

Modélisation stochastique du dépôt de particules colloïdales transportées par des écoulements turbulents isothermes et non isothermes

Clara Martineau

▶ **To cite this version:**

Clara Martineau. Modélisation stochastique du dépôt de particules colloïdales transportées par des écoulements turbulents isothermes et non isothermes. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Université de Lorraine, 2013. Français. NNT : 2013LORR0194 . tel-00921279v2

HAL Id: tel-00921279

https://theses.hal.science/tel-00921279v2

Submitted on 20 Dec 2013

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

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

U.F.R. ESSTIN
École Doctorale EMMA (Énergétique, Mécanique et Matériaux)
Département de formation doctorale : Mécanique et Énergétique

Thèse présentée pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE LORRAINE
en Mécanique et Énergétique

par **Clara MARTINEAU**

Modélisation stochastique du dépôt de particules colloïdales transportées par des écoulements turbulents isothermes et non isothermes

Soutenue publiquement le 14 novembre 2013 à 10h à l'ESSTIN

Jury

Rapporteurs :	M. Christophe Morel	Docteur, HDR, CEA Grenoble
	M. Éric Climent	Professeur, INP-ENSEEIHT Toulouse
Examinateurs :	M. Jean-Marie Buchlin	Professeur, Univ. libre de Bruxelles, VKI
	M. Christophe Profeta	Docteur, MDC, Univ. Evry Val d'Essone
Directrice :	Mme. Anne Tanière	Professeur, Univ. de Lorraine
Encadrant :	M. Jean-Pierre Minier	Ingénieur Recherche, EDF R&D Chatou

Laboratoire d'Énergétique et de Mécanique Théorique et Appliquée (UMR 7563)
Groupe ESSTIN - 2, rue Jean Lamour, 54519 Vandoeuvre-lès-Nancy

Remerciements

Ce travail a été réalisé au Département Mécanique des Fluides, Énergie et Environnement d'EDF R&D en collaboration avec le Laboratoire d'Énergétique et de Mécanique Théorique et Appliquée de l'Université de Lorraine, dans le cadre d'une convention CIFRE de l'Agence Nationale pour la Recherche Technique, que je remercie pour son financement.

Je remercie très chaleureusement ma directrice de thèse, Anne Tanière pour m'avoir donné goût à la mécanique des fluides lorsqu'elle était mon enseignante à l'ESSTIN, pour l'intérêt qu'elle a porté à mes travaux, pour son énergie et ses encouragements. Je remercie également Jean-Pierre Minier, mon tuteur à EDF R&D, de m'avoir fait confiance pour cette thèse, pour sa pédagogie et ses conseils qui ont aiguillé mes travaux.

Je suis très reconnaissante à Mathieu Guingo qui a eu la gentillesse de m'épauler sur ce travail, je le remercie pour sa disponibilité, son écoute, la multiplicité de ses idées et ses remarques judicieuses.

Je souhaite également remercier Christophe Profeta qui a grandement contribué à l'avancée de mes travaux, pour avoir plongé dans ce sujet et, en plus de la qualité de son aide, pour sa réactivité.

Je remercie Éric Climent et Christophe Morel pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail en acceptant de le juger en tant que rapporteurs et le premier pour avoir accepté de présider le jury. Mes remerciements vont également à Jean-Marie Buchlin et Christophe Profeta qui ont accepté de faire partie du jury de cette thèse.

Enfin, je souhaite remercier tous les membres du groupe I81 pour leur bonne humeur. Je pense tout particulièrement à mes collègues thésards avec qui j'ai partagé de très bons moments : Kateryna, Sana, Arnaud, Avner, Bertrand, Christophe, Franck, Khaled et Romain. Merci pour les pauses café, la perpétuelle bonne humeur, les pâtisseries du lundi et la gastronomie tunisienne, les sorties à la Défense, le cadre studieux, sérieux et productif du bureau O217 et les virées "en ville". Je remercie également les membres du club d'Aïkido de Chatou pour leur énergie et les moments de franche rigolade partagés sur le tatamis ou ailleurs. Sans oublier Dia, l'éditeur de graphiques discount.

Mes dernières pensées vont à mes parents et mes deux sœurs qui m'ont toujours encouragée et qui m'ont fait confiance sur ce projet. Je remercie également ma belle famille ainsi que tous mes amis pour leur soutien.

Enfin, je remercie Etienne, pour sa présence, son soutien, sa capacité qu'il a de croire en moi, ce qui m'a donné du courage tout au long de ma thèse et surtout dans la dernière ligne droite. Merci mein Schatz.

Abstract

We present here new results obtained with the generalisation to non isothermal flows of a near-wall particle deposition model. This work is divided in two parts.

The first part consists in coupling the Generalised Langevin Model used to compute the particles statistics in the core of the flow with the Near-Wall Model that calculates particles motion in the vicinity of the wall. In order to achieve the coupling in a consistent way, we focus on the balance of fluxes of fluid particles crossing the interface between the two models. This amounts to assessing if the coupling is valid in the fluid limit case, as non-physical accumulation of fluid particles can occur at the interface. This part of the study has lead to theoretical and numerical developments on the conditional statistics of particles crossing an interface. The particle deposition rate is then computed with inertial particles and the model reproduces satisfactorily experimental studies in isothermal flow.

In the case of non isothermal flows, particles can experience thermophoresis (which is a mechanism that induces a particle flux in the presence of a temperature gradient in the flow) that may strongly affect the particle deposition rate. We thus choose to model thermophoresis in our Near-Wall deposition Model in order to predict accurate particule deposition in non isothermal flows. In this part of the study we first investigate thermophoresis in gas as it is well explained, thanks to the gas kinetic theory. Thermophoresis in liquids is then studied. In contrast to the gases, the theory and experiment of thermophoresis in liquids are far from being well established. The last part of this work is dedicated to the modelisation of thermophoresis in liquids in the Near-Wall Model. It has lead to new promising numerical results of particle deposition enhanced by thermophoresis in liquids.

Keywords : particle polydispersed flows, lagrangian stochastic modeling, turbulent structures, thermophoresis, colloidal particles, CFD

Résumé

Nous présentons la généralisation d'un modèle de dépôt de particules aux écoulements non isothermes. Ce travail comporte deux parties.

La première partie présente l'approche de modélisation lagrangienne stochastique adoptée pour simuler le dépôt de particules colloïdales et traite du raccord entre le Modèle de Langevin Généralisé qui calcule le transport des particules dans le cœur de l'écoulement et le Modèle de Proche Paroi destiné au transport des particules au voisinage de la paroi. Le raccord est assuré par l'équilibre du flux de particules traversant l'interface entre les deux modèles. La validation du couplage s'effectue par le passage en particules fluides, il s'agit de vérifier que le raccord est valable dans le cas limite du fluide. En effet, des accumulations non physiques de particules fluides peuvent se produire autour de l'interface. Le travail de couplage a donné lieu à des développements théoriques et numériques sur les statistiques conditionnées d'une particule traversant une interface. Des calculs de dépôt de particules montrent que le modèle reproduit correctement les résultats expérimentaux pour des écoulements isothermes.

Cependant, dans un écoulement non isotherme, les particules peuvent faire l'expérience du phénomène de thermophorèse (qui est le mécanisme de déplacement des particules induit par un gradient de température) qui peut considérablement influencer le dépôt de particules. Nous avons donc choisi d'intégrer la modélisation de la thermophorèse dans le Modèle de Proche Paroi afin d'évaluer au mieux le taux de dépôt de particules dans un écoulement non isotherme. Nous commençons par étudier la thermophorèse en milieu gazeux car elle est très bien expliquée par la théorie cinétique des gaz. L'étude de la thermophorèse en milieu liquide est plus ardue car elle ne dispose pas encore de théorie unifié ni de travaux expérimentaux qui étudient ce phénomène. La dernière partie de ce document est donc consacrée à la prise en compte du phénomène de thermophorèse en liquide dans le Modèle de Proche Paroi. Cette étude fournit de nouveaux résultats numériques de dépôt de particules en présence d'un gradient de température dans un milieu liquide.

Mots clés : écoulement diphasique polydispersé, modélisation lagrangienne stochastique, structures turbulentes, thermophorèse, particules colloïdales, CFD

Sommaire

Remerciements iii

Résumé v

Nomenclature xv

Introduction générale 1

I La modélisation lagrangienne stochastique pour l'étude du dépôt de particules 11

1 La modélisation lagrangienne stochastique 13
1.1 L'approche hybride "champ moyen"/"particulaire stochastique" . . . 13
1.1.1 Description de la phase continue . . . 13
1.1.2 Description de la phase dispersé . . . 14
1.2 Le Modèle de Langevin Généralisé . . . 16
1.3 Le Modèle de dépôt de Proche Paroi . . . 17
1.3.1 La zone externe . . . 18
1.3.2 La zone interne . . . 19
Conclusion partielle . . . 21

2 Le couplage des deux modèles lagrangiens stochastiques 23
2.1 Traitement du raccord à l'interface : égalité des flux de particules . . . 25
2.2 Résultats numériques . . . 27
2.2.1 Observation de la concentration en particules fluides . . . 29
2.2.2 Observation de la vitesse des particules fluides . . . 30
2.2.3 Observation de la PDF de la vitesse des particules fluides . . . 31
2.2.4 Observation du flux de particules fluides à l'interface . . . 32
2.3 Solutions pour rétablir l'égalité des flux . . . 33
2.3.1 Identification de le distribution $U_{s2\to1}$ . . . 33
2.4 Analyse du comportement du couplage en fonction du pas de temps . . . 36
Conclusion partielle . . . 39

3 Application du couplage au calcul de dépôt de particules colloïdales 41
3.1 Implémentation numérique du couplage 41
3.2 Simulations numériques de dépôt de particules 43
3.2.1 La courbe de dépôt expérimentale 43
3.2.2 Résultats numériques de dépôt de particules 44
Conclusion partielle 47

II La thermophorèse : Extension du Modèle de Proche Paroi aux écoulements non isothermes 51

Introduction de la deuxième partie 53

4 Modélisation de la thermophorèse dans l'approche Lagrangienne Stochastique 55
4.1 Représentation classique de la thermophorèse : le coefficient de Soret 55
4.2 Les enjeux de modélisation dans la formulation Lagrangienne stochastique 57
4.3 Étude de la sensibilité du Modèle de Proche Paroi à un gradient de température dans un milieu gazeux 59
4.4 Prise en compte de la thermophorèse dans la modélisation lagrangienne stochastique 62
Conclusion partielle 63

5 Thermophorèse en gaz 65
5.1 Bibliographie 65
5.1.1 Généralités sur la théorie cinétique des gaz 65
5.1.2 Théories sur l'ensemble de la gamme de nombre de Knudsen . 66
5.2 Simulation numérique de la thermophorèse en gaz 68
5.2.1 Expériences de dépôt en milieu gazeux 68
5.2.2 Simulations numériques de dépôt en milieu gazeux 69
Conclusion partielle 73

6 Thermophorèse en liquide 75
6.1 Modélisation des interactions entre les particules et la paroi dans un milieu liquide 76
6.1.1 Interactions électromagnétiques de van der Waals 76
6.1.2 Interactions électrostatiques : notion de double couche électrostatique 77
6.1.3 La théorie DLVO dans la modélisation lagrangienne stochastique 78
6.2 La thermophorèse en liquide : une approche basée sur l'équilibre thermodynamique local 79
6.3 Expériences de dépôt en milieu liquide 81
6.4 Simulations numériques de dépôt en milieu liquide 82
6.4.1 Écoulement isotherme 82

6.4.2 Écoulement non isotherme 84
Conclusion partielle 86

Conclusion générale et Perspectives **91**

A Fonction densité de probabilité de la vitesse d'une particule traversant une interface **97**

Bibliographie **105**

Table des figures

1 Structure d'une centrale REP, source : EDF 2
2 Schéma d'un GV avec le faisceau de tubes, source : IRSN 3
3 À gauche : vue supérieure du faisceau de tubes en "U". À droite : vue des plaques entretoises et des passages foliés, source : EDF CEIDRE 4
4 Découpage du phénomène de dépôt de particules en 4 mécanismes élémentaires, source EDF R&D 6

1.1 Structure 1D du modèle de dépôt de proche paroi 18
1.2 Trajectoire d'une particule dans la zone de proche paroi, source : Guingo et Minier [25] 19

2.1 PDF des vitesses de fluide vu U_s. A gauche, dans le MPP avec l'alternance structure cohérente de type sweep/ejection (distributions de Dirac) et phase de diffusion (distribution gaussienne). A droite, la distribution gaussienne du MLG. 24
2.2 Schéma des flux de particules traversant une interface entre deux zones 25
2.3 Concentration en particules fluides dans la zone de proche paroi, . . 29
2.4 Nuage de points dans la zone de proche paroi, ... 30
2.5 Différence entre la PDF des vitesses supposée (points noirs) et effective (points rouges) 31
2.6 Différence entre le flux $\mathcal{F}_{1\to 2}$ supposé (courbe continue) et effectif (pointillés) 32
2.7 Visualisation de la PDF recherchée (trait plein) et comparaison avec la PDF hal-normale (pointillés) 34
2.8 Visualisation de l'allure de la PDF théorique (trait continu) et de sa réalisation numérique (points) p 36
2.9 Concentration en particules fluides dans la zone de proche paroi. Première étape de couplage (ligne continue), deuxième étape de couplage (pointillés) 37
2.10 Analyse de la sensibilité du couplage pour trois pas de temps : $dt = 10^{-6}, 10^{-7}$ et 10^{-8} s 38
2.11 PDF p pour différents pas de temps 39

3.1 Comparaison de la PDF théorique (en pointillés) à la distribution obtenue avec la méthode de rejet (trait plein) 42
3.2 Résultats expérimentaux de dépôt de particules 44

3.3 Section transversale du maillage de la conduite pour l'expérience de Liu et Agarwal [39] 45
3.4 Comparaison des vitesses de dépôt numériques avec l'expérimental . . 46
3.5 Illustration du mécanisme de thermophorèse 53

4.1 Profil de température dans la couche limite 60
4.2 Vitesse de dépôt pour différents écarts de température ΔT 61

5.1 Influence de la thermophorèse sur la vitesse de dépôt de particules pour différents gradients de température 71

6.1 Représentation schématique de la double couche, les signes peuvent être inversés 77
6.2 Énergie d'interaction DLVO entre une sphère et un plan, source : Henry et al. [32] 79
6.3 Vitesse de dépôt des particules adimensionnée en fonction du pH, expérience de Williamson et al. [75] 82
6.4 Comparaison des vitesses de dépôt de particules adimensionnée en milieu liquide et en milieu gazeux pour un écoulement isotherme . . 83
6.5 Influence de la thermophorèse en milieu liquide pour différents gradients de température. Comparaison de la force de thermophorèse de Dhont et al. (traits continus) et de la force de thermophorèse de Duhr et Braun (pointillés). 84
6.6 Différence entre la PDF des vitesses supposée (points noirs) et effective (points rouges) 94

Liste des tableaux

2.1 Caractéristique de l'écoulement de la phase continue pour l'étude numérique de validation par les particules fluides 28

3.1 Caractéristiques de l'expérience de Liu et Agarwal [39] 45

5.1 Caractéristiques de l'expérience de Leeming [38] 70
5.2 Gradient de température à la paroi 70
5.3 Comparaison des ordres de grandeur des coefficients de thermophorèse pour un écart de température $\Delta T = 50\ K$ 72

6.1 Caractéristiques de l'expérience de Williamson et al. [75] 81
6.2 Comparaison des coefficients de diffusion thermophorétique D_T en liquide pour différents gradients de température 85

Nomenclature

Lettres latines

$\mathcal{A}_H$	Constante d'Hamaker (J)
C	Concentration (kg/m^3)
C_D	Coefficient de traînée $(-)$
d_p	Diamètre d'une particule (m)
D	Coefficient de diffusion moléculaire (m^2/s)
D_c	Diamètre d'une conduite (m)
D_T	Coefficient de diffusion thermophorétique $(m^2/(s \cdot K))$
e	Charge électrique élémentaire (C)
F	Force (N)
F_A	Constante de Faraday (C/mol)
$\mathcal{F}_{i \to j}$	Flux de particules de la zone i vers la zone j (m/s)
g	Accélération de la pesanteur (m/s^2)
I	Force ionique (mol/l)
k	Énergie cinétique turbulente (m^2/s)
K	Coefficient de diffusion d'un processus stochastique $(m/s^{3/2})$
Kn	Nombre de Knudsen (-)
k_B	Constante de Boltzmann (J/K)
L	Distance maximale parcourue par une particule durant un pas de temps (m)
k_p	Vitesse de dépôt d'une particule (m/s)
l_B	Longueur de Bjerrum (m)
l_ν	Échelle de longueur visqueuse (m)
m	Masse (kg)
n	Quantité (-)
$\mathcal{N}_A$	Constante d'Avogadro (J/K)
p	Fonction densité de probabilité (-)
P	Pression (Pa)
R	Constante universelle des gaz $(J/(mol \cdot K))$
Re	Nombre de Reynolds (-)
s_{hyd}	Entropie d'hydratation surfacique $(J/(mol \cdot K \cdot m^2)$
S_T	Coefficient de Soret (K^{-1})
T_L	Échelle de temps lagrangienne (s)
T_f	Température du fluide (K)

u^*	Vitesse de friction (m/s)
U_f	Vitesse du fluide (m/s)
U_p	Vitesse d'une particule (m/s)
U_s	Vitesse de fluide vu (m/s)
x, y, z	Position (m)

Lettres grecques

Δt	Pas de temps (s)
ϵ	Dissipation turbulente (J/kg)
ϵ_0	Permittivité du vide $(C^2/(J \cdot m))$
ϵ_r	Permittivité relative du matériau (-)
ζ	Potentiel zêta (V)
λ_{DH}	Longueur de Debye (m)
λ_g	Conductivité thermique du gaz $(W/(m \cdot K))$
λ_p	Conductivité thermique de la particule $(W/(m \cdot K))$
λ_m	Libre parcours moyen d'une molécule (m)
Λ	Rapport des conductivités thermiques (-)
μ	Viscosité dynamique turbulente $(kg/(m \cdot s))$
ν	Viscosité cinématique turbulente (m^2/s)
φ	Potentiel (V)
ρ	Masse volumique (kg/m^3)
σ	Écart type (m/s)
σ_{eff}	Charge effective surfacique (C/m^2)
τ	Temps caractéristique (s)

Indices

bro	Relatif au mouvement brownien
dif	Relatif à une phase de diffusion
ext	Relatif à la zone externe
f	Relatif au fluide
int	Relatif à la zone interne
p	Relatif à la particule
s	Relatif au fluide vu
struc	Relatif à une structure turbulente
T	Relatif à la thermophorèse
w	Relatif à la paroi
0	Relatif à l'état initial

Exposants

$+$	Normalisé en unités de paroi

Acronymes

CFD	Computational Fluid Dynamics
DLVO	Derjaguin-Landau Verwey-Overbeek
DNS	Simulation Numérique Directe
GV	Générateur de Vapeur
MD	Molecular Dynamics
MLG	Modèle de Langevin Généralisé
MPP	Modèle de dépôt de Proche Paroi
PDF	Fonction Dénsité de Probabilité
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes equation
REP	Réacteur à Eau Pressurisée
R&D	Recherche et Développement
VDW	van der Waals

Introduction générale

Ce travail de thèse porte sur la compréhension, la modélisation et la simulation du dépôt de particules colloïdales portées par un écoulement turbulent. Afin de souligner l'importance de l'étude du phénomène de dépôt, nous allons tout d'abord l'illustrer par un exemple industriel de dépôt de particules dans les générateurs de vapeur. Puis nous présenterons les différentes phases du processus de dépôt (dépôt, ré entraînement, agglomération et colmatage). Nous verrons notamment que la première phase se découpe en deux étapes (transport et attachement) qui font intervenir des phénomènes hydrodynamiques (interaction entre les particules et la turbulence de l'écoulement), des phénomènes physico-chimiques (interaction entre les particules et la paroi) mais aussi des phénomènes thermodynamiques (étude de l'influence d'un gradient de température sur le comportement des particules). Ensuite, nous présenterons l'approche de modélisation adoptée pour simuler l'ensemble du processus de dépôt de particules. Enfin, nous définirons les enjeux et objectifs de ce travail de thèse qui porte sur l'amélioration de la modélisation du mécanisme de dépôt de particules avec la prise en compte des phénomènes thermodynamiques qui peuvent favoriser le dépôt des particules.

Le phénomène de déposition

Le phénomène de dépôt de particules en suspension dans un fluide s'observe dans de nombreux écoulements. Que ce soit dans un cadre sanitaire, environnemental ou industriel, la compréhension du phénomène de dépôt de particules est cruciale. Pour cela, il est nécessaire d'identifier les différents facteurs d'origine hydrodynamique, physico-chimique ou encore thermodynamique qui peuvent amener une particule à se déposer sur une surface.

Un grand nombre de travaux théoriques, expérimentaux et numériques sont dédiés à l'étude du phénomène de dépôt de particules. Cependant, chaque étude est différente car elle dépend de l'échelle à laquelle on souhaite observer le phénomène de dépôt (e.g. Prusek et al. [63] étudient le dépôt à l'échelle d'un générateur de vapeur tandis que Lugscheider et al. [40] étudient la structure microscopique d'un dépôt multi-couches de cristaux d'indium). Ainsi, si l'on s'intéresse uniquement à la quantité de particules déposées, une approche macroscopique est suffisante. Au contraire, si l'on souhaite caractériser plus finement le dépôt afin d'accéder, par

exemple, aux zones préférentielles de dépôt ou encore à la géométrie du dépôt, il est nécessaire d'étudier le mécanisme à une échelle plus fine, à minima à l'échelle de la surface de dépôt. C'est dans ce cadre que s'inscrit le présent travail de thèse.

Les travaux ont été effectués au sein du projet MOFPHET-C2 (MOdélisation Fine des PHÉnomènes de Thermohydraulique - Chimie) piloté depuis 2004 à EDF R&D [11], qui a pour objectif de comprendre les mécanismes à l'origine de la formation de dépôts de particules colloïdales dans les écoulements turbulents. Pour se convaincre de l'importance de l'étude du phénomène de dépôt de particules, nous allons, dans le prochain paragraphe, évoquer les phénomènes de dépôts observés dans les centrales nucléaires de type Réacteur à Eau Pressurisée (REP).

La centrale REP possède trois circuits hydrauliques (le circuit primaire, le circuit secondaire et le circuit de refroidissement) qui opèrent des échanges thermiques entre eux afin de transformer l'énergie issue de la réaction nucléaire en électricité. Les trois circuits sont indépendants afin d'éviter l'émission de substance radioactive dans l'environnement. Dans le réacteur, la réaction en chaîne de fission nucléaire produit de la chaleur qui chauffe l'eau du circuit primaire à très haute température 330 $°C$, cette eau est à 155 bar afin d'être maintenue à l'état liquide. Le circuit primaire échange son énergie avec le circuit secondaire dans le générateur de vapeur (GV). L'eau du circuit secondaire se transforme alors en vapeur et fait tourner une turbine qui, couplée à un alternateur, produit de l'électricité. Enfin, le circuit de refroidissement refroidit le circuit secondaire au moyen d'un condensateur. La structure d'une centrale REP est représentée sur la Figure 1.

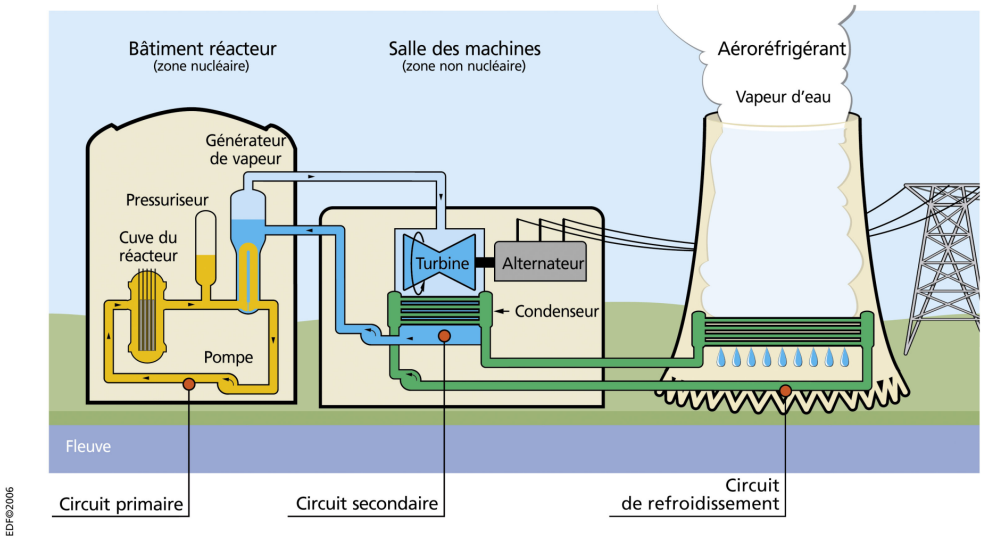


FIGURE 1 – Structure d'une centrale REP, source : EDF

Au sein du GV, l'eau du circuit primaire circule dans un faisceau de plusieurs milliers de tubes en "U" inversé (Figure 2). Chaque GV contient entre 3000 et 6000

tubes [63] ce qui représente une surface d'échange entre le circuit primaire et le circuit secondaire comprise entre 5000 et 7000 m^2. Ces tubes sont maintenus en place par des plaques entretoises qui permettent de conserver un écart constant entre chaque tube et d'assurer leur stabilité afin d'éviter les phénomènes vibratoires. Comme on peut le voir sur la Figure 2, ces supports sont disposés régulièrement sur toute la hauteur du GV. L'eau du circuit secondaire circule le long des tubes et passe au niveau de l'espace (que l'on dénommera "passage folié") situé entre les tubes en "U" et la plaque entretoise (on peut voir sur la Figure 3 la géométrie des passages foliés).

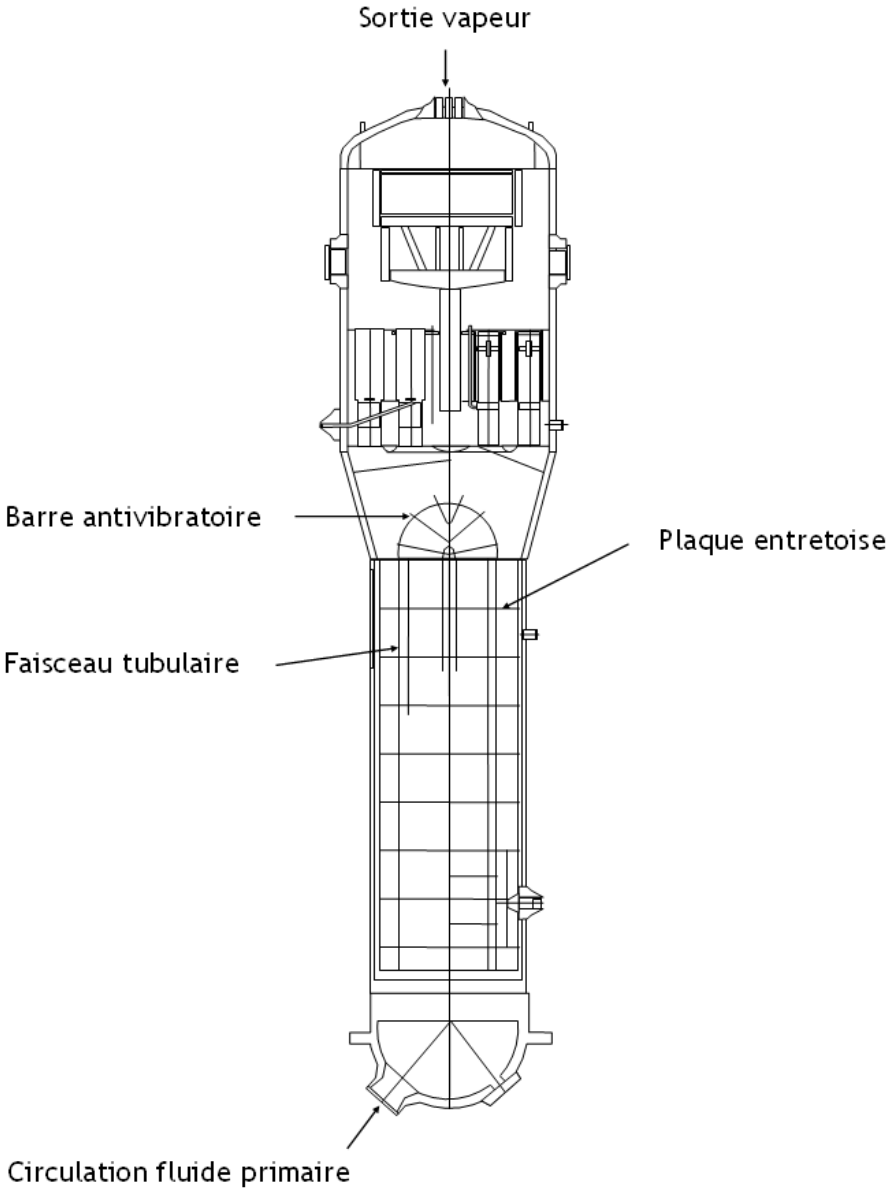


FIGURE 2 – Schéma d'un GV avec le faisceau de tubes, source : IRSN

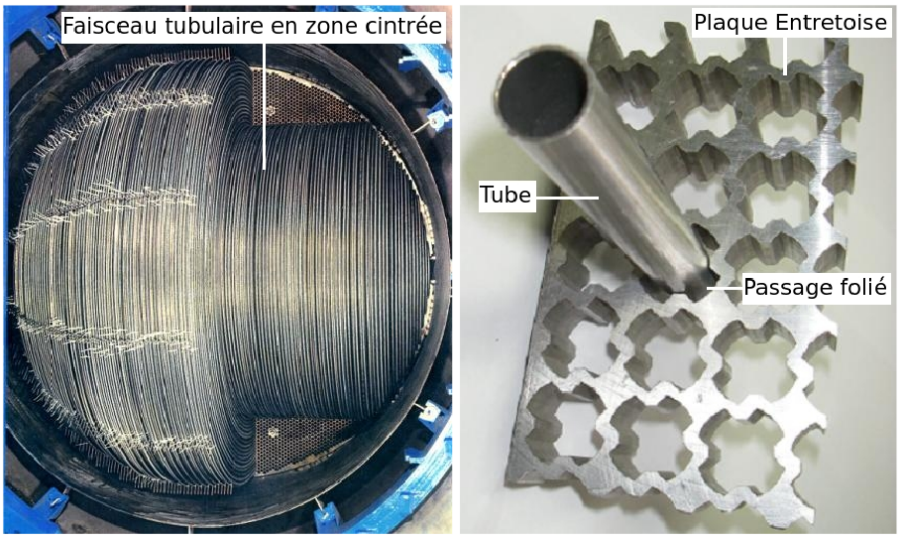


FIGURE 3 – À gauche : vue supérieure du faisceau de tubes en "U". À droite : vue des plaques entretoises et des passages foliés, source : EDF CEIDRE

Au bout de plusieurs années de fonctionnement des REP, des dépôts d'oxydes métalliques, issus de la corrosion des composants de l'installation, peuvent se produire dans le GV. On distingue, au sein du GV, deux types de dépôt de particules qui peuvent avoir des effets néfastes et perturber les performances de l'installation. On observe des dépôts de particules le long des tubes du circuit primaire ce qui a pour effet d'augmenter la résistance thermique entre les deux circuits et ce qui diminue le rendement de l'échangeur de chaleur. Ce type de dépôt affecte donc la performance de l'installation. On observe également des dépôts au niveau des passages foliés des plaques entretoises. Ces dépôts peuvent grossir et colmater progressivement la section de passage du fluide. Ce phénomène de dépôt provoque un blocage de l'écoulement au niveau du passage folié qui induit de fortes vitesses dans cette zone (car la réduction de la section de passage accélère la vitesse de l'écoulement), qui peuvent mettre en vibration les tubes en "U" et les endommager par fatigue mécanique (en allant de la simple fissuration jusqu'à la rupture du tube).

L'échange de chaleur entre le circuit primaire et secondaire génère de forts gradients de température au niveau de la paroi des tubes du circuit primaire. Or, en présence d'un gradient de température, les particules expérimentent une force de thermophorèse qui généralement les font se déplacer de la zone chaude vers la zone froide de l'écoulement. Appliqué au GV, ce mécanisme peut être à l'origine des dépôt observés en son sein. Dans le GV, la zone chaude est assimilée à la paroi des tubes en "U" et la zone froide (relativement aux tubes) comprend tout le reste du GV et notamment les plaques entretoises. Le mécanisme de thermophorèse, qui interviendrait au niveau des passages foliés, pourrait expliquer les dépôt observés dans cette zone. Il pourrait également freiner le dépôt de particules le long des parois des tubes en "repoussant" les particules vers l'écoulement du circuit secondaire qui est plus froid. Dans les deux cas, il convient de tenir compte du mécanisme de

thermophorèse dans la modélisation du dépôt de particules. De plus, comme nous le verrons dans la suite du manuscrit, dans un tel milieu liquide (écoulement du circuit secondaire dans le GV) les forces d'interaction physico-chimiques jouent un rôle important dans le dépôt de particules. Il est donc nécessaire d'en tenir compte également dans notre modélisation, surtout lorsqu'il s'agit d'un milieu liquide où ces effets physico-chimiques jouent un rôle important.

