



HAL
open science

Simulation des interactions hydrodynamiques entre inclusions dans un métal liquide : établissement de noyaux d'agrégation dans les conditions représentatives du procédé de flottation

Matthieu Gisselbrecht

► **To cite this version:**

Matthieu Gisselbrecht. Simulation des interactions hydrodynamiques entre inclusions dans un métal liquide : établissement de noyaux d'agrégation dans les conditions représentatives du procédé de flottation. Génie des procédés. Université de Lorraine, 2019. Français. NNT : 2019LORR0073 . tel-02331097

HAL Id: tel-02331097

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-02331097>

Submitted on 24 Oct 2019

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

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



AVERTISSEMENT

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

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

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

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

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

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

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

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

THÈSE

Pour l'obtention du grade de :

Docteur de l'Université de Lorraine

Spécialité : Sciences des Matériaux

Présentée par :

Matthieu GISSELBRECHT

Simulation des interactions hydrodynamiques entre inclusions dans un métal liquide : établissement de noyaux d'agrégation dans les conditions représentatives du procédé de flottation

11 juillet 2019

Membres du jury :

<i>Président :</i>	M. Nicolas Rimbart	Professeur ENSEM, Université de Lorraine
<i>Rapporteurs :</i>	M. Pascal Gardin	Docteur ingénieur-chercheur ArcelorMittal, Maizières-lès-Metz (France)
	Mme Christine Frances	Professeure LGC, Université de Toulouse
<i>Examineurs :</i>	Mme Micheline Abbas	Maître de conférences LGC, Université de Toulouse
	M. Denis Mangin	Professeur LAGEP, Université Lyon 1
<i>Invité :</i>	M. Jochen Fröhlich	Professeur ISM, TU Dresden (Allemagne)
<i>Encadrants :</i>	M. Jean-Pierre Bellot	Professeur IJL, Université de Lorraine
	M. Jean-Sébastien Kroll-Rabotin	Maître de conférences IJL, Université de Lorraine

Remerciements

Je souhaite remercier mes tuteurs Jean-Pierre Bellot et Jean-Sébastien Kroll-Rabotin pour leur confiance et leur accompagnement tout au long de cette thèse. Je vous suis par ailleurs très reconnaissant de m'avoir donné l'opportunité de faire de l'enseignement en parallèle de mes travaux de recherche.

Pour continuer, j'adresse mes remerciements à Pascal Gardin et Christine Frances pour avoir accepté d'être membre du jury en qualité de rapporteur. Leurs commentaires et remarques me permettront d'améliorer encore ce mémoire.

Mes remerciements vont bien-sûr à l'équipe Procédés d'Elaboration et mes collègues de travail en général, pour leur patience et leur bonne humeur. Merci à Manoj, Rayan, Léa, Hélène, Savya, Edgar, Rami et tant d'autres. J'espère garder contact avec vous.

Je remercie ma famille, en particulier mes parents, mes grands-parents et ma sœur sans qui l'aboutissement de ce travail n'aurait certainement pas eu lieu. Ils ont su apporter un soutien logistique, et surtout moral lorsque ce dernier n'était pas au beau fixe. Merci de m'avoir encouragé dans les moments délicats et de m'avoir permis de devenir ce que je suis aujourd'hui.

J'ai également une pensée particulière pour mon grand ami Charles, ainsi qu'à Johannes et Solène, avec qui j'ai pu partager des moments de complicité et de franche rigolade, véritables bouffées d'oxygène indispensables pour mener à bien une thèse.

Je remercie enfin les étudiants de l'orchestre universitaire de Lorraine, avec qui j'ai parcouru toute la région et vécu d'agréables moments musicaux en dehors du monde de la recherche.

Pour terminer, je remercie les personnes qui ne se retrouvent pas dans ces lignes et qui pensent le mériter.

