de lits fluidisés, nous avons montré que la fluctuation du nombre de Nusselt suit une distribution log-normale. Ainsi, la valeur de $\mathcal{N}u'_p$ cherchée peut être décrite par ce type de loi. Cependant, étant donné qu’une corrélation temporelle existe, l’approche développée pour les lits fixes ne semble pas adéquate ici. Les résultats prometteurs pour la loi de traînée décrivant la fluctuation comme un événement stochastique incitent à reprendre cette description pour le nombre de Nusselt.

Cette fluctuation de nombre de Nusselt est un signal aléatoire qui doit avoir une distribution log-normale invariante en temps, comme mis en évidence dans les simulations PRS. Cependant, ce terme doit avoir une corrélation temporelle.

Le caractère log-normal de la distribution de ce terme fluctuant induit que la distribution de son logarithme suit une distribution normale. Ainsi, le processus peut être exprimé à l'aide des deux paramètres de la distribution log-normale : sa médiane μ , son écart-type σ , et d'un paramètre a définissant le taux de corrélation du signal d'un instant à l'autre (voir équation 4.20). Cette formulation est réécrite équation 4.20 où $\ln(w(t))$ suit une distribution normale d'écart-type $\sigma\sqrt{1-a^2}$. Écrit avec ce formalisme, la distribution de $\ln(\mathcal{N}u'_p)$ suit effectivement un processus stochastique à bruit-blanc.

$$\mathcal{N}u'_p = \mu \left(\frac{\mathcal{N}u'_p(t-1)}{\mu} \right)^a w(t) \quad (4.19)$$

$$\ln(\mathcal{N}u'_p) = \ln(\mu) + a \left(\ln(\mathcal{N}u'_p(t-1)) - \ln(\mu) \right) + \ln(w(t)) \quad (4.20)$$

L'estimation du paramètre a est obtenu à l'aide des fonctions d'autocorrélations mesurées dans les PRS. Dans le cas du modèle proposé, des éléments sur la forme des fonctions d'autocorrélation pour un temps $\tau = n\Delta t / (d_p / U_{f,in})$ sont décrits. La distribution de la fluctuation du nombre de Nusselt est, par construction, telle que $\ln(Nu')$ suit une loi normale. L'autocorrélation de $\ln(Nu')$ est alors similaire à celle définie par Esteghamatian *et al.* [64] (voir équation 4.25).

$$R_{\ln(\mathcal{N}u'_p), \ln(\mathcal{N}u'_p)}(\tau) = \exp(-\tau/\mathcal{T}), \quad \mathcal{T} = -\Delta t / \ln(a) \quad (4.21)$$

À l'aide de la forme de la fonction d'autocorrélation de $\ln(\mathcal{N}u'_p)$, il est possible d'estimer la forme de la fonction d'autocorrélation de $\mathcal{N}u'_p$. Soit $X_n = \ln(\mathcal{N}u'_p(n\Delta t))$ et $X_{n+k} = \ln(\mathcal{N}u'_p((n+k)\Delta t))$ de moyennes nulles et d'écart-type $\sigma_{X_n} = \sigma_{X_{n+k}}$. Ces deux distributions ont un coefficient de corrélation $R_{X_i,k} = a^{k\Delta t}$. Les distributions $Y_n = \exp(X_n)$ et $Y_{n+k} = \exp(X_{n+k})$ sont donc log-normales. La valeur de l'espérance des distributions Y_n et Y_{n+k} sont rappelées équation 4.23.

$$E[Y_i] = \exp(\sigma_{X_i}^2/2) \quad (4.22)$$

$$E[Y_n Y_{n+k}] = \exp \left[1/2(\sigma_{X_n}^2 + 2R_{X_i,k}\sigma_{X_n}\sigma_{X_{n+k}} + \sigma_{X_{n+k}}^2) \right] \quad (4.23)$$

La fonction d'autocorrélation des deux distributions de $\mathcal{N}u'_p$, $R_{Y_i,k}$ se met sous la forme de l'équation 4.24. En remplaçant les différents termes par les relations fournies dans l'équation 4.23, et avec $R_{Y_i,0} = 1$, il vient l'équation 4.25.

$$R_{Y_i,k} = \frac{cov(Y_n, Y_{n+k})}{cov(Y_n, Y_n)} = \frac{E[Y_n Y_{n+k}] - E[Y_n]E[Y_{n+k}]}{E[Y_n Y_n] - E[Y_n]E[Y_n]} \quad (4.24)$$

$$R_{\mathcal{N}u'_p, \mathcal{N}u'_p}(\tau) = \frac{\exp(\sigma^2 \exp(-\tau/\mathcal{T})) - 1}{\exp(\sigma^2) - 1} \quad (4.25)$$

Ainsi, de la même manière que pour la loi de traînée, les paramètres σ et a sont déterminés à partir de $\sigma_{\mathcal{N}u'_p}$, du temps intégral \mathcal{T}_{th} et du pas de temps de la simulation DEM-CFD. FIG. 4.13 montre l'évolution du signal de $\mathcal{N}u'_p$ ainsi que sa fonction d'autocorrélation. Il est intéressant de noter que la corrélation de $\mathcal{N}u'_p$ décroît en suivant la forme de l'équation 4.25,

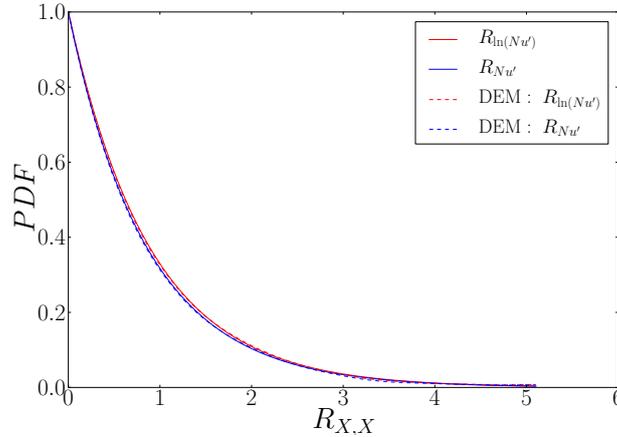


FIGURE 4.13 – Comparaison des fonctions d'autocorrelations de $\mathcal{N}u'_p$ et $\ln(\mathcal{N}u'_p)$ avec les équations 4.25 et 4.21.

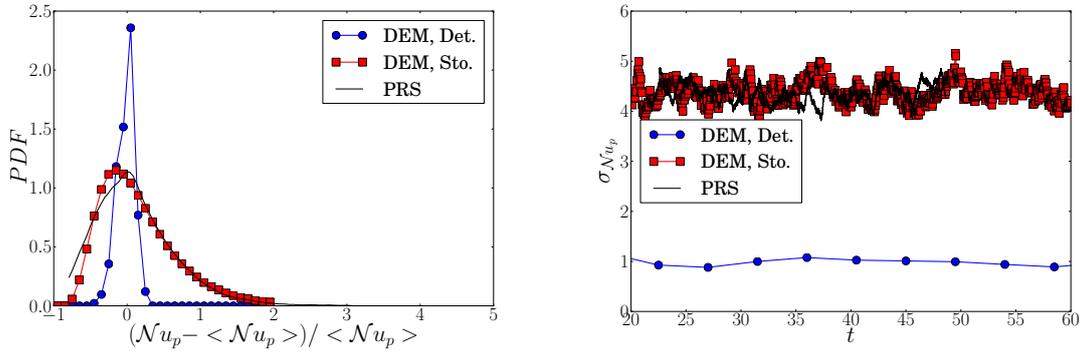
ce qui valide l'implémentation du modèle.

Nous avons testé le modèle pour deux régimes de fluidisations : $2U_{mf}$ et $4.5U_{mf}$. FIG. 4.14c montre l'évolution du profil de température avec et sans modèle stochastique. Il est intéressant de noter que l'ajout de stochastique thermique ne modifie pas le comportement macroscopique du lit pour les échanges fluide-particules. Une comparaison des distributions du nombre de Nusselt ainsi que de l'évolution temporelle de $\sigma_{\mathcal{N}u_p}$ met en évidence la capacité du modèle pour réintroduire les fluctuations perdues à l'échelle DEM-CFD (voir FIG. 4.14a). Ainsi pour les deux régimes testés, l'ajout de la fluctuation du nombre de Nusselt vient modifier la dispersion des échanges thermiques liés aux interactions de sillages pour les forts nombres de Prandtl. De même, FIG. 4.14b présente l'évolution temporelle de l'écart-type de la distribution de nombres de Nusselt dans le lit. Une nette amélioration est observée avec la formulation stochastique.

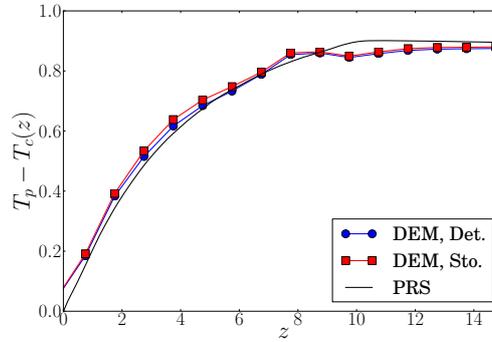
4 Conclusions/Synthèse

L'extension du modèle DEM-CFD à la thermique a été validée sur de nombreuses configurations. De plus, les effets des paramètres liés aux opérations d'interpolation et de projection montrent une meilleure estimation lorsque les tailles de mailles sont grandes. Cependant, l'utilisation d'un noyau Gaussien à la manière de Capecelatro [31] semble permettre de s'affranchir des effets de mailles. Pour autant, le cas d'une sphère isolée met en évidence un effet lié au régime d'écoulement Pe (épaisseur de couches limites). Il pourrait être intéressant, dans une prochaine étape, de définir un noyau de pondération qui permette de s'affranchir de ces effets.

Dans une seconde partie, la comparaison directe PRS/DEM-CFD a mis en évidence les



(a) Distribution de nombre de Nusselt.

(b) Évolution temporelle de l'écart-type de la distribution de $\mathcal{N}u_p$.

(c) Profil de température.

FIGURE 4.14 – Comportement thermique du lit fluidisé : comparaison PRS/DEM-CFD avec terme fluctuant.

limitations de l'approche mésoscopique à reproduire les gradients locaux de température observés en configurations fixes. Les lois de fermeture sont alors améliorées de manière à pourvoir à ces manques à l'aide d'un terme stochastique [162]. Cette méthode semble montrer un excellent accord avec la PRS à la fois pour le coefficient de traînée et pour le nombre de Nusselt. Il est de plus vérifié que l'introduction du modèle stochastique n'induit pas de changement sur le comportement global du lit. À la manière de ce qui a été montré pour les lits fixes, une piste d'amélioration de ce modèle tient à la prise en compte des interactions des particules proches et permettrait d'être plus fidèle aux simulations PRS. Ainsi, une caractérisation plus fidèle de la dispersion au niveau PRS permettrait d'améliorer la précision et la robustesse du modèle et de l'approche.

La comparaison des cas en lits fluidisés montre les mêmes limitations qu'en lits fixes. Cependant, un aspect dynamique est à ajouter au modèle de fermeture stochastique, qui semble alors capable de reproduire les observations PRS. Ces premiers résultats doivent maintenant être améliorés dans d'autres régimes. De plus, le principal point noir de cette méthode réside dans la nécessité de connaître a priori les résultats PRS qui devront être reproduits à l'échelle

DEM-CFD.

Ainsi, le principal challenge pour l'obtention d'un modèle plus robuste est d'améliorer la caractérisation du transfert de quantité de mouvement et du transfert thermique au niveau PRS afin de fournir un modèle plus prédictif. Ceci passe par la mise au point d'un descripteur de la microstructure et de l'écoulement plus précis que le couple de paramètres $(\alpha_c, \mathcal{R}e_p)$ utilisé jusqu'alors. Une méthode dans l'esprit de celle proposée par Akiki [7] semble être un bon candidat dans ce sens.