En résumé, si l'on veut prédire correctement les taux de dépôt observés dans les GV il faut prendre en compte l'ensemble des forces susceptibles d'agir sur le dépôt des particules (à savoir les forces de thermophorèse et d'interaction physico-chimique en plus des forces hydrodynamiques) dans la modélisation du dépôt de particules. Une bonne modélisation de l'ensemble des mécanismes responsables du dépôt donne accès aux zones préférentielles de dépôt dans les GV. Cette information permettra de cibler les zones à nettoyer dans le GV afin de supprimer les dépôts et permet ainsi de réduire la durée de nettoyage des GV ce qui représentera un gain considérable pour l'exploitant.

Un processus de dépôt découpé en quatre phases

Afin d'étudier l'ensemble du processus de dépôt, du dépôt d'une simple particule jusqu'au colmatage de la section de passage du fluide, le projet MOFPHET-C2 a découpé le processus de dépôt en quatre mécanismes élémentaires illustrés dans la Figure 4 :

1. **Le dépôt :** les particules présentes dans l'écoulement peuvent être transportées du cœur de l'écoulement à la zone de proche paroi où elles interagissent avec la couche limite turbulente. Ce premier mécanisme est généralement découpé en deux étapes : une étape de transport et une étape d'attachement. Au cours de l'étape de transport, les particules peuvent non seulement interagir avec des structures caractéristiques de l'écoulement qui peuvent favoriser le transport des particules vers la paroi mais aussi migrer en direction de la paroi en présence d'un gradient de température dans la zone de proche paroi. Les particules interagissent ensuite avec la paroi et peuvent y adhérer ou non en fonction des forces physico-chimiques qui s'appliquent dans cette zone. Cette étape de dépôt fait donc intervenir à la fois des aspects de mécanique des fluides liés au transport d'une particule par la turbulence du fluide, des aspects de thermodynamique liés au comportement des particules en présence d'un gradient de température de l'écoulement et, une fois que la particule est sur le point de se déposer, à des aspects physico-chimiques liés aux propriétés des particules, de l'écoulement et de la paroi (rugosité) qui créent des forces supplémentaires qui peuvent ou non favoriser le dépôt des particules

2. **Le ré-entraînement :** une fois que les particules adhèrent à la paroi, elles

peuvent être remises en mouvement et ré-entraînées vers le cœur de l'écoulement si les forces d'adhésion physico-chimiques qui maintiennent les particules à la paroi sont plus faibles que les forces hydrodynamiques de l'écoulement présentes à la paroi.

3. **L'agglomération :** en fonction des propriétés de l'écoulement, les particules peuvent aussi interagir entre elles et former des agglomérats de taille plus importante qui sont également susceptibles de se déposer à la paroi.

4. **Le colmatage :** le dépôt de plusieurs couches de particules forme des amas de taille croissante qui peuvent dans certains cas boucher la section de passage du fluide. Cette étape fait de nouveau appel à des aspects de physico-chimie responsables de la consolidation des dépôts et d'une meilleure adhérence à la paroi.

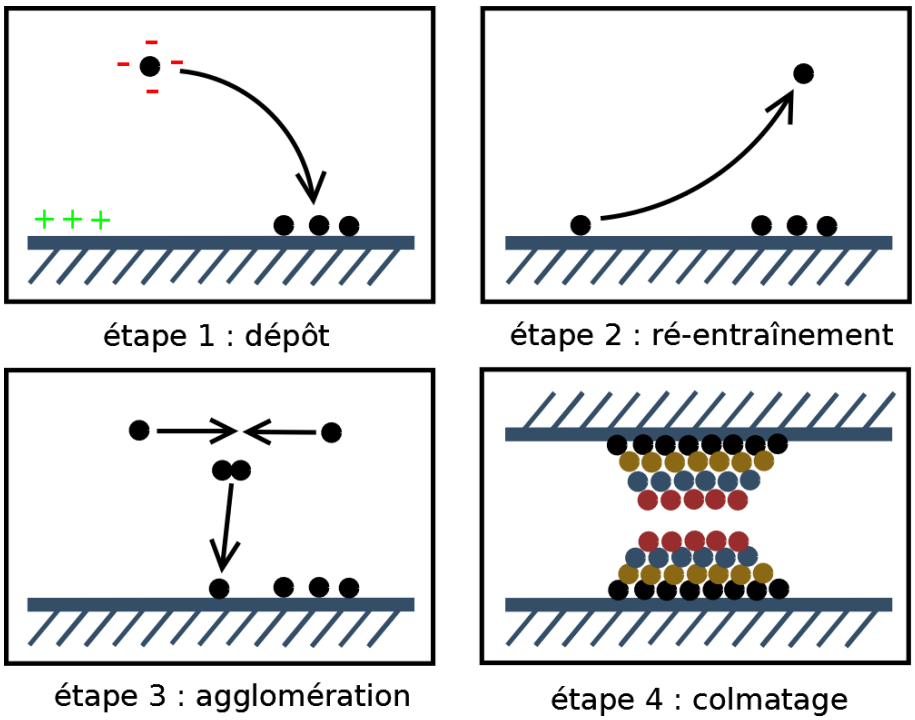


FIGURE 4 – Découpage du phénomène de dépôt de particules en 4 mécanismes élémentaires, source EDF R&D

L'objectif du projet MOFPHET-C2 est double :

- améliorer la compréhension des mécanismes individuels liés à la formation de dépôts sous écoulement en s'appuyant sur de la modélisation à l'échelle fine du mécanisme complet de dépôt (phases 1 à 4 de la Figure 4) et de l'expérimental (la boucle d'essai expérimentale, PERFIDE [71], est actuellement dédiée à l'étude de la formation de dépôts en conditions REP),

- implémenter le modèle physique dans une code de calcul numérique de CFD (en l'occurrence le code de CFD *Code_Saturne* qui est un code de CFD open source basé sur une méthode de volumes finis co-localisé, développé depuis 1998 à EDF R&D [3]).

L'approche adoptée

Afin de modéliser fidèlement le transport des particules dans la couche limite turbulente, une modélisation à l'échelle locale de l'interaction entre les particules et les structures turbulentes de l'écoulement est donc nécessaire. C'est dans cet esprit qu'il a été décidé de décrire l'évolution des particules par une approche lagrangienne. Cette approche permet de simuler sans approximation le transport des particules dans la zone de proche paroi. L'approche lagrangienne consiste à suivre l'évolution des caractéristiques d'un grand nombre de particules et donne accès aux statistiques intéressantes de cette population par simulation de Monte-Carlo [9] qui permet d'approcher la fonction densité de probabilité (PDF) de ces caractéristiques. L'approche lagrangienne fournit une information sur la densité de probabilité ce qui est plus riche que les seuls deux premiers moments comme nous l'expliquerons dans le premier chapitre du manuscrit.

Il est bon de préciser que les particules dont nous étudions le dépôt sont des particules colloïdales qui est une catégorie de particules de taille suffisamment faible pour lesquelles les forces browniennes deviennent plus importantes que les forces de gravité s'exerçant sur les particules. Le diamètre des particules colloïdales se situe entre la centaine de nanomètres et quelques micromètres. C'est d'ailleurs ce type de particules que l'on retrouve en suspension dans les GV.

Enjeux et objectifs de la thèse

Ce travail de thèse aborde le processus global de dépôt décrit ci-dessous sous l'angle de la première phase du processus (i.e. le mécanisme de dépôt d'une particule isolée). Les autres phases (agglomération, ré-entraînement et colmatage) ne sont pas étudiées, elles font l'objet d'autres travaux (on peut citer les travaux de Mohaupt et al. pour l'agglomération [55], ceux de Guingo et Minier [24] et de Henry et al. [30],[33] pour le ré entraînement, et les travaux de Henry et al. pour l'adhésion des particules à la paroi [32],[33] ainsi que pour le colmatage [31],[33]).

Un premier travail de thèse (Guingo et Minier [25]) a porté sur l'étude hydrodynamique de l'interaction entre les particules et la turbulence de proche paroi qui pilote le transport des particules vers le voisinage immédiat de la paroi. Ce travail a aboutit à la construction d'un Modèle de Proche Paroi qui permet de simuler le déplacement des particules induit par la structure hydrodynamique de l'écoulement dans la zone de proche paroi. Une partie de notre travail de thèse concerne l'amélioration du Modèle de Proche Paroi développé par Guingo et Minier [25] car, comme nous l'expliquerons dans la première partie de ce manuscrit, ce Modèle de Proche Paroi, qui calcule l'écoulement au voisinage de la paroi, est couplé avec un autre modèle (le Modèle de Langevin Généralisé) qui calcule le transport des particules dans le cœur de l'écoulement. La première partie de ce travail a donc porté sur l'amélioration du raccord de ces deux modèles.

Travailler sur le couplage des deux modèles est essentiel à une bonne prédiction du dépôt des particules colloïdales. Prendre en compte le transfert de chaleur pouvant amener à modifier ce dépôt de particules l'est tout autant. C'est pourquoi, j'ai dédié toute une deuxième partie de ce travail au phénomène de thermophorèse ayant une incidente flagrante sur les trajectoires de ces particules et à fortiori sur leur dépôt. En effet, dans le cadre d'un écoulement non isotherme (e.g une paroi chauffant), il est naturel de se poser la question de l'influence du gradient de température sur la vitesse de dépôt des particules. La deuxième partie du présent travail de thèse porte donc sur le raffinement du Modèle de Proche Paroi aux écoulements non isothermes afin de tenir compte du mécanisme de thermophorèse, induit par un gradient de température, dans la modélisation du dépôt de particules. De plus, comme nous le verrons dans le dernier chapitre de cette thèse, la thermophorèse en milieu liquide est un sujet d'étude en cours d'exploration (il ne dispose pas encore d'explication théorique unifiée et dispose de peu d'études expérimentales de thermophorèse en milieu liquide). L'intégration de la thermophorèse en milieu liquide dans la modélisation du dépôt de particules présente donc un caractère novateur.

Plan du manuscrit

Ce manuscrit se découpe donc en deux parties. La première partie comprend trois chapitres et porte sur le raccord des deux modèles lagrangiens stochastiques développés pour simuler le dépôt de particules colloïdales. Tandis que la deuxième partie, qui comprend trois chapitres, est consacrée à l'extension du Modèle de Proche Paroi aux écoulements non isothermes (présentant un gradient de température) afin de prendre en compte le mécanisme de thermophorèse dans le dépôt de particules.

Le premier chapitre présente les deux modèles utilisés pour calculer le déplacement d'une particule dans le cœur de l'écoulement d'une part (Modèle de Langevin Généralisé) et au voisinage de la paroi d'autre part (Modèle de Proche Paroi).

Le second chapitre traite du raccord entre ces deux modèles. Comme nous l'observerons dans la suite du manuscrit, la nature stochastique de chaque modèle est très différente et leur couplage fait intervenir des notions de calcul stochastique très pointues ce qui fait que ce chapitre est très technique. Cependant c'est une étape nécessaire qui, si elle n'est pas prise en compte, aboutit à une mauvaise prédiction du comportement des particules autour de l'interface entre les deux modèles. Ces travaux ont été présentés en juin 2013 à l'International Conference on Multiphase Flows (ICMF 2013) et ont été soumis à la revue Particulate Science and Technology [44].

Le troisième chapitre de ce manuscrit permet de valider le travail de couplage des modèles via des calculs numériques de dépôt de particules qui sont comparés aux résultats de dépôt expérimentaux de la littérature.

La deuxième partie commence par présenter pourquoi le modèle en l'état est insuffisant pour calculer le déplacement d'une particule induit par un gradient de température (mécanisme de thermophorèse).

Le cinquième chapitre présente la formulation retenue pour modéliser la thermophorèse dans un écoulement d'air, ce chapitre est un préambule au dernier chapitre qui traite de la thermophorèse en milieu liquide car, comme nous le verrons, la thermophorèse en milieu gazeux est largement expliquée dans la littérature (que ce soit d'un point de vue théorique, expérimental ou numérique) alors que le littérature existante souffre d'un manque important lorsqu'il s'agit d'étudier la thermophorèse en milieu liquide. Ces travaux ont également été présentés à l'ICMF.

Ainsi, le sixième chapitre traite de la thermophorèse en milieu liquide qui est une étude préliminaire mais qui, somme toute, est novatrice par rapport à la littérature existante. Ce dernier chapitre a pour vocation de réaliser des simulations numériques de dépôt en conditions industrielles (e.g. le dépôt de particules dans un GV), où de forts gradients de température à la paroi peuvent fortement influencer la vitesse de dépôt des particules en suspension dans l'écoulement liquide. Dans ce dernier chapitre nous présenterons de nouveaux résultats numériques de dépôts de particule dus à la thermophorèse en milieu liquide.

Première partie

La modélisation lagrangienne stochastique pour l'étude du dépôt de particules

Chapitre 1

La modélisation lagrangienne stochastique

1.1 L'approche hybride "champ moyen"/"particulaire stochastique"

Le terme *écoulement multiphasique* désigne la catégorie d'écoulements qui comporte au moins deux phases immiscibles. Dans le cadre de notre étude, nous nous limiterons aux écoulements turbulents diphasiques. Lorsque l'une des deux phases est présente sous forme d'inclusions dispersées dans une phase continue turbulente et que ces inclusions sont caractérisées par une distribution en taille, on parle d'écoulements turbulents disphasique polydispersés. Le but de ce chapitre est de présenter l'approche de modélisation adoptée pour simuler ces écoulements. Pour cela, nous allons tout d'abord rappeler les équations qui régissent l'évolution de la phase continue (appelée fluide dans la suite du manuscrit) et de la phase dispersée (appelée particules).

1.1.1 Description de la phase continue

Afin de simplifier l'écriture des équations, nous nous limiterons aux écoulements incompressibles à masse volumique constante. Les équations exactes qui décrivent l'évolution spatiale et temporelle du fluide sont l'équation de continuité (1.1) et l'équation de Navier-Stokes (1.2) :

$$\frac{\partial U_{f,i}}{\partial x_j} = 0 \tag{1.1}$$

$$\frac{\partial U_{f,i}}{\partial t} + U_{f,j}\frac{\partial U_{f,i}}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_f}\frac{\partial P}{\partial x_i} + \nu_f \frac{\partial^2 U_{f,i}}{\partial {x_j}^2} \tag{1.2}$$

où $U_{f,i}$ représente la vitesse instantanée du fluide dans la direction i et P la pression du fluide. Les équations de Navier-Stokes (1.2) permettent de résoudre une grande majorité d'écoulements (pour un fluide newtonien) naturels ou industriels, qu'ils soient turbulents ou non. Or, la multiplicité des échelles temporelles et spatiales des structures du champ de vitesse (taille et durée de vie des tourbillons) rend la résolution numérique des équations de Navier-Stokes très difficile car elle nécessiterait une forte puissance de calcul et des coûts de calcul faramineux (le nombre de degrés de liberté d'un écoulement turbulent est de l'ordre de $Re^{9/4}$). La résolution exacte des équations de Navier-Stokes ne peut se faire que dans des cas simples et à faibles nombres de Reynolds. Au délà, une alternative consiste à ne résoudre que les grandeurs moyennes de l'écoulement (vitesse, pression etc.). Pour cela on pratique la décomposition de Reynolds sur les inconnues du problème qui consiste à écrire une grandeur comme la somme d'une valeur moyenne et d'une fluctuation, e.g. la décomposition du champ de vitesse fluide s'écrit : $U_{f,i} = \langle U_{f,i} \rangle + u_{f,i}$ puis on applique l'opérateur moyenne d'ensemble $\langle \cdot \rangle$ à l'équation (1.2). Les équations de Navier-Stokes ainsi moyennées, appelées équations RANS (pour Reynolds Averaged Navier Stokes equations), sont ensuite résolues à l'aide de modèles de fermeture de type $k - \epsilon$ (premier ordre) ou $R_{ij} - \epsilon$ (second ordre). La résolution des équations RANS permet de connaître, sur un maillage, les deux premiers moments du champ de vitesse (champ de vitesse moyen $\langle U_{f,i} \rangle(x,t)$ et corrélations du second ordre $\langle u_{f,i} u_{f,j} \rangle(x,t)$) mais le champ de vitesse instantané $U_{f,i}(x,t)$ reste inconnu. Nous noterons qu'en conséquence de cela, cette méthode de résolution numérique dépend fortement de la manière de discrétiser l'écoulement (taille des mailles).

Dans ce présent travail, nous utiliserons le code de CFD *Code_Saturne* (qui est un code de CFD open source basé sur une méthode de volumes finis co-localisé et développé depuis 1998 à EDF R&D [3]) pour la résolution de la phase phase fluide avec le modèle de turbulence de type RANS $R_{ij} - \epsilon$.

1.1.2 Description de la phase dispersé

Pour les particules, on écrit le principe fondamental de la dynamique sur chaque particule. Les forces qu'exercent un écoulement turbulent sur des particules sont nombreuses. Cependant, lorsque les particules sont suffisamment denses ($\rho_p \gg \rho_f$), le bilan des forces se réduit aux forces de traînée et de gravité. Le mouvement de chaque particule est alors décrit par le système suivant :

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}x_p}{\mathrm{d}t} = U_p \\ \dfrac{\mathrm{d}U_p}{\mathrm{d}t} = \dfrac{U_s - U_p}{\tau_p} + g \end{cases} \tag{1.3}$$

où x_p représente la position de la particule, U_p sa vitesse et U_s la *vitesse de fluide vu* qui correspond à la vitesse du fluide à la position de la particule i.e. $U_s = U_f(x_p, t)$. La force de traînée dépend de l'inertie τ_p de la particule, qui est une échelle de temps de relaxation qui mesure le temps nécessaire à la particule pour s'ajuster à la vitesse locale du fluide (e.g. les particules dont l'inertie est infiniment petite ($\tau_p \to 0$) réagissent quasi instantanément aux perturbations de l'écoulement, elles se comportent comme le fluide, on parle alors de *particules fluides*). L'inertie d'une particule s'exprime ainsi :

$$\tau_p = \frac{\rho_p}{\rho_f} \frac{4 d_p}{3 C_D |U_s - U_p|}. \tag{1.4}$$

ρ_p et ρ_f représentent respectivement la masse volumique d'une particule et du fluide et d_p le diamètre d'une particule. C_D est le coefficient de traînée, il est donnée par des corrélations empiriques. Pour une sphère (la particule sera considérée sphérique dans le suite de nos travaux), le coefficient de traînée, C_D s'exprime de la manière suivante :

$$C_D = \begin{cases} \dfrac{24}{Re_p}\left(1 + 0,15 Re_p^{0,687}\right) & \text{si } Re_p \leq 1000 \\ \\ 0,44 & \text{si } Re_p \geq 1000 \end{cases} \tag{1.5}$$

avec Re_p, le nombre de Reynolds particulaire :

$$Re_p = \frac{d_p |U_s - U_p|}{\nu_f} \tag{1.6}$$

où ν_f est la viscosité cinématique du fluide. La vitesse de fluide vu, U_s (Eq. (1.3)), qui est nécessaire pour la simulation des trajectoires de particules n'est pas connue et doit donc être reconstituée.

La modélisation du dépôt de particules est donc assurée par une approche hybride de type "champs-moyens"/particulaire où la phase continue est décrite par une approche eulérienne et la phase dispersée par une approche lagrangienne. Il est important de souligner que, dans une telle approche hybride, les informations de la phase fluide fournies par l'utilisation d'un modèle RANS sont des grandeurs moyennées tandis que le suivi lagrangien de particules fait appel à des grandeurs instantanées. Afin de lier ces deux approches et donc de fermer le système "champ

moyen"/"grandeur instantanée" on fait appel aux *méthodes PDF* qui ont principalement été développées par l'équipe de Pope ([61] et [62]). C'est donc dans le cadre du formalisme de ces méthodes PDF qu'a été élaboré le modèle stochastique lagrangien que nous allons décrire dans la section suivante.

1.2 Le Modèle de Langevin Généralisé

L'objectif de la modélisation lagrangienne est de reconstruire la vitesse de fluide vu U_s (i.e. la vitesse instantanée du fluide le long de la trajectoire de la particule) à partir des champs moyens de l'écoulement.

Nous allons à présent décrire brièvement le Modèle de Langevin Généralisé (MLG) développé par Miner et Peirano [52] pour simuler les écoulements turbulents diphasiques polydispersés.

Dans le MLG, chaque particule est représentée par son vecteur d'état (x_p, U_p, U_s) et le déplacement d'une particule est modélisé par le système suivant :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \mathrm{d}x_p(t) & = & U_p \mathrm{d}t \\ \mathrm{d}U_p(t) & = & \dfrac{U_s - U_p}{\tau_p} \mathrm{d}t + g \mathrm{d}t \\ \mathrm{d}U_s(t) & = & A\left(\langle U_{f,i} \rangle, \langle u_{f,i} u_{f,j} \rangle, \langle P \rangle, t\right) \mathrm{d}t + B\left(\langle U_{f,i} \rangle, \langle u_{f,i} u_{f,j} \rangle, \langle P \rangle, t\right) \mathrm{d}W_t \end{array} \right. \tag{1.7}$$

La vitesse de fluide vu U_s est modélisée par une équation différentielle stochastique. C'est une équation de Langevin où $A\left(U_s, t\right)$ et $B\left(U_s, t\right)$ sont respectivement les coefficients de dérive et de diffusion du processus U_s et $\mathrm{d}W$ l'incrément de Wiener. Pour plus d'informations sur les processus stochastiques on peut s'intéresser aux récents travaux de Chibbaro et Minier [9] qui offrent une description générale des méthodes stochastiques pour la mécanique des fluides. Le détail des coefficients de dérive et de diffusion du processus U_s est donné dans les travaux de Minier et Peirano [52]. L'équation différentielle stochastique sur la vitesse de fluide vu U_s a pour objectif de reconstruire la turbulence du fluide à partir des statistiques moyennes de l'écoulement (champ de pression moyen $\langle P \rangle$ et les deux premiers moments de la vitesse du fluide $\langle U_{f,i} \rangle(x,t)$ et $\langle u_{f,i} u_{f,j} \rangle(x,t)$). Sachant que la modélisation de la vitesse de fluide vu se fait à partir des grandeurs précédemment citées, qui sont moyennées sur un maillage, la variation de ces grandeurs doit donc rester raisonnable afin de pouvoir reproduire correctement l'écoulement fluide. Ceci implique que dans les zones de forte anisotropie de l'écoulement, le maillage doit être suffisamment fin afin de capter ces variations. Ainsi, si l'on souhaite modéliser fidèlement l'écoulement dans la zone de proche paroi avec le Modèle de Langevin Généralisé il faut

générer un maillage suffisamment fin qui capte correctement le profil de pression moyen ainsi que le profil des deux premiers moments de la vitesse du fluide ([62] et [52]).

Il est important de rappeler que les modèles développés sont destinés à être employés pour la simulation d'écoulements diphasiques industriels qui sont généralement étudiés sur des maillages importants (compte tenu des dimensions importantes des installations industrielles). Cependant, la dimension des maillages créés pour simuler ce type d'écoulement doit rester raisonnable afin ne pas générer des coûts de calculs trop importants. Comme nous venons de l'évoquer, certaines zones d'un écoulement turbulent (notamment dans la zone de proche paroi) présentent de fortes variations des grandeurs moyennes de l'écoulement (vitesse moyenne, énergie cinétique, etc.) et ces variations ne sont pas captées si le maillage est trop grossier dans ces zones de forte anisotropie. Or l'utilisation de ces modèles sur des cas industriels nous impose des tailles de mailles importantes. Compte tenu de la restriction sur la taille des mailles, le Modèle de Langevin Généralisé ne peut donc pas être employé pour simuler le transport des particules dans la zone de proche paroi qui est une zone de forte anisotropie. Pour ces raisons, un Modèle de dépôt de Proche Paroi a été développé par Guingo et Minier [25],[24] afin de simuler le dépôt des particules dans un écoulement turbulent confiné. Comme nous le verrons dans la prochaine section, ce modèle est basé sur une représentation fine de la turbulence de proche paroi et des interactions qui en découlent avec les particules. Cette approche permet de conserver des tailles de mailles raisonnables et peut être appliquée au calcul d'écoulements industriels complexes.

1.3 Le Modèle de dépôt de Proche Paroi

Le Modèle de dépôt de Proche Paroi (MPP) est basé sur une approche phénoménologique qui vise à identifier les structures de l'écoulement dans la couche limite turbulente qui jouent un rôle prépondérant dans le dépôt de particules à la paroi. Le but de cette section n'est pas de reproduire la démarche de construction du MPP (qui est entièrement détaillée dans [25] et [24]) mais de présenter les principales caractéristiques de ce modèle de proche paroi.

Ce modèle simule le comportement d'une particule dans la couche limite turbulente d'un écoulement confiné. Il se découpe en deux zones, une zone interne qui correspond à la sous-couche visqueuse de la couche limite et une zone externe qui comprend la zone logarithmique de la couche limite. De plus, ce modèle ne s'applique que dans la direction normale à la paroi car des études expérimentales et numériques ([36], [42] et [2]) ont montré que le transport de particules à la paroi est principalement dû à des structures caractéristiques de l'écoulement turbulent perpendiculaires à la paroi. Le MLG calcule le transport des particules dans les deux autres directions (longitudinale et transversale). La structure du MPP est représentée en Figure 1.1.

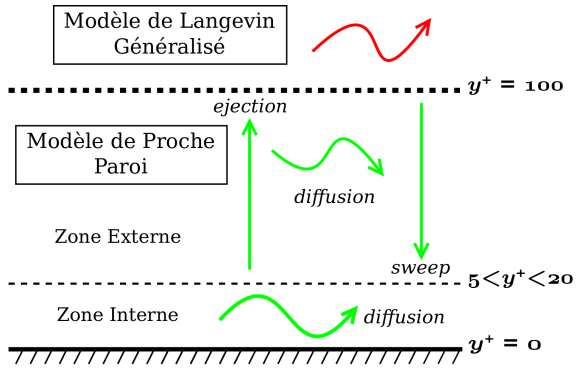


FIGURE 1.1 – Structure 1D du modèle de dépôt de proche paroi

Le mouvement des particules dans le MPP est régi par le système d'équation suivant (Eq. (1.8)) :

$$\begin{cases} \mathrm{d}y_p &= V_p \mathrm{d}t \\ \mathrm{d}V_p &= \dfrac{V_s - V_p}{\tau_p}\mathrm{d}t + g\mathrm{d}t \\ \mathrm{d}V_s &= \text{Modèle} \end{cases} \tag{1.8}$$

La particule est représentée par le même vecteur d'état (y_p, V_p, V_s) que celui de modèle de Langevin mais la vitesse de fluide vu V_s est modélisé différemment dans chaque zone afin de reproduire les caractéristiques de l'écoulement turbulent dans chaque zone de la couche limite. Nous allons a présent décrire la modélisation de la vitesse de fluide vu dans ces zones.

1.3.1 La zone externe

La construction de la **zone externe** (Figure 1.1) vient d'une approche phénoménologique. Des études expérimentales [36] et numériques [42], [2] ont montré que le transport des particules dans la direction normale à la paroi est principalement causé par des structures cohérents de type sweep (structure de l'écoulement fluide qui amène la particule vers la paroi) et de type éjection (structure de l'écoulement fluide qui renvoie la particule vers le coeur de l'écoulement). La modélisation de la vitesse de fluide vu dans cette zone est donc une succession d'événements cohérents et de phases de diffusion où la particule réside dans une phase de l'écoulement plus aléatoire. Un processus de saut parent pilote l'alternance entre les structures turbulentes et les phases de diffusion. Le processus de saut $S(t)$ peut prendre trois valeurs 1, 2 et 3, lorsque $S(t) = 1$ la particule est dans une structure turbulente de type

sweep, sa vitesse vaut $-V_{\text{struc}}$, lorsque $S(t) = 3$ sa vitesse vaut $+V_{\text{struc}}$ et lorsque $S(t) = 2$ sa vitesse est modélisée par un processus de diffusion :

$$\mathrm{d}V_s = -\frac{V_s}{T_L}\mathrm{d}t + K_{\text{ext}}\mathrm{d}W_t \tag{1.9}$$

où K_{ext} est le coefficient de diffusion du processus V_s et T_L le temps de corrélation lagrangien qui mesure la mémoire du processus V_S. Un exemple de la trajectoire d'une particule dans la zone externe est représenté sur la Figure 1.2. Les états du processus de saut $S(t)$ figurent en pointillés sur le graphe. On remarque que la particule suit une trajectoire rectiligne lorsqu'elle est dans une structure turbulente et que sa trajectoire est plus aléatoire lorsqu'elle se trouve dans une phase de diffusion.

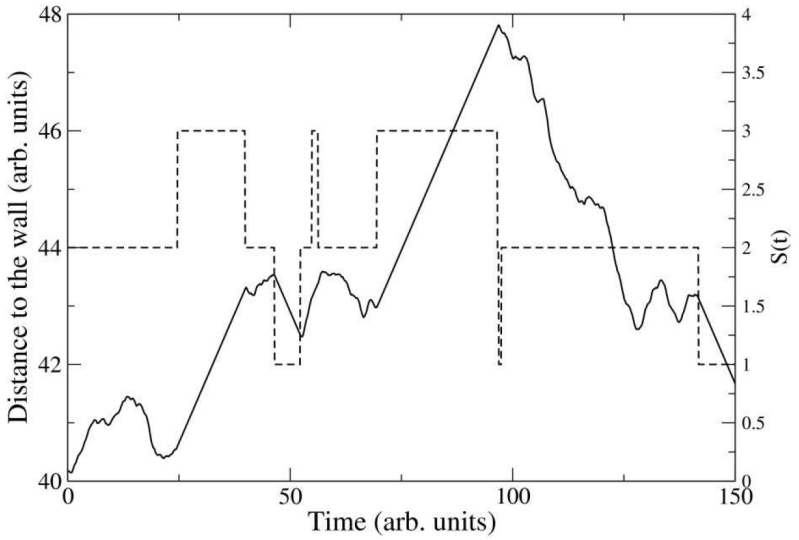


FIGURE 1.2 – Trajectoire d'une particule dans la zone de proche paroi, source : Guingo et Minier [25]

1.3.2 La zone interne

Contrairement à la zone externe, la **zone interne** est dépourvue de structures cohérentes car dans dans cette région de l'écoulement, l'intensité des structures cohérentes décroît et devient faible devant l'intensité de diffusion turbulente. La modélisation doit en outre reproduire les profils de vitesse normale $\langle V_s \rangle$ et de variance des fluctuations normales $\langle {u_s}^2 \rangle$ correspondants aux études de DNS (cf. [1]). Pour ces raisons, les paramètres du modèle deviennent dépendants de la distance à la paroi afin de tenir compte de la décroissance des grandeurs de l'écoulement dans cette

zone. La vitesse de fluide vu est donc modélisée par un processus de diffusion :

$$\mathrm{d}V_s = A_{\mathrm{int}}(y_p^+)\mathrm{d}t - \frac{V_s}{T_L}\mathrm{d}t + K_{\mathrm{int}}(y_p^+)\mathrm{d}W_t. \tag{1.10}$$

La valeur du coefficient $A_{\mathrm{int}}(y_p^+)$ est donné dans les travaux de Guingo et Minier [25]. La valeur du coefficient de diffusion $K_{\mathrm{int}}(y_p^+)$ est choisie afin d'établir l'équilibre entre la zone interne et la zone externe du Modèle de Proche Paroi. Elle est obtenue théoriquement par la condition d'équilibre des flux de particules traversant l'interface entre les deux zones (le principe de cette démarche est entièrement détaillé dans le deuxième chapitre de ce manuscrit Section 2.1). La valeur du coefficient est la suivante [25] :

$$K_{\mathrm{int}}(y_p^+) = \begin{cases} \dfrac{K_{\mathrm{int}}(y_{\mathrm{interf}}^+)}{2}\left(1 - \cos\left(\dfrac{\pi y_p^+}{5}\right)\right) & \text{si } y_p^+ \leq 5 \\ K_{\mathrm{int}}(y_{\mathrm{interf}}^+) & \text{si } y_p^+ \geq 5 \end{cases} \tag{1.11}$$

avec $K_{\mathrm{int}}(y_{\mathrm{interf}}^+)$, le coefficient de diffusion à l'interface zone / externe qui vaut :

$$K_{\mathrm{int}}(y_{\mathrm{interf}}^+) = \frac{\tau_d}{\tau_s + \tau_d} K_{\mathrm{ext}} \tag{1.12}$$

où τ_d et τ_s sont les temps caractéristiques respectivement d'une phase de diffusion et d'une structure turbulente de la zone externe. La démarche pour obtenir l'expression du coefficient de diffusion de la zone externe, K_{ext} fait l'objet de la première section du chapitre suivant (Section 2.1).

De plus, le mouvement Brownien étant plus important dans la couche limite visqueuse, son effet a été ajouté dans le bilan de forces agissant sur la particule :

$$\mathrm{d}V_p = \frac{V_s - V_p}{\tau_p}\mathrm{d}t + g\mathrm{d}t + K_{\mathrm{bro}}\mathrm{d}W_t. \tag{1.13}$$

Le coefficient de diffusion brownien K_{bro} est donné par le théorème d'équipartition de l'énergie [70] :

$$K_{\mathrm{bro}} = \sqrt{\frac{2k_B T_f}{m_p \tau_p}} \tag{1.14}$$

où k_B est la constante de Boltzman, T_f la température de l'écoulement vu par la particule et m_p la masse de la particule. Contrairement aux autres grandeurs du modèle dans la zone interne, le coefficient de diffusion brownien ne dépend pas de la distance à la paroi et son importance est grandissante lorsque l'on se rapproche de la paroi puisque $K_{\mathrm{int}} \to 0$ quand $y_p \to 0$. Notons que K_{bro} dépend de la température

de l'écoulement T_f.