Table des matières

Introduction générale	4
1 La propreté inclusionnaire dans les métaux liquides	8
1.1 Le traitement du métal par le procédé de flottation	8
1.1.1 Généralités sur le procédé de flottation	8
1.1.2 Mécanismes physiques en jeu	9
1.2 Modélisation du comportement des particules inclusionnaires à l'échelle macroscopique	11
1.2.1 Méthode des bilans de populations	11
1.2.2 Noyaux d'agrégation	15
1.2.3 Notion d'efficacité de collision	20
1.2.4 Couplage entre phases	25
1.3 Un travail collaboratif : le projet ANR-DFG Flotinc	26
1.4 Objectifs	29
2 Outils numériques utilisés pour la simulation d'inclusions en milieu liquide	30
2.1 Suivi lagrangien des particules	31
2.1.1 Détection de collision	32
2.2 Solveur fluide : méthode de Boltzmann sur réseau	35
2.2.1 Équation de Boltzmann	35
2.2.2 Discrétisation sur un réseau : méthode LBM	36
2.2.3 Application à la résolution des équations de Navier-Stokes	39
2.3 Couplage fluide-solide : méthode de frontière immergée	44
2.3.1 Représentation des solides	44
2.3.2 Échanges de quantité de mouvement entre phases	45
3 Dynamique d'une particule de forme globulaire dans un écoulement	50
3.1 Validation dynamique des solveurs et comparaisons à des solutions analytiques	50
3.1.1 Réponse à un couple constant extérieur imposé : étude théorique	50
3.1.2 Résultats numériques et comparaison	53
3.2 Validation cinématique : particule libre en écoulement cisailé plan	58
3.2.1 Étude théorique de la perturbation induite par une particule solide dans un cisaillement	58
3.2.2 Mise en place des simulations	67
3.2.3 Analyse des résultats de simulations numériques	71
4 Surfaces de collision binaire dans un écoulement cisailé plan	79
4.1 Choix de l'écoulement cisailé plan	79
4.1.1 Modélisation de la turbulence	79
4.1.2 Noyaux usuels : Saffman & Turner et Smoluchowski	80

4.2	Détermination de surfaces de collision	82
4.2.1	Méthode de tirage déterministe	84
4.2.2	Critères d'arrêt	84
4.3	Paramètres influents sur la collision binaire	88
4.3.1	Liste des paramètres	88
4.3.2	Choix d'un jeu de paramètres indépendants et adimensionnement	89
4.4	Validations préliminaires : calculs de déviation	90
4.4.1	Conditions initiales et limites	90
4.4.2	Déviation pour deux sphères isolées	93
4.5	Analyse des interactions hydrodynamiques	96
4.5.1	Influence des effets inertiels des particules	96
4.5.2	Interactions entre sphères de taille identique	96
4.5.3	Influence du rapport de taille	100
4.5.4	Influence de la sphéricité	103
4.5.5	Paramétrage des surfaces pour les sphères	106
5	Application au procédé de flottation du métal liquide	109
5.1	Critère de collision à implémenter en calcul DNS d'un panache de bulles	109
5.2	Estimation du noyau de collision à partir de calculs d'efficacités	111
5.2.1	Expression de l'efficacité collisionnelle à partir de la surface de collision	111
5.2.2	Principe du calcul d'efficacité et des bornes d'incertitude	113
5.2.3	Valeurs d'efficacité et corrélation	114
5.3	Exploitation pour des calculs de fréquence de collision dans des bilans de population	116
5.4	Calcul de la fréquence instantanée de collision pour un train de bulles résolu	118
5.4.1	Conditions de simulation et domaine d'étude	118
5.4.2	Estimation des distributions de volume et des particules dans le spectre de cisaillement	122
5.4.3	Calcul de la fréquence de collision entre particules	123
5.5	Deuxième application : calcul de la fréquence et de la cinétique d'agrégation à partir d'une simulation RANS	126
5.5.1	Description de la poche et résultats d'une simulation « Reynolds Averaged Navier-Stokes » (RANS)	126
5.5.2	Estimation de la distribution du volume dans le spectre de cisaillement	126
5.5.3	Bilan de population et résultats	129
6	Conclusions et perspectives	132
	ANNEXES	136
A	Noyau de collision de Saffman & Turner	136
B	Nature des interactions entre deux particules et comparaisons avec les forces hydrodynamiques	139
B.1	Interactions de nature physico-chimique	139
B.1.1	Forces de Van der Waals	139
B.1.2	Forces de répulsion électrique	140
B.2	Interactions hydrodynamiques pour des particules à très faible distance : forces de lubrification	141
B.3	Interactions générées par la présence de gaz	142
B.3.1	Forces à distance de Bjerknes	142