Cependant, la méthodologie proposée permet de mettre au jour les manques intrinsèques du modèle DEM-CFD sur les fluctuations locales de l'écoulement et leurs effets sur les transferts thermiques en lits fixes et en lits fluidisés. Ainsi, la réintroduction de la contribution de sous-maille perdue dans les configurations fixes vient combler la perte d'information de la DEM-CFD. Seulement une partie de cette contribution est issue de la formulation des équations moyennée de la DEM-CFD, d'autres pouvant être liées aux méthodes de projection/interpolation. De même, dans le cas fluidisé, la fluctuation rajoutée comble directement la différence observée entre la DEM-CFD et la PRS. Cependant, il faut noter que le mouvement des particules induit des fluctuations locales dans la partie fluide qui viennent s'ajouter à celles purement liées à l'écoulement (équations fluide moyennées). Dissocier la contribution des particules de celle liée aux équations du fluide permettrait d'améliorer le modèle de manière à ne rajouter que la contribution de sous-maille non résolue à cette échelle.

Conclusion et perspectives

Sommaire

1	Conclusion	223
2	Perspectives	225

1 Conclusion

Ce travail porte sur la caractérisation des transferts thermiques dans des systèmes fluide-particules par simulations numériques. De telles configurations mettant en jeu des interactions hydrodynamiques, thermiques et / ou réactives se retrouvent dans de nombreux pans d'applications industrielles. La compréhension de ces couplages, à toutes les échelles du système est un point d'amélioration pour le dimensionnement, le pilotage et l'efficacité de ces unités. Dans ce travail, les transferts thermiques sont étudiés tant localement que de manière macroscopique. En particulier, le paramètre physique quantifiant l'intensité des transferts thermiques – le nombre de Nusselt – est estimé et comparé au niveau de chaque particule à deux niveaux d'échelles : simulations résolue et moyennée (stratégie multi-échelles).

Dans une première partie de ce travail, le contexte physique des lits fluidisés, les régimes d'écoulement et les transferts thermiques s'y opérant sont décrits. À l'aide de ces informations, une série de validations montre la gamme de paramètres pouvant être raisonnablement simulée et définit des règles sur la précision des solutions. Dans les cas largement documentés de la littérature, un bon accord est obtenu. Le cas de particules en interactions hydrodynamiques et thermiques est moins présent dans la littérature. En particulier, il est mis en évidence que la convergence numérique du flux de chaleur global n'est pas un critère suffisant pour décrire la précision de la solution du fait de compensation d'erreurs locales. La quantification de la précision de la solution numérique doit alors être menée sur chaque particule indépendamment.

Cette connaissance des limites et de la précision de la méthode employée, permet dans un second temps, de définir des systèmes d'étude de complexité croissante afin de mettre en évidence l'impact des interactions hydrodynamiques sur les transferts thermiques. En particulier, une étude sur un alignement de sphères dont une seule particule est thermiquement active donne des indices quant à l'effet de l'interaction hydrodynamique sur la modification

des transferts thermiques locaux. Des changements sur la forme et les paramètres des zones de recirculation en aval/amont des sphères viennent modifier les gradients de température à la surface des particules. Ainsi, il est possible, dans certaines configurations fortement convectives (souvent rencontrées en lits fluidisés), d'avoir des modifications des transferts le long de l'écoulement du fluide (particules en aval), mais aussi en amont de la zone thermiquement active. Des effets de blocage/augmentation des transferts locaux sont aussi mis en évidence. Dans un troisième temps, des réseaux aléatoires de particules fixes sont étudiés en s'inspirant des cas de la littérature. La description de l'écoulement permet alors d'estimer localement le potentiel d'échange d'une particule avec son environnement proche (et ainsi de calculer le nombre de Nusselt). L'effet d'interaction thermique du sillage avec les particules en aval, suggéré dans la configuration de particules alignées est confirmé pour les particules proches dans les lits fixes. L'impact de l'utilisation d'une fonction de pondération pour déterminer les grandeurs fluides locales ne montre pas d'effet particulier sur la valeur moyenne mais influe sur l'étalement des distributions statistiques. Il convient alors, dans la suite, de définir une méthodologie permettant d'estimer ces grandeurs locales en fonction de la microstructure et du régime d'écoulement. De plus, la porosité, le nombre de Reynolds et le nombre de Prandtl ne semblent pas être des descripteurs suffisants pour caractériser pleinement les transferts thermiques. La taille du support utilisé pour définir les moyennes est aussi impactant, mais varie peu, une fois la microstructure locale proprement capturée. Cependant, des supports trop larges vont éliminer les effets locaux du fait de leur taille.

Une seconde étape de ce travail s'intéresse à l'étude numérique de la partie dense de petits lits fluidisés liquide–solide par simulation résolue. Par souci d'économie d'utilisation des ressources informatiques, une première partie montre que la fluidisation bi-périodique liquide–solide garde les mêmes propriétés macroscopiques et statistiques lorsque le nombre de particules varie de 500 à 3000 particules. L'étude de plusieurs régimes de fluidisation sur ce système minimal permet de caractériser les effets dynamiques du transfert thermique. En particulier, les temps Lagrangiens sont extraits à des fins de modélisation à l'échelle DEM-CFD. Une étude croisée de la dynamique des composantes du nombre de Nusselt montre que les évolutions temporelles du flux de chaleur et de la température locale sont fortement corrélées. Au contraire, la corrélation temporelle croisée du flux de chaleur et de la température de mélange (bilan 1D) ne le sont pas. Enfin, une série de lits fixes est extraite des simulations fluidisées en figeant les positions des particules à certains instants. Une comparaison lits fixes/lits fluidisés permet alors de quantifier l'effet de l'agitation des particules sur la distribution de vitesses locales de la phase fluide et sur la distribution de la force hydrodynamique. Une diminution de l'ordre de 3% à 6% est observée pour le transfert thermique. Dans un dernier temps, un des cas de fluidisation bi-périodique est repris en y ajoutant des parois. Ceci a pour but de déterminer l'impact des murs sur la dynamique des transferts hydrodynamiques et thermiques. Après avoir vérifié que le régime de fluidisation était similaire au cas bi-périodique, il est clairement montré une diminution de l'agitation et de la vitesse moyenne des particules en proche paroi. Ceci constitue un élément d'amélioration des modèles pour les échelles DEM-CFD et Euler-Euler. Au niveau thermique, la réduction de la vitesse moyenne s'accompagne d'un potentiel d'échange thermique plus important proche des murs et résulte en des flux de chaleurs identiques au cœur du lit. Une légère diminution des nombres de Nusselt est alors observée (par opposition avec les observations en lits fixes) dans cette zone. Une description

plus précise de l'estimation des transferts thermiques est cependant nécessaire pour confirmer ces observations.

Enfin, dans un dernier chapitre, l'extension du modèle DEM–CFD de la plateforme PELGRIFF pour les transferts thermiques est présentée et validée sur des cas documentés de la littérature et avec des solutions analytiques. En s'inspirant des travaux de Municchi [162] et Esteghamatian *et al.* [64], une comparaison directe PRS/DEM–CFD est ensuite menée. Il est montré que la forme spatialement moyennée des équations du modèle DEM–CFD réduit l'étalement des distributions des paramètres thermiques dans les lits (fixes et fluidisés) à cette échelle. Une formulation stochastique simple est alors proposée pour pallier ces manques dans le cas fixe. Cette amélioration permet alors de reproduire les manques observés par rapport à la PRS. Dans le cas fluidisé, le caractère dynamique est ajouté de manière à se rapprocher des observations en simulations résolues et montre alors une meilleure estimation des perturbations locales sans affecter le comportement macroscopique du lit. Le principal challenge pour la suite réside dans l'obtention d'un modèle plus robuste et prédictif pour les fluctuations hydrodynamiques et thermiques. Ceci passe par une caractérisation plus précise du régime d'écoulement et de la microstructure au niveau PRS à l'aide de descripteurs plus performants que ceux utilisés dans ces travaux [7].

2 Perspectives

En premier lieu, l'étude des transferts thermiques par simulations résolues doit désormais être étendue à d'autres régimes d'écoulement. En particulier, l'étude d'écoulements plus hétérogènes, plus agités ou à des nombres de Reynolds plus élevés doit être menée afin de comprendre les couplages forts entre hydrodynamique et thermique. À l'image de Feng *et al.* [74], l'extension à ces régimes permettrait de comprendre comment les hétérogénéités spatiales à l'échelle du lit influencent les transferts thermiques. Quantifier l'impact de l'agitation des particules sur les transferts thermiques est aussi une question qui peut trouver des réponses avec ces configurations (par comparaison lits fixes / lits fluidisés par exemple). Dans un second temps, la simulation de systèmes gaz-particules dont la dynamique est plus complexe que celle en fluidisation liquide–solide revêt un intérêt pour la modélisation : caractériser les différences sur la dynamique de l'écoulement, sur celle des particules et sur les transferts ainsi que la transition (importance des effets visqueux) entre ces régimes est encore une question ouverte. De plus, ce type de simulation permettrait de comprendre la formation de clusters de particules et leur impact sur les transferts thermiques.

Une autre piste d'amélioration repose sur les premiers résultats encourageants de la formulation du nombre de Nusselt fluctuant. En particulier, des simulations sur des configurations plus nombreuses et balayant un spectre de nombre de Reynolds, nombre de Stokes, porosité et nombre de Prandtl pourraient permettre de nourrir la description du modèle proposé. Ceci permettrait de définir, à l'image du nombre de Nusselt moyen, des corrélations sur les propriétés des fluctuations hydrodynamiques et thermiques. Esteghamatian [67] soulève cependant que cette formulation reste une adaptation *ad hoc*, et réaliser des simulations pour autant de

paramètres est un travail lourd. Cependant, la réduction du système d'étude proposé dans ce travail rend plus abordable cette opération, bien que les ressources nécessaires soient encore très coûteuses. En particulier, une piste qui permettrait d'éviter ces gros calculs consisterait à estimer si des simulations tri-périodiques de sédimentation sont similaires aux régimes des lits fluidisés d'intérêt. En termes de résolution de la thermique, les conditions limites utilisées par Sun *et al.* [215] permettent d'étendre l'étude des transferts thermiques aux domaines tri-périodiques. Enfin, de manière à réduire encore les besoins en ressources de calcul, des améliorations au niveau des simulations résolues du code PELIGRIFF telles que le couplage avec une méthode à raffinement de maillage (AMR) peuvent être employées. D'un autre côté, il apparaît ici que le véritable défi concernant les lois de fermeture thermique ne consiste plus à définir la variabilité du nombre de Nusselt moyen aux paramètres tels que la porosité, ou le nombre de Péclet mais à définir avec précision la distribution du nombre de Nusselt afin de la réintroduire au niveau DEM-CFD. Cette caractérisation nécessite de définir des descripteurs plus représentatifs de la microstructure et de l'écoulement. Une autre piste, proposée par Akiki *et al.* [7], repose sur l'estimation du champ fluide non perturbé tel que décrit dans Maxey et Riley [152]. La sommation des contributions dans un milieu dispersé peut être conceptuellement étendue aux transferts thermiques. Dans un deuxième temps, une partie de ce travail s'est attachée à mettre en évidence l'impact de parois solides sur la dynamique et le comportement thermique des particules. Une comparaison directe entre PRS et DEM-CFD permettrait de mettre en évidence les analogies / différences entre les deux modèles au niveau des parois. En particulier, la comparaison du traitement de la phase fluide en proche paroi et son impact sur les statistiques des particules est un point d'amélioration de l'échelle mésoscopique. Enfin, dans un troisième temps, l'étude du transfert thermique mur-lit fluidisé à l'échelle résolue et DEM-CFD permettrait de valider / réfuter les modèles de fermeture déjà existants [137, 173, 209]

L'effet de la convection naturelle, et, en particulier, la quantification de sa contribution sur les transferts est aussi une piste d'étude. Bien que les propriétés du fluide (type eau ou air) ne montrent pas de larges variations d'expansion thermique pour des différences de température pouvant atteindre 50K, les gradients locaux au niveau des particules peuvent générer des écoulements secondaires pouvant impacter le mouvement des particules si leur nombre de Stokes est suffisamment faible. Ainsi, il est intéressant d'essayer de quantifier l'effet du terme de Grashof dans les équations d'énergie au niveau PRS sur la dynamique du lit, la porosité moyenne et les transferts thermiques. Des critères sur le nombre de Richardson, $Ri = Gr/Re^2$ apparaissant dans les équations et traduisant l'intensité relative de la flottabilité et de la convection forcée peuvent être identifiés pour caractériser les zones d'importances de ce phénomène. Dans le cas de particules au repos, Wachs [249] observe le mouvement ascendant d'un lit de particules pour certains nombres de Grashof. Dans le cas d'une particule isolée, ces effets sont observés au niveau expérimental [35, 264] pour le cas de convection naturelle s'opérant à co-courant avec la convection forcée. Une étude numérique de Musong et Feng [163] a étudié ce problème à l'aide d'une méthode IBM pour des nombres de Reynolds compris entre $10 \leq Re \leq 100$ et des nombres de Richardson dans la gamme $0 \leq Ri \leq 5$. L'angle d'inclinaison est varié de manière à ce que la convection naturelle s'ajoute ou s'oppose à l'écoulement. Étendre ces études à des systèmes multi-particules fixes ou non, permettrait de quantifier les changements locaux et/ou macroscopiques dans les lits de particules.