Le Modèle de Proche Paroi présente deux interfaces, l'une entre la zone interne et la zone externe, l'autre entre la zone externe et le coeur de l'écoulement qui est calculé par le Modèle de Langevin Généralisé. Le traitement du raccord des deux interfaces est assuré par l'égalité du flux de particules qui les traversent. Dans les deux cas, cela conduit à une expression pour le coefficient de diffusion de chaque zone (K_{int} et K_{ext}). Pour l'interface interne, il s'agit de raccorder deux processus stochastiques de diffusion sachant que seules les particules en phase de diffusion peuvent traverser l'interface. En revanche, le traitement de l'interface externe est plus ardu car les particules peuvent quitter la zone de proche paroi dans une structure d'éjection ou dans une phase de diffusion. Cette complexité nécessite un traitement supplémentaire qui fait l'objet du chapitre suivant.

Conclusion partielle

Nous avons présenté dans ce chapitre, l'approche de modélisation adoptée pour simuler les écoulements disphasiques. Il s'agit d'une approche hybride dans laquelle le fluide est décrit par une méthode dite Eulérienne qui fournit les champs moyens sur un maillage a l'aide d'un modèle de turbulence (modele RANS de type $R_{ij}-\epsilon$) et dans laquelle les particules sont décrites par une méthode Lagrangienne qui consiste a suivre les trajectoires d'un nombre statistiquement représentatif de particules dans l'écoulement. Dans cette approche hybride, l'information fournie par la description Eulérienne du fluide étant limitée (typiquement aux deux premiers moments), les vitesses fluides instantanées qui sont nécessaires pour la simulation des trajectoires de particules solides sont reconstituées par des modèles lagrangiens stochastiques.

La particularité de la modélisation du transport des particules dans un écoulement turbulent confiné est qu'elle est la coordination de deux modèles : le Modèle de Langevin Généralisé (MLG) (développé par Minier et Peirano en 2001 [52]) qui calcule le transport des particules dans le cœur de l'écoulement et le Modèle de Proche Paroi (MPP) (développé par Guingo et Minier en 2008 [25]) qui calcule le déplacement des particules au voisinage de la paroi. Dans ces modèles, chaque particule est représentée par le même vecteur d'état qui comprend la position de la particule, sa vitesse et la vitesse de fluide vu qui correspond à la vitesse instantanée du fluide à la position de la particule. Cependant, la modélisation de la vitesse de fluide vu diffère d'un modèle à l'autre.

La construction du MPP est le résultat d'une approche phénoménologique qui a identifié que certaines structures cohérentes de l'écoulement dans la zone de proche paroi sont responsables du déplacement des particules en direction de la paroi. Le MPP se découpe en deux zones, une zone externe qui comprend la zone logarithmique de la couche limite de l'écoulement et qui est le siège d'évènement cohérents de type sweep et ejection et de phases de diffusion plus aléatoires. La modélisation de la

vitesse de fluide vu dans cette zone est donc une alternance entre un processus déterministe pour les structures cohérentes et un processus stochastique de diffusion pour les phases de diffusion. La zone interne du MPP qui comprend la sous-couche est dépourvue de structures cohérentes et la vitesse de fluide vu est modélisée par un processus stochastique de diffusion tout comme dans le MLG. Les deux modèles sont couplés au niveau de leur interface qui est située à la fin de la zone logarithmique de la couche limite. Le raccord du MLG avec le MPP fait l'objet du chapitre suivant.

Chapitre 2

Le couplage des deux modèles lagrangiens stochastiques

Ce chapitre traite de la démarche adoptée pour raccorder le Modèle de Langevin Généralisé (MLG) au Modèle de Proche Paroi (MPP) qui calculent respectivement le déplacement d'une particule dans le cœur de l'écoulement et dans la zone de proche paroi.

La difficulté du couplage se comprend lorsque l'on s'intéresse aux caractéristiques de chaque modèle au voisinage de l'interface. Comme nous l'avons expliqué précédemment (Section 1.2 et Section 1.3), la modélisation de la vitesse de fluide vu U_s diffère d'un modèle à l'autre. En effet, contrairement au MLG dont la description du fluide est réalisée par un processus de diffusion, celle de la zone externe du MPP présente une petite complexité induite par le processus de saut (qui pilote l'alternance entre une phase de diffusion et une structure cohérente). Cette caractéristique étant le résultat d'une approche phénoménologique qui a pour objectif de modéliser de la façon la plus fidèle le comportement des particules colloïdales dans la couche limite turbulente. La Figure 2.1 illustre cette différence entre les deux modèles. Les courbes représentent la fonction densité de probabilité (PDF) de la vitesse de fluide vu U_s dans chaque modèle. Ces courbes ont été obtenues par simulation de Monte Carlo [9].

Nous sommes en présence de deux processus stochastiques très différents (cf. Figure 2.1) que nous devons coupler afin de simuler le transport d'une particule dans l'ensemble de l'écoulement. L'interface entre les deux modèles crée une discontinuité dans la description de la vitesse de fluide vu. L'objectif de ce couplage est donc de rendre l'interface invisible en assurant la continuité des grandeurs principales de l'écoulement au passage de l'interface (comme nous l'expliquerons dans la suite de ce chapitre, il s'agit de la concentration en particules fluide).

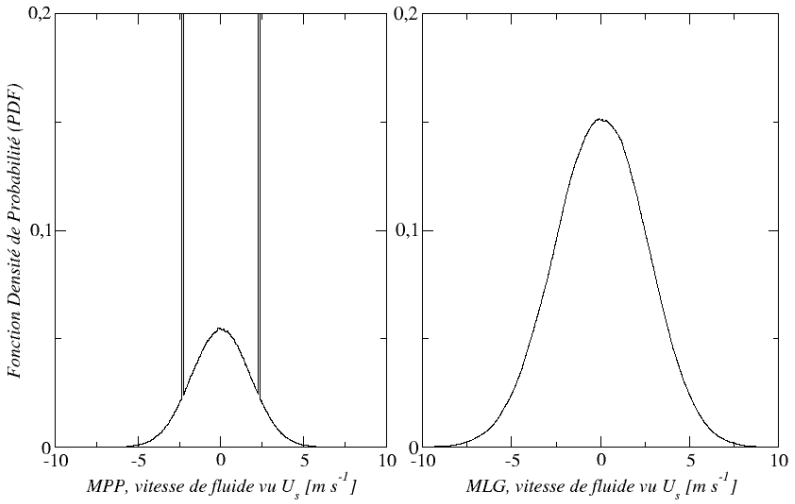


FIGURE 2.1 – PDF des vitesses de fluide vu U_s. A gauche, dans le MPP avec l'alternance structure cohérente de type sweep/ejection (distributions de Dirac) et phase de diffusion (distribution gaussienne). A droite, la distribution gaussienne du MLG.

Nous avons identifié deux critères afin de valider le couplage de ces modèles lagrangien stochastiques : la validation par les particules fluides et l'adéquation aux résultats expérimentaux de dépôt de particules colloïdales ([59] et [39]). Ce chapitre traite du premier critère, la validation par les particules fluides qui est nécessaire dans le cadre d'une démarche de validation d'un modèle lagrangien (cette démarche de validation sera détaillée dans la Section 2.1 de ce chapitre). C'est une étude à la fois théorique et numérique. Le Chapitre 3 abordera le deuxième critère qui est plus physique puisqu'il s'agit de se confronter aux résultats expérimentaux de dépôt disponibles dans la littérature.

2.1 Traitement du raccord à l'interface : égalité des flux de particules

Les travaux de couplage sont validés par le passage en particules fluides. La validation par les particules fluides est une étape cruciale dans la construction d'un modèle lagrangien. Elle consiste à vérifier que lorsque le modèle est utilisé avec des particules fluides ($\tau_p^+ \to 0$), non seulement les caractéristiques connues d'un écoulement (profils de vitesse, de variance, etc.) sont bien retrouvées. Mais surtout que l'écoulement ne comporte aucune accumulation non physique de particules fluides (phénomène de "spurious drift" [46]) i.e. que la concentration en particules fluides est uniforme dans tout l'écoulement. En d'autres termes, cela revient à respecter l'équation de conservation de la masse dans tout le domaine. La validation par les particules fluides s'avère très utile dans le cas d'écoulements à géométrie complexe où les statitisques de l'écoulement ne sont pas toujours connues.

Nous cherchons donc à assurer une répartition uniforme des particules fluides dans tout le domaine, notamment autour de l'interface. Sachant que les particules qui traversent l'interface ont toutes la même masse car ce sont des particules fluides, la conservation de la masse autour de l'interface est assurée par l'égalité du flux de particules fluides issues du cœur de l'écoulement et pilotées par le MLG ($\mathcal{F}_{1\to2}$ dans la Figure 2.2) avec le flux de particules fluides issues de la zone de proche paroi, pilotées par le MPP ($\mathcal{F}_{2\to1}$ dans la Figure 2.2).

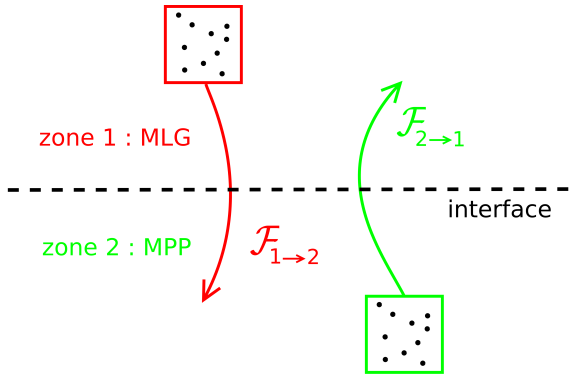


FIGURE 2.2 – Schéma des flux de particules traversant une interface entre deux zones

De manière générale, le flux de particules se déplaçant d'une zone 1 vers une zone 2 s'exprime de la manière suivante [54] :

$$\mathcal{F}_{1\to2} = C_p \int_0^{+\infty} v p_1(v)\,\mathrm{d}v \tag{2.1}$$

où C_p est la concentration volumique de particules et p_1 la PDF de la vitesse des particules fluides dans la zone 1.

L'interface entre les deux modèles (à $y^+ = 100$) se situe dans la zone logarithmique de la couche limite, et dans cette zone, les composantes du tenseur de Reynolds sont constantes [62]. De ce fait, les paramètres du coefficients de dérive et de diffusion du processus U_s sont constants (U_s est un processus d'Ornstein Uhlenbeck [58]). La PDF de la vitesse de fluide vu du MLG est donc gaussienne et s'écrit :

$$p_1(v) = \frac{1}{\sigma_1\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{v^2}{2{\sigma_1}^2}\right) \tag{2.2}$$

où σ_1 est l'écart type du processus U_s dans le MLG :

$$\sigma_1 = \sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{\frac{kC_0}{1 + (3/2)C_0}} \tag{2.3}$$

C_0 est un paramètre actuellement fixé à 2.1 et k représente l'énergie cinétique turbulente du fluide.

En réinjectant Eq. (2.2) dans Eq. (2.1), on obtient l'expression du flux $\mathcal{F}_{1\to2}$ de particules issues du MLG :

$$\mathcal{F}_{1\to2} = C_p \frac{\sigma_1}{\sqrt{2\pi}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{kC_0}{1 + (3/2)C_0}} \tag{2.4}$$

En procédant de la même manière [25] on obtient l'expression du flux $\mathcal{F}_{2\to1}$ de particules issues de la zone de proche paroi et se dirigeant vers le coeur de l'écoulement :

$$\mathcal{F}_{2\to1} = C_p \left(\frac{1}{2}\frac{\tau_s}{\tau_s + \tau_d} V_s + \frac{\tau_d}{\tau_s + \tau_d}\frac{\sigma_2}{\sqrt{2\pi}}\right) \tag{2.5}$$

où τ_d et τ_s représentent respectivement le temps caractéristique d'une phase de diffusion et d'une structure cohérente dans la zone externe de MPP. L'écart type σ_2 du processus U_s dans une phase de diffusion du MPP s'écrit :

$$\sigma_2 = K_{\text{ext}} \sqrt{\frac{T_L}{2}}. \tag{2.6}$$

L'égalité des flux ($\mathcal{F}_{1\to2} = \mathcal{F}_{2\to1}$) qui s'obtient en égalisant Eq. (2.4) et Eq. (2.5), donne une expression du coefficient de diffusion K_{ext} de la zone externe du MPP :

$$K_{\text{ext}} = \frac{\tau_s + \tau_d}{\tau_d\sqrt{T_l}}\left(\sqrt{\frac{2kC_0}{1+(3/2)C_0}} - \sqrt{\pi}\frac{\tau_s}{\tau_s+\tau_d}V_s\right). \tag{2.7}$$

Nous venons de détailler la démarche mise en oeuvre pour assurer l'équilibre des flux de particules à l'interface entre la zone externe du Modèle de Proche Paroi et le Modèle de Langevin Généralisé. Cette démarche a abouti à l'expression du coefficient de diffusion de la zone externe K_{ext}. Nous rappelons que l'égalité des flux de particules a pour objectif de raccorder les deux modèles en rendant la présence de l'interface invisible. Afin de tester cette condition de raccord, nous avons effectué des calculs numériques avec des particules fluides. Les résultats de l'étude numérique sont décrits dans la section suivante.

2.2 Résultats numériques

Dans le cadre de la démarche de validation par les particules fluides (cf. premier paragraphe de la Section 2.1), nous présentons quelques résultats numériques qui permettent d'observer le comportement des particules fluides autour de l'interface entre le MLG et le MPP. Pour cela, nous étudions un écoulement d'air dans un canal plan à section carré de côté c et de longueur L, les caractéristiques de l'écoulement, celles du domaine d'étude ainsi que les paramètres du calcul numérique sont renseignés dans le Tableau 2.1. Tous les calculs numériques de ces travaux de thèse ont été effectués avec le code de CFD *Code_Saturne* qui est basé sur une méthode de volumes finis co-localisé et développé depuis 1998 à EDF R&D [3]. L'écoulement de la phase porteuse (l'air) est d'abord calculé à l'aide d'un modèle de turbulence de type RANS $R_{ij} - \epsilon$. Une condition de périodicité entre l'entrée et la sortie de l'écoulement permet d'obtenir un profil de vitesse établi dès l'entrée du canal. Puis, on injecte uniformément $n_p = 10^6$ particules fluides dans les dix premiers centimètres du canal plan. Les positions initiales (x_p, y_p, z_p) des particules fluides sont tirées de la façon suivante où $U_i(0,1)$ est une variable aléatoire qui suit une loi uniforme dans l'intervalle $[0,1]$:

$$x_p = U_1(0,1)*1.27\times10^{-2},\ y_p = U_2(0,1)*1.27\times10^{-2},\ z_p = U_3(0,1)*10\times10^{-2}. \tag{2.8}$$

Paramètre	Valeur
longueur du canal l	$1\,m$
largeur du canal c	$1,27\,10^{-2}\,m$
nombre de Reynolds Re	50000
vitesse de frottement $u*$	$3,106\,m/s$
masse volumique ρ_f	$1,2\,kg/m^3$
viscosité cinématique ν_f	$1,5\,10^{-5}\,m^2/s$

TABLE 2.1 – Caractéristique de l'écoulement de la phase continue pour l'étude numérique de validation par les particules fluides

Le pas de temps dt vaut 10^{-6} s de telle sorte que $dt^+ = dt/\tau_\nu = 0.3$, avec τ_ν, l'échelle de temps visqueuse qui mesure le temps caractéristique des variations de l'écoulement au voisinage de la paroi dues à la viscosité. En effet, afin que la simulation numérique reproduise fidèlement l'écoulement en proche paroi, il est nécessaire que le pas de temps dt de la simulation soit plus faible que le temps caractéristique de l'écoulement dans cette zone (i.e. $dt \ll \tau_\nu$). Le temps caractéristique τ_ν s'écrit :

$$\tau_\nu = \frac{\nu_f}{u^{*2}}. \tag{2.9}$$

Les résultats de l'étude numérique sont présentés de manière progressive afin de fournir une analyse de plus en plus fine du comportement des particules fluides autour de l'interface.

2.2.1 Observation de la concentration en particules fluides

Afin de calculer la concentration en particules fluides C_p dans la zone de proche paroi le domaine d'étude est divisé en couche parallèles à la paroi d'épaisseur égale à une unité de paroi (y^+). La concentration en particules fluides est ensuite moyennée dans chaque couche puis normalisée par la concentration globale en particules fluides $C_0 = n_p/V$ (où $V = c^2 l$ est le volume du domaine d'étude). La paroi se situe à $y^+ = 0$ et l'interface $y^+ = 100$. Le MPP calcule le déplacement des particules entre la paroi et l'interface (zone 2 de la Figure 2.2), au delà c'est le MLG qui s'applique (zone 1 de la Figure 2.2). Le profil de concentration en particules fluide est représenté sur la Figure 2.3.

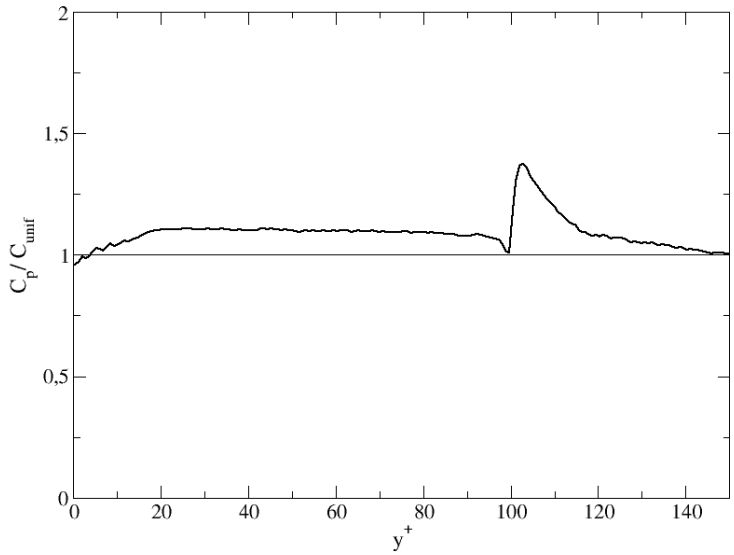


FIGURE 2.3 – Concentration en particules fluides dans la zone de proche paroi,

Nous observons une accumulation non physique de particules fluides de l'ordre de 40% à l'interface du côté de la zone 1 (à y^+ de l'ordre de 100). Le couplage actuel présente donc un défaut qui devra être corrigé mais avant de remédier à cela nous allons tenter d'expliquer ce défaut de "spurious drift" en commençant par observer la vitesse des particules fluides dans cette zone.

2.2.2 Observation de la vitesse des particules fluides

Pour comprendre le comportement des particules fluides à l'interface, nous avons tracé en Figure 2.4 un nuage de point autour de l'interface où chaque point représente le couple (y_p^+, V_s).

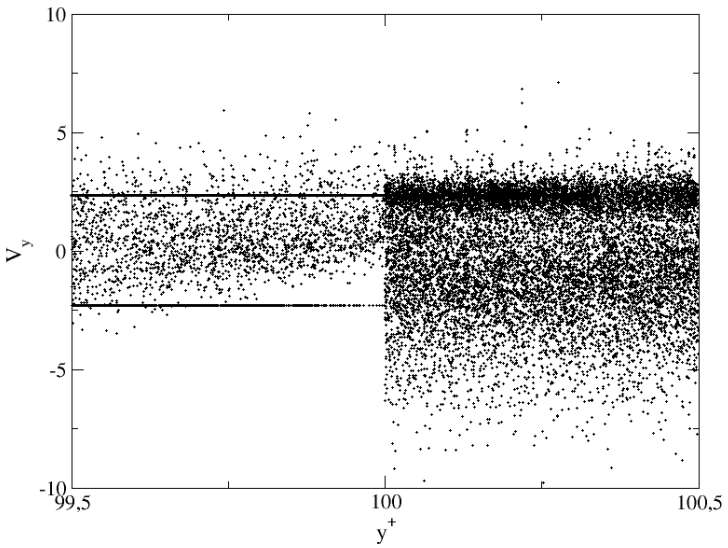


FIGURE 2.4 – Nuage de points dans la zone de proche paroi,

On constate que dans le cadran supérieur droit du graphique ($y^+ > 100$ et $V_s > 0$) la vitesse des particules fluides se concentre autour de la même valeur qui correspond à la vitesse d'une structure d'éjection ($+V_{\text{struc}}$). Contrairement au cadran inférieur droit ($y^+ > 100$ et $V_s < 0$), la distribution des vitesses de ce côté de l'interface est fortement influencée par les particules qui sortent de la zone de proche paroi avec une structure d'éjection.

Cette observation nous permet de dégager un premier constat : les modèles interagissent au niveau de l'interface, il ne doivent donc pas être considérés indépendamment l'un de l'autre.

2.2.3 Observation de la PDF de la vitesse des particules fluides

Nous avons donc tracé en Figure 2.5 la distribution de la vitesse des particules fluides situées au delà de l'interface ($100 < y_p^+ < 100.5$) dans la zone de l'écoulement calculée par le MLG et nous l'avons comparée à la distribution de vitesse supposée qui est gaussienne dans cette zone (cf. Section 2.1).

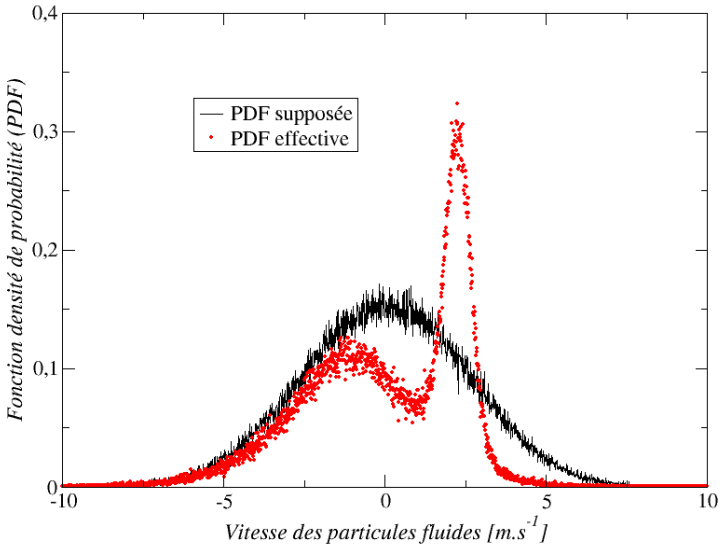


FIGURE 2.5 – Différence entre la PDF des vitesses supposée (points noirs) et effective (points rouges)

On remarque que la distribution effective est très différente de la distribution supposée qui est celle sur laquelle nous avons établi l'égalité des flux de particules traversant l'interface entre les deux modèles ($\mathcal{F}_{1\to2} = \mathcal{F}_{2\to1}$). La distribution effective présente un pic pour les valeurs de vitesse positives qui est centré autour de la vitesse d'une éjection $+V_{\text{struc}} \simeq 2.5$ avec les paramètres actuels du MPP.

L'interaction des modèles au niveau de l'interface fait que la distribution supposée à l'interface est perturbée par l'interaction entre les deux modèles, ce qui explique l'écart que nous observons sur la Figure 2.5.

2.2.4 Observation du flux de particules fluides à l'interface

A partir des distributions de vitesse supposée et effective nous avons calculé les flux de particules correspondants ($\mathcal{F}_{1\to2}$ supposé et $\mathcal{F}_{1\to2}$ effectif). Sur la Figure 2.6 le flux de particules traversant l'interface correspond à la valeur des courbes pour $U_s = 0$ m.s^{-1}. L'écart entre les deux courbes représente l'erreur entre le flux de particules supposé et le flux de particules effectif. Le flux supposé est environ 40% plus grand que le flux effectif. Le modèle de dépôt est donc calibré par la relation sur le coefficient de diffusion K_{ext} (Eq. (2.7)), pour renvoyer 40% de particules en plus que ce qu'il ne devrait. Ce qui explique l'accumulation de l'ordre de 40% sur la courbe de concentration (Figure 2.3).

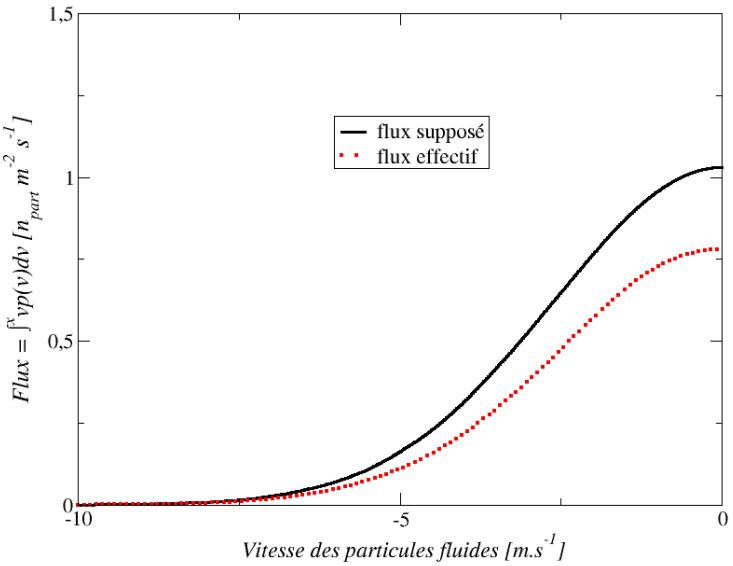


FIGURE 2.6 – Différence entre le flux $\mathcal{F}_{1\to2}$ supposé (courbe continue) et effectif (pointillés)

C'est donc une mauvaise évaluation du flux de particules $\mathcal{F}_{1\to2}$ qui est à l'origine de l'accumulation des particules fluides à l'interface (cf. Figure 2.3). L'étude numériques par des particules fluides nous montre que l'égalité des flux de particules fluides à l'interface n'est pas respectée (comme en témoigne le déséquilibre observé à l'interface) et donc que le couplage actuel n'est pas correct. La prochaine section propose une solution pour rétablir l'égalité des flux qui permettra de raccorder judicieusement le Modèle de Proche Paroi au Modèle de Langevin Généralisé.

2.3 Solutions pour rétablir l'égalité des flux

Nous avons identifié deux façons d'équilibrer correctement les flux de particules traversant l'interface afin de rétablir une concentration uniforme en particules fluides dans cette zone :

1. Evaluer le flux $\mathcal{F}_{1\to 2}$ effectif à partir de l'expression de la PDF des vitesses effectives (courbe en pointillés de la Figure 2.5).

2. Conserver l'estimation actuelle du flux $\mathcal{F}_{1\to 2}$ (basé sur l'hypothèse d'une PDF gaussienne à l'interface) en ré-initialisant la vitesse des particules issues du MPP $U_{s2\to 1}$ afin de rétablir une distribution gaussienne des vitesses à l'interface (courbe en traits pleins Figure 2.5).

Le traitement du couplage doit rester relativement simple. Poursuivre la première piste nécessiterait au moins deux étapes supplémentaires :

1. Ecrire l'expression de la PDF effective qui est complexe car elle est la combinaison des deux distributions p_1 et p_2.

2. Ecrire la nouvelle expression du coefficient de diffusion K_{ext}

Tandis que la deuxième piste nécessite uniquement d'exprimer la distribution de vitesse $U_{s2\to 1}$ et permet de conserver l'expression actuelle du coefficient K_{ext}. De plus la PDF de $U_{s2\to 1}$ dépendra seulement des paramètres du MLG.

Nous avons donc choisi de poursuivre la deuxième piste qui aboutit à de nouvelles relations théoriques sur les statistiques conditionnées d'une particule traversant une interface.

2.3.1 Identification de le distribution $U_{s2\to 1}$

La distribution de vitesse que nous recherchons est la sous classe des particules qui sont décrites par le système suivant et qui traversent une interface pendant un intervalle de temps dt :

$$\begin{cases} \mathrm{d}Y_p = U_s \mathrm{d}t \\ \\ U_s = -\dfrac{U_s}{T_L}\mathrm{d}t + K\mathrm{d}W_t \end{cases} \tag{2.10}$$

Ainsi nous recherchons l'expression de la vitesse U_s à l'instant t^{n+1} sachant que sa vitesse à l'instant t^n est un processus d'Ornstein Uhlenbeck.

La première idée qui émerge est que seule la sous-classe de particules ayant une vitesse du même signe, positif dans notre étude puisqu'on traite de la vitesse des particules qui se dirigent vers le coeur de l'écoulement, peut traverser l'interface. Dans ce cas, la PDF conditionnée recherchée est une distribution half-normale qui est une distribution normale de moyenne 0 et d'écart type σ dont la fonction de distribution s'exprime :

$$p(u) = \frac{\sqrt{2}}{\sigma\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{u^2}{2\sigma^2}\right) \text{ avec } u \in [0, +\infty]. \tag{2.11}$$

L'allure de la distribution half-normale est représentée en pointillés sur la Figure 2.7.

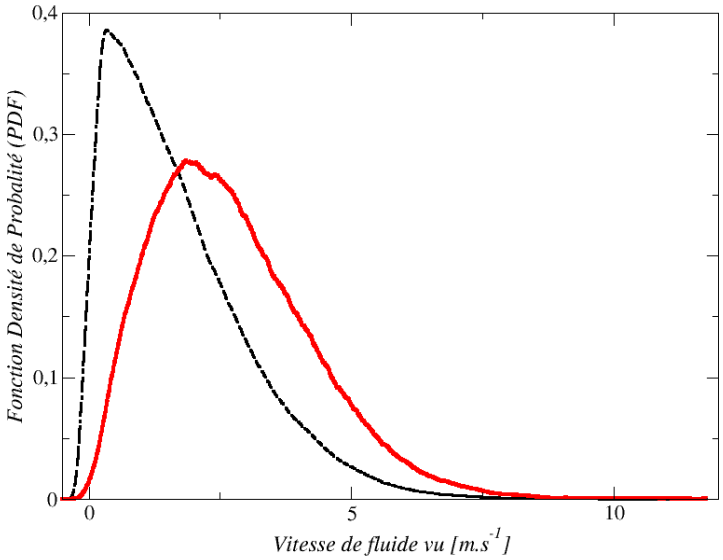


FIGURE 2.7 – Visualisation de la PDF recherchée (trait plein) et comparaison avec la PDF hal-normale (pointillés)

Or, une vérification numérique nous a démontré que cette hypothèse est fausse, que la PDF recherchée n'est pas aussi simple qu'une half gaussienne. Son allure (en trait plein sur la Figure 2.7) ne s'apparente d'ailleurs à aucune forme de distribution connue.

La démarche pour obtenir l'expression de cette PDF conditionnée, que nous noterons p, est détaillée dans l'Annexe A. Ce travail est le fruit d'une collaboration avec le Docteur Christophe Profeta (Université d'Evry Val d'Essonne) qui est spécialisé dans le calcul stochastique. Voici son expression :

$$p = \frac{\mathrm{A}}{\mathrm{B}} \tag{2.12}$$

avec :

$$\begin{aligned} \mathrm{A} = \frac{1}{2\pi LK\sqrt{\Delta t}} \exp\left(\frac{-v^2}{2(K^2\Delta t+\alpha_t)}\right) \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad & \left[\sqrt{\frac{2\Delta t K^2}{\Delta t K^2+\alpha_t}} L\mathrm{Erfc}\left(-a\right)\right. \\ & -\frac{\sigma K^2\Delta t^2}{\Delta t K^2+\alpha_t}\left(\exp\left(-a^2\right)-\exp\left(-b^2\right)\right) \\ & \left.+\frac{v\sigma K\sqrt{\alpha_t}\Delta t^{\frac{3}{2}}\sqrt{\pi}}{\sqrt{2}\left(\Delta t K^2+\alpha_t\right)^{\frac{3}{2}}}\left(\mathrm{Erf}\left(b\right)-\mathrm{Erf}\left(a\right)\right)\right] \end{aligned} \tag{2.13}$$

$$\mathrm{B} = \frac{1}{2}\mathrm{Erfc}\left(\frac{L}{\sqrt{2}\sigma\Delta t}\right)+\frac{\sigma\Delta t}{\sqrt{2\pi}L}\left(1-\exp^{-L^2/(2\Delta t^2\sigma^2)}\right) \tag{2.14}$$

et

$$\begin{aligned} \alpha_t &= \sigma^2(1-\frac{1}{T_L}\Delta t)^2 \\ a &= \sqrt{\frac{K^2\Delta t+\alpha_t}{2K^2\Delta t}}\left(\frac{-L}{\sigma\Delta t}+\frac{v\sqrt{\alpha_t}}{K^2\Delta t+\alpha_t}\right) \\ b &= \frac{v\sqrt{\alpha_t}}{\sqrt{2K^2\Delta t(K^2\Delta t+\alpha_t)}} \end{aligned} \tag{2.15}$$

où L représente le trajet maximal parcouru par une particule pendant un pas de temps. K, σ et T_L [52] sont respectivement le coefficient de diffusion, l'écart type et l'échelle de temps lagrangienne du processus U_s décrit par le système suivant :

$$\left\{\begin{array}{rcl} \mathrm{d}Y_p &=& U_s\mathrm{d}t \\ \mathrm{d}U_s &=& -\dfrac{U_s}{T_L}\mathrm{d}t+K\mathrm{d}W_t \end{array}\right. \quad \text{avec} \quad \begin{array}{rcl} Y_p &\sim& U[-L;0] \\ U_s &\sim& N(0,\sigma^2). \end{array} \tag{2.16}$$

Cette PDF dépend des paramètres suivants : la vitesse u (u représente l'ensemble des valeurs possibles de la vitesse $U_{s2\to1}$), les coefficients de dérive $1/T_L$ et de diffusion K, le trajet maximal L ainsi que le pas de temps Δt.