B.3.2 Pont gazeux entre particules non mouillées	145
B.4 Comparaison des différentes interactions dans le cas de particules d'alumines non mouillées dans un acier liquide	146
C De l'utilité des quaternions pour la résolution du mouvement des solides	151
C.1 Quaternions : définition et propriétés	151
C.2 Application aux rotations	152
D Compléments de calculs sur la méthode de Boltzmann sur réseau	155
D.1 Matrice de passage - rappel	155
D.2 Expression	155
Nomenclature	159
Bibliographie	170

Introduction générale

Les métaux sont utilisés dans de nombreux secteurs industriels tels que le transport terrestre, le bâtiment, l'énergie ou encore l'aéronautique. Entre 2010 et 2017, pour le seul cas de l'acier, la production annuelle mondiale a augmenté d'environ 20% pour atteindre près de 1700 millions de tonnes d'après l'association mondiale de l'acier ([World Steel Association, 2018](#)). Les métaux à haute performance mécanique doivent répondre à des critères exigeants de propreté inclusionnaire. Ainsi, l'optimisation de tenue en fatigue et d'usinabilité des pièces passent nécessairement par une bonne maîtrise de l'état de la population d'inclusions définie en termes de densité numérale, de taille et de composition. Des agrégats inclusionnaires de trop grande taille diminuent drastiquement les performances mécaniques du métal d'après [Zhang et Thomas \(2003\)](#). Ils favorisent par exemple l'apparition de microfissures pouvant se propager lors de cycles en fatigue comme le montre l'exemple de la figure 1, où une microfissure a été initiée à partir d'une particule de sulfure de manganèse (MnS) d'une dizaine de micromètres. Sur des très fines tôles d'acier, ces agrégats peuvent former des défauts exfoliés. La contrainte sur la taille limite tolérée de ces défauts augmente à mesure que l'épaisseur des produits diminue. Face à une demande croissante et de plus en plus exigeante concernant la qualité des matériaux, le contrôle de la propreté inclusionnaire pour la production de métaux à hautes performances est donc devenu un critère de premier plan.

Les inclusions se forment et se transforment tout au long de la filière d'élaboration, et elles sont soit exogènes ou endogènes. Elles sont de nature chimique très variée, mais dans le cas des aciers, la plupart d'entre elles sont des inclusions non-métalliques. On distingue principalement :

- Des alumines (Al_2O_3), produits de la désoxydation (calmage) de l'acier par l'ajout d'aluminium. [Braun et al. \(1979\)](#) classifient la morphologie de ces inclusions en 5 catégories : dendritique, facétée, sphérique, de forme plate ou en cluster. Elles peuvent former des agrégats de forme globulaire ou dendritique et sont d'autant plus volumineuses si le milieu est riche en oxygène. Elles sont représentées figure 2.
- Des silices (SiO_2), également produits de la désoxydation de l'acier.
- Les alumines et silices peuvent être traitées à l'aide de calcium et former respectivement des aluminates de calcium ($\text{CaO}_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_y$) et silicates de calcium ($\text{CaO}_x(\text{SiO}_2)_y$). De telles inclusions sont partiellement liquides lors du traitement de l'acier en fusion. Elles ont donc une propension à garder une forme globulaire.
- Des sulfures de calcium (CaS) et de manganèse (MnS), produits de la désulfuration du métal. La morphologie de ces dernières a été étudiée récemment en détail par [Zhang et al. \(2017\)](#).
- Des suspensions provenant de fragments du laitier et qui se sont arrachées de ce dernier du fait de la forte agitation du bain liquide. Elles sont essentiellement composées à base de chaux (CaO) et magnésie (MgO.) Tout comme les aluminates et silicates, elles peuvent être à l'état liquide et ont des tailles pouvant atteindre $300 \mu\text{m}$ ([Zhang et Thomas, 2003](#)).