L'ensemble des travaux conduits ici supposent une température constante à la surface des particules. Le cas du transfert de matière est plus complexe car il peut être associé à une réaction chimique. Dans ce cas, la concentration à la surface est non-uniforme et peut varier dans le temps. Si les transferts thermiques et les transferts externes d'espèces chimiques suivent les mêmes lois dans le cas de réactions infinies, la gamme de validité de ces hypothèses pour les procédés industriels n'est pas toujours vérifiée. Ainsi, un point clé de la caractérisation des transferts dans les unités réside dans la compréhension des couplages entre la cinétique chimique et la compétition entre transferts externes et transferts internes au niveau des particules. Ces comparaisons font intervenir le module de Thiele (ou le nombre de Damkholer). L'étude par simulation résolue de ces transferts pour des particules sphériques ou pour tous types de particules est un élément clé de la compréhension pour la modélisation numérique des écoulements fluide-particules réactifs. Le cas de particules en interactions pour les transferts internes et externes est à ce jour peu étudié et ouvre un large champ de recherche. En particulier l'effet du module de Thiele sur le nombre de Nusselt / Sherwood effectif d'une particule ou d'un ensemble de particules ainsi que leurs impacts couplés aux autres paramètres α_c , Re , Pr / Sc n'est pas à ce jour établi. Pigeonneau *et al.* [176] ont étudié le cas d'une réaction réversible à la surface d'une bulle dans les régimes de Stokes et obtiennent une limite asymptotique du nombre de Sherwood en fonction de la constante d'équilibre, du nombre de Damkholer, de Péclet et du rapport de diffusivités entre la particule et le fluide. Des travaux sont actuellement en cours au sein de l'équipe PELIGRIF et de l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse pour implémenter une méthode « sharp interface » permettant le couplage précis interne-externe sur les transferts réactifs. L'extension de ces travaux aux systèmes multi-particules donnerait un élément de réponse sur la physique en jeu dans les réacteurs à lits fixes réactifs.

Enfin, dans l'optique d'une stratégie multi-échelles, une comparaison du modèle DEM-CFD et du modèle à deux fluides (TFM) sur une configuration commune peut être mise en place. Les termes de fermeture du TFM peuvent alors être directement extraits des simulations DEM-CFD et réincorporés au niveau de la TFM. Les travaux de Capecelatro [29, 30] sur la turbulence de la phase dispersée montrent l'intérêt de cette démarche. Ceci peut ensuite être étendu au niveau des transferts thermiques et réactifs.

Bibliographie

- [1] A. R. ABRAHAMSEN et D. GELDART. « Behaviour of gas-fluidized beds of fine powders Part II. Voidage of the dense phase in bubbling beds ». In : *Powder Technology* 26 (1980), p. 47–55 (cf. p. 15, 16).
- [2] A.R. ABRAHAMSEN et D. GELDART. « Behaviour of gas-fluidized beds of fine powders Part III. Effective thermal conductivity of a homogeneously expanded bed ». In : *Powder Technology* 26 (1980), p. 57–65 (cf. p. 15).
- [3] A.R. ABRAHAMSEN et D. GELDART. « Behaviour of gas-fluidized beds of fine powders Part I. Homogeneous expansion ». In : *Powder Technology* 26 (1980), p. 35–46 (cf. p. 15).
- [4] A.R. ABRAHAMSEN et D. GELDART. « Homogeneous fluidization of fine powders using various gases and pressures ». In : *Powder Technology* 19 (1978), p. 133–136 (cf. p. 15, 16).
- [5] A. AGUILAR-CORONA, R. ZENIT et O. MASBERNAT. « Collisions in a liquid fluidized bed. » In : *International journal of multiphase flow* 37 (7) (2011), p. 695–705 (cf. p. 189).
- [6] Alicia AGUILAR-CORONA. « Agitation des particules dans un lit fluidisé liquide. Etude expérimentale. » Thèse de doct. MEGEP, 2008 (cf. p. 129, 148).
- [7] G. AKIKI, T.L. JACKSON et S. BALACHANDAR. « Pairwise interaction extended point-particle model for a random array of monodisperse spheres ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 813 (2017), p. 882–928 (cf. p. 86, 88, 91, 169, 222, 225, 226).
- [8] T.B. ANDERSON et R. JACKSON. « A fluid mechanical description of fluidized beds ». In : *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals* 6(4) (1967), p. 527–539 (cf. p. 2, 41, 50, 73, 128, 133).
- [9] R. ANDREUX et al. « New description of fluidization regimes ». In : *American Institute of Chemical Engineers Journal* 51–4 (2005), p. 1125–1130 (cf. p. 18).
- [10] Sourabh V APTE et Justin R FINN. « A variable-density fictitious domain method for particulate flows with broad range of particle–fluid density ratios ». In : *Journal of Computational Physics* 243 (2013), p. 109–129 (cf. p. 128).
- [11] F. AUGIER, F. IDOUX et J.Y. DELENNE. « Numerical simulations of transfer and transport properties inside packed beds of spherical particles ». In : *Chemical Engineering Science* 65 (2010), p. 1055–1064 (cf. p. 32, 57).
- [12] P. BAGCHI, M.Y. HA et S. BALACHANDAR. « Direct numerical simulation of flow and heat transfer from a sphere in a uniform cross-flow. » In : *Journal of Fluids Engineering* 123 (2001), p. 347–358 (cf. p. 97).
- [13] E. BARNEA et J. MIZRAHI. « A generalised approach to the dynamics of particulate systems, part II : Sedimentation and fluidisation of clouds of spherical liquid drops ». In : *The Canadian Journal of Chemical Engineering* 53 (1975), p. 461–468 (cf. p. 53).

- [14] E. BARNEA et J. MIZRAHI. « A generalized approach to the fluid dynamics of particulate systems, part I : General correlation for fluidization and sedimentation in solid multiparticle systems ». In : *Chemical Engineering Journal* 5 (1973), p. 171–189 (cf. p. 53).
- [15] R. BEETSTRA, M.A. van der HOEF et J.A.M. KUIPERS. « Drag Force of intermediate Reynolds number flow past mono- and bidisperse arrays of spheres ». In : *American Institute of Chemical Engineers Journal* 53–2 (2007), p. 489–501 (cf. p. 40, 53).
- [16] R. BEETSTRA, M.A. Van der HOEF et J.A.M. KUIPERS. « Numerical study of segregation using a new drag force correlation for polydisperse systems derived from Lattice-Boltzmann simulations ». In : *Chemical Engineering Science* 62 (2007), p. 246–255 (cf. p. 36, 44, 53, 57, 168, 216).
- [17] M.J. BERGER et J. OLIGER. « Adaptative mesh refinement for hyperbolic partial-differential equations. » In : *Journal of Computational Physics*. 53(3) (1984), p. 484–512 (cf. p. 46).
- [18] Manuel BERNARD. « Approche Multi-échelle pour les écoulements fluide-particules ». Thèse de doct. MEGEP, 2014 (cf. p. 2, 41, 45, 50, 51, 53, 198, 199, 203).
- [19] J.M.S. BOTTERILL, Y. TEOMAN et K.R. YUREGIR. « The effect of operating temperature on the velocity of minimum fluidization, bed voidage and general behaviour ». In : *Powder Technology* 31 (1982), p. 101–110 (cf. p. 14).
- [20] G. BOUCHET, M. MEBAREK et J. DUSEK. « Hydrodynamic forces acting on a rigid fixed sphere in early transitional regimes. » In : *European Journal of Mechanics B/Fluids* 5 (2006), p. 321–336 (cf. p. 101).
- [21] Wim-Paul BREUGEM. « A second-order accurate immersed boundary method for fully resolved simulations of particle-laden flows ». In : *Journal of Computational Physics* 231 (2012), p. 4469–4478 (cf. p. 128).
- [22] T.E. BROADHURST et H.A. BECKER. « Onset of fluidization and slugging in beds of uniform particles ». In : *American Institute of Chemical Engineers Journal* 21–2 (1975), p. 238–247 (cf. p. 15, 16).
- [23] P. BUFFIÈRE et R. MOLETTA. « Collision frequency and collisional particle pressure in three-phase fluidized beds. » In : *Chemical Engineering Science* 55 (2000), p. 5555–5563 (cf. p. 6, 189).
- [24] K.A. BUIST et al. « A combined experimental and simulation study of fluid-particle heat transfer in dense arrays of stationary particles ». In : *Chemical Engineering Science* (2016) (cf. p. 3, 97, 108, 113, 118–120, 123).
- [25] K.A. BUIST et al. « On an efficient hybrid soft and hard sphere collision integration scheme for DEM. » In : *Chemical Engineering Science*. 153 (2016), p. 363–373 (cf. p. 51).
- [26] A. BURGGRAEVE et al. « Understanding Fluidized-Bed Granulation ». In : *Pharmaceutical Technology* 35 (2011), p. 63–67 (cf. p. 1).