La PDF théorique p ainsi que sa réalisation numérique après intégration dans le MPP sont représentés en Figure 2.8 (l'implémentation numérique du couplage est décrit dans le chapitre suivant, Section 3.1).

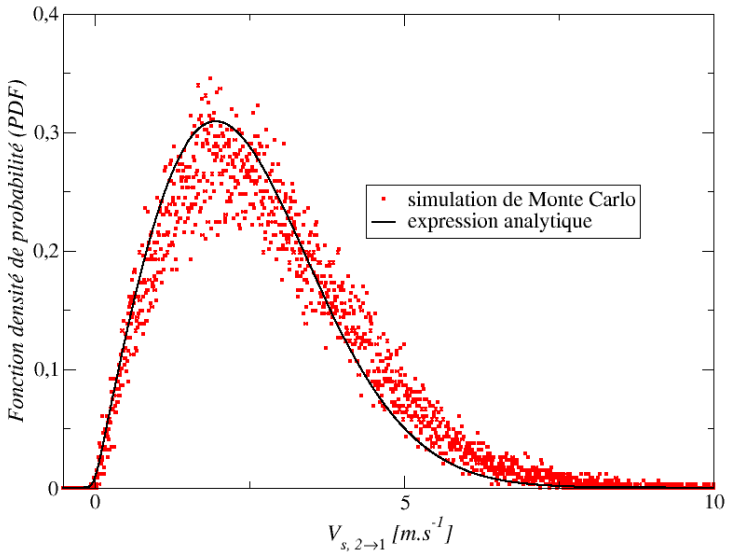


FIGURE 2.8 – Visualisation de l'allure de la PDF théorique (trait continu) et de sa réalisation numérique (points) p

L'expression théorique de la PDF conditionnée permet de rétablir une distribution gaussienne à l'interface côté zone 1 (cf.Figure 2.5). Ainsi l'estimation du flux $\mathcal{F}_{1\to2}$ (qui est basée sur une hypothèse de gaussianité) devient valide et l'équilibre des flux de particules traversant l'interface est respecté. L'accumulation non physique de particules à l'interface est désormais très faible (on passe de 40% à $\pm5\%$ d'écart à la concentration uniforme), la conservation de la masse est ainsi respectée, comme en témoigne l'uniformité de la concentration en particules fluides autour de l'interface des deux modèles sur la Figure 2.9.

2.4 Analyse du comportement du couplage en fonction du pas de temps

Une analyse de l'indépendance du couplage au pas de temps dt a été réalisée pour trois pas de temps ($dt = 10^{-6},\ 10^{-7}$ et $10^{-8}\ s$). Les résultats de l'analyse sont représentés sur la Figure 2.10 (l'état de la concentration, pour un $dt = 10^{-6}\ s$ avant le couplage est représentée en filigrane sur la figure).

On remarque que la courbe de dépôt pour $dt = 10^{-8}\ s$ est bruitée. En effet, pour le pas de temps le plus petit, le calcul est plus long et comme toutes les courbes sont moyennées sur le même nombre de pas de temps, on dispose de moins d'échantillons ce qui explique le bruit statistique sur cette courbe.

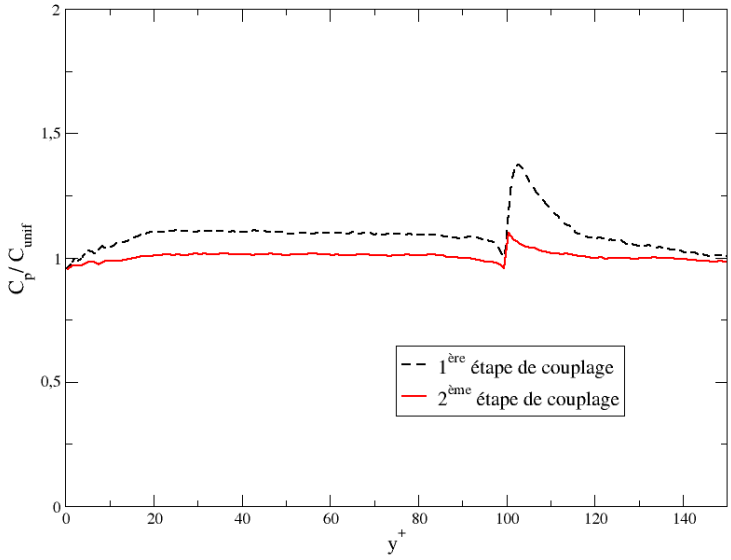


FIGURE 2.9 – Concentration en particules fluides dans la zone de proche paroi. Première étape de couplage (ligne continue), deuxième étape de couplage (pointillés)

On remarque également deux choses :

- La concentration en particules fluides dans la zone de proche paroi est de nouveau uniforme et égale à l'unité (elle était de l'ordre de 1,15 avant le couplage). A la lumière de ce résultat, on peut déjà envisager de calculer le dépôt de particules colloidales (dont l'inertie ne tend plus vers zéro) avec ce modèle en l'état car le dépôt de particules est piloté par la concentration en proche paroi.

- Dans tous les cas le couplage réduit sensiblement l'accumulation à l'interface (nous ne l'avons pas représenté sur cette figure, mais toutes les courbes de concentration avant cette étape de couplage présentent une accumulation de l'ordre de 40% à l'interface). Cependant, la discontinuité du profil de concentration subsiste (même si l'accumulation conserve un ordre de grandeur raisonnable de 10%).

Une étude du comportement du couplage en fonction du pas de temps a donc été effectuée afin de comprendre l'accumulation à l'interface qui subsiste. Pour cela, nous avons tracé sur la Figure 2.11 la PDF p pour différents pas de temps et nous constatons que les courbes sont indépendantes du pas de temps, la PDF p est donc indépendante du pas de temps dt.

Une étude de la proportion de particules qui quittent le Modèle de Proche Paroi (MPP) en phase d'éjection et en phase de diffusion a montré que cette proportion ne varie pas en fonction du pas temps, elle reste constante (80% des particules quittent

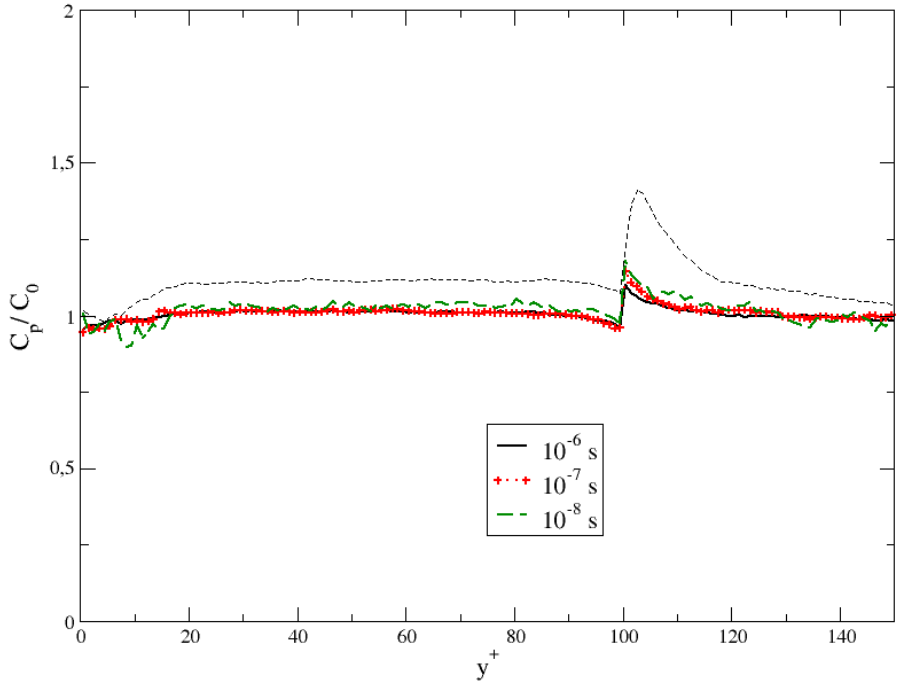


FIGURE 2.10 – Analyse de la sensibilité du couplage pour trois pas de temps : $dt = 10^{-6}, 10^{-7}$ et 10^{-8} s

le MPP avec une structure d'éjection contre 20% en phase de diffusion). La correction des vitesses est actuellement effectuée uniquement pour les particules issues d'une éjection car nous pensions que l'accumulation était uniquement due aux particules issues d'une éjection. Autrement dit, nous avions estimé que l'écart entre la vitesse des éjection (qui est déterministe) et la distribution des vitesse de l'autre côté de l'interface était responsable du déséquilibre de la concentration à l'interface. Cependant, il faut aussi s'intéresser aux particules qui quittent le modèle en phase de diffusion car si l'écart entre la PDF des vitesse de ces particules et la PDF des particules du Modèle de Langevin Généralisé est trop grand, on aboutira de la même façon à une mauvaise estimation du flux de particules à l'interface. La ré initialisation des de la vitesse $U_{s2\to1}$ des particules qui quittent le MPP dans une phase de diffusion doit de ce fait également être étudiée. Le raccord des deux modèles n'est pas encore achevé, cependant, comme nous l'expliquerons dans la conclusion ci-après, il offre une première solution qui est valable pour l'étude du dépôt de particules colloïdales.

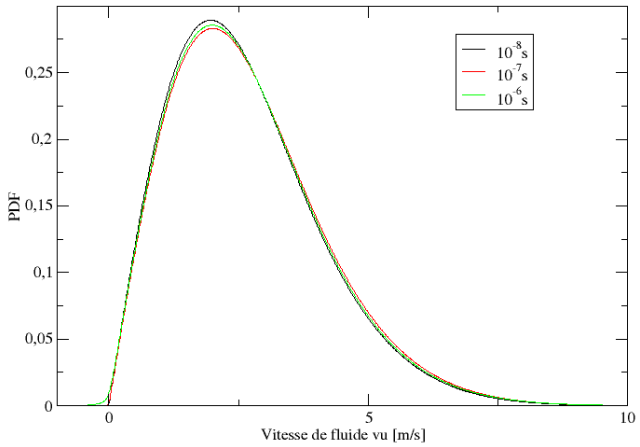


FIGURE 2.11 – PDF p pour différents pas de temps

Conclusion partielle

L'objectif de chapitre était de réaliser le couplage entre le Modèle de Langevin Généralisé (MLG) qui calcule le transport des particules dans le coeur de l'écoulement et le Modèle de Proche Paroi (MPP) qui simule le déplacement des particules dans la couche limite de l'écoulement. Le point fort de ce travail est que le couplage est dorénavant indépendant des caractéristiques du MPP ainsi que de la position de l'interface entre les deux modèles. De ce fait, le raccord des deux modèles restera valable même si le MPP est modifié. Nous allons à présent rappeler les étapes de ce travail de couplage.

Nous avons tout d'abord défini la condition de réalisation du couplage qui est l'égalité du flux de particules qui traversent l'interface entre les deux modèles. Ce raccord est ensuite étudié en considérant le cas de particules fluides (qui sont des particules qui se comportent comme le fluide, dont l'inertie tend vers zéro) qui est une étape importante de validation des modèles lagrangiens. Cette méthode consiste à vérifier que lorsque le modèle est utilisé avec des particules fluides, il reproduit les caractéristiques connues de l'écoulement (profils de concentration, etc.) mais aussi qu'il est exempt de "spurious drift" (i.e. d'accumulation non physique de particules fluides). L'observation des résultats du passage en particules fluides révèle que la condition de raccord qui est basée sur l'équilibre des flux de particules à l'interface n'est pas suffisante.

Afin de réaliser le couplage, nous procédons à une étape supplémentaire de correction de la vitesse des particules qui quittent le Modèle de Proche Paroi (MPP). Cette correction, qui a abouti à de nouveaux développements théoriques sur les sta-

tistiques conditionnées d'un particule traversant une interface, permet de réaliser correctement le couplage des deux modèles. L'objectif de coupler les deux modèles est donc atteint et de plus, le couplage est indépendant du MPP. Il s'agit là d'un point fort car il nous permet modifier les caractéristiques du MPP (afin par exemple de prendre en compte le mécanisme de thermophorèse) sans avoir à modifier la couplage. Ainsi, bien que ce travail ait posé certaines difficultés (car il a fait intervenir des notions de calcul stochastique très pointues) il me semble qu'il est très important car il pose les bases d'une modélisation solide et correcte du transport des particules dans la zone de proche paroi. Ces premiers travaux de couplage présentent deux points forts, d'une part l'accumulation à l'interface est réduite et d'autre part, la concentration en particules fluides dans la zone de proche paroi est de nouveau égale à un. Ce dernier point nous permet d'ailleurs d'étendre notre étude au calcul de dépôt de particules colloïdales car la concentration en particules dans la zone de proche paroi est celle qui pilote le dépôt. On peut donc affirmer que, pour nos prochains calculs de dépôt de particules colloïdales, le couplage est validé.

Cependant, il faut garder à l'esprit que la solution actuelle du couplage n'est pas encore totalement satisfaisante (comme en témoignent la discontinuité du profil et l'accumulation à l'interface). La question du raccord des deux modèles reste ouverte. Nous rappelons que nous avons dégagé deux solutions pour résoudre le couplage, celle que nous avons sélectionnée demande sans doute à être poursuivie et l'autre piste doit encore être étudiée, comme nous l'expliquerons dans les perspectives de ces travaux.

Le travail de raccord de deux modèles permet de se consacrer à l'étude du dépôt de particules colloïdales et notamment à l'influence d'un gradient de température sur la vitesse de dépôt. Mais avant d'étudier les écoulements non isothermes (ce qui constitue la deuxième partie du manuscrit) nous allons tout d'abord confirmer ces travaux sur le couplage, dans le chapitre suivant, par des simulations numériques de dépôts de particules dans un écoulement isotherme.

Chapitre 3

Application du couplage au calcul de dépôt de particules colloïdales

Ce chapitre est dédié aux résultats de simulation numérique de dépôt de particules. Dans la première partie nous détaillons l'implémentation numérique du couplage décrit dans le chapitre précédent. Puis nous présentons des calculs numériques de dépôt de particules basés sur le cas test de Liu et Agarwal [39], qui mesure le dépôt de gouttelettes d'huile dans un écoulement d'air turbulent en conduite verticale.

3.1 Implémentation numérique du couplage

Le traitement du couplage entre le modèle de Proche Paroi (MPP) et le Modèle de Langevin Généralisé (MLG) nécessite une ré-initialisation de la vitesse de fluide vu des particules qui quittent le MPP ($U_{s2\to1}$ cf. Section 2.3). Comme nous l'avons expliqué dans le chapitre précedent, cette vitesse suit une loi de probabilité conditionnée qui dépend des paramètres du MLG (cf. Eq. (2.12)). Sachant que l'information est directement véhiculée au niveau des particules, il faut pouvoir remonter à la vitesse de fluide vu à partir de sa distribution grâce à une méthode de Monte-Carlo inverse.

Il existe plusieurs méthodes de génération de nombres aléatoires ([17]) à partir d'une distribution arbitraire donnée qu'elle soit discrète ou continue. Dans notre cas, pour une distribution continue, Moltchanov [56] a identifié trois méthodes, la méthode de transformation inverse, la méthode de composition et la méthode de rejet. Compte tenu de la complexité de l'expression de la PDF $p(u)$ (Eq. (2.12)), nous avons opté pour la dernière méthode qui semble la plus adaptée à notre cas.

La méthode de rejet consiste à utiliser une "fonction chapeau" pour générer des variables aléatoires qui sont soit acceptées si elles tombent sous la "fonction chapeau" soit rejetées dans le cas contraire. Voici le principe de cette méthode ([74]) :

Hypothèses :

- la PDF $p(u)$ doit être bornée
- u prend des valeurs finies, i.e. qu'il existe un couple (a, b) qui vérifie $a \leq u \leq b$

Déroulement de la méthode :

1. On normalise la PDF par un facteur c tel que $\forall\, u,\ cp(u) \leq 1$
2. On génère un paire (u_1, u_2) de manière uniforme sur l'intervalle $[0, 1]$, i.e. $u_1, u_2 = U(0, 1)$
3. On exprime u en tant que fonction linéaire de u_1 dans l'intervalle $[a, b]$, $u = a + (b - a)u_1$
4. On accepte u si $u_2 \leq p(u)$ sinon on retourne à l'étape numéro 2

Cette méthode permet de générer des valeurs de vitesses qui suivent la distribution conditionnée désirée. Nous avons tracé dans la Figure 3.1 l'expression théorique de la PDF conditionnée $p(u)$ ainsi que sa reconstruction par la méthode de rejet obtenue par simulation de Monte Carlo. Comme attendu, les deux courbes correspondent exactement.

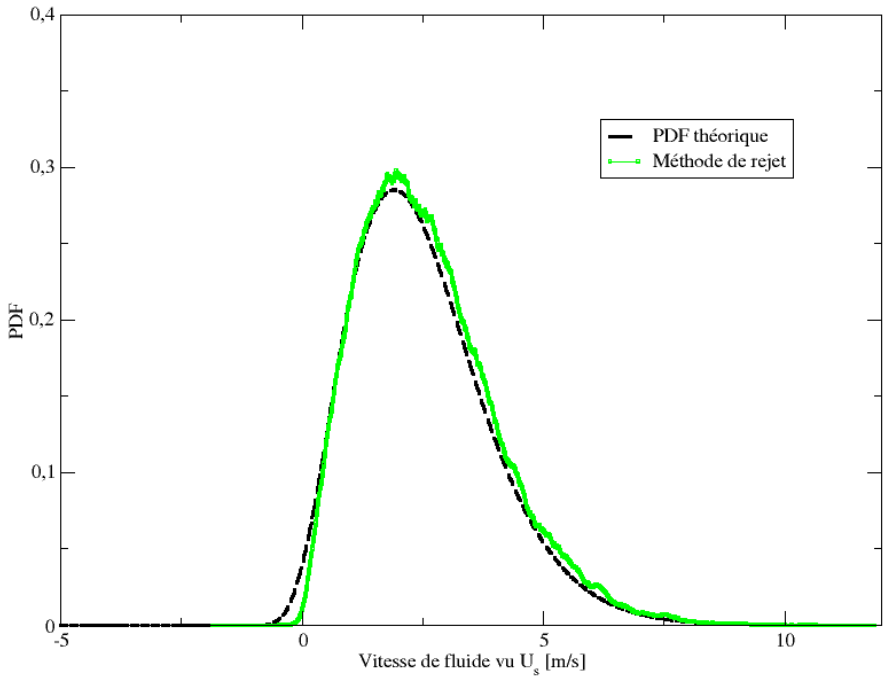


FIGURE 3.1 – Comparaison de la PDF théorique (en pointillés) à la distribution obtenue avec la méthode de rejet (trait plein)

Cette méthode a été implémentée dans le module lagrangien de *Code_Saturne* et permet de raccorder correctement le MPP au MLG.

3.2 Simulations numériques de dépôt de particules

3.2.1 La courbe de dépôt expérimentale

Il existe de nombreux résultats expérimentaux ([59]) et numériques ([10] et [19]) consacrés à l'étude du dépôt de particules. D'une manière générale, le dépôt des particules est mesuré par la vitesse de dépôt de particules k_p qui s'exprime ainsi :

$$k_p = \frac{\dot{m}_p}{C_p} \tag{3.1}$$

où $\dot{m}_p$ correspond au flux de particules qui heurtent la paroi, il s'exprime $kg/m^2/s$, C_p est la concentration en particules dans l'écoulement exprimée en kg/m^3.

La vitesse de dépôt est généralement exprimée en unités de paroi, adimensionnée par le vitesse de frottement à la paroi u^* :

$$k_p^+ = \frac{k_p}{u^*} \tag{3.2}$$

Le paramètre qui joue le rôle le plus important dans la vitesse de dépôt est l'inertie de la particule qui adimensionnée en unité de paroi s'exprime ainsi :

$$\tau_p^+ = \frac{d_p^2 u^{*2}}{18\nu_f^2}\frac{\rho_p}{\rho_f} \tag{3.3}$$

où d_p est le diamètre de la particule, ν_f la viscosité cinématique du fluide et ρ_p et ρ_f respectivement la masse volumique de la particule et du fluide. C'est pourquoi nous présenterons tous nous résultats de dépôt de particules comme ils sont représentés de manière générale dans la littérature sous la forme d'une courbe de dépôt $k_p^+ = f(\tau_p^+)$. L'intérêt de cette forme adimensionnée en unité de paroi est qu'elle est indépendante des caractéristiques de chacune des deux phases (continue et dispersée) et permet donc grâce au paramètre unique τ_p^+ de comparer les résultats de dépôt d'écoulements de nature différente. La Figure 3.2 présente différents résultats expérimentaux de dépôt issus de la synthèse de travaux expérimentaux de dépôt dans un écoulement d'air menée par Papavergos et Hedley [59].

Nous observons que la vitesse de dépôt k_p^+ présente trois régimes de dépôt en fonction de l'inertie adimensionnée τ_p^+ :

- pour $\tau_p^+ \leq 1$ la vitesse de dépôt est relativement faible, de l'ordre de 10^{-5}. Dans ce régime de diffusion l'agitation des particules au voisinage de la paroi est principalement causé par l'agitation brownienne qui est inversement proportionnelle au diamètre de la particule.

- pour $1 < \tau_p^+ \leq 20$, la vitesse de dépôt croît fortement et gagne 4 ordres de grandeur, elle passe de 10^{-5} à 10^{-1}. Dans ce régime intermédiaire diffusionnel-

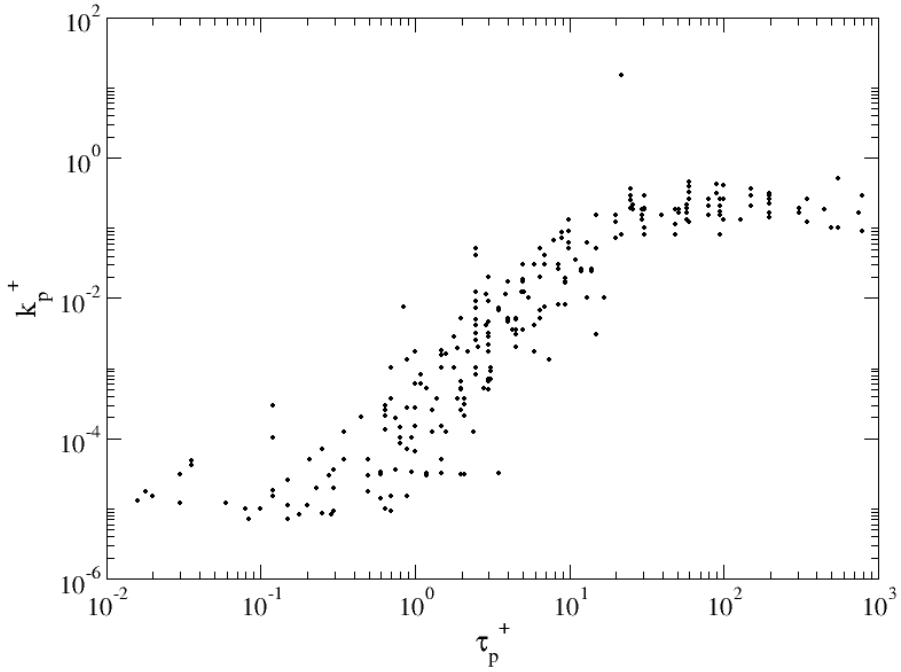


FIGURE 3.2 – Résultats expérimentaux de dépôt de particules

inertiel k_p^+ dépend fortement de l'inertie τ_p^+

– au delà de $\tau_p^+ = 20$ la vitesse de dépôt est constante, de l'ordre de 10^{-1}, elle correspond au flux limite de particules dans la direction normale à la paroi.

Il convient maintenant de confronter ces résultats expérimentaux à nos propres résultats issus de notre modélisation.

3.2.2 Résultats numériques de dépôt de particules

Les calculs numériques de dépôt ont été effectués en reproduisant l'expérience de Liu et Agarwal [39] qui ont étudié le dépôt de fines gouttes d'huile dans un écoulement d'air turbulent en conduite verticale (les caractéristique de l'écoulement sont renseignées dans le Tableau 3.1). Les gouttes d'huile ont un diamètre compris entre $1,4\,\mu m$ et $21\,\mu m$ ce qui correspond à une gamme d'inertie τ_p^+ comprise entre 10^{-1} et 10^3. La densité des gouttelettes est de $918\,kg/m^3$.

L'allure du maillage de la conduite est visible dans la Figure 3.3.

L'écoulement de la phase continue (air) est calculé au préalable à l'aide d'un modèle RANS de type $R_{ij} - \epsilon$. 100000 particules d'huile sont ensuite injectées uniformément à l'entrée du tuyau ce qui correspond à un régime suffisamment dilué pour lequel les interactions entre particules sont négligeables.

Paramètre	Valeur
diamètre de la conduite D_C	$1,27\,10^{-2}\,m$
longueur de la conduite	$1,02\,m$
densité de l'air ρ_f	$1,25\,kg/m^3$
nombre de Reynolds Re	10000 et 50000

TABLE 3.1 – Caractéristiques de l'expérience de Liu et Agarwal [39]

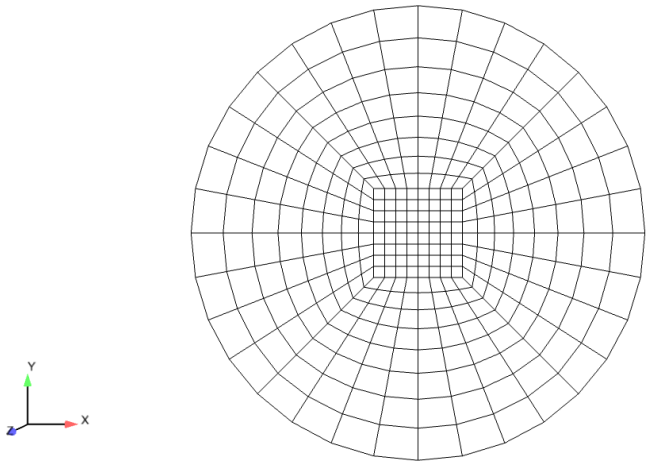


FIGURE 3.3 – Section transversale du maillage de la conduite pour l'expérience de Liu et Agarwal [39]

La vitesse de dépôt des particules est calculée à l'aide des travaux de Matida et al. [45] qui est basée sur un bilan de matière entre deux sections transversales de l'écoulement notées x_1 et x_2. Ils définissent pour cela une fraction F_i qui mesure la proportion relative de particules qui ont traversé la section x_i :

$$F_i = \frac{n_i}{n_0} \tag{3.4}$$

où n_i est le nombre de particules ayant traversé la section x_i et n_0 le nombre initial de particules dans l'écoulement. Ensuite, au moyen d'un bilan de population entre les deux sections ils aboutissent à l'expression suivante de la vitesse de dépôt :

$$k_p^+ = \frac{U_{\text{deb}} D_C}{4|x_2 - x_1|u^*} ln\left(\frac{F_1}{F_2}\right) \tag{3.5}$$

où U_{deb} est la vitesse débitante de l'écoulement d'air ($U_{\text{deb}} = \dfrac{4\dot{q_f}}{\pi D_C^2}$).

L'expression de Matida et al. ([45]) présente un point fort : il n'y a aucune incertitude sur le nombre de particules à prendre en compte pour le calcul de k_p contrairement à la formule générale du taux de dépôt (Eq. (3.1)) où la concentration en particules C_p demeure incertaine puisqu'elle varie fortement dans la zone de proche paroi notamment pour des particules inertielles. Cependant, la formule de Matida et al. ([45]) dépend du choix de la longueur des tronçons de l'écoulement ($|x_2 - x_1|$) entre lesquels on effectue le bilan de population pour calculer la vitesse de dépôt. En effet, le taux de dépôt de particules n'est pas constant dans toute la conduite, s'il est nul à l'entrée de la conduite, il se stabilise puis augmente vers la fin de la conduite. Pour ces raisons, nous avons choisi de calculer la vitesse de dépôt k_p avec la formule de Matida et al. (Eq. (3.5)) en prenant la moyenne des vitesses de dépôt calculées sur les cinq tronçons de l'écoulement de $10\,cm$ de longueur situés entre $25\,cm$ et $75\,cm$ de l'entrée du tuyau (car c'est entre ces deux sections que Liu et Agarwal [39] ont mesuré le taux de dépôt de particules).

Nous avons reporté les résultats numériques sur la Figure 3.4 qui comporte également les points expérimentaux de l'expérience de Liu et Agarwal [39] ainsi que la synthèse de Papavergos et Hedley [59]. Les résultats numériques reproduisent de manière satisfaisante les différents régimes de dépôt décrits dans la Section 3.2.1. Ce qui valide nos travaux de couplage. Ces résultats montrent que la démarche mathématique mise en oeuvre pour réaliser le couplage avait beaucoup de sens et que le choix de ré-initialiser la vitesse des particules qui traversent l'interface est bon.

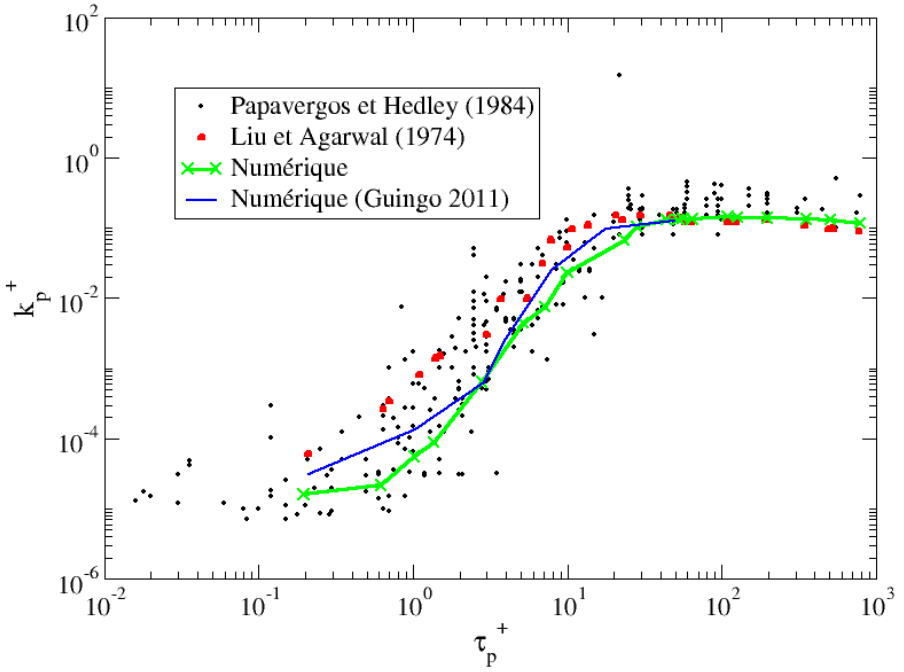


FIGURE 3.4 – Comparaison des vitesses de dépôt numériques avec l'expérimental

Conclusion partielle

Dans ce chapitre, nous avons validé le travail de couplage entre le Modèle de Proche Paroi et le Modèle de Langevin Généralisé en réalisant des simulations numériques de dépôt de particules.

Pour cela, nous avons au préalable présenté l'implémentation numérique du couplage réalisée par le biais d'une "méthode de rejet" qui permet de générer des variables aléatoires à partir d'une distribution arbitraire. Puis nous avons réalisé des calculs numériques de dépôt de particules colloïdales basés sur l'expérience de Liu et Agarwal [39] qui ont étudié le dépôt de gouttelettes d'huile dans un écoulement d'air turbulent en conduite verticale. Les résultats des simulations numériques sont en adéquation avec les résultats expérimentaux, ceci démontre que la modélisation du transport des particules prédit correctement le taux de dépôt de particules dans un écoulement d'air.

Les travaux de raccord de ces deux modèles (qui ont fait l'objet du précédent chapitre) ont donc ici été validés par des simulations numériques de dépôt de particules.

Conclusion de la première partie

Cette partie était consacrée aux modèles stochastiques utilisés pour simuler le dépôt de particules colloïdales dans un écoulement turbulent, nous allons à présent rappeler les points importants de chaque chapitre :

- Dans le premier chapitre nous avons souligné les caractéristiques principales des deux modèles, le Modèle de Langevin Généralisé (MLG) qui calcule le transport des particules dans le cœur de l'écoulement et le Modèle de Proche Paroi (MPP) qui est dédié au transport des particules dans la zone de proche paroi qui est le siège d'évènements cohérents. Dans chaque modèle, la particule est décrite par le même vecteur d'état (x_p, U_p, U_s) et seule la modélisation de la vitesse de fluide vu U_s diffère d'un modèle à l'autre. Ce chapitre présente donc l'approche de modélisation adopté pour simuler le dépôt de particules, il n'a fait l'objet d'aucune étude, il se contente de définir les modèles qui sont ensuite couplés dans le chapitre suivant.