Pour 1 kg d'acier, [Thomas et Bai \(2001\)](#) ont établi que l'on trouve typiquement 10^6 à 10^9 particules inclusionnaires (densité numérale correspondant à $8 \cdot 10^9$ à $8 \cdot 10^{12}$ particules par m^3). D'après [Tanizawa](#)

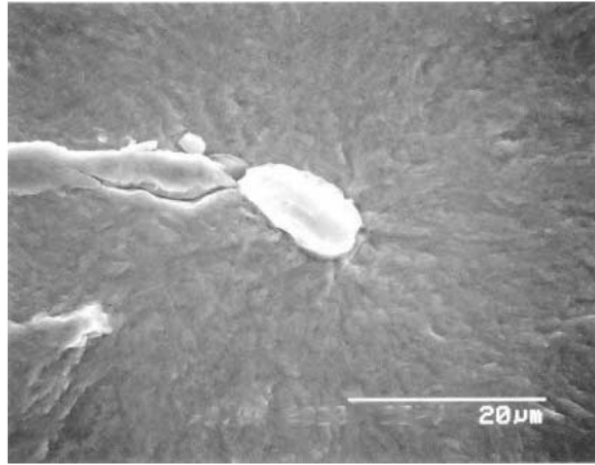


Fig. 1 – Exemple d'inclusion de sulfure de manganèse MnS (en clair) à l'origine de la microfissure apparue à la suite de tests de fatigue sur une billette d'acier ([Braun *et al.*, 1979](#)).

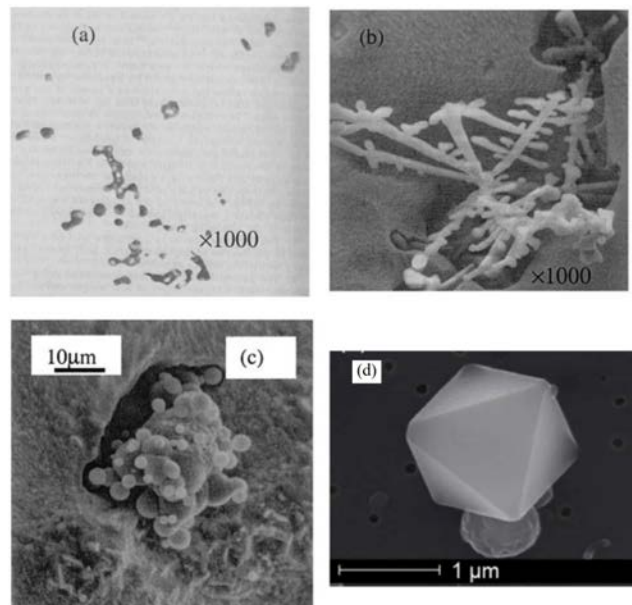


Fig. 2 – Morphologies typiques des inclusions d'alumines présentes dans l'acier. (a), (b) et (c) : [Zhang et Thomas \(2003\)](#), (d) : [Van Ende \(2010\)](#).

et al. (1991), la grande majorité des inclusions ont une taille inférieure à $20\ \mu\text{m}$, elles sont statistiquement au nombre de 400 pour des tailles comprises entre 80 et $130\ \mu\text{m}$, et seulement 1 pour une taille supérieure à $200\ \mu\text{m}$. Malgré cette densité numérique très importante, la concentration massique reste très faible de l'ordre de quelques dizaines de parties par million (ppm) pour les aciers, ce qui prouve que la phase solide est particulièrement dispersée.