- [27] J.P. CALTAGIRONE et S. VINCENT. « Sur une méthode de pénalisation tensorielle pour la résolution des équations de Navier-Stokes ». In : *C. R. Acad. Sci. Paris* 329 (2001), p. 607–613 (cf. p. 45, 128).
- [28] J. CAPECELATRO, O. DESJARDINS et R.O. FOX. « Investigating multiphase turbulence statistics of large-scale two-way coupled gravity-driven flows ». In : *ASME 2014 4th Joint US-European Fluids Engineering Division Summer Meeting collocated with the ASME 2014 12th International Conference on Nanochannels, Microchannels, and Minichannels*. 21511. American Society of Mechanical Engineers. 2014 (cf. p. 91).
- [29] J. CAPECELATRO, O. DESJARDINS et R.O. FOX. « Strongly coupled fluid–particle flows in vertical channels. I. Reynolds–averaged two–phase turbulence statistics ». In : *Physics of Fluids* 28 (2016), p. 033306 (cf. p. 227).
- [30] J. CAPECELATRO, O. DESJARDINS et R.O. FOX. « Strongly coupled fluid–particle flows in vertical channels. II. Turbulence modeling ». In : *Physics of Fluids* 28 (2016), p. 033307 (cf. p. 227).
- [31] Jesse CAPECELATRO et Olivier DESJARDINS. « An Euler-Lagrange strategy for simulating particle-laden flows ». In : *Journal of Computational Physics* 238 (2013), p. 1–31 (cf. p. 50, 51, 220).
- [32] A. CHEHBOUNI et al. « Effets de différents paramètres sur les vitesses de transition de la fluidisation en régime turbulent ». In : *Canadian Journal of Chemical Engineering* 73 (1995), p. 41–50 (cf. p. 17–19).
- [33] J.C. CHEN. « Handbook of fluidization and fluid-particle systems ». In : sous la dir. de CRC PRESS. Marcel Dekker, 2003. Chap. Heat Transfer, p. 252–293 (cf. p. 21, 30, 31).
- [34] H.C. CHUANG, T. JONES et K. BÉRUBÉ. « Combustion particles emitted during church services : Implications for human respiratory health ». In : *Environment International* 40 (2012), p. 137–142 (cf. p. 1).
- [35] S.W. CHURCHILL. « A comprehensive correlating equation for laminar, assisting, forced and free convection. » In : *American Institute of Chemical Engineers Journal* 23 (1) (1977), p. 10–16 (cf. p. 226).
- [36] R. CLIFT, J.R. GRACE et M.E. WEBER. *Bubbles, drops and particles*. Academic Press, 1978 (cf. p. 2, 23, 24, 57, 63, 96, 102, 104, 108).
- [37] E. CLIMENT et M.R. MAXEY. « Numerical simulations of random suspensions at finite Reynolds numbers ». In : *International Journal of Multiphase Flow* 29 (2003), p. 579–601 (cf. p. 128).
- [38] R. COLTTERS et A. L. RIVAS. « Minimum fluidization velocity correlations in particulate systems ». In : *Powder Technology* 147 (2004), p. 34–48 (cf. p. 15).
- [39] J. COTELA-DALMAU, R. ROSSI et A. LARESE. « Simulation of two and three-dimensional viscoplastic flows using adaptive mesh refinement. » In : *International journal for numerical methods in engineering*. (2017) (cf. p. 46).
- [40] M. COUSSIRAT et al. « Performances of stress-transport models in the prediction of particle-to-fluid heat transfer in packed beds ». In : *Chemical Engineering Science* 62 (2007), p. 6897–6907 (cf. p. 32).

- [41] P.A. CUNDALL et O.D.L. STRACK. « A discrete numerical model for granular assemblies ». In : *Geotechnique* 29 (1979), p. 47–65 (cf. p. 40, 50, 51).
- [42] C. DAN et A. WACHS. « Direct Numerical Simulation of particulate flow with heat transfer ». In : *International Journal of Heat and Fluid Flow* 31 (2010), p. 1050–1057 (cf. p. 2, 40, 48, 49, 58, 60, 62, 130).
- [43] J.F. DAVIDSON et D. HARRISON. *Fluidised particles*. Cambridge University Press, 1963 (cf. p. 198).
- [44] G. D’AVINO et M.A. HULSEN. « A comparison between a collocation and weak implementation of the rigid-body motion constraint on a particle surface. » In : *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 64 (2010), p. 1014–1040 (cf. p. 93).
- [45] N. G. DEEN et J.A.M. KUIPERS. « Direct numerical simulation of fluid flow accompanied by coupled mass and heat transfer in dense fluid-particle systems ». In : *Chemical Engineering Science* 116 (2014), p. 645–656 (cf. p. 2, 32, 39, 44, 57–59, 71–73, 120–123, 133, 142, 167, 211, 212).
- [46] N. G. DEEN et al. « Review of direct numerical simulation of fluid-particle mass, momentum and heat transfer in dense gas-solid flows ». In : *Chemical Engineering Science* 116 (2014), p. 710–724 (cf. p. 32, 33, 40, 59, 71, 73, 90, 128, 133, 144, 156).
- [47] N. G. DEEN et al. « Review of discrete particle modeling of fluidized beds ». In : *Chemical Engineering Science* 62 (2007), p. 28–44 (cf. p. 40).
- [48] Niels G. DEEN et J. A. M. KUIPERS. « Direct Numerical Simulation of Fluid Flow and Mass Transfer in Dense Fluid-Particle Systems ». In : *Industrial and Engineering Chemistry Research* 52 (2013), p. 11266–11274 (cf. p. 40, 59).
- [49] Niels G. DEEN et al. « Direct numerical simulation of flow and heat transfer in dense fluid-particle systems ». In : *Chemical Engineering Science* 81 (2012), p. 329–344 (cf. p. 32–34, 57–60, 73, 85, 123, 129, 133, 210, 211).
- [50] J.M.P.Q. DELGADO. « A critical review of dispersion in packed beds. » In : *Heat and Mass Transfer* 42(4) (2006), p. 279–310 (cf. p. 26–28, 58, 59, 70, 73).
- [51] J. J. DERKSEN. « Simulations of liquid-to-solid mass transfer in a fluidized microchannel ». In : *Microfluidics and Nanofluidics* 18.5 (2015), p. 829–839 (cf. p. 129).
- [52] J.J. DERKSEN. « Simulations of solid-liquid mass transfer in fixed and fluidized beds ». In : *Chemical Engineering Journal* 255 (2014), p. 233–244 (cf. p. 40, 57, 138, 144, 156, 157).
- [53] S.D. DHOLE, R.P. CHHABRA et V. ESWARAN. « A numerical study on the forced convection heat transfer from an isothermal and isoflux sphere in the steady symmetric flow regime. » In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 49 (2006), p. 984–994 (cf. p. 97).
- [54] R. DI FELICE. « The voidage function for fluid-particle interaction systems ». In : *International Journal of Multiphase Flow* 20 (1994), p. 153–159 (cf. p. 53, 209, 212).
- [55] F. DI MAIO, A. DI RENZO et D. TREVISAN. « Comparison of heat transfer models in DEM-CFD simulations of fluidized beds with an immersed probe ». In : *Powder Technology* 193 (2009), p. 257–265 (cf. p. 197).

- [56] A. DI RENZO et F.P. DI MAIO. « Homogeneous and bubbling fluidization regimes in DEM-CFD simulations : Hydrodynamic stability of gas and liquid fluidized beds ». In : *Chemical Engineering Science* 62 (2007), p. 116–130 (cf. p. 51).
- [57] H. DIETER BAEHR et K. STEPHAN. *Heat and Mass Transfer*. Springer, 2006 (cf. p. 20, 21).
- [58] J. DING et D. GIDASPOW. « A bubbling fluidization model using kinetic theory of granular flow ». In : *American Institute of Chemical Engineers Journal* 36–4 (1990), p. 523–538 (cf. p. 41).
- [59] K. DOICHEV et N. S. AKHMAKOV. « Fluidization of polydisperse systems ». In : *Chemical Engineering Science* 34 (1979), p. 1357–1359 (cf. p. 15).
- [60] F. DORAI et al. « Fully resolved simulations of the flow through a packed bed of cylinders : Effect of size distribution. » In : *Chemical Engineering Science* 129 (2015), p. 180–192 (cf. p. 47, 60, 63).
- [61] F. DUARTE, R. GORMAZ et S. NATESAN. « Arbitrary Eulerian–Lagrangian methods for Navier-Stokes equations with moving boundaries. » In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 193 (2004), p. 4819–4836 (cf. p. 43, 57).
- [62] E.A. EBACH et R.R. WHITE. « Mixing of fluids flowing through beds of packed solids. » In : *American Institute of Chemical Engineers* 19(5) (1958), p. 161–169 (cf. p. 26, 58).
- [63] S. ERGUN. « Fluid flow through packed columns ». In : *Chemical Engineering Progress* 48 (1952), p. 89–94 (cf. p. 1, 12–14, 53).
- [64] A. ESTEGHAMATIAN et al. « A stochastic formulation for the drag force based on multiscale numerical simulation of fluidized beds ». In : *International Journal of Multiphase Flow* (2017) (cf. p. 3, 86, 90, 91, 199, 218, 219, 225).
- [65] A. ESTEGHAMATIAN et al. « Micro/meso simulation of a fluidized bed in a homogeneous bubbling regime ». In : *International Journal of Multiphase Flow* 92 (2017), p. 93–111 (cf. p. 80, 85, 90).
- [66] A. ESTEGHAMATIAN et al. « Particle resolved simulation of liquid/solid and gas/solid fluidized beds ». In : *Physics of Fluids* 29.3 (2017), p. 033302 (cf. p. 40, 50, 80, 85, 90, 128, 129, 134, 150, 167, 190, 198, 208, 216).
- [67] Amir ESTEGHAMATIAN. « Calcul haute performance pour la simulation multi-échelle des lits fluidisés ». Thèse de doct. Ecole Centrale Lyon, 2016 (cf. p. 2, 41, 50, 53, 128, 138, 139, 192, 197, 198, 201, 203, 212, 218, 225).
- [68] F. EUZENAT et al. « Direct numerical simulation of flow and heat transfer in fixed arrays of spheres. » In : *not submitted* () (cf. p. 128, 129, 134, 137, 156, 167).
- [69] L.S. FAN et C. ZHU. *Principles of gas–solid flows*. Cambridge University Press, 1998 (cf. p. 1).
- [70] L.S. FAN et al. « Mechanism of Heat Transfer to Fluidized Beds ». In : *American Institute of Chemical Engineers Journal* 1 (3) (1955), p. 374–384 (cf. p. 21).

- [71] Pascal FEDE, Olivier SIMONIN et Andrew INGRAM. « 3D numerical simulation of a lab-scale pressurized dense fluidized bed focussing on the effect of the particle-particle restitution coefficient and particle-wall boundary conditions ». In : *Chemical Engineering Science* 142.Supplement C (2016), p. 215–235 (cf. p. 128).
- [72] Z.-G. FENG et E. E. MICHAELIDES. « A numerical study on the transient heat transfer from a sphere at high Reynolds and Peclet numbers ». In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 43-2 (2000), p. 219–229 (cf. p. 2, 3, 23, 24, 32, 56, 57, 74, 96, 120, 121, 123, 205, 207).
- [73] Z.-G. FENG et S.G. MUSONG. « Direct numerical simulation of heat and mass transfer of spheres in a fluidized bed ». In : *Powder Technology* 262 (2014), p. 62–70 (cf. p. 32–34, 57, 129, 134, 135, 137, 138, 146).
- [74] Z-G FENG et al. « A resolved Eulerian-Lagrangien simulation of fluidization of 1204 heated spheres in a bed with heat transfer. » In : 138 (2016), p. 041305 (cf. p. 129, 225).
- [75] G. FLAMANT, N. FATAH et Y. FLITRIS. « Wall-to-bed heat transfer in gas-solid fluidized beds : Prediction of heat transfer regimes ». In : *Powder Technology* 69 (1992), p. 223 (cf. p. 21).
- [76] Gilles FLAMANT et al. « Dense suspension of solid particles as a new heat transfer fluid for concentrated solar thermal plants : On-sun proof of concept ». In : *Chemical Engineering Science* 102 (2013), p. 567–576 (cf. p. 128).
- [77] B. FORMISANI, R. GIRIMONTE et L. MANCUSO. « Analysis of the fluidization process of particle beds at high temperature ». In : *Chemical Engineering Science* 53 (1998), p. 951–961 (cf. p. 14).
- [78] D. GELDART. « The effect of particle size and size distribution on the behaviour of gas-fluidised beds ». In : *Powder Technology* 6 (1972), p. 201–215 (cf. p. 2).
- [79] D. GELDART. « Types of gas fluidization ». In : *Powder Technology* 7 (1973), p. 285–292 (cf. p. 1, 8, 9, 11, 12, 16).
- [80] N.I. GELPERIN et V.G. EINSTEIN. *Fluidization*. Sous la dir. de J.F. DAVIDSON et D. HARRISON. Academic Press, New-York, 1971 (cf. p. 2, 30, 31).
- [81] L.R.. GLICKSMAN et F.M. JOOS. « Heat and Mass transfer in fixed beds at low Reynolds numbers. » In : *Journal of heat transfer*. 102 (1980), p. 736–741 (cf. p. 1, 27, 37, 58, 59, 71, 90).
- [82] R. GLOWINSKI et al. « A Fictitious Domain Approach to the Direct Numerical Simulation of Incompressible Viscous Flow past Moving Rigid Bodies : Application to Partriculate Flow ». In : *Journal of Computational Physics* 169 (2001), p. 363–426 (cf. p. 45–47, 58, 60, 93, 128–130).
- [83] V. GNIELINSKI. *Fluid-particle heat transfer in flow through packed beds of solids*. Sous la dir. de P. STEPHAN. VDI Heat Atlas, Springer, Heidelberg, 2010, p. 743–744 (cf. p. 29, 34, 59, 123, 211, 212, 217).