- Le second chapitre traite du raccord des deux modèles. Les calculs en particules fluides ont montré qu'une étape supplémentaire est nécessaire afin d'assurer l'égalité du flux de particules qui traversent l'interface entre le MLG et le MPP. L'intérêt de cette étape est qu'elle peut être résolue de deux façons et nous avons donc eu le choix. Durant mes travaux de thèse il m'a semblé que l'un des deux choix était plus abordable. Cependant le deuxième choix mérite d'être étudié. Un premier point fort du travail de couplage est qu'il a donné lieu à de nouveaux développement théoriques sur les statistiques conditionnées d'une particule traversant une interface qui n'existaient pas dans la littérature. De plus, le couplage est indépendant du MPP, il ne dépend que des caractéristiques du MLG ce qui est un autre point fort qui permet de pouvoir apporter des modifications au MPP afin de tenir compte d'autres phénomènes physiques (le caractère anisotherme de l'écoulement par exemple) sans avoir à modifier le couplage. Pour toutes ces raisons, ce chapitre est selon moi le chapitre le plus important de cette première partie.

- Dans le dernier chapitre de cette partie, nous avons présenté des résultats de simulations numériques de dépôt de particules. Le couplage a été implémenté dans la module lagrangien de *Code_Saturne* grâce à la méthode de rejet qui permet de générer des variables aléatoires à partir d'une distribution donnée.

Puis nous avons calculé le taux de dépôt particules au moyen de deux formules différentes que nous avons confronté aux résultats expérimentaux de l'expérience de Liu et Agarwal [39]. Les résultats de ces simulations numériques sont en adéquation avec les résultats expérimentaux.

Nous avons donc construit une modélisation adaptée (le traitement du couplage a grandement contribué à la construction de cette modélisation), destinée à calculer le transport des particules dans tout l'écoulement et notamment dans la zone de proche paroi. La caractéristique de cette modélisation est qu'elle est l'articulation de deux modèles, un modèle pour simuler le déplacement des particules dans le cœur de l'écoulement (le Modèle de Langevin Généralisé) et un modèle dédié au transport des particules au voisinage de la paroi (le Modèle de Proche Paroi). Cependant, tous les calculs de dépôt de particules ont été menés dans un écoulement gazeux et isotherme. La deuxième partie de ce manuscrit est donc consacrée à l'étude des écoulements anisothermes et notamment à l'influence d'un gradient de température dans l'écoulement sur le déplacement des particules, phénomène important dans ce qui nous préoccupe à savoir le dépôt de particules dans les générateurs de vapeur.

Deuxième partie

La thermophorèse : Extension du Modèle de Proche Paroi aux écoulements non isothermes

Introduction de la deuxième partie

La deuxième partie de ce manuscrit est consacrée à la prise en compte du mécanisme de thermophorèse dans la modélisation du transport des particules. Comme nous l'avons évoqué dans l'introduction générale de ce manuscrit, cette étude s'inscrit dans le cadre du projet MOFPHET-C2 qui a pour objectif d'améliorer la compréhension du phénomène de dépôt de particules dans les générateurs de vapeur et de modéliser les différents facteurs à l'origine de ces dépôts.

Dans cette introduction, nous illustrons l'intérêt industriel du mécanisme de thermophorèse, puis nous présentons le plan de cette partie dédiée à la thermophorèse.

Généralités sur la thermophorèse

Dans un écoulement non isotherme, la *thermophorèse* désigne le mécanisme de migration des particules en réponse à un gradient de température. Comme illustré sur la Figure 3.5, la particule se déplace dans la majorité des cas vers les zones de température décroissante. Sur cette figure, V_T représente la vitesse de thermophorèse induite par le gradient de température $\overrightarrow{\nabla T}$.

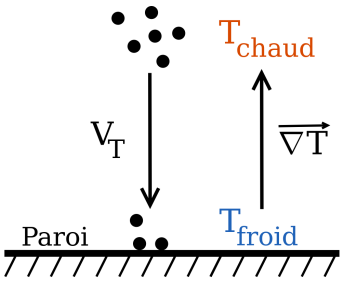


FIGURE 3.5 – Illustration du mécanisme de thermophorèse

Ce phénomène présente des intérêts dans le domaine industriel et peut être exploité à deux fins différentes :

- Il permet de **collecter** des particules en suspension dans un écoulement chaud au moyen de parois froides qui jouent le rôle d'attracteur. Cette technique de capture des aérosols peut être utilisée en prévention du dépôt de particules lors de la fabrication de composants micro-électroniques [79], [20] mais aussi pour capturer les suies issues de la combustion dans une chaudière [50], etc. D'une manière générale, cette application de la thermophorèse est destinée à "purifier" les écoulements des particules colloïdales en **favorisant** le dépôt.

- Dans le cas inverse, lorsque la paroi est plus chaude que l'écoulement, ce qui est le cas dans les échangeurs de chaleur, la thermophorèse agit comme une

répulsion des particules à la paroi qui diminue le nombres de particules déposées [57]. Ce phénomène doit donc être pris en compte dans la modélisation de la zone de proche paroi pour la simulation du dépôt dans les GV (nous verrons dans le Chapitre 6 que les interactions physico-chimiques doivent aussi être considérées pour une description la plus fidèle du dépôt de particules). Contrairement au cas précédent, la thermophorèse joue ici le rôle d'une barrière en **défavorisant** le dépôt de particules.

Plan de la deuxième partie

L'intégration de la thermophorèse dans le Modèle de Proche Paroi se fait de façon progressive jusqu'à la modélisation de la thermophorèse en liquide qui est l'objectif de notre étude.

Pour cela, nous allons dans un premier temps tester la sensibilité du Modèle de Proche Paroi en l'état (tel qu'il a été décrit dans la première partie du manuscrit). Cette étude fait l'objet du premier chapitre de cette partie (Chapitre 4). Comme nous l'expliquerons dans ce chapitre, les forces browniennes agissant sur les particules ne sont pas suffisantes pour reproduire le mécanisme de thermophorèse et il est donc nécessaire d'intégrer la force de thermophorèse dans la modélisation du transport des particules dans la zone de proche paroi (nous verrons que la force de thermophorèse s'ajoute au bilan des forces s'exerçant sur les particules).

Nous allons donc, commencer par étudier la force de thermophorèse en milieu gazeux car, comme nous l'expliquerons dans le Chapitre 5, la thermophorèse en milieu gazeux est largement expliquée dans la littérature (que ce soit sur le plan théorique ou expérimental, la liste des travaux est abondante). De plus, nos précédents calculs de dépôt ont été réalisés en milieu gazeux. Ce chapitre est donc à la fois dans la continuité de nos travaux de dépôt en milieu gazeux mais aussi en préambule à l'étude de la thermophorèse en milieu liquide qui fait l'objet du dernier chapitre de ce manuscrit.

Le Chapitre 6 présente donc une étude de la thermophorèse en milieu liquide. Comme nous le verrons, ce phénomène est encore mal expliqué : les différentes théories avancées pour expliquer le phénomène ne sont pas unifiées et on dispose de peu de résultats expérimentaux sur ce sujet. Ce chapitre est donc intéressant car il présente de nouveaux résultats numériques de dépôt en milieu liquide sous l'influence d'un gradient de température.

Chapitre 4

Modélisation de la thermophorèse dans l'approche Lagrangienne Stochastique

Ce premier chapitre de la partie consacrée aux écoulements non-isothermes est consacrée à l'introduction de la thermophorèse dans la modélisation Lagrangienne stochastique. Cet enjeu pose, en effet, des questions subtiles pour savoir s'il convient de rajouter un ou des termes supplémentaires dans l'équation représentant la dynamique des particules ou si la variation naturelle du coefficient de diffusion Brownienne en fonction de la température ne représente pas déjà ce phenomène de thermophorèse.

Nous commencerons par présenter le suivi des particules en présence d'une force de thermophorèse. Ensuite, nous testerons si la diffusion brownienne est suffisante pour reproduire le phénomène. Les tests numériques seront effectués en air afin de permettre la comparaison avec les calculs de dépôt dans un écoulement isotherme qui ont, jusqu'à présent, été réalisés en air (cf. résultats numériques de la Section 3.2.2).

4.1 Représentation classique de la thermophorèse : le coefficient de Soret

La thermophorèse est un mécanisme qui induit un flux de particules en présence d'un gradient de température. D'après les travaux de De Groot et Mazur [12], le flux net de particules à la paroi $\dot{m}_p$, lorsque la phase dispersée est suffisamment diluée (i.e., lorsque les interactions entre particules sont négligeables), s'écrit comme la somme d'un flux dû à la diffusion moléculaire et d'un flux dû à la diffusion thermique :

$$\dot{m}_p = \dot{m}_{p_{\text{dif}}} + \dot{m}_{p_{\text{th}}} = -D\nabla c - D_T c \nabla T_f \tag{4.1}$$

où c est la concentration en particules (kg/m^3), D le coefficient de diffusion moléculaire (m^2/s) donné par la relation d'Einstein :

$$D = \frac{k_B T_f}{6\pi\mu r_p} \tag{4.2}$$

Dans l'Eq. (4.2), D_T est le coefficient de diffusion thermophorétique $(m^2/(s \cdot K)$. Ce coefficient mesure l'interaction entre la température de l'écoulement et la concentration en particules c. Le flux $\dot{m}_p$ correspond à la masse de particules qui se dirige vers la paroi par unité de surface et de temps $(kg/(m^2 \cdot s))$.

À l'état stationnaire, le flux de particules $\dot{m}_p$ s'annule et le gradient de concentration en particules s'exprime :

$$\nabla c = -cS_T \nabla T_f \tag{4.3}$$

où :

$$S_T = \frac{D_T}{D} \tag{4.4}$$

est le coefficient de Soret (K^{-1}), si $S_T > 0$ les particules se dirigent de la zone chaude vers la zone froide comme défini sur la Figure 3.5. Le coefficient de Soret mesure donc le ratio entre la diffusion thermique et la diffusion moléculaire. Ce coefficient mesure l'amplitude de la thermophorèse à l'état stationnaire.

Le mécanisme de dérive des particules en présence d'un gradient de température macroscopique peut aussi s'exprimer sous la forme d'une vitesse de dérive thermophorétique, V_T :

$$V_T = -D_T \nabla T_f. \tag{4.5}$$

À l'équilibre, la vitesse de dérive des particules étant constante, la force de thermophorèse s'écrit :

$$F_T = V_T \frac{m_p}{\tau_p} = -\frac{m_p D}{\tau_p} S_T \nabla T_f. \tag{4.6}$$

Tout l'enjeu de la modélisation du mécanisme de thermophorèse réside dans l'expression du coefficient de Soret. Comme nous le verrons dans cette partie, dédiée aux écoulements non isothermes, il peut être fonction de plusieurs grandeurs qui ne sont pas les mêmes entre un écoulement gazeux et un écoulement liquide. En effet, si la thermophorèse en milieu gazeux est largement expliquée dans la littérature, l'explication théorique du mécanisme en milieu liquide n'a pas encore été trouvée. Ce qui donne lieu, comme nous le verrons dans la suite du manuscrit, à

différentes expressions du coefficient de Soret (la différence provient de l'approche adoptée pour décrire le mécanisme qui n'est pas la même).A titre d'exemple, selon l'estimation donnée par Brenner [6], l'écart entre le coefficient de diffusion thermophorétique D_T d'un milieu liquide et d'un milieu gazeux est de 5 ordres de grandeur ($O(10^{-12})\, m^2/(s \cdot K)$ contre $O(10^{-7})\, m^2/(s \cdot K)$ pour les gaz).

Le but de cette partie est de comprendre les mécanismes sous-jacents responsables de la thermophorèse afin de trouver une expression adaptée du coefficient de Soret. C'est dans cet esprit que s'organise la deuxième partie. Cependant, afin de déterminer s'il est nécessaire d'ajouter une force de thermophorèse dans la modélisation, nous allons tout d'abord discuter de la façon dont la thermophorèse peut être intégrée à la modélisation lagrangienne stochastique.

4.2 Les enjeux de modélisation dans la formulation Lagrangienne stochastique

La présentation classique du phénomène de thermophorèse, au travers du coefficient de Soret introduit dans la section précédente, laisse à penser qu'il convient de rajouter un terme de dérive (correspondant à la force de thermophorèse exprimée dans l'Eq. 4.6), à l'équation de la dynamique des particules. Cependant, cette question est plus difficile qu'il n'y parait et demande de mener une réflexion progressive. En effet, si l'on considère l'équation de la dynamique des particules telle qu'elle apparait dans sa formulation "standard" pour des particules colloïdales, soit :

$$\mathrm{d}U_p = \frac{U_s - U_p}{\tau_p}\mathrm{d}t + g\mathrm{d}t + K_{\mathrm{bro}}(\mathbf{y})\mathrm{d}W_t, \tag{4.7}$$

le coefficient de diffusion, K_{bro}, est une fonction de la température car il est donné par l'expression :

$$K_{\mathrm{bro}} = \sqrt{\frac{2k_B T_f(\mathbf{y})}{m_p \tau_p}}. \tag{4.8}$$

Dans le cas où la température du fluide devient une fonction de l'espace, $T_f = T_f(\mathbf{y})$, alors le coefficient de diffusion Brownienne devient lui-même variable en fonction de la position des particules, soit $K_{\mathrm{bro}} = K_{\mathrm{bro}}(\mathbf{y})$. Or les variations spatiales du coefficient de diffusion induisent naturellement un flux de particules dans le sens de ce gradient de diffusion. Cela se comprend intuitivement car le coefficient de diffusion joue directement sur le niveau d'agitation des vitesses des particules et une différence dans l'énergie d'agitation des particules entre deux zones induit un flux de la zone d'agitation élevée vers la zone d'agitation faible. Cela peut également se quantifier simplement en considérant le cas des faibles inerties ou de particules passives (ou encore de scalaires passifs) qui sont d'ailleurs considérées implicitement

dans l'analyse classique avec le coefficient de Soret. Dans le cas où $\tau_p \to 0$, alors l'équation d'évolution des positions s'écrit :

$$\mathrm{d}x_p = U_s \mathrm{d}t + (\tau_p K_{\mathrm{bro}}(\mathbf{y}))\, \mathrm{d}W_t. \tag{4.9}$$

En considérant un scalaire passif, c'est à dire constant le long des trajectoires des particules, et en écrivant l'équation d'évolution du scalaire moyen à partir de l'équation de Fokker-Planck correspondante, le flux de particules est donné par :

$$\dot{m}_p = -\nabla\,(D\,c) \tag{4.10}$$

où le coefficient de diffusion $D(\mathbf{y})$ s'écrit :

$$D(\mathbf{y}) = \frac{1}{2}\,(\tau_p K_{\mathrm{bro}}(\mathbf{y}))^2 = \frac{\tau_p k_B T_f(\mathbf{y})}{m_p} \tag{4.11}$$

Ce qui permet de retrouver le coefficient de diffusion d'Einstein Eq. (4.2) (avec $\tau_p = \rho_p d_p^2/(\rho_f 18\nu_f)$ et $m_p = \rho_p(4/3)\pi r_p^3$). Comme les notations l'indiquent ce coefficient est une fonction de l'espace au travers des variations de K_{bro} en fonction de la température $T_f(\mathbf{y})$ qui varie en fonction de l'espace. A cet effet, il est important de noter que la formulation classique de la thermophorèse, et du coefficient de Soret, utilise toujours (mais, implicitement) l'hypothèse que le coefficient de diffusion dit moléculaire D est constant, ce qui n'est pas le cas.

Le flux des particules peut s'écrire :

$$\dot{m}_p = -D\nabla c - c\nabla D = -D\nabla c - c\left(\frac{\partial D}{\partial T_f}\right)\nabla T_f \tag{4.12}$$

ce qui montre bien que la formulation "standard" de l'équation de la dynamique des particules contient déjà implicitement un phénomène qui peut être assimilé à une thermophorèse et que le coefficient de Soret correspondant s'exprime, en effectuant l'analogie avec l'Eq. (4.4), par :

$$S_T = \frac{1}{D}\frac{\partial D}{\partial T_f} = \frac{1}{T_f} \tag{4.13}$$

où D est le coefficient de diffusion donné par l'Eq. (4.11).

Ainsi, avant d'envisager l'éventuel ajout d'un terme supplémentaire de dérive dans l'équation de la dynamique des particules, il est important d'étudier d'abord l'influence naturelle de la variation du coefficient de diffusion et de mesurer si cet effet de thermophorèse "naturel" est suffisant pour rendre compte des vitesses de dérive observées expérimentalement.

4.3 Étude de la sensibilité du Modèle de Proche Paroi à un gradient de température dans un milieu gazeux

En préambule à l'intégration du mécanisme de thermophorèse dans la modélisation du transport des particules au voisinage de la paroi, nous avons tout d'abord étudié la réaction du Modèle de Proche Paroi (MPP) en l'état (i.e. dans sa version définie dans la première partie du manuscrit). Comme rappelé dans la section précédente, l'équation du mouvement de la particule dans le MPP s'écrit :

$$\mathrm{d}U_p = \frac{U_s - U_p}{\tau_p}\mathrm{d}t + g\mathrm{d}t + K_{\mathrm{bro}}(y)\mathrm{d}W_t. \tag{4.14}$$

Dans cette équation, le seul paramètre du modèle qui présente une dépendance à la température est le coefficient de diffusion brownien K_{bro}, dont nous rappelons l'expression :

$$K_{\mathrm{bro}}(y) = \sqrt{\frac{2k_B T_f(y)}{m_p \tau_p}} \tag{4.15}$$

où $T_f(y)$ est la température du fluide qui dépend de la distance à la paroi y et qui s'écrit (dans la suite de nos travaux, nous considérerons que la température du fluide varie uniquement dans la direction normale à la paroi) :

$$T_f(y) = T_w + y\nabla T_f(y). \tag{4.16}$$

avec $\nabla T_f(y)$, le gradient de température, $T_w = T_f(y = 0)$ la température de paroi.

Nous avons choisi d'appliquer le gradient de température uniquement dans la couche limite (dont la hauteur est fixée à $y_p^+ = 100$) en supposant que l'épaisseur de la couche limite thermique δ_t coïncide avec l'épaisseur de la couche limite turbulente δ qui s'exprime :

$$\delta = 100 l_\nu \tag{4.17}$$

où l_ν est l'échelle de longueur visqueuse qui s'exprime en m :

$$l_\nu = \frac{\nu}{u^*} \quad \text{et} \quad y_p^+ = \frac{y_p}{l_\nu} \tag{4.18}$$

On peut s'interroger sur la validité de cette hypothèse mais nous verrons par la suite que le mécanisme de thermophorèse est très marqué dans la couche limite, zone ou le gradient de température est très élevé et c'est cette tendance que nous avons

souhaité reproduire. Dans cet esprit, nous avons exprimé le gradient de température dans la couche limite de la manière suivante :

$$\nabla T = \begin{cases} \nabla T_w = \dfrac{u^{*2}\Delta T}{\nu_f(U_{\text{deb}} - 5u^*)} & \text{si } y_p^+ \leq 5 \\ \dfrac{(\Delta T - \nabla T_w 5 l_\nu)}{(100-5)l_\nu} & \text{si } 5 < y_p^+ \leq 100 \\ 0 & \text{si } y_p^+ > 100 \end{cases} . \tag{4.19}$$

ΔT correspond à la différence de température entre la paroi et la température du coeur de l'écoulement : $\Delta T = T_f(y = \delta) - T_w$. Nous avons tracé sur la Figure 4.1 une allure du profil de température $T_f = f(y^+)$ dans la zone de proche paroi pour un $\Delta T = 50\,K$ avec une température de paroi à $293\,K$, le gradient de température à la paroi est de l'ordre de $10^5\,K/m$.

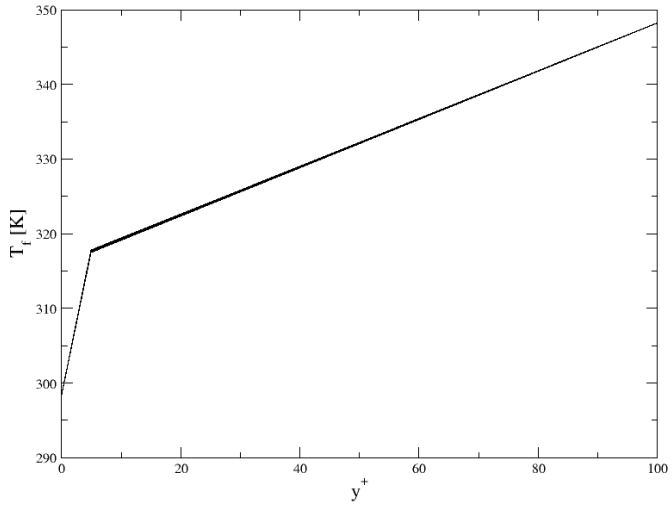


FIGURE 4.1 – Profil de température dans la couche limite

L'expression du gradient de température dans la sous couche visqueuse provient de l'estimation de l'analogie de Taylor-Prandtl entre le transfert de chaleur et le frottement (cf. [37] et [76] cités dans [28]). Dans le reste de la couche limite le profil de température T_f est donné par une interpolation linéaire en sachant que la température en fin de couche limite est égale à la température du coeur de l'écoulement.

Afin d'étudier la sensibilité du MPP à un gradient de température, nous avons calculé les courbes de dépôt de particules colloïdales ($k_p^+ = f(\tau_p^+)$) pour différentes écarts de température entre la paroi et le coeur de l'écoulement. Pour effectuer notre étude numérique de sensibilité, nous avons repris le cas-test numérique de Liu et Agarwal [39] (dont les caractéristiques sont rappelées dans Tableau 3.1). Il s'agit

d'une expérience de dépôt de goutte d'huiles dans un tuyau cylindre vertical sous un écoulement d'air turbulent.

Les courbes de dépôt sont tracées sur la Figure 4.2 où nous avons reporté les résultats expérimentaux de la synthèse de Papavergos et Hedley [59]. Enfin d'évaluer la sensibilité du Modèle de Proche Paroi à un gradient de température pariétal, la vitesse de dépôt de sept classes de particules (correspondant à une gamme de τ_p^+ comprise entre $6\,10^{-2}$ et $5\,10^{1}$) a été étudiée pour six écarts de température allant de $\Delta T = 10\,K$ jusqu'à $\Delta T = 10^{10}\,K$. Nous avons également calculé la courbe de dépôt isotherme.

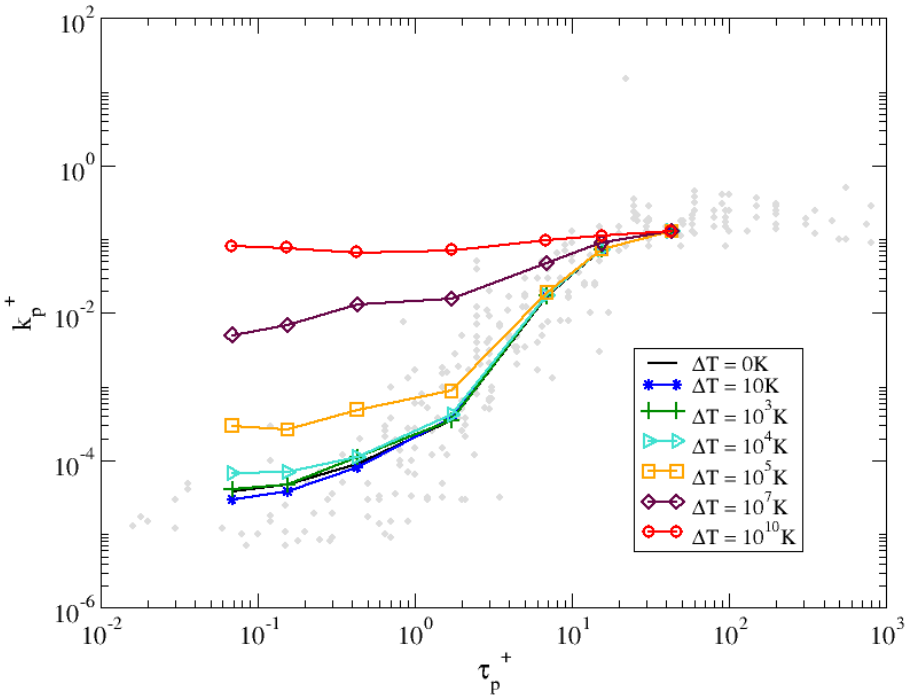


FIGURE 4.2 – Vitesse de dépôt pour différents écarts de température ΔT

On constate que pour les deux premiers écarts de température ($10\,K$ et $10^3\,K$) la vitesse de dépôt est la même que la vitesse de dépôt en écoulement isotherme. L'effet du gradient de température sur la vitesse de dépôt commence à être visible à partir d'un écart de température de $10^4\,K$, pour les particules en régime de diffusion ($\tau_p^+ < 1$). Cependant, cet effet est minime puisqu'il multiplie seulement la vitesse de dépôt k_p^+ par un facteur 2. Le premier effet significatif d'un gradient de température apparaît pour en écart de température de $10^5\,K$, la vitesse de dépôt gagne un ordre de grandeur. Au delà, pour les écarts de températures plus importants ($10^7\,K$ et $10^{10}\,K$), la vitesse de dépôt gagne 2 puis 3 ordres de grandeur.

Ce comportement témoigne de deux choses : la première, que l'influence d'un gradient de température, qui est contenue dans la modélisation du mouvement brownien, est d'autant plus significative que les particules sont petites. La deuxième, que le Modèle de Proche Paroi en l'état est très faiblement sensible à une gradient de température. Cependant, comme nous le mentionnerons dans le prochain chapitre, même pour de "faibles" écart de température (ici pour $\Delta T = 10\,K$), on devrait observer une augmentation de la vitesse de dépôt pour un écoulement en milieu gazeux. On peut donc en conclure que l'influence naturelle de la variation du coefficient de diffusion brownien induite par un gradient de température est insuffisante pour rendre compte des vitesses de dérive observées expérimentalement. Il faut donc envisager l'ajout d'un terme supplémentaire de dérive dans l'équation de la dynamique des particules afin de modéliser le mécanisme de thermophorèse.

4.4 Prise en compte de la thermophorèse dans la modélisation lagrangienne stochastique

Afin de prendre en compte le mécanisme de thermophorèse dans le transport des particules, il apparait donc nécessaire d'introduire une force supplémentaire dans le bilan des forces qui s'exercent sur les particules. Cette force de thermophorèse, F_T est donc ajoutée aux forces de traînée, de gravité et au terme d'agitation Brownienne dans l'équation du mouvement des particules :

$$\mathrm{d}U_p = \frac{U_s - U_p}{\tau_p}\mathrm{d}t + g\mathrm{d}t + K_{\mathrm{bro}}\mathrm{d}W_t + \frac{\mathbf{F_T}}{\mathbf{m_p}}\mathrm{d}\mathbf{t}. \tag{4.20}$$

où la force supplémentaire F_T, dite force de thermophorèse, est liée au coefficient de Soret par l'Eq. (4.6). L'objet de la modélisation est maintenant de donner une expression de ce coefficient de Soret.

Conclusion partielle

Le but de ce chapitre était de tester l'influence d'un gradient de température sur le Modèle de Proche Paroi sans apporter de modification à la modélisation du transport des particules au voisinage de la paroi. Ceci afin de constater si la diffusion brownienne est suffisante pour reproduire le mécanisme de thermophorèse.

Pour cela, nous avons réalisé des calculs numérique de dépôt de particules en air en appliquant un gradient de température dans la couche limite. Nous avons constaté que le modèle ne réagit pas à un gradient de température et une analyse des ordres de grandeur des différentes forces qui s'exercent sur les particules (traînée, gravité, browniennes) a confirmé que la diffusion brownienne ne permet pas de reproduire le mécanisme de thermophorèse. En conséquence, afin de tenir compte de ce phénomène, nous allons ajouter une force de thermophorèse F_T au bilan des forces qui s'exercent sur les particules.

Le but de cette partie est de comprendre les mécanismes sous-jacents responsables de la thermophorèse afin de trouver une expression adaptée du coefficient de Soret. C'est dans cet esprit que s'organise la deuxième partie, le Chapitre 5 traite de la thermophorèse dans un milieu gazeux et le Chapitre 6 traite du phénomène en milieu liquide.

Chapitre 5

Thermophorèse en gaz

5.1 Bibliographie

5.1.1 Généralités sur la théorie cinétique des gaz

L'explication physique du phénomène de thermophorèse dans un écoulement gazeux est basée sur des aspects de la théorie cinétique de gaz dont le comportement est entièrement décrit par les équations de Boltzmann (proposées par Boltzmann en 1872 et dont la résolution est très complexe). Afin d'étudier le mécanisme de dérive des particules en présence d'un gradient, nous supposons que le gradient de température s'applique uniquement dans la direction normale à la paroi, ce choix rendra l'intégration de la force de thermophorèse dans le Modèle de Poche Paroi plus aisée car c'est un modèle 1D.

D'après la théorie cinétique des gaz, l'énergie cinétique d'une molécule de gaz s'écrit :

$$E_c = \frac{1}{2} k_B T_f \tag{5.1}$$

où k_B est la constante de Boltzman et T_f la température du gaz. L'Eq. (5.1) qui relie la température à l'agitation moléculaire, permet d'expliquer le mécanisme de thermophorèse dans un gaz. En effet, dans les zones de forte température du milieu, les chocs répétés sur une particules qui sont dus à une agitation moléculaire du gaz plus élevée, provoquent un déplacement de la particule vers des zones où l'agitation moléculaire est plus modérée et qui correspondent aux zones plus froides de l'écoulement.

L'intensité de la force de thermophorèse dépend du nombre de Knudsen Kn qui mesure le rapport entre le libre parcours moyen des molécules de gaz λ_m et le rayon de la particule r_p :

$$Kn = \frac{\lambda_m}{r_p}. \tag{5.2}$$

Le libre parcours moyen λ_m mesure la distance moyenne parcourue par une

molécule de gaz avant d'entrer en contact avec une autre molécule de gaz et il s'écrit :

$$\lambda_m = \frac{\mu_g}{p}\sqrt{\frac{2k_B T_f}{m_p}}. \tag{5.3}$$

À titre d'exemple, le libre parcours moyen de l'air à $20°C$ et à $1\,atm$ vaut $70\,nm$.

Le nombre de Knudsen, sans dimension permet de caractériser différents régimes d'écoulement gazeux dispersés :

- Pour $Kn \ll 1$ le gaz peut être considéré comme un milieu continu, on parle de régime continu ou encore de régime de glissement

- Pour $Kn \gg 1$ les collisions molécules/particules sont beaucoup moins fréquentes que les collisions molécule/molécule, la particule s'apparente à une molécule de taille importante, on parle alors de régime moléculaire libre ou encore de régime de Knudsen.

- Dans le régime intermédiaire, toutes les collisions ont la même fréquence d'occurrence et la description du phénomène est plus complexe.

Comme nous le verrons dans la suite de ce chapitre, la force de thermophorèse dans un milieu gazeux dépend du nombre de Knudsen Kn qui décrit le régime d'écoulement dans lequel se trouve les particules.

5.1.2 Théories sur l'ensemble de la gamme de nombre de Knudsen

Il existe de nombreux travaux théoriques et expérimentaux autour de la thermophorèse en gaz. Nous allons présenter les approches adoptées pour chaque régime décrit ci-dessus (Zheng [80] a réalisé une revue détaillée de l'état de l'art sur la thermophorèse en gaz). Afin de simplifier l'écriture des formules de force de thermophorèse, nous écrirons le coefficient de Soret, S_T correspondant à chaque régime, sachant que la force de thermophorèse F_T s'écrit : $F_T = -(m_p D/\tau_p) S_T \nabla T_f$.

Régime continu : $Kn \ll 1$

Pour le régime continu, Epstein ([18]) a établi une expression de la force de thermophorèse basée sur la théorie de la mécanique des milieux continus :

$$S_T = \frac{9\pi}{T_f}\left(\frac{\Lambda}{1+2\Lambda}\right)\frac{\mu_g}{\rho_g D} \tag{5.4}$$

avec $\Lambda = \lambda_g/\lambda_p$ le rapport des conductivités thermiques du gaz et de la particule. λ_g correspond à la contribution transverse de la conductivité thermique du gaz et s'exprime :

$$\lambda_g = \frac{15}{4}\frac{k_B}{m_p}\mu_g. \tag{5.5}$$

L'expression d'Epstein (Eq. (5.4)) est un cas limite de l'équation de Boltzman, pour $Kn \to 0$, cependant elle sous-estime la force de thermophorèse en comparaison avec les résultats expérimentaux, pour des particules ayant une conductivité thermique élevée ($\Lambda \ll 1$). Brock [7] a apporté une correction à l'expression d'Epstein et aboutit à l'équation suivante du coefficient de Soret pour le régime continu :

$$S_T = \frac{1}{T_f}\frac{12\pi(\Lambda + C_t Kn)}{(1+3C_m Kn)(1+2\Lambda+2C_t Kn)}\frac{\mu_g}{\rho_g D} \tag{5.6}$$

où le coefficient de la vitesse de glissement C_m, le coefficient de saut de température C_t et le coefficient de fluage thermique C_{tc} sont donnés par la théorie cinétique des gaz.