L'un des principaux procédés retenus pour affiner le métal et donc réduire la teneur inclusionnaire est celui de flottation. Dans l'élaboration de l'acier, la flottation intervient en métallurgie secondaire, juste après la désoxydation du métal (le plus souvent par le silicium ou l'aluminium.) Elle consiste à injecter des bulles d'argon à la base de la poche d'acier qui capturent les inclusions lors de leur ascension vers la surface du bain. Le ou les panache(s) de bulles ont aussi pour vertu de brasser la poche et donc de favoriser à la fois l'homogénéité chimique du bain et l'agrégation turbulente des inclusions. Le panache de bulles ainsi présent va favoriser le mécanisme d'agrégation des inclusions grâce à l'agitation du mélange. De plus, les inclusions à proximité du train de bulles vont être entraînées dans le sillage des bulles ou bien être capturées par interception directe à la surface des bulles. Ces mécanismes de capture sont d'autant plus efficaces que les agrégats sont volumineux. Cette sensibilité à la taille des particules nécessite donc une bonne connaissance de la formation d'agrégats induite par la turbulence. Les différents mécanismes induits par la présence des bulles au niveau du panache sont représentés figure 3.

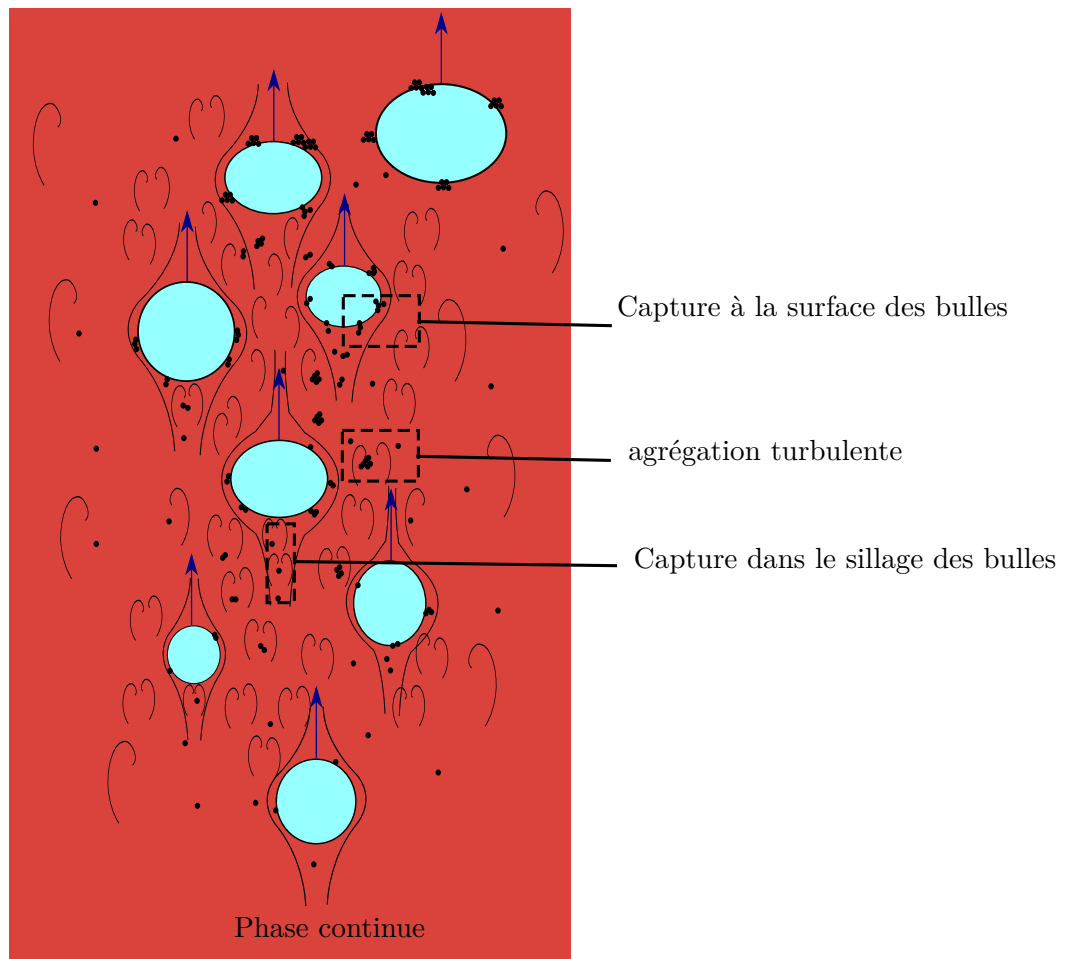


Fig. 3 – Principaux mécanismes responsables de la variation de la population des inclusions dans un panache de bulles.

Afin de quantifier le mécanisme d'agrégation turbulente de particules, de nombreux travaux expérimentaux ont été menés. La plupart ont étudié le comportement de suspensions en milieu aqueux agité. Les mesures dans de tels milieux sont facilitées par le fait qu'ils sont transparents et sont à l'état liquide dans les conditions normales de température et de pression, contrairement à la plupart des métaux. Ainsi, Higashitani *et al.* (1983) ont étudié l'agrégation de microparticules en latex en solution aqueuse agitée par une hélice en vue d'étudier l'évolution en taille de la population. Taniguchi *et al.* (1996) ont repris ces travaux et mené des études expérimentales sur le comportement de particules d'alumines de taille de $1.8 \mu\text{m}$ dans de l'eau.