- [84] Anne GOBIN et al. « Fluid dynamic numerical simulation of a gas phase polymerization reactor ». In : *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 43.10-11 (2003), p. 1199–1220 (cf. p. 128).
- [85] W.R.A. GOOSSENS. « Classification of fluidized particles by Archimedes number ». In : *Powder Technology* 98 (1998), p. 48–53 (cf. p. 12).
- [86] V.D. GOROSHKO, R.B. ROZENDAUM et O.M. TODES. « Approximates rules of hydraulics in a suspended bed ». In : *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Neft Gaz* 1 (1958), p. 125–131 (cf. p. 12, 15).
- [87] J.R. GRACE. « Contacting modes and behaviour classification of gas-solid and other two-phase suspensions ». In : *The Canadian Journal of Chemical Engineering* 64 (1986), p. 353–363 (cf. p. 19).
- [88] D.L. GRANATSTEIN. *Technoeconomic assessment of fluidized bed combustors as municipal solid waste incinerators : A summary of six case studies*. Rapp. tech. International Energy Agency (IEA), 2000 (cf. p. 1).
- [89] J.R.F. GUEDES et J.M.P.Q. DELGADO. « Effect of fluid properties on dispersion in flow through packed beds. » In : *American Institute of Chemical Engineers Journal*. 49(8) (2003), p. 1980–1985 (cf. p. 27, 70, 72).
- [90] D.J. GUNN. « Axial and radial dispersion in fixed beds. » In : *Chemical Engineering Science* 42(2) (1987), p. 363–373 (cf. p. 26, 27, 58, 73).
- [91] D.J. GUNN. « On axial dispersion in fixed beds. » In : *Chemical Engineering And Processing* 32 (1993), p. 333–338 (cf. p. 27).
- [92] D.J. GUNN. « Transfer of heat or mass to particles in fixed and fluidized beds ». In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 21 (1978), p. 467–476 (cf. p. 1, 2, 28, 33–35, 38, 39, 56, 57, 59, 70, 71, 120–123, 128, 156, 209, 211, 212, 214, 217).
- [93] S.M.J. GUZIK et al. « An adaptive mesh refinement strategy with conservative space–time coupling for lattice–Boltzmann method. » In : *51st AIAA Aerospace Science Meeting including new horizons forum and aerospace exposition*. 2013 (cf. p. 46, 58).
- [94] A. HAIDER et O. LEVENSPIEL. « Drag coefficient and terminal velocity of spherical and non-spherical particles ». In : *Powder Technology* 58 (1989), p. 63–70 (cf. p. 17).
- [95] G.Y. HAN, G.S. LEE et S.D. KIM. « Hydrodynamic characteristics of a circulating fluidized be ». In : *Korean Journal of Chemical Engineering* 2 (2) (1985), p. 141–147 (cf. p. 18).
- [96] S.J. HAN, R.B.H. TAN et K.C. LOH. « Hydrodynamic behavior in a new gas–liquid–solid inverse fluidization airlift bioreactor. » In : *Transaction of the Institution of Chemical Engineers* 78 (C) (2000), p. 207–215 (cf. p. 6).
- [97] E. HELLAND, R. OCCELLI et L. TADRIST. « Numerical study of cluster and particle rebound effects in a circulating fluidised bed ». In : *Chemical Engineering Science* 60 (2005), p. 27–40 (cf. p. 40).
- [98] F. HERNANDEZ-JIMENEZ et al. « Characterization of particle-wall frictional forces in pseudo-2D fluidized beds using DEM ». In : *Chemical Engineering Science* 116 (2014), p. 136–143 (cf. p. 40).

- [99] B.J. HILL, D.L. KOCH et A. J. LADD. « Moderate Reynolds number flows in ordered and random arrays of spheres ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 448 (2001), p. 243–278 (cf. p. 45, 168).
- [100] B.J. HILL, D.L. KOCH et A. J. LADD. « The first effect of fluid inertia on flows in ordered and random arrays of spheres ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 448 (2001), p. 213–241 (cf. p. 45, 168).
- [101] M.A. Van der HOEF, R. BEETSTRA et J.A.M. KUIPERS. « Lattice-Boltzmann simulations of low-Reynolds-number flow past mono- and bidisperse arrays of spheres : results for the permeability and drag force ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 528 (2005), p. 233–254 (cf. p. 40, 45, 128).
- [102] J.A.K. HORWITZ et A. MANI. « Accurate calculation of Stokes drag for point-particle tracking in two-way coupled flows ». In : *Journal of Computational Physics* 318 (2016), p. 85–109 (cf. p. 76).
- [103] T. HSIUNG et G. THODOS. « Mass transfer factor from actual driving force for the flow of gases through packed beds ($0.1 < Re < 100$) ». In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 20 (1977), p. 331–340 (cf. p. 58).
- [104] T. HSIUNG et G. THODOS. « Mass transfer in gas-fluidized beds : measurements of actual driving forces ». In : *Chemical Engineering Science* 32 (1977), p. 581–592 (cf. p. 58).
- [105] H.H. HU. « Direct simulation of flows of solid-liquid mixtures ». In : *International Journal of Multiphase Flow* 22–2 (1996), p. 335–352 (cf. p. 42, 43).
- [106] H.H. HU et D.D. JOSEPH. « Direct simulation of fluid particle motions ». In : *Theoretical and Computational Fluid Dynamics* 3 (1992), p. 285–306 (cf. p. 42).
- [107] H.H. HU, N.A. PATANKAR et M.Y. ZHU. « Direct Numerical Simulation of fluid-solid systems using the Arbitrary Lagrangian-Eulerian Technique ». In : *Journal of Computational Physics* 169 (2001), p. 427–462 (cf. p. 42, 43, 57, 128).
- [108] L. HUILIN et D. GIDASPOW. « Hydrodynamics of binary fluidization in a riser : CFD simulation using two granular temperatures ». In : *Chemical Engineering Science* 58 (2003), p. 3777–3792 (cf. p. 53).
- [109] L. HUILIN et al. « Investigation of mixing/segregation of mixture particles in gas-solid fluidized beds ». In : *Chemical Engineering Science* 62 (2007), p. 301–317 (cf. p. 40).
- [110] P.J. IRELAND et O. DESJARDINS. « Improving particle drag predictions in Euler-Lagrange simulations with two-way coupling ». In : *Journal of Computational Physics* 338 (2017), p. 405–430 (cf. p. 76).
- [111] M. ISHII et N. ZUBER. « Drag coefficient and relative velocity in bubbly, droplet or particulate flows ». In : *American Institute of Chemical Engineers Journal* 25 (5) (1979), p. 843–855 (cf. p. 53).
- [112] R. JACKSON. « Locally averaged equations of motion for a mixture of identical spherical particles and a Newtonian fluid ». In : *Chemical Engineering Science* 52–15 (1997), p. 2457–2469 (cf. p. 34).

- [113] J.Y. JANG et Y.W. CHIU. « 3-D transient conjugated heat transfer and fluid flow analysis for the cooling process of sintered bed ». In : *Applied Thermal Engineering* 29 (2009), p. 2895–2903 (cf. p. 32).
- [114] R. JESCHAR. « Wärmeübergang in Mehrkornschüttungen aus Kugeln ». In : *Archiv für das Eisenhüttenwesen* 35 (1964), p. 517–526 (cf. p. 30, 211).
- [115] C. JESSOP, M. DUNCAN et W.Y. CHAU. « Multigrid methods for N-body gravitational systems. » In : *Journal of Computational Physics*. 115–2 (1994), p. 339–351 (cf. p. 46).
- [116] M. JILIANG, C. XIAOPING et L. DAOYIN. « Minimum fluidization velocity of particles with wide size distribution at high temperatures ». In : *Powder Technology* 235 (2013), p. 271–278 (cf. p. 15).
- [117] T.A. JONHSON et V.C. PATEL. « Flow past a sphere up to a Reynolds number of 300 ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 378 (1999), p. 19–70 (cf. p. 3, 57, 101).
- [118] M.F. JOOS. « Mass transfer in fluidized beds ». Thèse de doct. Massachusset Institute of Technology, 1978 (cf. p. 38).
- [119] A.M.D. JOST, J. ZHANG et T.L. JACKSON. « Incompressible flow solver with ghost-cell immersed boundary method and adaptive mesh refinement. » In : *46th AIAA Fluid Dynamics Conference*. 2016 (cf. p. 46).
- [120] Y. KANARSKA, I. LOMOV et T. ANTOUN. « Mesoscale simulations of particulate flows with parallel distributed Lagrange multiplier technique. » In : *Computers and Fluids*. 48(1) (2011), p. 16–29 (cf. p. 46, 63, 96).
- [121] Y. KANARSKA et O. WALTON. « Application of parallel distributed Lagrange multiplier technique to simulate coupled Fluid–Granular flows in pipes with varying Cross-Sectional area. » In : *Powder technology*. 291 (2016), p. 35–45 (cf. p. 46, 58, 96).
- [122] S. KARIMI et al. « CFD-DEM Study of temperature and concentration distribution in a polyethylene fluidized bed reactor ». In : *Particulate Science and Technology : An International Journal* 29(2) (2011), p. 163–178 (cf. p. 51).
- [123] M. KARIMI-FARD et L.J. DURLOFSKY. « Unstructured Adaptive Mesh refinement for flow in heterogeneous porous media. » In : *14th European Conference on the mathematics of oil recovery*. 2014 (cf. p. 46).
- [124] A.R. KHAN et J.F. RICHARDSON. « Fluid–particle interaction and flow characteristics of fluidized beds and settling suspensions of spherical particles. » In : *Chemical Engineering Science* 42 (11) (1987), p. 2795–2796 (cf. p. 19, 146).
- [125] R.H. KHIABANI, Y. JOSHI et C.K. AIDUN. « Heat transfer in microchannels with suspended solid particles : lattice-Boltzmann based computations ». In : *Journal of Heat Transfer* 132.4 (2010), p. 041003 (cf. p. 58).
- [126] S. W. KIM et al. « Flowbehavior and regime transition in a high-density circulating fluidized bed riser ». In : *Chemical Engineering Science* 59 (2004), p. 3955–3963 (cf. p. 19).
- [127] C. KLEINSTREUER et H. CHIANG. « Convection heat transfer of closely-spaced spheres with surface blowing. » In : *Warme- und Stoffübertragung* 28 (1993), p. 285–293 (cf. p. 97).