Régime moléculaire : $Kn \gg 1$

Pour le régime moléculaire, Waldmann [73] a utilisé la théorie cinétique des gaz pour formuler la force de thermophorèse, on remarquera que cette expression est indépendante du rapport des conductivités thermiques Λ :

$$S_T = \frac{1}{T_f}\frac{2\pi}{Kn}\frac{\mu_g}{\rho_g D}. \tag{5.7}$$

Notons également que l'expression de Brock (Eq. (5.6)) se réduit à l'équation Eq. (5.4) lorsque $Kn \to 0$ si $C_{tc} = 0,75$ (valeur suggérée par Brock [7] et Epstein [18]).

Régime intermédiaire

Talbot et al. [69] sont les premiers à avoir formulé une expression pour la thermophorèse sur l'ensemble de la gamme de nombre de Knudsen. Ils ont constaté que dans la limite où $Kn \to +\infty$, les résultats de Brock (Eq. (5.6)) et de Waldmann (Eq. (5.7)) sont très proches (3% d'écart) si $C_m = 1,14$, $C_t = 2,18$ et $C_{tc} = 1,17$. Cette interpolation entre les deux régimes limites (continu et moléculaire) a été largement utilisée ([67], [48] et [28]) pour modéliser la force de thermophorèse cependant, elle ne repose pas sur une modélisation physique du phénomène c'est pourquoi nous nous sommes orientés vers une autre formulation.

Beresnev et Chernyak [4] ont établit une expression de la force de thermophorèse pour des nombres de Knudsen arbitraires basée sur la théorie cinétique des gaz. Ils ont pour cela, modélisé l'équation de Boltzmann à l'aide d'une version linéarisée du modèle BGK (pour Bhatnagar Gross et Krook, proposé en 1954 [5]) dénommée

"modèle S" (pour Shakhov [66]). Ce modèle permet d'approximer les équations de Boltzmann en remplaçant l'intégrale de collision par un terme plus simple qui facilite leur résolution. Cette approche de modélisation présente aussi l'avantage d'être valable pour des ratio de conductivité thermique Λ arbitraires.

L'expression du coefficient de Soret donnée par le "modèle S" sur toute la gamme du nombre de Knudsen est :

$$S_T = \frac{1}{T_f}\frac{2\pi}{Kn}\left[\frac{f_{11}+\Lambda f_{21}}{f_{31}+(1+2.5\Lambda Kn)f_{41}}\right]\frac{\mu_g}{\rho_g D} \tag{5.8}$$

où les coefficient f_{i1} dépendent uniquement du nombre de Knudsen et dont les valeurs sont données dans l'article Beresnev et Chernyak ([4] TABLE I, p. 1748).

Yamamoto et Ishihara [78] ont adopté une démarche similaire à celle de Beresnev et Chernyak [4], en résolvant les équations de Boltzman à l'aide du modèle BGK (sans réaliser l'étape supplémentaire de linéarisation à l'aide de "modèle S"). La modélisation de Yamamoto et Ishihara [78] est meilleure que celle de Talbot et al. (par la comparaison avec les résultats théoriques effectuée par Healy et Young [29]), neanmoins, il apparaît, d'après les travaux de Healy et Young [29] que la théorie développée par Beresnev et Chernyak [4] donne de meilleurs résultats pour prédire le mécanisme de thermophorèse pour des nombres de Knudsen arbitraires. C'est donc leur formulation du coefficient de Soret Eq. (5.8) que nous avons retenue pour modéliser la thermophorèse en gaz.

Nous avons intégré la force de thermophorèse calculée par Beresnev et Chernyak (Eq. (5.8)) dans l'équation du mouvement d'une particule dans le Modèle de Proche Paroi comme ceci (la modélisation de la vitesse de fluide vu U_s demeure inchangée) :

$$\mathrm{d}U_p = \frac{U_s - U_p}{\tau_p}\mathrm{d}t + g\mathrm{d}t + K_{\mathrm{bro}}\mathrm{d}W_t + \frac{\mathbf{F_T}}{\mathbf{m_p}}\mathrm{d}\mathbf{t}. \tag{5.9}$$

Nous présentons, dans la prochaine section, des calculs numériques de dépôt de particules sous l'influence d'un gradient de température. Pour cela, nous commençons par présenter quelques travaux expérimentaux relatifs à la thermophorèse. Puis nous analysons les résultats des simulations numériques de thermophorèse avec le MPP modifié pour prendre en compte la force de thermophorèse.

5.2 Simulation numérique de la thermophorèse en gaz

5.2.1 Expériences de dépôt en milieu gazeux

D'un point de vue expérimental, tout comme pour les écoulements isothermes, l'influence de la thermophorèse sur le dépôt de particules est généralement étudiée

sur des écoulements en conduite. La difficulté est de pouvoir maintenir un gradient de température constant dans tout l'écoulement afin de calculer correctement la vitesse de dépôt des particules.

Romay et al. [65] ont étudié le dépôt de particules de chlorure de sodium et de polystyrène latex dans un écoulement turbulent (respectivement $Re = 1400$ et $Re = 9500$) en conduite verticale de longueur L (les particules ont un diamètre compris entre $0,1$ et $0,7\,\mu m$). L'écoulement chargé en particules est chauffé à l'entrée de la conduite entre $298\,K$ et $410\,K$ tandis que les parois sont maintenues à une température de $298\,K$ par une procédé de refroidissement à l'eau (pour une conduite de $0,49\,cm$ de diamètre cela correspond à des valeurs de gradient comprises entre 200 et 48000 K/m à l'entrée de la conduite). Un dispositif permet de mesurer l'efficacité du dépôt entre l'entrée et la sortie. Cependant l'estimation de la vitesse de dépôt sur toute la conduite ne peut être correcte car la température de l'écoulement est refroidie par les parois et donc l'intensité de la force de thermophorèse diminue également.

Leeming [38] a étudié le dépôt de particules d'uranine et d'acide oléique dans un écoulement turbulent en conduite verticale. Tout comme l'expérience de Liu et Agarwal [39], la quantité de particules déposées est déterminée en coupant le tuyau en différentes sections et en utilisant la technique de spectrométrie par fluorescence. L'écoulement chargé en particules est au préalable chauffé avant d'être injecté dans la conduite dont les parois sont refroidies à l'eau. Cependant, contrairement à l'expérience de Romay et al. [65], Leeming [38] a veillé à maintenir un gradient de température constant en imposant un flux d'eau ad hoc à la paroi. De plus, il a pris soin d'obtenir un profil de température établi avant de procéder à ses mesures et dans ces conditions, la différence de température entre la paroi et le centre de l'écoulement est seulement de $4\,K$ (ce qui correspond à un gradient de 800 K/m pour un tuyau de 1 cm de diamètre).

Les résultats de l'expérience de Leeming [38] sont ceux que nous avons retenus car le dispositif expérimental permet de maintenir un gradient de température constant et donc une force de thermophorèse constante (contrairement à l'expérience de Romay et al. [65]) où la force de thermophorèse décroît) dans les sections du tuyau sur lesquelles les relevés ont été effectués.

5.2.2 Simulations numériques de dépôt en milieu gazeux

Dans cette section nous présentons des résultats de simulations numériques de dépôt de particules en présence d'un gradient de température correspondant au cas test de l'expérience de Leeming décrite dans la section précédente. Les principales caractéristiques de l'étude expérimentale sont résumées dans le Tableau 5.1 :

Nous avons étudié l'influence de deux gradients de température correspondant à un écart de température entre la paroi et le coeur de l'écoulement ΔT_f de $4\,K$ et de

Paramètre	Valeur
diamètre de la conduite D_C	$1,27\,10^{-2}\,m$
longueur de la conduite	$1,02\,m$
densité de l'air ρ_f	$1,25\,kg/m^3$
nombre de Reynolds Re	50000

TABLE 5.1 – Caractéristiques de l'expérience de Leeming [38]

$50\,K$. Bien que nous ne disposions que de résultats expérimentaux pour $\Delta T_f = 4\,K$, nous avons comparé nos résultats de dépôt pour $\Delta T_f = 50\,K$ avec les simulations numériques de He et Ahmadi [28] qui ont effectué des simulations similaires en prenant l'expression de Talbot et al. [69] pour la force de thermophorèse. Nous avons également calculé la courbe de dépôt pour $\Delta T_f = 0\,K$ afin de vérifier que la nouvelle version du MPP reproduit bien les résultats de dépôt pour un écoulement isotherme.

Comme dans les calculs précédents, les variables moyennes de l'écoulement ($\langle P \rangle$ et les deux premiers moments de la vitesse du fluide) sont calculés avec un modèle de turbulence du second ordre de type RANS $R_{ij} - \epsilon$.

Ensuite, les particules d'acide oléique sont injectées avec un profil uniforme à l'entrée du tuyau. La vitesse de dépôt est calculée avec la méthode de Matida et al. [45] cf. Section 3.2.2. Pour le calcul de la phase dispersée, nous avons imposé un profil de température dans la couche limite dont l'expression a été donnée dans l'introduction de la deuxième partie du manuscrit (Eq. (4.19)). Le Tableau 5.2 présente l'ordre de grandeur du gradient de température dans la sous-couche visqueuse :

Écart de température (K)	$4\,K$	$50\,K$
Gradient de température à la paroi (K/m)	$\simeq 6\,10^3$	$\simeq 2\,10^5$

TABLE 5.2 – Gradient de température à la paroi

La courbe de dépôt est tracée en Figure 5.1. Les vitesses de dépôts calculées avec notre modèle sont en bon accord avec les résultats expérimentaux et numériques.

Nous retrouvons bien les trois régimes de la courbe de dépôt en fonction de l'inertie (mentionnés dans la Section 3.2.1), de plus, la courbe de dépôt réagit bien, i.e. que la vitesse de dépôt est d'autant plus grande que l'écart de température est important, ce qui est cohérent avec l'expression de la force de thermophorèse qui est proportionnelle au gradient de température.

Nous remarquons également que la vitesse de dépôt est très sensible au gradient de température, en effet, même pour un faible écart de température ($\Delta T_f = 4\,K$) la vitesse de dépôt gagne plus de deux ordres de grandeur. L'écart entre les courbes qui est plus grand pour les particules dont l'inertie adimensionnée est inférieure à

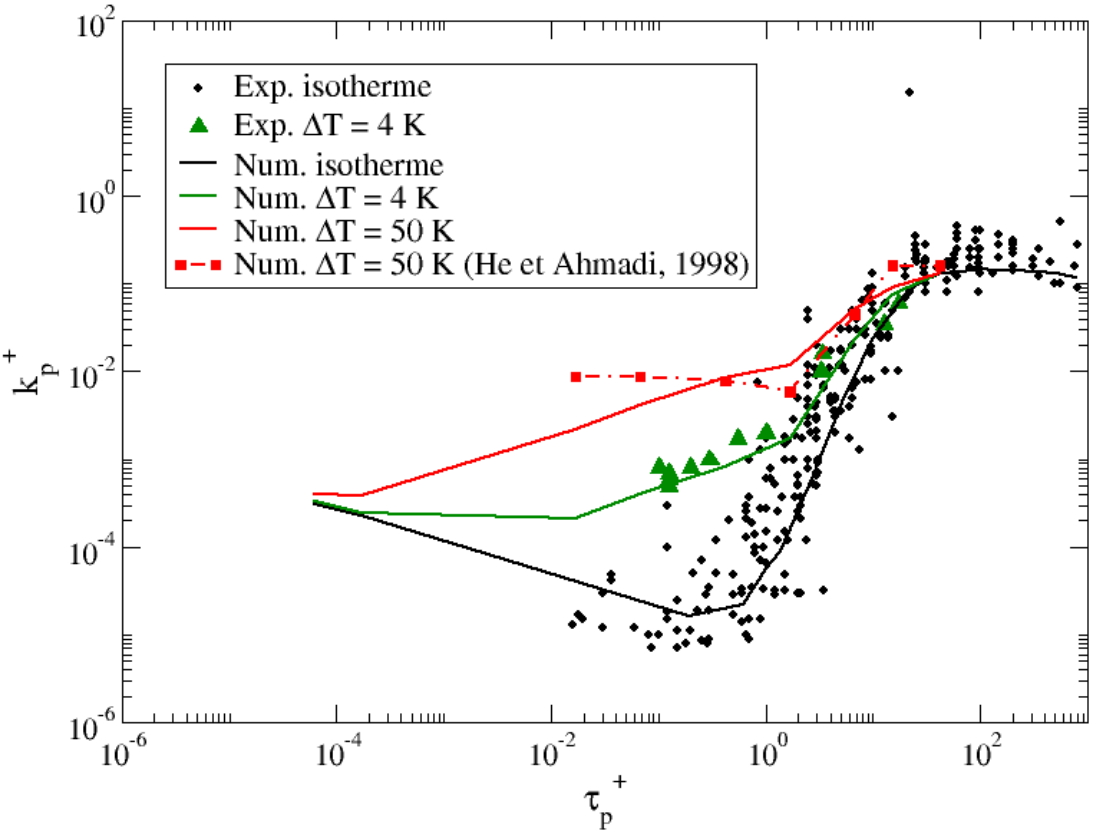


FIGURE 5.1 – Influence de la thermophorèse sur la vitesse de dépôt de particules pour différents gradients de température

1, montre que le mécanisme est plus prononcé pour les particules de faible inertie.

Bien qu'il n'y ait pas de résultats expérimentaux pour des valeurs d'inertie adimensionnée en dessous de 10^{-2}, nous avons calculé le taux de dépôt pour cette gamme d'inertie afin de tester l'influence du mouvement brownien qui est le mécanisme prédominant pour des particules de cette taille. Nous remarquons d'une part que la vitesse de dépôt est d'autant plus importante que la taille des particules diminue et d'autre part que toutes courbes se rejoignent à $\tau_p^+ = 10^{-4}$. Ce qui signifie que l'intensité de la force de thermophorèse diminue avec l'inertie des particules. Ce résultat est cohérent avec l'expression de la force de thermophorèse dont la valeur limite tend vers 0 lorsque le diamètre des particules tend vers 0.

De plus, les vitesses de dépôt calculées sont en bon accord avec les simulation de He et Ahmadi [28] ainsi qu'avec les résultats expérimentaux de Leeming [38].

Enfin, toutes les courbes se rejoignent pour les inerties élevées (au delà de $\tau_p^+ = 5$) qui correspond au régime de vol libre, dans lequel la trajectoire des particules n'est

plus sensible aux perturbations de l'écoulement.

Nous avons évalué la valeur des coefficients de thermophorèse (cf. Tableau 5.3) : respectivement le coefficient de Soret S_T et le coefficient de diffusion thermophorétique D_T (nous rappelons que la vitesse de dérive thermophorétique s'écrit $v_T = -D_T \nabla T$) pour un écart de température $\Delta T = 50\,K$ et pour trois diamètres différents. Dans ce tableau figurent également la valeur de l'inertie adimensionnée τ_p^+ correspondante ainsi que celle du coefficient de diffusion moléculaire.

$d_p = 2r_p\ (\mu m)$	τ_p^+	$S_T\ (K^{-1})$	$D_T\ (m^2/(s \cdot K))$	$D\ (m^2/s)$
$0,3$	$0,15$	$6,55\,10^3$	$5,86\,10^{-7}$	$8,96\,10^{-11}$
$0,5$	$0,43$	$2,96\,10^4$	$1,57\,10^{-6}$	$5,38\,10^{-11}$
1	$1,725$	$2,15\,10^5$	$5,79\,10^{-6}$	$2,69\,10^{-11}$

TABLE 5.3 – Comparaison des ordres de grandeur des coefficients de thermophorèse pour un écart de température $\Delta T = 50\,K$

On constate que plus le rayon est grand, plus le coefficient de Soret est grand (car il est proportionnel à r_p). On observe le comportement inverse pour le coefficient de diffusion D (qui est inversement proportionnel au rayon). De plus, en comparant les vitesses de dépôt obtenues par simulation numérique avec et sans force de thermophorèse (respectivement Figure 5.2 et Figure 4.2) on retrouve bien le bon ordre de grandeur du coefficient de Soret ($\simeq 10^4\ K^{-1}$). En effet, pour un $\tau_p^+ = 0,43$, la vitesse de dépôt k_p^+ est égale à 10^{-2} pour un écart de température $\Delta T = 50\,K$ sur la Figure 5.2 et pour un $\Delta T = 10^7\,K$ sur la Figure 4.2 (qui correspond aux calculs sans force de thermophorèse). Si on écrit l'égalité des vitesses de dérive thermophorétique, il vient (l'indice 1 correspond au calcul avec force de thermophorèse et l'indice 2 fait référence au calcul sans force de thermophorèse où le coefficient brownien induit un coefficient de Soret $S_T = 1/T$ cf. Eq. (4.13)) :

$$\begin{aligned} v_{T_1} &\simeq v_{T_2} \\ -S_{T_1}\Delta T_1 &\simeq -S_{T_2}\Delta T_2 \\ S_{T_1} 10 &\simeq 10^{-2} 10^7 \\ S_{T_1} &\simeq 10^4\ K^{-1}. \end{aligned} \tag{5.10}$$

Ce que nous devons retenir de cette étude sur la thermophorèse en gaz est pour les particules où l'effet de thermophorèse est le plus significatif ($0,1 < \tau_p^+ < 1$), le coefficient de Soret **est de l'ordre de $10^4, 10^5\ \mathbf{K^{-1}}$**.

Conclusion partielle

Dans ce chapitre, nous avons étudié le mécanisme de thermophorèse en milieu gazeux. Pour cela, nous avons au préalable réalisé une étude bibliographique de la thermophorèse dans un milieu gazeux. Ce phénomène est largement expliqué dans la littérature, il dispose de nombreux travaux théoriques expérimentaux et numériques.

La théorie cinétique des gaz permet d'expliquer la thermophorèse en milieu gazeux et fournit, en fonction du régime de l'écoulement (qui est déterminé par le nombre de Knudsen Kn), une expression de la force de thermophorèse pour chaque régime (à savoir le régime continu, le régime moléculaire et le régime intermédiaire). Parmi tous les travaux théoriques, nous avons retenu l'approche de Beresnev et Chernyak [4] qui ont établi une expression de la force de thermophorèse pour des nombres de Knudsen arbitraires basée sur la théorie cinétique des gaz. Leur formulation repose donc sur une modélisation physique du mécanisme de thermophorèse en milieu gazeux contrairement aux travaux de Talbot et al. [69] qui sont une interpolation entre les deux régimes limites de l'écoulement gaz (régime continu et régime de diffusion).

Après implémentation de la force de thermophorèse (dont l'expression est donnée dans l'Eq. (5.8)) dans le Modèle de Proche Paroi, nous avons effectué des simulations numériques de dépôt de particules basées sur l'expérience de Leeming [38] qui a étudié le dépôt de particules d'uranine et d'acide oléique dans un écoulement d'air turbulent en conduite verticale. Comme cette expérience a été menée avec un seul gradient de température (correspondant à un écart de température entre la paroi et le cœur de l'écoulement de $4\,K$) nous avons également comparé nos résultats avec les travaux numériques de He et Ahmadi [28] qui ont étudié le dépôt de particules pour différents gradients de température. Les résultats de nos simulations sont en bon accord avec les résultats expérimentaux et numériques. L'intégration de la force de thermophorèse de Bersenev et Chernyak [4] dans le Modèle de Proche Paroi est donc validée.

L'étude bibliographique a montré que le coefficient de Soret en milieu gazeux est très bien connu (nous rappelons que ce coefficient décrit le mécanisme de thermophorèse, i.e. le flux de particules induit par un gradient de température). En effet, même s'il existe plusieurs formulations du coefficient de Soret, elles sont toutes équivalentes car elles sont basées sur la même théorie, à savoir la théorie cinétique des gaz. En milieu liquide, cette théorie ne s'applique pas et on ne dispose actuellement d'aucune théorie unifiée capable d'expliquer la thermophorèse en milieu liquide. Comme nous l'évoquerons dans le chapitre suivant, il existe dans la littérature, plusieurs approches pour expliquer ce phénomène et chaque approche aboutit à une nouvelle expression du coefficient de Soret. Ce chapitre montre donc qu'en milieu gazeux, la thermophorèse est très bien expliquée et que nous sommes parvenus à l'intégrer avec succès dans notre modélisation du dépôt de particules. Il se place comme un

préambule au chapitre suivant où l'objectif est de trouver une expression ad hoc du coefficient de Soret pour notre modélisation de la thermophorèse en milieu liquide.

Chapitre 6

Thermophorèse en liquide

Introduction

Contrairement à la thermophorèse en milieu gazeux les travaux théoriques et expérimentaux relatifs à l'étude de la thermophorèse en milieu liquide n'ont pas encore abouti à une description unifiée du mécanisme de thermophorèse en milieu liquide. La notion de libre parcours moyen n'existe plus vraiment de manière aussi claire que dans la théorie cinétique des gaz et, de plus, son "équivalent" tend vers zéro ou correspondrait juste à l'espacement entre les molécules de liquide. Il en résulte qu'une particule en suspension dans un liquide va interagir plus fortement avec les molécules du milieu liquide que dans un gaz. L'interaction entre la particule et le liquide est alors étudiée au niveau de l'interface molécule/particule i.e. au niveau de la surface de la particule.

D'après Piazza [60], le mécanisme de thermophorèse en milieu liquide s'explique par la perturbation de l'état d'équilibre thermodynamique de la zone interfaciale provoquée par un gradient de température. Ce déséquilibre induirait un gradient de pression local provoquant alors la migration de la particule afin de rétablir l'état d'équilibre thermodynamique. La thermophorèse en milieu liquide peut donc être expliquée à l'aide d'une théorie microscopique basée sur l'équilibre local thermodynamique d'une particule colloïdale.

Par ailleurs, dans un milieu liquide, les interactions au niveau moléculaire entre les surfaces chargées (que ce soit la surface des particules colloïdales ou la paroi) peuvent jouer un rôle important dans l'équilibre des colloïdes et notamment leur dépôt. C'est pourquoi, la première section de ce chapitre décrit les interactions physico-chimiques présentes au niveau des surfaces chargées et s'attache particulièrement à la théorie de double couche ainsi qu'à la théorie DLVO. Puis nous nous intéresserons à la modélisation de la force de thermophorèse en milieu liquide. Enfin, dans le but de tester les expressions des forces de thermophorèse retenues afin de modéliser la thermophorèse en milieu liquide, des simulations numériques de dépôt de particules, sous l'influence de différents gradients de température, ont été réalisées et font l'objet de la dernière section de ce chapitre.

6.1 Modélisation des interactions entre les particules et la paroi dans un milieu liquide

Dans un milieu liquide, les interactions physico-chimiques entre les particules colloïdales en suspension et la paroi jouent un rôle important dans le dépôt. Nous devons donc les intégrer dans la modélisation du transport des particules dans la zone de proche paroi. La théorie DLVO (pour Derjaguin et Landau [13] et Verwey et Overbeek [72]) décrit ces interactions comme la somme d'une contribution toujours attractive du potentiel de van der Waals (VDW) et d'une contribution électrostatique liée à la double couche électrostatique qui peut être attractive ou répulsive. Nous allons débuter cette section en décrivant chaque interaction puis nous exposerons la mise en oeuvre de la théorie DLVO dans la modélisation lagrangienne stochastique.

6.1.1 Interactions électromagnétiques de van der Waals

Les interactions de van der Waals (VDW) [26], généralement attractives, désignent un ensemble de forces d'origine électromagnétiques qui s'exercent à l'échelle moléculaire entre dipôles. On distingue trois types d'interactions qui sont les forces de : Keesom (entre deux dipôles permanents), Debye (entre un dipôle permanent et un dipôle induit) et London (entre deux dipôles induits) cette dernière force est la contribution principale des interactions VDW. Pour une particule colloïdale de rayon r_p, située à une distance d d'une paroi ($d = y_p - r_p$ où y_p est la position dans la direction normale à la paroi du centre de gravité de la particule), la force de van der Waals s'écrit :

$$F_{\mathrm{VDW}} = \frac{-\mathcal{A}_H r_p^3}{3(2r_p + d)^2 d^2} \tag{6.1}$$

Dans l'Eq. (6.1), $\mathcal{A}_H$ est la constante d'Hamaker qui est caractéristique de la nature des matériaux en présence (particule et paroi) et du milieu liquide. Cette constante intervient dans l'expression de l'énergie de van der Walls par unité de surface qui s'écrit :

$$E_{\mathrm{VDW}} = \frac{-\mathcal{A}_H}{12\pi d^2} \tag{6.2}$$

cette constante s'exprime donc en Joules, elle est donnée pour chaque "trio" particule / paroi / milieu liquide et son ordre de grandeur varie entre 10^{-18} et 10^{-20} J. Pour le système magnétite/eau/acier inoxydable (système que nous utiliserons pour nos simulations numériques) $\mathcal{A}_H = 6\,10^{-20}$ J.

6.1.2 Interactions électrostatiques : notion de double couche électrostatique

Pour étudier les interactions électrostatiques, la notion de double couche électrostatique a été introduite afin de modéliser la distribution des charges autour d'une surface. Cette modélisation a évolué au cours du temps afin de mieux décrire le potentiel de surface.

Helmholtz [34] a été le premier à proposer un modèle de distribution de charges autour d'une surface qui a ensuite été perfectionné par Gouy et Chapman [22], [8]. Enfin Stern [68] a affiné la structure de la couche électrostatique en une double couche. Le principe de la notion de double couche électrostatique est le suivant : dans un milieu liquide, la charge de surface d'une particule ou d'une paroi va être contrebalancée par les ions en solution pour rétablir la neutralité électronique au voisinage de la surface considérée. Le ré arrangement des ions en solution crée une double couche électrostatique au voisinage de la surface. Comme illustré sur la Figure 6.1, les charges de surface attirent des charges de signe opposé (gegenion) qui se disposent en une couche fine au voisinage de la paroi appelée couche de Stern. D'autres gegenion vont également se disposer dans une zone plus large autour de la surface pour former une couche diffuse. Les deux couches forment ainsi la double couche électrostatique qui délimite la zone d'interaction électrostatique entre la particule (ou la paroi) et le milieu liquide.

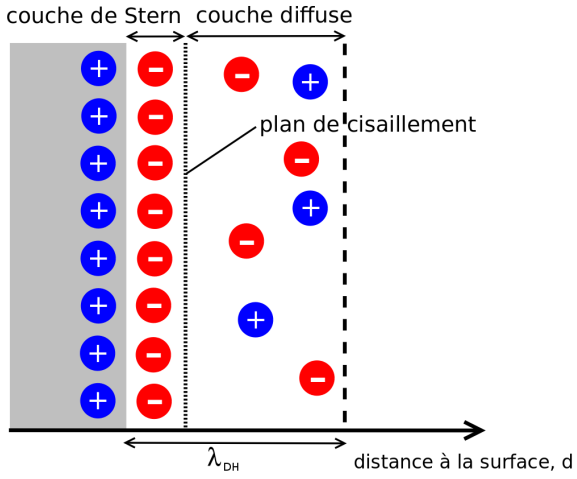


FIGURE 6.1 – Représentation schématique de la double couche, les signes peuvent être inversés

Au cours du temps, le modèle de double couche électrostatique s'est encore affiné et on considère désormais que la couche de Stern est divisée en deux [34] (ce qui aboutit à une triple couche électrostatique). Cependant, par souci de simplification, on considérera ici le modèle de double couche développé par Stern [68], sans diviser la couche de Stern.

La double couche électrostatique est caractérisée par deux grandeurs, son potentiel électrique et son épaisseur, la longueur de Debye λ_{DH}. Dans la couche de

Stern, le potentiel électrique décroît de façon linéaire du potentiel de surface φ_0 au potentiel ζ qui correspond au potentiel du plan de cisaillement. Ce potentiel qui est plus accessible que le potentiel de surface (car plus facile à mesurer) est donc généralement utilisé pour caractériser l'état électrostatique d'une surface. Le potentiel électrique décroît ensuite de façon exponentielle dans la couche diffuse.

La longueur de Debye qui représente la portée des interactions électrostatiques est donnée par la relation suivante :

$$\lambda_{\mathrm{DH}}(T_f) = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon(T_f) R T_f}{2 F_A^2 I}} \tag{6.3}$$

où ϵ_0 est la permittivité du vide, $\epsilon(T_f)$ la permittivité relative également appelée constante diélectrique du milieu, R la constante universelle des gaz, F_A la constante de Faraday qui mesure la charge électrique d'une mole d'électrons ($F \simeq 9,65\ C/mol$) et I la force ionique du milieu liquide qui s'exprime en $M = mol/l$. Plus la force ionique est faible, plus la double couche électrostatique est étendue et plus le potentiel ζ est élevé.

La force d'interaction électrostatique résultante F_{elec} s'écrit :

$$F_{\mathrm{elec}} = 4\pi\epsilon_0\epsilon(T_f)\frac{r_p}{\lambda_{\mathrm{DH}}}\varphi_1\varphi_2 e^{-d/\lambda_{\mathrm{DH}}} \tag{6.4}$$

où φ_i sont les potentiels ζ du milieu i (particule ou paroi).

6.1.3 La théorie DLVO dans la modélisation lagrangienne stochastique

La théorie DLVO, comme nous l'avons énoncé précédemment, décrit les interactions physico-chimiques particule / paroi comme la somme d'une contribution toujours attractive du potentiel de van der Waals (VDW) et d'une contribution électrostatique liée à la double couche électrostatique qui peut être attractive ou répulsive. En reprenant les expressions des Eq. (6.2) et Eq. (6.4), la force DLVO s'exprime :

$$\begin{aligned} F_{\mathrm{DLVO}} &= F_{\mathrm{VDW}} + F_{\mathrm{elec}} \\ &= -\frac{A_H r_p^3}{3(2r_p+d)^2 d^2} + 4\pi\epsilon_0\epsilon(T_f)\frac{r_p}{\lambda_{\mathrm{DH}}}\varphi_1\varphi_2 e^{-d/\lambda_{\mathrm{DH}}} \end{aligned} \tag{6.5}$$

La Figure 6.2 représente l'énergie de l'interaction DLVO agissant sur les particules en fonction de la distance à la paroi dans un cas répulsif (φ_1 et φ_2 sont du même signe). On remarque la présence d'une barrière d'énergie dans les derniers nanomètres qui séparent la particule de la paroi. Cette barrière (dont la hauteur sera désignée par E_{DLVO}) pourrait empêcher la particule d'entrer en contact avec la paroi et donc de s'y déposer (ce qui a pour conséquence de diminuer le taux de dépôt des particules en suspension).

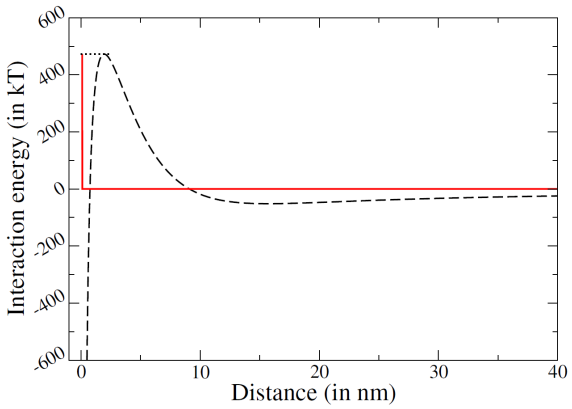


FIGURE 6.2 – Énergie d'interaction DLVO entre une sphère et un plan, source : Henry et al. [32]

La modélisation des interactions DLVO se fait en deux étapes et intervient dès que la distance particule/paroi est inférieure au rayon de la particule ($y_p \leq r_p$) :

1. On détermine l'énergie cinétique de la particule $E_c = \frac{1}{2} m_p V_p(y_p)^2$
2. si : $\begin{cases} E_c > E_{\text{DLVO}} & \text{la particule se dépose} \\ E_c \leq E_{\text{DLVO}} & \text{la particule rebondit} \end{cases}$

Cette modélisation constitue une condition aux limites du Modèle de Proche Paroi qui permet de savoir, une fois que la particule entre en contact avec la paroi, si elle y adhère et donc si le dépôt a lieu. C'est pourquoi nous avons intégré la modélisation des interactions DLVO dans nos prochains calculs en milieu liquide.

Nous venons de présenter le modèle d'interaction physico-chimique nécessaire à la simulation de dépôt de particules en milieu liquide, nous allons maintenant étudier la modélisation de la thermophorèse en milieu liquide.

6.2 La thermophorèse en liquide : une approche basée sur l'équilibre thermodynamique local

Dans cette section, nous présentons deux formulations différentes du coefficient de Soret qui correspondent aux variantes d'une même approche qui est basée sur des considérations thermodynamique afin de définir la force de thermophorèse exercée sur des particules colloïdales en milieu liquide.