Toutefois, l'étude du comportement des inclusions en milieu aqueux turbulent ne permet pas de tirer un parallèle complet avec les inclusions en milieu métallique. En effet, les particules étant hydrophobes en milieu métallique, leur affinité s'en trouve modifiée ce qui peut impacter leur comportement. Par ailleurs, des modèles à l'échelle du procédé en poche ont été développés. Par l'intermédiaire de noyaux statistiques, ils permettent d'étudier l'évolution de la population des inclusions et de modéliser les mécanismes à petite échelle. Étant données les incertitudes qui subsistent quant au comportement inclusionnaire mésoscopique dans un métal liquide, ils méritent par conséquent d'être affinés à l'aide de modèles à plus petite échelle.

Le projet ANR-DFG Flotinc dans lequel s'inscrit ce travail s'intéresse au comportement inclusionnaire dans des conditions représentatives du procédé de flottation d'un métal en fusion. Il s'agit d'un projet aussi bien numérique qu'expérimental qui propose de mieux quantifier le mécanisme d'agrégation turbulente à proximité d'un panache de bulles par une approche multi-échelles. Ce projet offre l'opportunité d'affiner les noyaux statistiques d'agrégation turbulente utilisés dans les modèles macroscopiques des réacteurs métallurgiques. De ce fait, il permet de mieux comprendre le mécanisme d'agrégation en temps réel ainsi que de mieux contrôler la taille des inclusions résiduelles après traitement du métal.

Le travail présenté ici consiste à étudier numériquement les interactions inclusionnaires à petite échelle dans un écoulement dont le profil est la représentation locale de la turbulence générée par le train de bulles. À partir d'une série de calculs, il permet d'extraire un noyau d'agrégation en fonction des paramètres identifiés susceptibles d'influencer le comportement local des particules.