- [128] J.F. KOK et al. « The physics of wind-blow sand and dust ». In : *Reports on Progress in Physics* 75 (2012), p. 1–92 (cf. p. 1).
- [129] N.A. KONAN et al. « Reactive Multiphase Flow Simulation of Uranium Hexafluoride Conversion Reactor ». In : *7th International Conference on Multiphase Flow, ICMF 2010, Tampa, FL, May 30 -June 4, 2010*. 2010 (cf. p. 1).
- [130] P. KOSINSKI et A.C. HOFFMANN. « An extension of the hard-sphere particle-particle collision model to study agglomeration ». In : *Chemical Engineering Science* 65 (2010), p. 3231–3239 (cf. p. 40).
- [131] S.H.L. KRIEBITZSCH, M.A. Vand der HOEF et J.A.M. KUIPERS. « Fully resolved simulation of a gas–solid fluidized bed : A critical test of DEM models ». In : *Chemical Engineering Science* 91 (2013), p. 1–4 (cf. p. 138).
- [132] H. KRUGGLE-EMDEN et al. « Direct numerical simulation of coupled fluid flow and heat transfer for single particles and particle packings by a LBM–approach ». In : *Powder Technology* 294 (2016), p. 236–251 (cf. p. 58, 59, 156).
- [133] X. KU, T. LI et T. LOVAS. « CFD-DEM simulation of biomass gasification with steam in a fluidized bed reactor ». In : *Chemical Engineering Science* 122 (2015), p. 170–283 (cf. p. 1, 198).
- [134] J.A.M. KUIPERS et al. « A numerical model of gas-fluidized beds ». In : *Chemical Engineering Science* 47.8 (1992), p. 1913–1924 (cf. p. 128).
- [135] D. KUNII et O. LEVENSPIEL. *Fluidization Engineering*. Sous la dir. de H. BRENNER. Butterworth-Heinemann, 1991 (cf. p. 1, 2, 6–8, 11, 14, 16, 17, 26, 30–32, 36, 56–59, 72, 90, 127, 128).
- [136] Anthony J.C. LADD. « Numerical Simulations of Particulate Suspensions via a Discretized Boltzmann Equation Part I. Theoretical Foundation ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 271 (1994), p. 285–309 (cf. p. 45, 58).
- [137] B. LEGAWIEC et D. ZIOLKOWSKI. « Structure, voidage and effective thermal conductivity of solids within a near–wall region of beds packed with spherical pellets in tubes. » In : *Chemical Engineering Science* 49(15) (1994), p. 2513–2520 (cf. p. 226).
- [138] M. LEVA. *Fluidization*. Sous la dir. de NEW-YORK. McGraw-Hill, 1959 (cf. p. 15).
- [139] J. LI et D.J. MASON. « A computational investigation of transient heat transfer in pneumatic transport of granular particles ». In : *Powder Technology* 112 (2000), p. 273–282 (cf. p. 51).
- [140] S. LI. « Modélisation d’un incinérateur de boues en lit fluidisé en vue de la maîtrise des émissions de Nox ». Thèse de doct. Ecole Doctorale EEATS, INP Grenoble, 2008 (cf. p. 1).
- [141] X. LI et al. « Lattice-Boltzmann simulation of endothermal catalytic reaction in catalyst porous media ». In : *Applied Thermal Engineering* 50 (1) (2013), p. 1194–1200 (cf. p. 45, 128).
- [142] S. LIMTRAKUL, A. BOONSIRIRAT et T. VATANATHAM. « DEM modeling and simulation of a catalytic gas–solid fluidized bed reactor : a spouted bed as a case study ». In : *Chemical Engineering Science* 59 (22–23) (2004), p. 5225–5231 (cf. p. 51).

- [143] H. LITTMAN, R.G. BARILE et A.H. PULSIFER. « Gas-particle heat transfer coefficients in packed beds at low Reynolds numbers ». In : *I&EC Fundamentals* 7–4 (1968), p. 554–561 (cf. p. 36).
- [144] D. LIU et al. « Simulation of char and propane combustion in a fluidized bed by extending DEM–CFD approach. » In : *Proceedings of the combustion institute* 33 (2011), p. 2701–2708 (cf. p. 198).
- [145] K. LUO et al. « A ghost–cell immersed boundary method for simulations of heat transfer in compressible flows under different boundary conditions. » In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 92 (2016), p. 708–717 (cf. p. 44).
- [146] J. MAGNAUDET, M. RIVERO et J. FABRE. « Accelerated flows past a rigid sphere or a spherical bubble. Part I : Steady straining flow ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 284 (1995), p. 97–135 (cf. p. 101).
- [147] A. MAHESHWARI, R.P. CHHABRA et G. BISWAS. « Effect of blockage on drag and heat transfer from a single sphere and an in-line array of three spheres ». In : *Powder Technology* 168 (2006), p. 74–83 (cf. p. 97).
- [148] H. MARTIN. « Low pecelet number particle-to-fluid heat and mass transfer in packed beds ». In : *Chemical Engineering Science* 33 (1978), p. 913–919 (cf. p. 37).
- [149] A. MASSOL. « Simulations numériques d’écoulements à travers des réseaux fixes de sphères monodisperses et bidisperses, pour des nombres de Reynolds modérés ». Thèse de doct. Institut National Polytechnique de Toulouse, 2004 (cf. p. 20, 21, 34, 39, 53).
- [150] M. MATYKA et Z. KOZA. « How to compute tortuosity easily ? » (Cf. p. 124).
- [151] B. MAURY. « Direct simulations of 2D fluid-particle flows in biperiodic domains ». In : *Journal of Computational Physics* 156 (1999), p. 325–351 (cf. p. 43).
- [152] M.R. MAXEY et J.J. RILEY. « Equation of motion for small rigid sphere in a nonuniform flow. » In : *Physics of Fluids* 26(4) (1983), p. 883–889 (cf. p. 168, 226).
- [153] R. MEI, L.S. LUO et W. SHYY. « An accurate curved boundary treatment in the lattice Boltzmann method. » In : *Journal of Computational Physics* 155 (1999), p. 307–330 (cf. p. 58).
- [154] Y. MELLER et A. LIBERZON. « Particle–fluid forces as the source of acceleration PDF invariance in particle size. » In : *International Journal of Multiphase Flow* 76 (2015), p. 22–31 (cf. p. 169).
- [155] J. M.DM MERRY et J.F. DAVIDSON. « Gulf-stream circulation in shallow fluidized-beds ». In : *Trans. Instn. Chem. Engrs.* 51 (1973), p. 361–368 (cf. p. 16).
- [156] B. METZGER, O. RAHLI et X. YIN. « Heat transfer across sheared suspension : role of the shear-induced diffusion ». In : *Journal of fluid mechanics* 724 (2013), p. 527–552 (cf. p. 129).
- [157] S.F. MILLER et C.J. KING. « Axial dispersion in liquid flow through packed beds. » In : *American Institute of Chemical Engineers* (1966), p. 767–773 (cf. p. 26, 58).
- [158] R. MITTAL et G. IACCARINO. « Immersed Boundary Methods ». In : *Annual Review of Fluid Mechanics* 37 (2005), p. 239–261 (cf. p. 44, 128).

- [159] J. MOHD-YUSOF. « Combined immersed-boundary/B-spline methods for simulations of flow in complex geometries ». In : *Annual Research Briefs* (1997), p. 317–327 (cf. p. 128).
- [160] N. MOSTOUFI et J. CHAOUKI. « Prediction of effective drag coefficient in fluidized beds ». In : *Chemical Engineering Science* 54 (1999), p. 851–858 (cf. p. 53, 168).
- [161] J.C. Brändle de MOTTA et al. « Local dissipation properties and collision dynamics in a sustained homogeneous turbulent suspension composed of finite size particles ». In : *International journal of multiphase flow* 85 (2016), p. 369–379 (cf. p. 129).
- [162] F. MUNICCHI et S. RADL. « Consistent closures for Euler–Lagrange models of bi-disperse gas–particle suspensions derived from particle–resolved direct numerical simulations. » In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* (2017) (cf. p. 2, 4, 27, 35, 36, 53, 59, 60, 83, 85, 90, 96, 97, 198, 214, 215, 221, 225).
- [163] S. MUSONG et Z.-G. FENG. « Mixed convective heat transfer from a heated sphere at an arbitrary incident flow angle in laminar flows ». In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 78 (2014), p. 34–44 (cf. p. 23, 226).
- [164] I. NAKAMURA. « Steady wake behind a sphere. » In : *Physics of Fluids* 19(5) (1976) (cf. p. 101).
- [165] P.A. NELSON et T.R. GALLOWAY. « Particle-to-fluid heat and mass transfer in dense systems of fine particles ». In : *Chemical Engineering Science* 30 (1975), p. 1–6 (cf. p. 1, 37–39, 90).
- [166] A.V. ORPE et A. KUDROLLI. « Velocity correlation in dense granular flows observed with internal imaging. » In : *Physical Review Letters*. 98 (2007), p. 238001 (cf. p. 152).
- [167] A. OZEL et al. « Particle resolved direct numerical simulation of a liquid–solid fluidized bed : Comparison with experimental data ». In : *International Journal of Multiphase Flow* 89 (2017), p. 228–240 (cf. p. 128, 129, 148).
- [168] T. PAN et al. « Fluidization of 1204 spheres : simulation and experiment ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 451 (2002), p. 169–191 (cf. p. 40).
- [169] N.A. PATANKAR. « A formulation for fast computations of rigid particulate flows ». In : *Center for Turbulence Research Annual Research Briefs* (2001), p. 185–196 (cf. p. 46).
- [170] N.A. PATANKAR et al. « A new formulation of the distributed lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows. » In : *International Journal of Multiphase Flow* 26 :9 (2000), p. 1509–1524 (cf. p. 45).
- [171] A.V. PATIL. « Heat Transfer in gas–solid fluidized beds. » Thèse de doct. Eindhoven University of Technology, 2014 (cf. p. 197, 198, 209).
- [172] A.V. PATIL, E.A.J.M. PETERS et J.A.M. KUIPERS. « Comparison of CFD–DEM heat transfer simulations with infrared/visual measurements. » In : *Chemical Engineering Journal* 277 (2015), p. 388–401 (cf. p. 197, 198).
- [173] D.J. PATIL et al. « Wall–to–bed heat transfer in gas–solid bubbling fluidized beds. » In : 52(1) (2006), p. 58–74 (cf. p. 226).

- [174] P. PEPIOT et O. DESJARDINS. « Numerical analysis of the dynamics of two- and three-dimensional fluidized bed reactors using an Euler-Lagrange approach ». In : *Powder Technology* 220 (2012), p. 104–121 (cf. p. 51).
- [175] C.S. PESKIN. « Numerical analysis of blood flow in the heart ». In : *Journal of Computational Physics* 25 (1977), p. 220–252 (cf. p. 44, 58).
- [176] F. PIGEONNEAU, M. PERRODIN et E. CLIMENT. « Mass-transfer enhancement by a reversible chemical reaction across the interface of a bubble rising under Stokes flow ». In : *American Institute of Chemical Engineers Journal* 60 (9) (2014), p. 3376–3388 (cf. p. 227).
- [177] S. POPINET. « Gerris : a tree-based adaptive solver for the incompressible Euler equations in complex geometries ». In : *Journal of Computational Physics* 190.2 (2003), p. 572–600 (cf. p. 58).
- [178] N. PRASIANAKIS et I.V. KARLIN. « Lattice Boltzmann method for thermal flow simulation on standard lattices. » In : *Physical Review E* 76 (2007), p. 016702 (cf. p. 45).
- [179] N. PRASIANAKIS et al. « Lattice Boltzmann method with restored Galilean invariance. » In : *Physical Review E* 79 (2007), p. 066702 (cf. p. 45).
- [180] « Radial density function for hard spheres. » In : *Physical Review A* 43(10) (1991), p. 5418–5423 (cf. p. 64, 174).
- [181] M. RAHMANI et A. WACHS. « Free falling and rising of spherical and angular particles ». In : *Physics of Fluids* 26 (2014), p. 083301 (cf. p. 60, 63).
- [182] A.D. RAKOTONIRINA et A. WACHS. « Grains3D, a flexible DEM approach for particles of arbitrary convex shape - Part II : parallel implementation and scalable performance. » In : *Powder Technology*. in press (2017) (cf. p. 50, 128).
- [183] Daniel RAKOTONIRINA Andriarimina. « Fluid–solid interactions in a non-convex granular media : application to rotating drums and packed bed reactors. » Thèse de doct. Ecole Normale Supérieure de Lyon, 2016 (cf. p. 41, 47, 197).
- [184] R.S. RAMACHANDRAN, C. KLEINSTREUER et T.-Y. WANG. « Forced convection heat transfer of interacting spheres ». In : *Numerical Heat Transfer, Part A : Application : An International Journal of Computation and Methodology* 15 :4 (1989), p. 471–487 (cf. p. 97, 99, 107–109, 112, 114–117).
- [185] T. RANDRIANARIVELO et al. « A DNS approach dedicated to the analysis of fluidized beds ». In : *Proceedings of the IUTAM Symposium on Computational Multiphase Flow*. 2006 (cf. p. 45).
- [186] T.N. RANDRIANARIVELO et al. « Numerical modelling of solid particle motion using a new penalty method ». In : *International Journal for numerical methods in fluids* 47 (2005), p. 1245–1251 (cf. p. 45).
- [187] W.E. RANZ et W.R. MARSHALL. « Evaporation from drops, Part I and II ». In : *Chemical Engineering Progress* 48 (1952), p. 141–146, 173–180 (cf. p. 23, 24, 26, 32, 38, 39, 56, 74, 96, 205).
- [188] L. REH. « Zeitschrift für Verfahrenstechnik, Technische Chemie und Apparatuswesen ». In : *Chemical Engineering and Technology* 40 (1968), p. 509–556 (cf. p. 9, 10).