Dhont et al. [14] ont formulé une expression du coefficient de Soret, S_T suivante :

$$S_T^{(1)} = \frac{1}{T_f}\left[1 + \frac{1}{4}\left(\frac{4\pi l_B(T_f)^2 \sigma_{\text{eff}}(T_f)}{e}\right)^2 \frac{r_p^2}{l_B(T_f)^3}\left(1 - \frac{\mathrm{d}ln(\epsilon(T_f))}{\mathrm{d}ln(T_f)}\right)\lambda_{\text{DH}}(T_f)\right]. \tag{6.6}$$

où la constante diélectrique $\epsilon(T_f)$ s'exprime de la façon suivante :

$$\epsilon(T_f) = A + \alpha_1 T_f + \alpha_2 T_f^2 + \alpha_3 T_f^3. \tag{6.7}$$

où les α_i sont des constantes avec dimensions dont les valeurs ont été évaluées expérimentalement par Malmberg et Maryott [41] pour des températures allant de 0°C à 100°C ($A = 87.740$, $\alpha_1 = -0,4008\ K^{-1}$, $\alpha_2 = 9,398\ 10^{-4}\ K^{-2}$ et $\alpha_3 = -1,410\ 10^{-6}\ K^{-3}$).

Dans Eq. (6.6), l_B est la longueur de Bjerrum définie par :

$$l_B(T_f) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon(T_f)k_B T_f}. \tag{6.8}$$

En utilisant l'expression de l_B Eq. (6.8), on arrive à la forme proposée par Dhur et Braun [15] pour l'expression du coefficient de Soret :

$$S_{\mathrm{T}}^{(2)} = \frac{4\pi r_p^2}{k_B T_f}\left[\frac{-s_{\mathrm{hyd}}}{\mathscr{N}_A} + \frac{\sigma_{\mathrm{eff}}(T_f)^2}{4\epsilon_0\epsilon(T_f)T_f}\left(1 - \frac{T_f}{\epsilon(T_f)}\frac{\partial\epsilon(T_f)}{\partial T_f}\right)\lambda_{\mathrm{DH}}(T_f)\right] \tag{6.9}$$

avec $\mathscr{N}_A$ la constante d'Avogadro et s_{hyd} qui représente une entropie d'hydratation surfacique (comptée ici par surface de particule et par mole).

On peut considérer la formulation Eq. (6.9) comme une généralisation de la formulation Eq. (6.6). Dans les deux cas, le coefficient de Soret s'exprime sous la forme :

$$S_{\mathrm{T}}^{(i)} = \frac{1}{T_f}\left(\mathrm{cst}^{(i)} + B_{\mathrm{DLVO}}\right) \tag{6.10}$$

avec :

$$\begin{cases} B_{\mathrm{DLVO}} &= \dfrac{\pi\sigma_{\mathrm{eff}}^2 r_p^2}{k_B\epsilon_0\epsilon(T_f)T_f}\left(1 - \dfrac{T_f}{\epsilon(T_f)}\dfrac{\partial\epsilon(T_f)}{\partial T_f}\right)\lambda_{\mathrm{DH}}(T_f) \\ \mathrm{cst}^{(1)} &= 1 \\ \mathrm{cst}^{(2)} &= \dfrac{-4\pi r_p^2 s_{\mathrm{hyd}}}{R}. \end{cases} \tag{6.11}$$

Nous verrons dans la Section 6.4, dédiée aux simulations numériques, que le terme B_{DLVO} est prépondérant, il représente la contribution majeure du coefficient de Soret (avec les paramètres expérimentaux utilisés).

Nous venons de présenter les deux expressions du coefficient de Soret (Eq. (6.6) et Eq. (6.9)) que nous intégrerons dans le Modèle de Proche Paroi pour tenir compte du mécanisme de thermophorèse en milieu liquide. Cependant, sachant que nous

sommes en milieu liquide, les interactions entre les particules et la paroi deviennent fortes et doivent donc être modélisées. Dans le processus de dépôt d'une particule, cela correspond à l'étape d'attachement d'une particule à la paroi (en effet, comme nous l'avons expliqué dans l'introduction générale de ce manuscrit, le dépôt est découpé en deux étapes, une étape de transport et une étape d'attachement à la paroi). Contrairement à un milieu gazeux, les conditions physico-chimiques qui règnent au voisinage de la paroi jouent un rôle prépondérant dans le transport des particules. Si nous voulons étudier la thermophorèse en milieu liquide, nous devons prendre en compte cette étape d'attachement de la particule à la paroi. La prochaine section présente l'état de l'art des expériences de dépôt de particules colloidales sous écoulement en présence d'un gradient de température à la paroi. La dernière section de ce chapitre est consacrée à l'étude numérique de l'implémentation de la force de thermophorèse dans le Modèle de Proche Paroi.

6.3 Expériences de dépôt en milieu liquide

Le dépôt de particules colloïdales en milieu liquide n'est pas étudié de la même façon qu'en milieu gazeux. La plupart des études expérimentales étudient l'impact de la variation d'un paramètre caractéristique de la phase liquide sur la vitesse de dépôt d'une classe de particule (en terme de diamètre). A titre d'exemple, Williamson et al. [75] ont étudié la vitesse du dépôt de particules colloïdales en fonction du pH mais seulement pour une classe de particules.

Étant donné que nous ne disposons pas des courbes expérimentales de dépôt de particules colloïdales en milieu liquide même pour un écoulement isotherme, nous avons, dans un premier temps, décidé de l'étudier et de la comparer à la courbe de dépôt de particules en milieu gazeux.

Pour cela, nos simulations numériques sont basées sur l'expérience de Williamson et al. [75] qui ont étudié le dépôt de particules d'hématite (Fe_2O_3) d'un diamètre de $0,2\ \mu m$ dans un écoulement liquide turbulent pour des condition de pH variant entre 5 et 9. Le dépôt est observé dans cylindre vertical (de diamètre $D_C = 1,28\ cm$ et de longueur $L = 1,22\ m$) dont les parois sont en acier inoxydable. Le taux de dépôt est mesuré à 80 cm de l'entrée du cylindre. Les caractéristiques de l'écoulement sont résumées dans le Tableau 6.1.

Nombre de Reynolds	11000
Température	298 K
Diamètre des particules	$0,2\ \mu m$
Densité des particules	5240 kg/m^3

TABLE 6.1 – Caractéristiques de l'expérience de Williamson et al. [75]

La variation du taux de dépôt en fonction du pH est représentée sur la Figure 6.3.

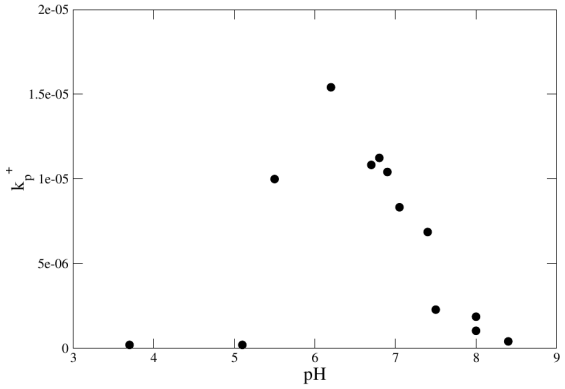


FIGURE 6.3 – Vitesse de dépôt des particules adimensionnée en fonction du pH, expérience de Williamson et al. [75]

Nous avons effectué nos simulation de dépôt pour un $pH = 6,5$ ce qui correspond à la vitesse de dépôt maximale ($k_p+ = 1,6\,10^{-5}$) observée par Williamson et al. [75]. Dans ces conditions de pH, le potentiel de la phase solide $\varphi_1 = 20\ mV$, celui de la phase liquide, $\varphi_2 = -20\ mV$ et la force ionique de la solution $I = 10^{-6,5}\ M$.

6.4 Simulations numériques de dépôt en milieu liquide

Afin de réaliser nos simulations numériques de thermophorèse en milieu liquide, nous avons donc repris les conditions de l'expérience de Wiliamson et al. [75] décrites ci-dessus (géométrie et caractéristiques de l'écoulement pour un $pH = 6,5$). Puis, nous avons étudié le dépôt de particules d'hématite en faisant varier le diamètre des particules d_p, de $10^{-2}\ \mu m$ à $30\ \mu m$, ce qui correspond à une gamme d'inertie adimensionnée τ_p^+, comprise entre 10^{-6} et 10^1. Le maillage utilisé pour ces simulations est le même que celui de l'étude de Liu et Agarwal (cf. Figure 3.3).

Nous commencerons par présenter les résultats de dépôt pour un écoulement isotherme afin de les comparer aux résultats de dépôt en milieu gazeux. Puis nous étudierons l'influence de différents gradients de température sur la vitesse de dépôt en milieu liquide.

6.4.1 Écoulement isotherme

La courbe de dépôt en milieu liquide pour un écoulement isotherme est représentée sur la Figure 6.4 sur laquelle nous avons également représenté la courbe de dépôt en milieu gazeux.

Nous remarquons que pour une même valeur de τ_p^+ les valeurs de vitesse de dépôt ne sont pas du même ordre de grandeur, par exemple, pour une particule ayant une

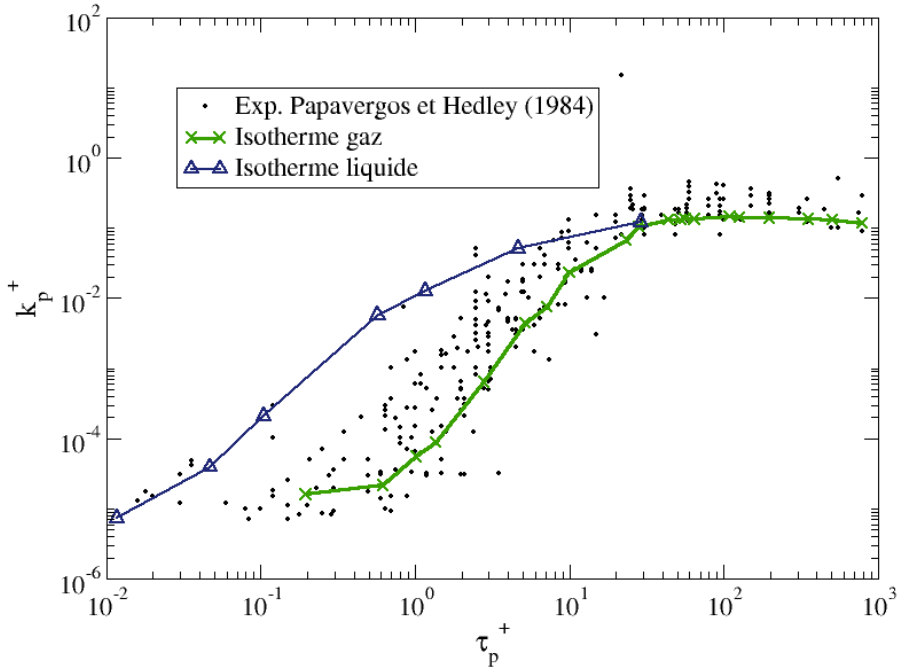


FIGURE 6.4 – Comparaison des vitesses de dépôt de particules adimensionnée en milieu liquide et en milieu gazeux pour un écoulement isotherme

inertie adimensionnée de l'ordre de 1, la vitesse de dépôt en milieu liquide est 1000 fois plus importante qu'en milieu gazeux. En effet, pour $\tau_p^+ = 1$ cela correspond à $d_p = 1\ \mu m$ en air et $d_p = 10\ \mu m$ en eau. Ainsi, pour la même valeur de l'inertie adimensionnée, la taille de particule correspondante est dix fois plus importante en eau qu'en air. Cela implique que pour un même τ_p^+ la particule se déposera plus facilement en eau car elle atteindra plus rapidement la paroi. Ce qui explique l'écart entre les deux courbes de dépôt.

Malgré les écarts de vitesse de dépôt entre les deux milieux, l'allure de la courbe de dépôt est conservée, i.e. on retrouve les trois régimes de dépôt sur toute la gamme des inerties adimensionnées (cf. Section 3.2.1) ainsi que l'augmentation de la vitesse de dépôt pour les particules de très faible inertie qui sont fortement animées par l'agitation brownienne. On remarque également que les vitesses de dépôt pour les particules en régime de diffusion ($\tau_p^+ = 10^{-6}$ en eau et $\tau_p^+ = 10^{-4}$ en air) sont du même ordre : $k_p^+ = 10^{-4}$. Cette remarque est également valable pour les particules en régime de vol libre.

Notons qu'on retrouve bien la vitesse de dépôt de l'expérience de Williamson et al. [75] pour un diamètre égal à $0,2\ \mu m$ qui correspond à un $\tau_p^+ = 10^{-4}$.

Dorénavant, nous ne ferons plus apparaître les résultats de dépôt en milieu gazeux sur nos courbes de dépôt.

6.4.2 Écoulement non isotherme

Afin d'étudier la thermophorèse en milieux liquide et l'implémentation des forces de thermophorèse (Eq. (6.6) et Eq. (6.9)) dans le Modèle de Proche Paroi, nous avons simulé le dépôt de particules pour deux écarts de température : $\Delta T_f = 5\,K$ et $\Delta T_f = 50\,K$. Les courbes de dépôt correspondantes sont représentées sur la Figure 6.5.

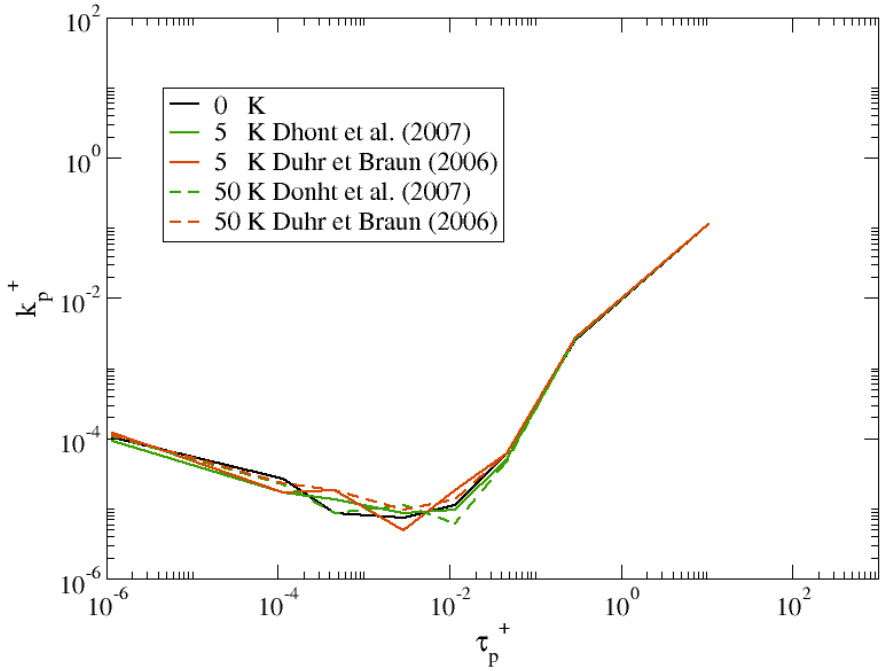


FIGURE 6.5 – Influence de la thermophorèse en milieu liquide pour différents gradients de température. Comparaison de la force de thermophorèse de Dhont et al. (traits continus) et de la force de thermophorèse de Duhr et Braun (pointillés).

Pour calculer ces courbes, nous avons exprimé la charge surfacique σ_{eff} en utilisant l'estimation de l'équation de Grahame pour des particules à faible potentiel ($\varphi < 25\,mV$) donnée dans [35] :

$$\sigma_{\text{eff}}(T_f) = \frac{\epsilon_0 \epsilon(T_f) \varphi_1}{\lambda_{\text{DH}}(T_f)}. \tag{6.12}$$

Dans ces conditions, pour un diamètre $d_p = 2\,\mu m$ et pour un écart de température $\Delta T = 5\,K$ les termes du coefficient de Soret définis dans Eq. (6.13) valent :

$$\begin{cases} B_{\text{DLVO}} & \simeq & 9\,10^2 \\ \text{cst}^{(1)} & = & 1 \\ \text{cst}^{(2)} & \simeq & 5,25 \end{cases} \tag{6.13}$$

en prenant $s_{\text{hyd}} 4\pi r_p^2 = -43,7\ J/(mol \cdot K)$ qui est la valeur moyenne de l'entropie d'hydratation par mole d'eau obtenue par Risacher et Fritz [64]. On remarque que le terme B_{DLVO} est prépondérant, il représente la contribution majeure du coefficient de Soret. Les deux constantes (respectivement **1** et **5, 25**) qui sont du même ordre, ce qui cohérent car les deux formules dérivent l'une de l'autre, sont négligeables devant le terme DLVO.

En observant les courbes de dépôt en Figure 6.5, on constate que pour les calculs de dépôts effectués avec les deux formules de force de thermophorèse (celle de Dhont et al. [14] et celle de Duhr et Braun [16]), la vitesse de dépôt des particules k_p^+ est insensible à un gradient de température. On peut donc en conclure, d'après ces premiers résultats numériques, que le mécanisme de thermophorèse en milieu liquide est négligeable devant les forces hydrodynamiques qui pilotent le dépôt des particules colloïdales. Ce résultat a déjà été observé par McNab en 1972 [47] qui a étudié la vitesse de thermophorèse de billes de polystyrène de 1 micron dans un écoulement stagnant et pour des gradient de température ∇T compris entre $7\ 10^3$ et $3\ 10^4\ K/m$ (dans nos simulations le gradient est bien plus grand car il est compris entre $2,5\ 10^5$ et $2,6\ 10^6\ K/m$).

Afin de valider ces résultats numériques, nous avons évalué l'ordre de grandeur du coefficient de diffusion thermophorétique D_T des deux approches (celle de Dhont et al. [14] et celle de Duhr et Braun [16]) sachant que ce coefficient de diffusion thermophorétique $D_T = S_T D$ où D, le coefficient de diffusion moléculaire donné par la relation d'Einstein Eq. (4.2) $D \simeq 2\ 10^{-13}\ m^2/s$ dans l'eau. La comparaison a été effectuée pour des particules d'un diamètre $d_p = 2\ \mu m$ ce qui correspond à un $\tau_p^+ \simeq 5\ 10^{-2}$, les valeurs correspondantes du coefficient de diffusion thermique sont données dans le Tableau 6.2.

Écart de température (K)	5	50
D_T $(m^2/(s \cdot K))$ de Dhont et al. [14]	$6,61\ 10^{-13}$	$5,43\ 10^{-13}$
D_T $(m^2/(s \cdot K))$ de Duhr et Braun [16]	$6,64\ 10^{-13}$	$5,46\ 10^{-13}$

TABLE 6.2 – Comparaison des coefficients de diffusion thermophorétique D_T en liquide pour différents gradients de température

Sachant que, d'après Brenner [6], le coefficient de diffusion thermophorétique D_T dans un liquide est de l'ordre de $10^{-12}\, m^2/(s \cdot K)$. L'ordre de grandeur du coefficient de diffusion thermophorétique pour les deux formules est donc correct. Les travaux de Duhr et Braun [16] et ceux de Dhont et al. [14] présentent des résultats similaires, ce qui est rassurant car tous les deux sont basés sur la même approche (cf. les ordres ordres de grandeur donnés dans l'Eq. (6.13)). Il demeure cependant quelques incertitudes sur les coefficients de chaque formule, notamment sur les valeurs du potentiel

de la particule φ_1 et de l'entropie d'hydratation surfacique s_{hyd} pour lesquels nous n'avons pas de dépendance à la température (cependant, l'incertitude sur ce dernier terme est négligeable vu qu'il contribue très faiblement au coefficient de Soret car comme nous l'avons vu dans l'Eq. (6.13) c'est le terme B_{DLVO} qui est prépondérant).

Ce que nous devons retenir de cette étude de thermophorèse en liquide est que le coefficient de Soret en liquide (avec les paramètres que nous avons utilisés pour nos simulation qui sont ceux de l'expérience de Williamson et al. [75]) est de l'ordre de $\mathbf{10^0\,K^{-1}}$. Il y a donc environ **5** ordres de grandeur entre le coefficient de Soret en gaz et celui en liquide (celui en gaz est le plus important, cf. Section 5.2.2).

L'analyse de ces premiers résultats de dépôt de particules en milieu liquide dans un écoulement non isotherme montre que la thermophorèse en milieu liquide n'est pas le mécanisme prépondérant responsable du dépôt des particules colloïdales. Ces résultats demeurent cependant hypothétiques car aucun résultat expérimental disponible ne permet de les confirmer ou de les infirmer. Afin de confirmer cette première hypothèse (i.e. que la thermophorèse n'est pas un mécanisme majeur dans le dépôt de particules colloïdales en milieu liquide) il serait intéressant d'étudier les autres approches théoriques développées pour expliquer le mécanisme de thermophorèse en milieu liquide. On peut citer les travaux de Würger [77] qui décrit le mécanisme de thermophorèse comme une conséquence de l'effet Marangoni qui correspond au flux de particules sous l'effet d'un gradient de tension superficielle. Lorsque le gradient de tension superficielle est causé par un gradient de température, on parle alors de l'équivalent "thermique" de l'effet Marangoni également appelé convection thermo-capillaire. Ou peut également citer les travaux de Han [27] qui étudie le mécanisme de thermophorèse à la lumière d'une approche de type "Dynamique Moléculaire" (désignée par MD pour "Molecular Dynamics" dans la littérature). Ces études permettraient de corroborer ou non cette première hypothèse.

Conclusion partielle

Dans ce chapitre, nous avons étudié le mécanisme de thermophorèse en milieu liquide afin de l'intégrer au Modèle de Proche Paroi. L'étude bibliographique a montré que les approches qui étudient ce phénomène sont nombreuses. Nous avons cependant choisi d'adopter l'approche basée sur une étude thermodynamique qui décrit le mécanisme de thermophorèse comme étant la conséquence d'un déséquilibre thermodynamique local de la zone interfaciale située entre la particule et le liquide. Nous avons donc retenu deux expressions ([14] et [16]) de la force de thermophorèse, toutes deux basées sur cette approche d'équilibre thermodynamique local, que nous avons intégrées dans la modélisation du transport des particules.

Nous avons vu que pour modéliser le dépôt de particules dans un liquide il est nécessaire de prendre en compte les interactions physico-chimiques entre les particules et la paroi qui jouent un rôle important dans le dépôt. Ainsi, l'étape d'attachement

de la particule à la paroi est modélisée à partir de la théorie DLVO. Cette étape constitue une condition aux limites du Modèle de Proche Paroi (qui simule le transport de la particule à la paroi) qui permet de déterminer si la particule adhère ou non à la paroi une fois qu'elle rentre en contact avec la paroi.

Puis nous avons effectué des simulations numériques de dépôt de particules afin de tester les formules retenues pour la modélisation du mécanisme de thermophorèse en milieu liquide (cf. Eq. (6.6) et Eq. (6.9)). Sachant que nous ne disposons d'aucune courbe de dépôt de particules (de la forme $k_p^+ = f(\tau_p^+)$) en milieu liquide nous avons au préalable réalisé un calcul de dépôt en écoulement isotherme afin de nous comparer aux résultats de dépôt dans un écoulement d'air isotherme. L'allure de la courbe de dépôt est la même pour les deux milieux. Cependant, pour une même valeur d'inertie adimensionnée τ_p^+, les vitesses de dépôt en milieu liquide sont plus importantes (l'écart sur la vitesse k_p^+ est d'environ deux ordres de grandeur). Cet écart s'explique par le fait que pour une même valeur de τ_p^+ le diamètre des particules en milieu liquide est dix fois plus important que le diamètre correspondant en milieu gazeux. Ainsi, la particule se déposerait plus rapidement en eau car elle atteindrait plus vite la paroi.

Enfin, nous avons effectué des calculs de dépôt de particules avec différents gradients de température afin de tester les formules retenues pour la modélisation de la force de thermophorèse en milieu liquide. Les résultats montrent que la thermophorèse en milieu liquide n'est pas un mécanisme prépondérant dans le dépôt de particules sachant qu'il n'affecte pas la vitesse de dépôt des particules. Cependant, ces résultats devront être comparés à d'autres approches (qui sont mentionnées à la fin de la Section 6.4.2) afin de confirmer cette première hypothèse.

Conclusion de la deuxième partie

Dans cette deuxième partie, nous avons étudié le mécanisme de thermophorèse afin de l'intégrer à la modélisation du transport de la particule dans la zone de proche paroi. Le point clé de cette partie est que nous avons généralisé le Modèle de Proche Paroi aux écoulements non isothermes tant dans un milieu gazeux que dans un milieu liquide. Nous allons à présent rappeler les points forts de chaque chapitre :

- Le quatrième chapitre est consacré à l'étude de la sensibilité du Modèle de Proche Paroi à un gradient de température afin de savoir si la diffusion brownienne est suffisante pour reproduire le mécanisme de thermophorèse. Cette étude a révélé que le Modèle de Proche Paroi doit être modifié afin d'intégrer la modélisation d'un force de thermophorèse dans le suivi lagrangien des particules. Ce chapitre opère donc une transition entre la première partie de ce travail de thèse qui a aboutit à la construction d'une modélisation adaptée pour simuler le transport des particules colloïdales dans un écoulement turbulent isotherme et la deuxième partie de ce document qui est consacré à la généralisation du Modèle de Proche Paroi aux écoulements non isothermes.

- Le cinquième chapitre est dédié à l'étude de la thermophorèse dans un milieux gazeux. Afin de sélectionner une expression de la force de thermophorèse pour notre modélisation, nous avons tout d'abord réalisé un état de l'art de la thermophorèse en milieux gazeux. Nous avons sélectionné la formulation de Beresnev et Chernyak [4] car elle est basée sur une modélisation physique du phénomène de thermophorèse contrairement aux travaux de Talbot et al. [69] qui sont largement utilisés mais qui ne résultent pas d'une approche de modélisation du phénomène. Nous avons ensuite intégré la force de Beresnev et Chernyak [4] dans le Modèle de Proche Paroi afin de mener des simulations de dépôt de particules en présence d'un gradient. Le modèle amélioré reproduit de manière satisfaisante les résultats expérimentaux qui, comme nous l'avons vu ne sont pas systématiquement représentés sous forme de courbe de dépôt. Les résultats de nos simulations numériques montrent que la thermophorèse dans un écoulement gazeux, augmente le taux de dépôt de plusieurs ordres de grandeur. On peut donc conclure que le modèle développé dans ce chapitre prédit correctement le taux de dépôt de particules dans un écoulement gazeux non isotherme.

- Le sixième chapitre est consacré à la thermophorèse en liquide. Contrairement à la thermophorèse en gaz, trouver une expression de la force de thermophorèse adaptée à notre cas (celui de particules colloïdales transportées par des écoulements turbulents) n'a pas été aussi aisé car l'approche adoptée pour décrire le phénomène n'est pas unifiée. Nous avons retenu deux expressions différentes pour notre modélisation. Nous n'avons recensé aucun travaux expérimentaux qui mesurent le dépôt de particules en fonction de leur inertie

dans un milieu liquide, et ce même pour des écoulements isothermes. Les premiers résultats révèlent que la thermophorèse en milieu liquide ne serait pas un mécanisme prépondérant intervenant dans le dépôt de particules. Cependant, la validation de l'implémentation d'une force de thermophorèse dans le Modèle de Proche Paroi ne peut être correctement validée en l'absence de données expérimentales. Il est donc nécessaire de s'intéresser aux autres approches existantes qui permettent d'expliquer la thermophorèse en milieu liquide. Cependant nous avons besoin de résultats expérimentaux de taux de dépôt dans un écoulement non isotherme liquide afin de pouvoir comparer et valider nos observations numériques.

En guise de conclusion, ce travail de généralisation du Modèle de Proche Paroi aux écoulements non isothermes a été validé pour les écoulements en milieu gazeux. Les résultats observés en milieu liquide ont révélé une première hypothèse, que la thermophorèse en milieu liquide ne joue pas un rôle important dans le taux de dépôt des particules. Cependant, ces résultats numériques doivent encore être validés afin de confirmer ou d'infirmer cette hypothèse ce qui nous permettra de prédire correctement le comportement des particules dans un générateur de vapeur.

Conclusion générale et Perspectives

Ce travail de thèse a été effectué dans le but de modéliser le dépôt de particules colloïdales dans des écoulements turbulents non isothermes. Ces travaux s'inscrivent en effet dans le cadre d'un projet industriel destiné à comprendre et à modéliser les phénomènes de dépôt observés dans des installations industrielles (e.g. les générateurs de vapeur). Dans cette conclusion générale nous dressons donc un bilan du travail effectué qui se partage en deux parties.

La première partie définit le cadre de la modélisation du transport des particules. L'approche adoptée pour simuler les écoulement diphasiques est une approche hybride dans laquelle le fluide est décrit par une méthode Eulérienne qui fournit les champs moyens de l'écoulement (pression moyenne et les deux premiers moments de la vitesse du fluide) sur un maillage et dans laquelle les particules sont décrites par une méthode Lagrangienne. Dans cette approche, l'information fournie par la description du fluide étant limitée (car moyennée) les vitesses fluides instantanées, nécessaires à la modélisation Lagrangienne, sont reconstruites par des modèles lagrangiens stochastiques. Comme nous l'avons expliqué dans le premier chapitre, l'utilisation de ces modèles étant destinée au calcul d'écoulements industriels nous impose d'employer une modélisation dédiée au transport des particules dans la zone de proche paroi. La particularité de la modélisation du transport des particules est donc qu'elle est la coordination de deux modèles : d'une part le Modèle de Langevin Généralisé [52] qui calcule le déplacement des particules dans le cœur de l'écoulement et d'autre part le Modèle de Proche Paroi [25] qui calcule le transport des particules dans la zone de proche paroi qui est le siège de structures cohérentes.

Le second chapitre traite du raccord de ces deux modèles. Des calculs en particules fluides ont montré qu'une étape de correction était nécessaire pour réaliser correctement le couplage des deux modèles. Les travaux de couplage ont donné lieu à de nouveaux développements théoriques sur les statistiques conditionnées d'une particule traversant une interface. Le point fort de cette étude est que le couplage est dorénavant indépendant des caractéristiques du Modèle de Proche Paroi, il ne dépend que des caractéristiques du Modèle de Langevin Généralisé.

Le couplage est ensuite validé par des simulations numériques de dépôt de particules colloïdales et inertielles dans le troisième chapitre. Ces simulations sont basées sur l'expérience de Liu et Agarwal [39] qui ont mesuré le dépôt de gouttelettes d'huile

dans un écoulement d'air turbulent en conduite verticale. L'adéquation des résultats de simulation numérique aux résultats expérimentaux montre que la modélisation du transport développée prédit correctement le taux de dépôt dans un écoulement d'air isotherme.

L'extension de la modélisation aux écoulements non isothermes constitue la deuxième partie de ce document. Pour cela, nous avons tout d'abord testé l'influence d'un gradient de température sur le Modèle de Proche Paroi sans y apporter de modifications afin de constater si la diffusion brownienne seule permet de capter le mécanisme de thermophorèse (qui est le phénomène de migration des particules en réponse à un gradient de température). Cette étude de sensibilité, qui fait l'objet du quatrième chapitre de ce manuscrit, a montré qu'il est nécessaire d'intégrer une force de thermophorèse dans la modélisation du transport des particules au voisinage de la paroi.

Les travaux liés à la thermophorèse en milieu gazeux étant nombreux, nous avons tout d'abord choisi de modéliser la thermophorèse en milieu gazeux dans le cinquième chapitre. La théorie cinétique des gaz permet d'expliquer le phénomène de thermophorèse en milieu gazeux. Nous avons sélectionné l'approche de modélisation de la force de thermophorèse de Beresnev et Chernyak [4] qui repose sur une modélisation physique du mécanisme de thermophorèse basée sur la théorie cinétique des gaz. Afin de valider l'intégration de la force de thermophorèse dans le Modèle de Proche Paroi, nous avons simulé l'expérience de Leeming [38] qui a mesuré le dépôt de particules d'uranine et d'acide oléique dans un écoulement d'air turbulent vertical avec un gradient de température correspondant à un écart de température entre le cœur de l'écoulement et la paroi de $4\,K$. Les résultats des simulations qui sont en bon accord avec les résultats expérimentaux témoignent de la capacité du Modèle de Proche Paroi à modéliser le mécanisme de thermophorèse en milieu gazeux.

L'étude du mécanisme de thermophorèse en milieu liquide, qui fait l'objet du dernier chapitre de ce manuscrit, n'a pas été aussi aisée qu'en milieu gazeux. En effet, l'étude de la thermophorèse en milieu liquide est un vaste sujet d'exploration qui ne dispose pas encore de théorie unifiée capable d'expliquer le phénomène ni de résultats expérimentaux de dépôts dus à la thermophorèse dans un liquide. Parmi les approches existantes (mentionnées par Piazza [60]) nous avons retenu une approche basée sur l'équilibre thermodynamique local de la particule. Dans le cadre de cette approche nous avons comparé deux expressions développées par Dhont et al. [14] et Duhr et Braun [16] pour modéliser la thermophorèse en milieu liquide. Malheureusement, l'absence de données expérimentales de dépôt de particules sous écoulement ne nous permet pas de valider l'approche de modélisation retenue (les travaux expérimentaux de thermophorèse en liquide que nous avons recensé mesurent des vitesses de thermophorèse dans un écoulement stagnant, cf. [15] et [47]). Cependant les premiers résultats révèlent que la thermophorèse en milieu liquide ne serait pas un mécanisme prépondérant dans le dépôt de particules en milieu liquide

dans la mesure où il n'agit pas sur la vitesse de dépôt. En effet, tout comme dans un gaz, il semblerait que ce soit l'interaction entre les particules colloïdales et l'hydrodynamique de l'écoulement qui pilote le dépôt des particules à la paroi. Cette hypothèse devra être étudiée à la lumière d'autres approches théoriques que nous évoquons dans la prochaine section qui propose les perspectives de ces travaux de thèse.