La rédaction de ce manuscrit s'organise logiquement comme suit : le premier chapitre décrit de façon plus détaillée le procédé de flottation et les modèles statistiques d'évolution de la population inclusionnaire par agrégation turbulente. Ces éléments permettront de mieux saisir les enjeux de ce travail, mais aussi de justifier les conditions de simulation sélectionnées et de décrire le projet collaboratif Flotinc de façon plus exhaustive. Dans le chapitre 2, nous nous focaliserons sur les méthodes numériques utilisées dans ce travail. Nous étudierons au chapitre 3 la dynamique d'inclusions lisses à sphéricité élevée (sphères et ellipsoïdes). Nous exposerons naturellement dans le chapitre 4 les résultats des interactions pour une paire de particules sphériques dans un écoulement traduisant localement la présence des bulles. Ce chapitre présentera également de nouvelles corrélations pour les noyaux d'agrégation turbulents. Le chapitre 5 exploitera les résultats obtenus pour deux situations, un panache de bulles dans une colonne et un traitement d'acier en poche industrielle. La dernière partie de ce manuscrit est consacrée aux conclusions et perspectives de ce projet.

Chapitre 1

La propreté inclusionnaire dans les métaux liquides

Ce chapitre met en contexte l'étude réalisée en traitant de façon exhaustive le procédé de flottation appliqué à l'affinage des métaux liquides. Il met en lumière les modèles macroscopiques utilisés, ainsi que les limites que cela implique et que ce travail propose de lever en partie. Du fait de la complexité du procédé de flottation, une approche multi-échelles semble la plus appropriée. Cela a incité à créer le projet collaboratif « Flotinc » détaillé en dernière partie.

1.1 Le traitement du métal par le procédé de flottation

1.1.1 Généralités sur le procédé de flottation

La flottation est un procédé de séparation de deux phases, l'une continue (liquide), l'autre dispersée (le plus souvent solide). Ce procédé est d'autant plus intéressant que les particules sont parfois difficiles à séparer de la phase continue du fait de leur densité similaire (séparation gravitaire peu efficace). Il est largement utilisé dans l'industrie, ce dès le 19^{ème} siècle dans le domaine de la minéralurgie. Dans la plupart des cas, des bulles sont injectées au sein de la phase continue liquide dans laquelle se trouve la phase dispersée à extraire. Lors de leur ascension au sein de la phase continue, ces bulles captent les particules dispersées (en suspension), qui sont ensuite entraînées à la surface où elles forment une couche superficielle.

Il existe d'autres configurations de ce procédé qui n'ont pas forcément recours à des bulles. Ainsi, la phase gazeuse est remplacée par des liquides immiscibles (« oil flotation ») ou des solides (« carrier flotation »). Néanmoins, ce sont les bulles qui sont employées ici en tant que vecteur d'affinage.

Le procédé de flottation a été utilisé plus récemment en métallurgie. Dans la filière de l'aluminium, le traitement s'effectue dans des réacteurs fermés ou ouverts. Il permet d'éliminer les inclusions présentes, mais aussi l'hydrogène dissous dans l'aluminium ainsi que certains éléments alcalins comme le sodium. Le gaz employé est en général de l'argon mélangé à du chlore injecté à l'extrémité des pales comme l'illustre la figure 1.1, ainsi qu'un résultat de CFD proposé par [Mirgaux \(2007\)](#).

Dans le cas de l'acier et pour des raisons de température élevée, on préfère l'utilisation d'un ou plusieurs bouchons poreux placés à la base de la poche et qui libèrent de l'argon comme l'illustre le schéma de la