- [189] J.P. RIBA et J.P. COUDERC. « Expansions de lits fluidisés par des liquides ». In : *Canadian Journal of Chemical Engineering* 55 (1977), p. 118–121 (cf. p. 14, 20).
- [190] L.F. RICHARDSON. « The approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems including differential equations, with an application to the stresses in a masonry dam ». In : *Philosophical Transactions of the Royal Society of London, Series A* 210 (1911), p. 307–357 (cf. p. 33, 63).
- [191] W.N. RICHARDSON J.F. and Zaki. « Sedimentation and fluidisation : Part I ». In : *Transactions of the Institution of Chemical Engineers* 32 (1954), p. 35–53 (cf. p. 1, 19, 146, 147).
- [192] H.P. RIQUARTS. « On heat transfer between particles and fluid in aerated beds ». In : *German Chemical Engineering* 3–4 (1980), p. 286–295 (cf. p. 36–39).
- [193] A.C. ROBINSON et T.A. et al BRUNNER. « ALEGRA : An Arbitrary Lagrangian–Eulerian Multimaterial, Multiphysics Code. » In : *46th AIAA Aerospace Science Meeting and Exhibit*. 2008 (cf. p. 43, 57).
- [194] A. ROMA, C.S. PESKIN et M.J. BERGER. « An adaptive version of the immersed boundary method. » In : *Journal of computational Physics*. 153(2) (1999), p. 509–534 (cf. p. 46, 58).
- [195] S.J.P. ROMKES et al. « CFD modelling and experimental validation of particle-to-fluid mass and heat transfer in a packed bed at very low channel to particle diameter ratio ». In : *Chemical Engineering Journal* 96 (2003), p. 3–13 (cf. p. 32, 57).
- [196] P.N. ROWE. « A convenient empirical equation for estimation of the Richardson–Zaki exponent. » In : *Chemical Engineering Science* 42 (11) (1987), p. 2795–2796 (cf. p. 19, 146).
- [197] P.N. ROWE, K.T. CLAXTON et J.B. LEWIS. « Heat and Mass transfer from a single sphere in an extensive flowing fluid ». In : *Transactions of the Institution of Chemical Engineers* 43 (1965), p. 14 (cf. p. 30, 34, 38, 39, 211, 217).
- [198] G.L. RUBINSTEIN, J.J. DERKSEN et S. SUNDARESAN. « Lattice Boltzmann simulations of low-Reynolds-number flow past fluidized spheres : effect of Stokes number on drag force. » In : *Journal of Fluid Mechanics* 788 (2016), p. 576–601 (cf. p. 155).
- [199] I.A. SADARJOEN et al. « Selective visualization of vortices in hydrodynamic flows. » In : *IEEE Visualization 1998*. 1998, p. 419–422 (cf. p. 101).
- [200] V. SALIKOV et al. « Characterization and DEM–CFD modelling of a prismatic spouted bed. » In : *Powder Technology* 270 (2015), p. 622–636 (cf. p. 197).
- [201] S.C. SAXENA et V.L. GANZHA. « Heat transfer to immersed surfaces in gas-fluidized beds of large particules and powder characterization ». In : *Powder Technology* 39 (1984), p. 199–208 (cf. p. 11–13).
- [202] L. SCHILLER et Z. NAUMANN. « A drag coefficient correlation ». In : *Zeitschrift des vereines deutscher ingenieure* 77 (1935), p. 318 (cf. p. 17, 53, 146, 207).
- [203] H. SCHLICHTING et K. GERSTEN. *Boundary Layer Theory, 8th Revised and Enlarged Edition*. Springer, 2000 (cf. p. 2, 96, 101).

- [204] E.U. SCHLÜNDER. « On the mechanism of mass transfer in heterogeneous systems ». In : *Chemical Engineering Science* 32 (1977), p. 845–851 (cf. p. 36).
- [205] D.A. Graf von der SCHULENBURG et M.L. JOHNS. « Catalyst effectiveness factor distributions in isothermal packed bed reactors ». In : *Chemical Engineering Science* 66 (2011), p. 3003–3011 (cf. p. 40).
- [206] L.A. SGRO et al. « Measurements of nanoparticles of organic carbon and soot in flames and vehicle exhausts ». In : *Environmental Science and Technology* 42 (2008), p. 859–863 (cf. p. 1).
- [207] D.J. SHERMAN et al. « Wind-blow sand on beaches : an evaluation of models ». In : *Geomorphology* 22 (1998), p. 113–133 (cf. p. 1).
- [208] J. SHÄFER, S. DIPPEL et D. WOLF. « Force scheme in simulations of granular materials ». In : *Journal de Physique, I, EDP Sciences* 6–1 (1996), p. 5–20 (cf. p. 51).
- [209] D. SHI, R. NICOLAI et L. REH. « Wall-to-bed heat transfer in circulating fluidized beds. » In : *Chemical Engineering and Processing* 37 (1998), p. 287–293 (cf. p. 226).
- [210] M. SOMMERFELD. « Modelling of particle-wall collisions in confined gas-particle flows ». In : *International Journal of Multiphase Flow* 18.6 (1992), p. 905–926 (cf. p. 128).
- [211] M. SOUZY et al. « Super-diffusion in sheared suspensions ». In : *Physics of fluids* 27(4) (2015), in press (cf. p. 129, 177).
- [212] S. SUANEZ et al. « Dune recovery after storm erosion on a high-energy beach : Vougot Beach, Brittany (France) ». In : *Geomorphology* 139–140 (2012), p. 16–33 (cf. p. 1).
- [213] S.P. SULLIVAN et al. « Simulation of packed bed reactors using lattice Boltzmann methods ». In : *Chemical Engineering Science* 60 (2005), p. 3405–3418 (cf. p. 45).
- [214] B. SUN, S. TENNETI et S. SUBRAMANIAM. « Modeling average gas–solid heat transfer using particle–resolved direct numerical simulation ». In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 86 (2015), p. 898–913 (cf. p. 35, 56, 57, 59, 90, 128, 156, 211, 217).
- [215] B. SUN et al. « Pseudo-turbulent heat flux and average gas–phase conduction during gas–solid heat transfer : flow past random particle assemblies ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 798 (2016), p. 299–349 (cf. p. 35, 39, 57, 59, 76, 121, 212, 226).
- [216] R. SURMAS, C.E. PICO-ORTIZ et P.C. PHILIPPI. « Simulating thermohydrodynamics by finite difference solutions of the Boltzmann equations. » In : *European Physical Journal Special Edition* 171 (2009), p. 81–90 (cf. p. 45).
- [217] H. TAKEUSHI et al. « A quantitative definition and flow regime diagram for fast fluidization ». In : *Powder Technology* 47 (1986), p. 195–199 (cf. p. 19).
- [218] C.K.W. TAM. « The drag on a cloud of spherical particles in low Reynolds number flow. » In : 38(3) (1969), p. 537–546 (cf. p. 169).
- [219] Toshitsugu TANAKA, Keiichiro KADONO et Yutaka TSUJI. « Numerical simulation of gas-solid two-phase flow in a vertical pipe. On the effect of particle-to-particle collision. » In : 56 (jan. 1990), p. 3210–3216 (cf. p. 128).

- [220] S. TANEDA. « Experimental investigation of the wake behind a sphere at low Reynolds numbers. » In : *Journal of the Physical Society of Japan* 11 (1956), p. 1104–1108 (cf. p. 101).
- [221] Y. TANG, E.A.J.F. PETERS et J.A.M. KUIPERS. « Direct numerical simulations of dynamic gas–solid suspensions. » In : *American Institute of Chemical Engineers* 62 (6) (2016), p. 1958–1969 (cf. p. 129, 138, 148, 154, 155, 167).
- [222] K. TANNOUS, M. HEMATI et C. LAGUERIE. « Caractéristiques au minimum de fluidisation et expansion des couches fluidisées de particules de la catégorie D de Geldart ». In : *Powder Technology* 80 (1994), p. 55–72 (cf. p. 18, 19).
- [223] H. TAVASSOLI, E. PETERS et J. KUIPERS. « Direct numerical simulation of non-isothermal flow through dense bi-disperse random arrays of spheres ». In : *Powder Technology* (2016) (cf. p. 35).
- [224] H. TAVASSOLI et al. « Direct numerical simulation of particulate flow with heat transfer ». In : *International Journal of Multiphase Flow* 57 (2013), p. 29–37 (cf. p. 32, 33, 57, 58, 64, 71, 74, 83, 97, 121).
- [225] S. TENNETI et al. « Role of fluid heating in dense gas–solid flow as revealed by particle-resolved direct numerical simulation ». In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 58 (2013), p. 471–479 (cf. p. 32, 33, 35, 63, 121, 197).
- [226] T.E. TEZDUYAR, M. BEHR et J. LIU. « A new strategy for finite element computations involving moving boundaries and interfaces – the deforming-spatial-domain/space-time procedure : I. The concept and preliminary tests. » In : *Compute Methods in Applied Mechanics and Engineering* 94 (1992), p. 339–351 (cf. p. 43).
- [227] T.E. TEZDUYAR et al. « A new strategy for finite element computations involving moving boundaries and interfaces – the deforming-spatial-domain/space-time procedure : II. Computation of free–surface flows, two-liquid flows, and flows with drifting cylinders. » In : *Compute Methods in Applied Mechanics and Engineering* 94 (1992), p. 353–371 (cf. p. 43).
- [228] T.E. TEZDUYAR et al. « Modeling of fluid–structure interactions with the space–time finite elements : arterial fluid mechanics. » In : *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 54 (2007), p. 901–922 (cf. p. 43).
- [229] T.E. TEZDUYAR et al. « Space–time finite element techniques for computation of fluid–structure interactions. » In : *Compute Methods in Applied Mechanics and Engineering* 195 (2006), p. 2002–2027 (cf. p. 43).
- [230] J. R. THIRD, Y. CHEN et C. R. MÜLLER. « Comparison between finite volume and lattice-Boltzmann method simulations of gas–fluidised beds : bed expansion and particle–fluid interaction force ». In : *Computational Particle Mechanics* 3.3 (2016), p. 373–381 (cf. p. 128, 129).
- [231] V. THONGLIMP, N. HIQUILY et C. LAGUERIE. « Vitesse minimale de fluidisation et expansion des couches fluidisées par un gaz ». In : *Powder technology* 38 (1984), p. 233–253 (cf. p. 20).