Perspectives

La synthèse de ce travail de thèse nous permet de dégager plusieurs perspectives de travaux futurs dans le but d'améliorer et de poursuivre notre étude. Il s'avère que les perspectives concernent les deux points forts de ce manuscrit, a savoir : le couplage des deux modèles lagrangien stochastiques (Chapitre 2) et l'étude de la thermophorèse en milieu liquide (Chapitre 6). Détaillons à présent les perspectives envisagées pour chaque point.

– Dans le Chapitre 2, nous avons identifié deux façons d'équilibrer le flux de particules à l'interface entre les deux modèles (cf. Section 2.3). La première solution que nous avons étudiée (à savoir la ré initialisation de la vitesse des particules qui quittent le Modèle de Proche Paroi) a permis de réduire l'accumulation des particules fluides observée à l'interface et de rétablir une concentration uniforme dans la zone de proche paroi. Cependant, le déséquilibre à l'interface est toujours présent, ce qui signifie que le couplage n'est pas encore établi et qu'il faut donc poursuivre ce travail de raccord. Pour cela, il est donc nécessaire, d'une part, de continuer l'étude de la ré initialisation de la vitesse des particules (e.g. en ré initialisant la vitesse de l'ensemble des particules fluides qui traversent l'interface) et d'autre part d'explorer la deuxième piste. L'idée est de remonter à l'expression théorique de la distribution effective des vitesses observées autour de l'interface, l'allure de cette distribution est rappelée dans la Figure 6.6. Comme nous l'avons évoqué dans le Chapitre 2, l'expression de cette PDF est complexe car elle est la combinaison de deux distributions. Cette tâche n'est donc a priori pas évidente.

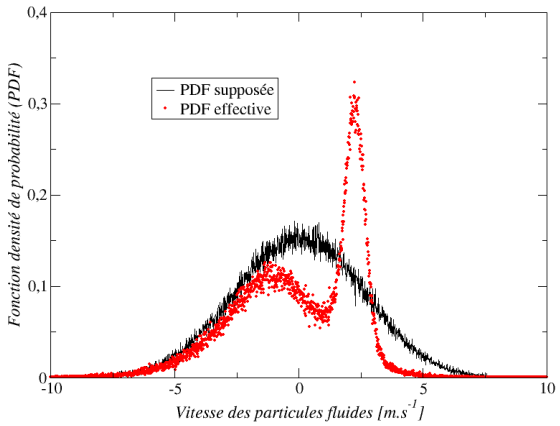


FIGURE 6.6 – Différence entre la PDF des vitesses supposée (points noirs) et effective (points rouges)

L'étude de cette deuxième solution nous permettra d'identifier la meilleure méthode pour réaliser le couplage. Ces travaux permettront de clore l'étude du raccord des deux modèles en ayant exploré toutes les pistes dégagées.

– Dans le Chapitre 6 nous avons identifié deux points qui permettraient de poursuivre notre étude de la thermophorèse en milieu liquide qui, rappelons le, n'en est encore qu'à ses débuts.

1. La littérature souffre d'un manque de résultats expérimentaux sur le dépôt de particules en milieu liquide dû à la thermophorèse. Sans ces résultats nous ne pouvons confirmer nos résultats numériques et donc l'intégration de la thermophorèse en milieu liquide dans notre modélisation.

2. Au vu du manque de données expérimentales, il est nécessaire de le combler par une étude numérique plus poussée. Pour cela, il serait intéressant de se comparer aux autres approches disponibles dans la littérature et qui expliquent la thermophorèse en milieu liquide. J'en ai sélectionné deux : celle de Würger [77] qui considère la thermophorèse en milieu liquide comme l'équivalent thermique de l'effet Marangoni (qui caractérise un flux de particules induit par un gradient de tension superficielle) et celle de Han [27] qui étudie la thermophorèse en milieu liquide à partir d'une méthode de type "Molecular Dynamics". Je voudrai également insister sur le fait que l'ensemble des calculs de thermophorèse en milieu liquide ont été menés dans des conditions DLVO attractives. Il est donc naturel de se poser la question de l'influence de la variation du conditionnement physico-chimique sur la vitesse de dépôt en présence d'un gradient de température (Williamson et al. [75] ont étudié la vitesse de dépôt en faisant varier le pH). Ainsi, la comparaison de nos résultats numériques avec ceux des autres approches que nous venons de mentionner (où le dépôt est aussi bien abordé sous l'angle hydrodynamique que sous l'angle physico-chimique) permettrait de valider notre modélisation de la thermophorèse en milieu liquide et par conséquent de répondre à cette question :
Dans quelle mesure la thermophorèse impacte-t-elle le dépôt de particules colloïdales dans un milieu liquide ?

Annexe A

Fonction densité de probabilité de la vitesse d'une particule traversant une interface

Cette annexe rapporte les travaux de Christophe Profeta (Maître de Conférence à l'Université d'Evry Val d'Essonne) qui est un mathématicien spécialisé dans le calcul stochastique qui a grandement contribué à l'avancée de ce travail de thèse sur la partie couplage de deux modèles stochastiques (Chapitre 2).

On recherche fonction de densité de probabilité conditionnée suivante :

$$p(\, V_{\Delta t} \,|\, y_0 < y_{\text{interface}} < y_{\Delta t} \,) \tag{A.1}$$

sachant que les variables y et V sont deux processus stochastiques qui décrivent l'évolution d'une particule fluide via le système d'équation suivant :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \mathrm{d}y & = & V\mathrm{d}t \\ \mathrm{d}V & = & -\beta V\mathrm{d}t + K\mathrm{d}W_t \text{ avec } \beta = \dfrac{1}{T_L}. \end{array} \right. \tag{A.2}$$

Si on discrétise le système précédent sur un pas de temps Δt :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} y_{\Delta t} - y_0 & = & V_0 \Delta t \\ V_{\Delta t} - V_0 & = & -\beta V_0 \Delta t + K(W_{\Delta t} - W_0). \end{array} \right. \tag{A.3}$$

Comme y_0 suit une loi uniforme U sur l'intervalle $[-L; 0]$ (où L représente le trajet maximal parcouru par une particule pendant un pas de temps Δt), V_0 une loi normale centrée G (de moyenne nulle) et d'écart type $\sigma = \sqrt{(K^2 T_L)/2}$ (où K et T_L [52] sont respectivement le coefficient de diffusion et l'échelle de temps lagrangienne du processus V_0) et W_0 une loi normale centrée W d'écart type $\sqrt{\Delta t}$ (propriété du processus de Wiener) et que tous ces processus sont indépendants, le système

Eq. (A.3) s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} y_{\Delta t} & = & U + \sigma G \Delta t \\ V_{\Delta t} & = & \sigma G(1 - \beta \Delta t) + K\sqrt{\Delta t} W. \end{array} \right. \tag{A.4}$$

Sachant que y_0 suit une loi uniforme sur l'intervalle $[-L; 0]$ la condition :

$$y_0 < y_{\text{interface}} < y_{\Delta t} \quad \Rightarrow \quad y_{\Delta t} > 0 \,|\, y_0 \sim U[-L; 0]. \tag{A.5}$$

La probabilité conditionnée recherchée Eq. (A.1) s'écrit :

$$p(\, V_{\Delta t} \,|\, y_{\Delta t} > 0 \,) = \frac{p(\, V_{\Delta t} \in \mathrm{d}v \,,\, U + \sigma G \Delta t > 0 \,)}{p(\, U + \sigma G \Delta t > 0 \,)} = \frac{\mathrm{A}}{\mathrm{B}} \tag{A.6}$$

avec A donné par l'Eq. (A.21) et B par l'Eq. (A.8). Nous allons calculer chaque terme séparément, en commençant par le dénominateur B qui s'exprime plus facilement que le numérateur A.

$$\begin{aligned} \mathrm{B} &= \int_{-L}^{0} \int_{\mathbb{R}} \mathbf{1}_{\{x + y\sigma\Delta t > 0\}} \frac{\mathrm{d}x}{L} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp^{-y^2/2} \mathrm{d}y \\ &= \int_{-L}^{0} \int_{\frac{-x}{\sigma\Delta t}}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp^{-y^2/2} \mathrm{d}y \frac{\mathrm{d}x}{L} \\ &= \left[\frac{x}{L} \int_{\frac{-x}{\sigma\Delta t}}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp^{-y^2/2} \mathrm{d}y \right]_{-L}^{0} - \int_{-L}^{0} \frac{x}{L} \frac{1}{\sigma\Delta t} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp^{-x^2/(2\Delta t^2 \sigma^2)} \mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\frac{L}{\sigma\Delta t}}^{+\infty} \exp^{-y^2/2} \mathrm{d}y + \left[\frac{\sigma\Delta t}{\sqrt{2\pi} L} \exp^{-x^2/(2\Delta t^2 \sigma^2)} \right]_{-L}^{0} \end{aligned} \tag{A.7}$$

soit :

$$\mathrm{B} = \frac{1}{2} \mathrm{Erfc}\left(\frac{L}{\sqrt{2}\sigma\Delta t} \right) + \frac{\sigma\Delta t}{\sqrt{2\pi} L} \left(1 - \exp^{-L^2/(2\Delta t^2 \sigma^2)} \right). \tag{A.8}$$

avec :

$$\begin{aligned} \mathrm{Erfc}(x) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{+\infty} \exp^{-u^2} \mathrm{d}u \\ \mathrm{Erf}(x) &= 1 - \mathrm{Erfc}(x) \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{x} \exp^{-u^2} \mathrm{d}u. \end{aligned} \tag{A.9}$$

Pour déterminer l'expression du numérateur A dans Eq. (A.6), on calcule :

$$\mathrm{C} = p(\, V_{\Delta t} \leqslant v \,,\, U + \sigma G \Delta t > 0 \,) \tag{A.10}$$

puis on dérivera par rapport à v pour obtenir A.

$$\begin{aligned} \mathrm{C} &= \int_{-L}^{0}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}} \mathbf{1}_{\{\sigma y(1-\beta\Delta t)+K\sqrt{\Delta t}z\leqslant v\}}\mathbf{1}_{\{x+y\sigma\Delta t>0\}}\frac{\mathrm{d}x}{L}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp^{-y^2/2}\mathrm{d}y\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp^{-z^2/2}\mathrm{d}z \\ &= \int_{-L}^{0}\int_{\frac{-x}{\sigma\Delta t}}^{+\infty}\left(\int_{-\infty}^{\frac{v-\sigma y(1-\beta\Delta t)}{K\sqrt{\Delta t}}}\frac{\exp^{-z^2/2}}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{d}z\right)\frac{\exp^{-y^2/2}}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{d}y\frac{\mathrm{d}x}{L}. \end{aligned} \tag{A.11}$$

On dérive C par rapport à v :

$$\begin{aligned} \mathrm{A} &= \int_{-L}^{0}\int_{\frac{-x}{\sigma\Delta t}}^{+\infty}\frac{1}{K\sqrt{2\pi\Delta t}}\exp\left(\frac{-(v-\sigma y(1-\beta\Delta t))^2}{2\Delta tK^2}\right)\frac{\exp^{-y^2/2}}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{d}y\frac{\mathrm{d}x}{L} \\ &= \frac{1}{2\pi LK\sqrt{\Delta t}}\int_{-L}^{0}\int_{\frac{-x}{\sigma\Delta t}}^{+\infty}\exp\left(\frac{-1}{2K^2\Delta t}\left(y^2K^2\Delta t+\sigma^2y^2(1-\beta\Delta t)^2-2v\sigma y(1-\beta\Delta t)+v^2\right)\right)\mathrm{d}y\,\mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{2\pi LK\sqrt{\Delta t}}\int_{-L}^{0}\underbrace{\int_{\frac{-x}{\sigma\Delta t}}^{+\infty}\exp\left(-\frac{K^2\Delta t+\sigma^2(1-\beta\Delta t)^2}{2K^2\Delta t}\left(y-\frac{v\sigma(1-\beta\Delta t)}{K^2\Delta t+\sigma^2(1-\beta\Delta t)^2}\right)^2\right)\mathrm{d}y}_{\mathrm{D}}\,\mathrm{d}x\,\exp\left(\frac{-v^2}{2(K^2\Delta t+\alpha_t)}\right). \end{aligned} \tag{A.12}$$

On effectue le changement de variables suivant : $u=\sqrt{\frac{K^2\Delta t+\sigma^2(1-\beta\Delta t)^2}{2K^2\Delta t}}\left(y-\frac{v\sigma(1-\beta\Delta t)}{K^2\Delta t+\sigma^2(1-\beta\Delta t)^2}\right)$, l'intégrale D dans Eq. (A.12) devient :

$$\mathrm{D} = \int_{-\sqrt{\frac{K^2\Delta t+\sigma^2(1-\beta\Delta t)^2}{2K^2\Delta t}}\left(\frac{x}{\sigma\Delta t}+\frac{v\sigma(1-\beta\Delta t)}{K^2\Delta t+\sigma^2(1-\beta\Delta t)^2}\right)}^{+\infty} \exp(-u^2)\sqrt{\frac{2K^2\Delta t}{K^2\Delta t+\sigma^2(1-\beta\Delta t)^2}}\mathrm{d}u \tag{A.13}$$

et en posant : $\alpha_t = \sigma^2(1-\beta\Delta t)^2$, l'intégrale D s'écrit de manière simplifiée :

$$\mathrm{D} = \sqrt{\frac{2K^2\Delta t}{K^2\Delta t+\alpha_t}}\frac{\sqrt{\pi}}{2}\mathrm{Erfc}\left(-\sqrt{\frac{K^2\Delta t+\alpha_t}{2K^2\Delta t}}\left(\frac{x}{\sigma\Delta t}+\frac{v\sqrt{\alpha_t}}{K^2\Delta t+\alpha_t}\right)\right). \tag{A.14}$$

Dès lors A (Eq. (A.12)) s'écrit :

$$\begin{aligned}\mathrm{A} &= \frac{1}{2\pi LK\sqrt{\Delta t}}\exp\left(\frac{-v^2}{2(K^2\Delta t+\alpha_t)}\right)\int_{-L}^{0}\mathrm{D}\,\mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{2\pi LK\sqrt{\Delta t}}\exp\left(\frac{-v^2}{2(K^2\Delta t+\alpha_t)}\right)\sqrt{\frac{2K^2\Delta t}{K^2\Delta t+\alpha_t}}\frac{\sqrt{\pi}}{2}\underbrace{\int_{-L}^{0}\mathrm{Erfc}\left(-\sqrt{\frac{K^2\Delta t+\alpha_t}{2K^2\Delta t}}\left(\frac{x}{\sigma\Delta t}+\frac{v\sqrt{\alpha_t}}{K^2\Delta t+\alpha_t}\right)\right)\mathrm{d}x.}_{\mathrm{E}}\end{aligned} \tag{A.15}$$

Pour calculer E on effectue une intégration par parties :

$$\mathrm{E} = \underbrace{\left[x\mathrm{Erfc}\left(-\sqrt{\frac{K^2\Delta t+\alpha_t}{2K^2\Delta t}}\left(\frac{x}{\sigma\Delta t}+\frac{v\sqrt{\alpha_t}}{K^2\Delta t+\alpha_t}\right)\right)\right]_{-L}^{0}}_{\mathrm{E}_1} - \underbrace{\int_{-L}^{0}x\sqrt{\frac{K^2\Delta t+\alpha_t}{2K^2\Delta t}}\frac{1}{\sigma\Delta t}\exp\left(-\frac{K^2\Delta t+\alpha_t}{2K^2\Delta t}\left(\frac{x}{\sigma\Delta t}+\frac{v\sqrt{\alpha_t}}{K^2\Delta t+\alpha_t}\right)^2\right)\mathrm{d}x}_{\mathrm{E}_2} \tag{A.16}$$

$$\mathrm{E}_1 = L\,\mathrm{Erfc}\left(-\sqrt{\frac{K^2\Delta t+\alpha_t}{2K^2\Delta t}}\left(\frac{-L}{\sigma\Delta t}+\frac{v\sqrt{\alpha_t}}{K^2\Delta t+\alpha_t}\right)\right). \tag{A.17}$$

Pour calculer E_2, on effectue le changement de variables suivant : $u = \sqrt{\frac{K^2\Delta t+\alpha_t}{2K^2\Delta t}}\left(\frac{x}{\sigma\Delta t}+\frac{v\sqrt{\alpha_t}}{K^2\Delta t+\alpha_t}\right)$ et pour plus de simplicité, posons :

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{\frac{K^2\Delta t+\alpha_t}{2K^2\Delta t}}\left(\frac{-L}{\sigma\Delta t}+\frac{v\sqrt{\alpha_t}}{K^2\Delta t+\alpha_t}\right) \\ b &= \frac{v\sqrt{\alpha_t}}{\sqrt{2K^2\Delta t(K^2\Delta t+\alpha_t)}} \end{aligned} \tag{A.18}$$

dès lors, E_2 s'écrit :

$$\begin{aligned} \mathrm{E}_2 &= \frac{\sigma\Delta t\sqrt{2K^2\Delta t}}{\sqrt{K^2\Delta t+\alpha_t}}\int_a^b\left(u-\frac{v\sqrt{\alpha_t}}{\sqrt{2K^2\Delta t(K^2\Delta t+\alpha_t)}}\right)\exp(-u^2)\,\mathrm{d}u \\ &= \frac{\sigma\Delta t\sqrt{2K^2\Delta t}}{\sqrt{K^2\Delta t+\alpha_t}}\left[-\frac{\exp^{-u^2}}{2}\right]_a^b-\frac{v\sqrt{\alpha_t}}{\sqrt{2K^2\Delta t(K^2\Delta t+\alpha_t)}}\frac{\sqrt{\pi}}{2}\left(\mathrm{Erf}(b)-\mathrm{Erf}(a)\right) \\ &= \frac{\sigma\Delta t\sqrt{2K^2\Delta t}}{2\sqrt{K^2\Delta t+\alpha_t}}\left(\exp^{-a^2}-\exp^{-b^2}\right)-\frac{v\sqrt{\alpha_t}}{\sqrt{2K^2\Delta t(K^2\Delta t+\alpha_t)}}\frac{\sqrt{\pi}}{2}\left(\mathrm{Erf}(b)-\mathrm{Erf}(a)\right). \end{aligned} \tag{A.19}$$

En ré injectant les expressions de E_1 et E_2 dans Eq. (A.15), on aboutit à l'expression suivante pour A :

$$A = \frac{1}{2\pi LK\sqrt{\Delta t}} \exp\left(\frac{-v^2}{2(K^2\Delta t+\alpha_t)}\right) \sqrt{\frac{2K^2\Delta t}{K^2\Delta t+\alpha_t}}\frac{\sqrt{\pi}}{2}(E_1 - E_2) \tag{A.20}$$

soit :

$$\begin{aligned} A = \frac{1}{2\pi LK\sqrt{\Delta t}} \exp\left(\frac{-v^2}{2(K^2\Delta t+\alpha_t)}\right) \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad & \left[\sqrt{\frac{2\Delta tK^2}{\Delta tK^2+\alpha_t}} L\,\mathrm{Erfc}\left(-a\right)\right. \\ & -\frac{\sigma K^2\Delta t^2}{\Delta tK^2+\alpha_t}\left(\exp\left(-a^2\right)-\exp\left(-b^2\right)\right) \\ & \left.+\frac{v\sigma K\sqrt{\alpha_t}\Delta t^{\frac{3}{2}}\sqrt{\pi}}{\sqrt{2}\left(\Delta tK^2+\alpha_t\right)^{\frac{3}{2}}}\left(\mathrm{Erf}\left(b\right)-\mathrm{Erf}\left(a\right)\right)\right]. \end{aligned} \tag{A.21}$$

Les expressions des coefficients a et b sont données dans l'Eq. (A.18).

Bibliographie

[1] Arcen, B. *Etude par simulation numérique directe du comportement et de la dispersion de particules solides en écoulement non homogène isothermo ou anisotherme*. PhD thesis, Université Henry Poincaré - Nancy 1, Nov. 2006.

[2] Arcen, B., Tanière, A., and Oesterlé, B. On the influence of near-wall forces in particle -laden channel flows. *International Journal of Multiphase Flow 32* (2006), 1326–1339.

[3] Archambeau, F., Méchitoua, N., and Sakiz, M. *Code_Saturne* : a Finite Volume Code for the Computation of Turbulent Incompressible Flows - Industrial Applications. *International Journal on Finite Volumes* (2004).

[4] Beresnev, S., and Chernyak, V. Thermophoresis of a spherical particle in a rarefied gas : Numerical analysis based on the model kinetic equation. *Physics of Fluids 7*, 7 (July 1995), 1743–1756.

[5] Bhatnagar, P., Gross, E., and Krook, M. A model for collision processis in gases i : small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Physical Review Letters 94* (1954), 511–525.

[6] Brenner, H. Self-thermophoresis and thermal self-diffusion in liquid and gases. *Physical Review E 82*, 3 (2010), 036325.

[7] Brock, J. On the theory of the thermal forces acting on aerosol particles. *Journal of Colloid Science 17* (1962), 768–780.

[8] Chapman, D. *Phil. Mag. 25* (1913), 475.

[9] Chibbaro, S., and Minier, J.-P. *Stochastic Methods in Fluid Mechanics*. Springer, CISM, Udine, 2014.

[10] Cleaver, J., and Yates, B. A sub layer model for the deposition of particles from a turbulent flow. *Chemical Engineering Science 30*, 8 (1975), 983–992.

[11] Cordier, H. Etude d'opportunité du projet mofphet-c. Tech. Rep. HI-86/03/020/A, EDF R&D, Dec. 2003.

[12] De Groot, S., and Mazur, P. *Non-Equilibrium Thermodynamics*. Amsterdam, North-Holland, 1962.

[13] Derjaguin, B., and Landau, L. *Acta Physicochim URSS 14* (1941), 633–662.

[14] Dhont, J., Wiegand, S., Duhr, S., and Braun, D. Thermodiffusion of charged colloids : Single-particle diffusion. *Langmuir 23* (2007), 1674–1683.

[15] Duhr, S., and Braun, D. Thermophoretic depletion follows boltzmann distribution. *Physical Review Letters 96*, 16 (2006), 168301.

[16] Duhr, S., and Braun, D. Why molecules move along a temperature gradient. *PNAS 103*, 52 (2006), 19678–19682.

[17] Dunn, W. L., and Shultis, J. K. 3 - pseudorandom number generators. In *Exploring Monte Carlo Methods*. Elsevier, Amsterdam, 2012, pp. 47–68.

[18] Epstein, P. Zur theorie des radiometers. *Z. Physik 54* (1929), 537–563.

[19] Fan, F.-G., and Ahmadi, G. A sublayer model for turbulent deposition of particles in vertical ducts with smooth and rough surfaces. *Journal of Aerosol Science 24*, 1 (1993), 45–64.

[20] Gae, G., Lee, C., and Park, S. Measurements and control of particle deposition velocity on a horizontal wafer with thermophoretic effect. *Aerosol Science and Technology 23* (1995), 321–330.

[21] Gardiner, C. *Handbook of Stochastics Methods for Physics, Chemistry and the Natural Sciences*. Springer, Berlin, 1985.

[22] Gouy, G. *J. Phys. Chem. 9* (1910), 475.

[23] Guingo, M. *Modélisation stochastique du dépôt et du réentraînement de particules dans un écoulement turbulent*. PhD thesis, Université Henry Poincaré - Nancy 1, June 2008.

[24] Guingo, M., and Minier, J.-P. A new model for the simulation of particle resuspension by turbulent flows based on a stochastic description of wall roughness and adhesion forces. *Journal of Aerosol Science 39* (2008), 957–973.

[25] Guingo, M., and Minier, J.-P. A stochastic model of coherent structures for particle deposition in turbulent flows. *Physics of Fluids 20*, 5 (2008), 053303.

[26] Hamaker, H. The london van der waals attraction between spherical particles. *Physica 4* (1937), 1058–1072.

[27] Han, M. Thermophoresis in liquids : a molecular dynamics simulation study. *Journal of Colloid and Interface Science 284*, 1 (2005), 339–348.

[28] He, C., and Ahmadi, G. Particle deposition with thermophoresis in laminar and turbulent duct flow. *Aerosol Science and Technology 29*, 6 (1998), 525–546.

[29] Healy, D., and Young, J. An exprimental and theoretical study of particle deposition due to thermophoresis and turbulence in an anunular flow. *International Journal of Multiphase Flow 36* (2010), 870–881.

[30] Henry, C., Minier, J.-P., and Lefèvre, G. Numerical study on the adhesion and reentrainment of nondeformable particles on surface : the role of surface roughness and electrostatic forces. *Langmuir 28* (2012), 438–452.

[31] Henry, C., Minier, J.-P., and Lefèvre, G. Towards a description of particulate fouling : From single particle deposition to clogging. *Advances in Colloid and Interface Science 185–186*, 0 (2012), 34–76.

[32] Henry, C., Minier, J.-P., Lefèvre, G., and Hurisse, O. Numerical study on the deposition rate of hematite particles on polypropylene walls : Role of surface roughness. *Langmuir 27* (2011), 4603–4612.

[33] Henry, C., Minier, J.-P., and Lefèvre, G. Towards a description of particulate fouling : From single particle deposition to clogging. *Advances in Colloid and Interface Science 185–186*, 0 (2012), 34 – 76.

[34] Hunter, R. *Foundations of Colloid Science*, second edition ed. 2001.

[35] Jacob, N. I. *Intermolecular and Surface Forces*, third edition ed. Elsevier, 2011.

[36] Kaftori, D., Hestroni, G., and Banerjee, S. Particle behaviour in turbulent boundary layer. ii. velocity and distribution profiles. *Physics of Fluids 7*, 5 (1995), 1107–1121.

[37] Kay, J. *An Introduction to Fluid Mechanics en Heat Transfer*, cambridge university press ed. Cambridge, 1963.

[38] Leeming, A. *Particle Deposition from Turbulent Flows.* PhD thesis, Cambridge University Engineering Department, 1995.

[39] Liu, B., and Agarwal, J. Experimental observation of aerosol deposition in turbulent flow. *Journal of Aerosol Science 5* (1974), 145–155.

[40] Lugscheider, E., Bobzin, K., and Erdle, A. Solder deposition for transient liquid phase (tlp)-bonding by msip-pvd-process. *Surface and Coatings Technology 174-175* (2003), 704–707.

[41] Malmberg, C., and Maryott, A. Dielectric constant of water from 0° to 100°c. *Journal of Research of the National Bureau of Standards 56*, 1 (Jan. 1956), 2–8.

[42] Marchioli, C., and Soldati, A. Mechanisms for particle transfer and segregation in a turbulent boundary layer. *Journal of Fluid Mechanics 468* (2002), 283–315.

[43] Martineau, C., Minier, J.-P., Guingo, M., and Tanière, A. Lagrangian stochastic modelling of colloidal particle deposition driven by turbulent flows. In *Proceedings of 8^{th} ICMF* (Jeju, Corea, May 2013), International Conference on Multiphase Flow.

[44] Martineau, C., Minier, J.-P., and Tanière, A. Stochastic modeling of particle deposition in a confined turbulent flow. Submitted to Particulate Science and Technology.

[45] Matida, E., Nishino, K., and Torii, K. Statistical simulation of particle deposition on the wall from turbulent dispersed pipe flow. *International Journal of Heat and Fluid Flow 21* (2000), 389–402.

[46] McInnes, J., and Bracco, F. Stochastic particle dispersion modeling and the tracer-particle limit. *Physics of Fluids A 4*, 12 (1992), 2809–2824.

[47] McNab, G. Thermophoresis in sols. Master's thesis, The University of British Columbia, Aug. 1972.

[48] Mehel, A., Sagot, B., Tanière, A., and Oesterlé, B. On the mutual effect of the turbulent dispersion model and thermophoresis on nanoparticle deposition. *International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation 13*, 6 (July 2012), 417–425.

[49] Mehel, A., Tanière, A., Oesterlé, B., and Fontaine, J.-R. The influence of an anisotropic Langevin dispersion model on the prediction of micro- and nanoparticle deposition in wall-bounded turbulent flows. *Journal of Aerosol Science 41* (2010), 729–744.

[50] Messerer, A., Niessner, R., and Pölschl, U. Miniature pipe bundle heat exchanger for thermophoretic deposition of ultrafine soot aerosol particles at high flow velocities. *Aerosol Science and Technology 38* (2004), 456–466.

[51] Minier, J.-P., and Chibbaro, S. Langevin PDF simulation of particle deposition in a turbulent pipe flow. *Journal of Aerosol Science 39*, 7 (2008), 555–571.

[52] Minier, J.-P., and Peirano, E. The PDF approach to turbulent polydispersed two-phase flows. *Physics Reports 352*, 1-3 (Oct. 2001), 1–214.

[53] Minier, J.-P., and Pozorski, J. Derivation of a PDF model for turbulent flows based on principles from statistical physics. *Physics of Fluids 9*, 6 (June 1997), 1748–1753.

[54] Minier, J.-P., and Pozorski, J. Wall-boundary conditions in probability function methods and application to a turbulent channel flow. *Physics of Fluids 11*, 9 (Sept. 1999).

[55] Mohaupt, M., Minier, J.-P., and Tanière, A. A new approach for the detection of particle interactions for large-inertia and colloidal particles in a turbulent flow. *International Journal of Multiphase Flow 37*, 7 (2011), 746–755.

[56] Moltchanov, D. Random numbers with arbitrary distribution. Network Simulation Techniques.

[57] Montassier, N., Boulaud, D., and Renoux, A. Experimental study of thermophoretic particle deposition in laminar tube flow. *Journal of Aerosol Science 22* (1991), 677–787.

[58] Öttinger, H. *Stochastic Processes in Polymeric Fluids, Tools and Examples for Developing Simulation Algorithms*. Springer, Berlin, 1996.

[59] Papavergos, P., and Hedley, A. Particle deposition behaviour from turbulent flows. *Chemical Engineering Research and Design 62* (1984), 275–295.

[60] Piazza, R. Thermophoresis : moving particles with thermal gradients. *Soft Matter 4* (2008), 1740–1744.

[61] Pope, S. {PDF} methods for turbulent reactive flows. *Progress in Energy and Combustion Science 11*, 2 (1985), 119–192.

[62] Pope, S. *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, 2000.

[63] Prusek, T., Moleiro, E., Oukacine, F., Adobes, A., Jaeger, M., and Grandotto, M. Deposit models for tube support plate flow blockage in steam generators. *Nuclear Engineering and Design 262* (2013), 418–428.

[64] Risacher, F., and Fritz, B. Estimation des variations en fonction de la température des produits de solubilité des principaux sels des milieux évaporitiques. *Sci. Géol. Bull. 37*, 3 (1984), 229–237.

[65] Romay, H., Takagi, S., Pui, D., and Liu, B. Thermophoretic deposition of aerosol particles in turbulent pipe flow. *Journal of Aerosol Science 29* (1998), 943–959.

[66] Shakhov, E. Generalisation of the krook kinetic relaxation equation. *Fluid Dynamics 3*, 5, 95–96.

[67] Slater, S., Leeming, A., and Young, J. Particle deposition from two-dimensional turbulent gas flows. *International Journal of Multiphase Flow 29* (2003), 721–750.

[68] Stern, O. *Zeit. Elektrochem. 30* (1924), 508.

[69] Talbot, L., Cheng, R., Schefer, R., and Willis, D. Thermophoresis of particles in a heated boundary layer. *Journal of Fluid Mechanics 80* (1980), 737–758.

[70] Tanière, A. Modélisation stochastique et simulation des écoulements diphasiques dispersés et turbulents. *Habilitation à Diriger les Recherches* (2010).

[71] Ungar, A. Etude de l'impact du conditionnement chimique sur la forme de dépôts côté secondaire des tubes de gv : bilan de l'essai réalisé en 2009 sur la boucle perfide avec le système d'injection de particules de magnétite. Tech. rep., EDF R&D, 2011.

[72] Verwey, E., and Overbeek, J. *Theory of stability of lyophobic colloids*, elsevier ed. Amsterdam, 1948.

[73] Waldmann, L. Uber die kraft eines inhomogen gases auf kleine suspendierte kugeln. *Naturforschung A14* (1959), 589–599.

[74] Wang, X. Improving the rejection sampling method in quasi-monte carlo methods. *Journal of Computational and Applied Mathematics 114*, 2 (2000), 231–246.

[75] Williamson, R., Newson, I., and Bott, T. R. The deposition of haematite particles from flowing water. *The Canadian Journal of Chemical Engineering 66* (1988), 51–54.

[76] Wood, N. The mass transfer of particles and acid vapour to cooled surfaces. *Journal Institute of Energy 76* (1981), 76–93.

[77] Würger, A. Is soret equilibrium a non-equilibrium effect ? *Compte Rendus Mécanique 341*, 4-5 (2013).

[78] Yamamoto, K., and Ishihara, Y. Thermophoresis of a spherical particle in a rarefied gas of a transition regime. *Physics of Fluids 31* (1988), 3618–3624.

[79] Ye, Y., Pui, D., Liu, B., Opiolka, S., Blumhorst, S., and Fissan, H. Thermophorectic effect of particle deposition on a free standing semiconductor wafer in a clean room. *Journal of Aerosol Science 22* (1991), 63–72.

[80] Zheng, F. Thermophoresis of spherical and non-spherical particles : a review of theories and experiments. *Advances in Colloid and Interface Science 97* (2002), 255–278.