- [232] E. TSOTAS. « On mass transfer, dispersion, and macroscopical flow maldistribution in packed tubes ». In : *Chemical Engineering and Processing* 31 (1992), p. 181–190 (cf. p. 36).
- [233] E. TSOTAS et E.U. SCHLÜNDER. « On axial dispersion in packed beds with fluid flow. » In : *Chemical Engineering and Processing* 24 (1988), p. 15–31 (cf. p. 27).
- [234] Y. TSUJI. « Multi-scale modeling of dense phase gas-particle flow ». In : *Chemical Engineering Science* 62 (2007), p. 3410–3418 (cf. p. 41).
- [235] Y. TSUJI, T. KAWAGUCHI et T. TANAKA. « Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed ». In : *Powder Technology* 77 (1993), p. 79–87 (cf. p. 41, 51, 197).
- [236] Y. TSUJI, T. TANAKA et T. ISHIDA. « Lagrangian numerical-simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe ». In : *Powder Technology* 71 (1992), p. 239–250 (cf. p. 197).
- [237] Y. TSUJI, T. TANAKA et S. YONEMURA. « Cluster patterns in circulating fluidized beds predicted by numerical simulation (discrete particle model versus two-fluid model) ». In : *Powder Technology* 95.3 (1998), p. 254–264 (cf. p. 128).
- [238] N. ULAGANATHAN et K. KRISHNAIAH. « Hydrodynamic characteristics of two-phase inverse fluidized bed. » In : *Bioprocess Engineering* 15 (1996), p. 159–164 (cf. p. 6).
- [239] M. ULHMANN. « An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows ». In : *Journal of Computational Physics* 209 (2005), p. 448–476 (cf. p. 44, 58, 128).
- [240] M. ULHMANN et A. CHOUÏPPE. « Clustering and preferential concentration of finite-size particles in forced homogeneous-isotropic turbulence. » In : *Journal of fluid mechanics* 812 (2017), p. 991–1023 (cf. p. 129).
- [241] A. VALAVANIDIS, K. FIOTAKIS et T. VLACHOGIANNI. « Airborne particulate matter and human health : toxicological assessment and importance of size and composition of particles for oxidative damage and carcinogenic mechanisms. » In : *Journal of Environmental Science and Health* 26 (2008), p. 339–362 (cf. p. 1).
- [242] M. VANELLA, A. POSA et E. BALARAS. « Adaptive mesh refinement for immersed boundary method. » In : *Journal of Fluids Engineering*. 136(4) (2014), p. 040909 (cf. p. 46).
- [243] S. VINCENT et al. « A Lagrangian VOF tensorial penalty method for the DNS of resolved particle-laden flows ». In : *Journal of Computational Physics* 256 (2014), p. 582–614 (cf. p. 45, 128).
- [244] D. VORTMEYER. « Packed beds thermal dispersion models and consistent sets of coefficients ». In : *Chemical Engineering Progress* 26 (1989), p. 263–268 (cf. p. 36).
- [245] A. WACHS et al. « Accuracy of finite Volume/Staggered grid Distributed Lagrange Multipliers/Fictitious Domain simulations of particulate flows ». In : *Computers & Fluids* 115 (2015), p. 154–172 (cf. p. 2, 3, 47, 60, 62–64, 66, 68, 90, 93, 95, 98, 128–130, 134, 137, 167).

- [246] A. WACHS et al. « GRAINS3D, a flexible DEM approach for particles of arbitrary convex shape – Part I : Numerical model and validations ». In : *Power Technology* 389 (2012), p. 224–374 (cf. p. 52, 132).
- [247] Anthony WACHS. « A DEM/DLM-FD method for direct numerical simulation of particulate flow : Sedimentation of polygonal isometric particles in a Newtonian fluid with particles ». In : *Computers & Fluids* 38 (2009), p. 1608–1628 (cf. p. 40, 47, 49, 62, 128–130).
- [248] Anthony WACHS. « PeliGRIFF, a parallel DEM-DLM/FD direct numerical simulation tool for 3D particulate flows ». In : *Journal of Engineering Mathematics* 71 (2011), p. 131–155 (cf. p. 2, 47, 49, 62, 128).
- [249] Anthony WACHS. « Rising of 3D catalyst particles in a natural convection dominated flow by a parallel DNS method ». In : *Computers and Chemical Engineering* 35 (2011), p. 2169–2185 (cf. p. 32, 40, 48, 49, 58, 60, 62, 90, 130, 226).
- [250] N. WAKAO et T. FUNAZKRI. « Effect of fluid dispersion coefficients on particle-to-fluid mass transfer coefficients in packed beds : correlation for Sherwood numbers ». In : *Chemical Engineering Science* 33 (1978), p. 1375–1384 (cf. p. 58, 156).
- [251] N. WAKAO, S. KAGUEI et T. FUNAZKRI. « Effect of fluid dispersion coefficients on particle-to-fluid heat transfer coefficients in packed beds ». In : *Chemical Engineering Science* 34 (1979), p. 325–336 (cf. p. 27, 30–32, 38, 39, 58, 59).
- [252] X.S. WANG et M.J. RHODES. « On the use of choking as a boundary for fast fluidization ». In : *Chemical Engineering Communications* 189–2 (2002), p. 223 (cf. p. 19).
- [253] L. WEI, Y. LU et J. WEI. « Flow separation from a spherical particle in supercritical water. » In : *Chemical Engineering Research and Design* 92 (2014), p. 2273–2282 (cf. p. 101).
- [254] C. Y. WEN et H. Y. YU. « A generalized method for predicting the minimum fluidization velocity ». In : *American Institute of Chemical Engineers Journal* 12–3 (1966), p. 610–612 (cf. p. 14, 15, 53, 168).
- [255] J. WERTHER et O. MOLERUS. « The local structure of gas fluidized beds. II : The spatial distribution of bubbles ». In : *International Journal of Multiphase Flow* 1 (1973), p. 123–138 (cf. p. 15, 16).
- [256] S. WHITAKER. « Forced convection heat transfer correlations for flow in pipes, past flat plates, single cylinders, single spheres, and for flow in packed beds and tube bundles ». In : *American Institute of Chemical Engineers Journal* 18 (1972), p. 361–371 (cf. p. 23, 24, 29, 32, 56, 96, 211).
- [257] S. WINITZKI. « A handy approximation for the error function and its inverse. » In : (2008) (cf. p. 215).
- [258] P.J. WITT, J.H. PERRY et M.P. SCHWARZ. « Application of CFD to fluidised beds systems ». In : *International Conference on CFD in Mineral and Metal Processing and Powder Generation*. 1997 (cf. p. 1).
- [259] S.Y. WU et J. BAEYENS. « Effect of temperature on minimum fluidization velocity ». In : *Powder Technology* 67 (1991), p. 217–220 (cf. p. 14, 15).

- [260] J. XIA, K. LUO et J. FAN. « A ghost-cell based high-order immersed boundary method for inter-phase heat transfer simulation ». In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 75 (2014), p. 302–312 (cf. p. 3, 32–34, 44, 57, 58, 63, 97, 128).
- [261] H.Y. XIE. « Drag coefficient of fluidized particles at high reynolds numbers ». In : *Chemical Engineering Science* 52 (1997), p. 3051–3052 (cf. p. 53, 168).
- [262] B. H. XU et A.B. YU. « Numerical simulation of the gas–solid flow in a fluidized bed by combining discrete particle method with computational fluid dynamics ». In : *Chemical Engineering Science* 52 (1997), p. 2785–2809 (cf. p. 197).
- [263] G. XU et al. « More fundamentals of dilute suspension collapse and choking for vertical conveying systems ». In : *American Institute of Chemical Engineers Journal* 47–10 (2001), p. 2177 (cf. p. 19).
- [264] A. YAMANAKA, T. YUKI et N. MITSUISHI. « Combined forced and natural convective heat transfer from spheres at small reynolds numbers ». In : *Journal of Chemical Engineering of Japan* 9–6 (1976), p. 445–449 (cf. p. 23, 56, 226).
- [265] W.C. YANG. « Modification and re-interpretation of Geldart’s classification of powders ». In : *Powder Technology* 171 (2007), p. 69–74 (cf. p. 2, 11).
- [266] J. YERUSHALMI et N.T. CANKURT. « Further sutides of the regimes of fluidization ». In : *Powder Technology* 24 (1979), p. 287–205 (cf. p. 18).
- [267] Z. YU et X. SHAO. « A direct-forcing fictitious domain method for particulate flows ». In : *Journal of Computational Physics* 227 (2007), p. 292–314 (cf. p. 46).
- [268] Zhaosheng YU, Xueming SHAO et Anthony WACHS. « A fictitious domain method for particulate flows with heat transfer ». In : *Journal of Computational Physics* 217 (2006), p. 424–452 (cf. p. 2, 32, 46, 47, 49, 58, 60, 62, 90).
- [269] M. ZASTAWNY et al. « Derivation of drag and lift force and torque coefficients for non-spherical particles in flows. » In : *International Journal of Multiphase Flow* 39 (2012), p. 227–239 (cf. p. 44).
- [270] Z.Y. ZHOU et al. « CFD-DEM simulation of gas fluidization of ellipsoidal particles ». In : *7th International Conference on CFD in the Mineral and Process Industries*. 2009 (cf. p. 41, 51).

Doctorat de l'Université de Toulouse
Délicivré par : L'Institut National Polytechnique de Toulouse (INP Toulouse)
École doctorale MEGeP
Spécialité : Énergétique et transferts

Simulation numérique directe et analyse des transferts de chaleur dans les lits de particules fixes et mobiles

Résumé — Ces travaux de recherche s'intéressent à la caractérisation des transferts thermiques dans les milieux fluide-particules, et en particulier, les lits fluidisés au sein desquels un solide divisé est mis en suspension par un fluide. La grande diversité d'échelles spatiales et temporelles dans ces procédés nécessite d'étudier les interactions hydrodynamiques, thermiques et/ou chimiques entre les particules et le fluide à l'aide d'une approche multi-échelles. Une étude des transferts thermiques dans des lits fixes puis fluidisés, est réalisée à deux échelles : locales (Particle Resolved Simulation) et moyennées (Discrete Element Method-Computational Fluids Dynamics). L'étude PRS permet de caractériser les couplages locaux des transferts thermiques entre particules ainsi que la dynamique de ces transferts dans les configurations fluidisées. Une étude comparative entre les échelles met en évidence les limites du modèle DEM-CFD à capter les fluctuations des transferts thermiques observées dans les simulations PRS. Dans un dernier temps, les fermetures du modèle DEM-CFD sont améliorées de manière à réintroduire les fluctuations perdues par le changement d'échelles.

Mots clés : Multi-échelles, Transferts Thermiques, Ecoulement fluide-particules, Simulation numérique directe, Simulation Euler-Lagrange, Lits fluidisés, Lits fixes.

Direct numerical simulations and analysis of heat transfer through fixed and fluidized beds

Abstract — This work aims at characterizing heat transfer into fluid-solid flows, and more particularly fluidized beds, into which a solid phase is suspended by a flowing fluid. The wide range of spatial and temporal scales present in such processes encourage to study hydrodynamic, thermal and/or chemical interactions between the particles and the fluid through a multi-scale strategy. The analysis of thermal interactions was first carried out for fixed bed configurations and then, fluidized beds at two overlapping scales : local (PRS ; Particle Resolved Simulation) and mesoscopic (DEM-CFD ; Discrete Element Method-Computational Fluids Dynamics). The PRS approach accounts for the local coupling of heat transfer between the particles and its dynamics into fluidized beds. A comparative study of the two scales indicated the limits of the DEM-CFD model to capture the heat transfer fluctuations observed into PRS. In a last step, the closure laws for DEM-CFD were improved to reintroduce the fluctuations lost at this scale.

Keywords : Multi-scale, Heat transfer, Particle-laden flows, Particle resolved simulation, Euler-Lagrange simulation, Fluidized beds, Fixed beds.