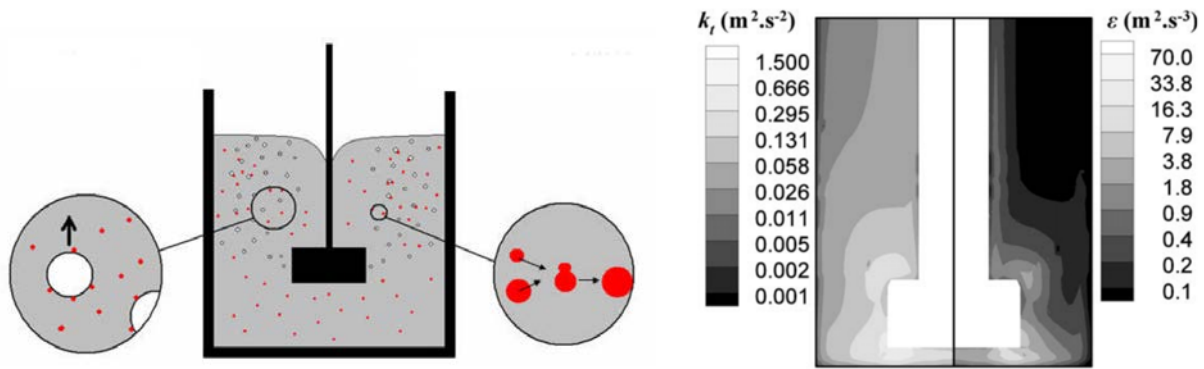


Fig. 1.1 – À gauche : poche de dégazage/flottation de l'aluminium où les processus physiques de flottation et agrégation sont illustrés. À droite : énergie cinétique turbulente et taux de dissipation turbulente, figure issue de [Mirgaux 2007](#) (vitesse du rotor : 250 tr. min^{-1} , débit gazeux : $8,3 \text{ Nl. min}^{-1}$.)

figure 1.2 ainsi qu'un résultat de calcul de CFD proposé par [Daoud et al. \(2011\)](#). Les bulles ainsi générées captent les plus grosses inclusions qui sont entraînées à la surface du laitier. Les poches d'acier liquide ont des dimensions typiques de 2 à 4 m de hauteur et 1,5 à 2,5 m de diamètre et peuvent contenir de 100 à 200 t de métal. Les bulles générées permettent à elles-seules d'agiter efficacement le bain d'acier. Elles homogénéisent ainsi la composition chimique du milieu grâce à son brassage. Par ailleurs, les bulles non seulement permettent la capture des inclusions, mais elles favorisent l'agitation turbulente et le transport des particules, et donc la probabilité de collision. Soulignons que l'agrégation influence grandement la distribution en taille des particules auxquelles les autres mécanismes décrits ci-après sont assez sensibles, ce qui rend le rôle de l'agrégation d'autant plus important.

1.1.2 Mécanismes physiques en jeu

Le métal agité dans la cuve à l'aide de bulles, avec ou sans l'aide de rotors, est un milieu triphasique complexe du fait des mécanismes en jeu et de la diversité des inclusions constituant la phase dispersée. Associés au processus de flottation, plusieurs autres mécanismes responsables de l'évolution des populations inclusionnaires coexistent et sont illustrés figure 1.3 :

- la collision entre inclusions, pouvant induire l'apparition d'agrégats, voire de clusters d'agrégats susceptibles de s'agglomérer. Ce travail de thèse participe à l'évaluation de la cinétique de ce mécanisme,
- la flottation, ie la collision entre bulles et inclusions,
- la capture à la surface supérieure de la phase continue,
- la capture aux parois.

Du fait de la faible fraction volumique d'inclusions dans les métaux liquides ($\phi \simeq 10^{-5}$), seules les collisions binaires sont considérées. La vitesse relative de deux inclusions est le moteur de leur collision, et peut avoir différentes origines. On peut citer la collision brownienne, ainsi que la collision induite par la turbulence ou encore la séparation gravitaire. La collision brownienne sort du cadre de cette étude, car elle concerne les particules de très petites tailles (inférieures au micromètre). La collision turbulente de particules de tailles microniques a été étudiée dans des cas extrêmes (nombre de Stokes infiniment petit ou grand.) Les types de collision précédents sont décrits de façon détaillée dans la thèse de [Claudotte \(2010\)](#), et sont résumées dans la section suivante.

Afin de tous les prendre en compte et de quantifier à l'échelle macroscopique tous les mécanismes présentés sur la figure 1.3, l'évolution de la population inclusionnaire est modélisée dans les simulations à

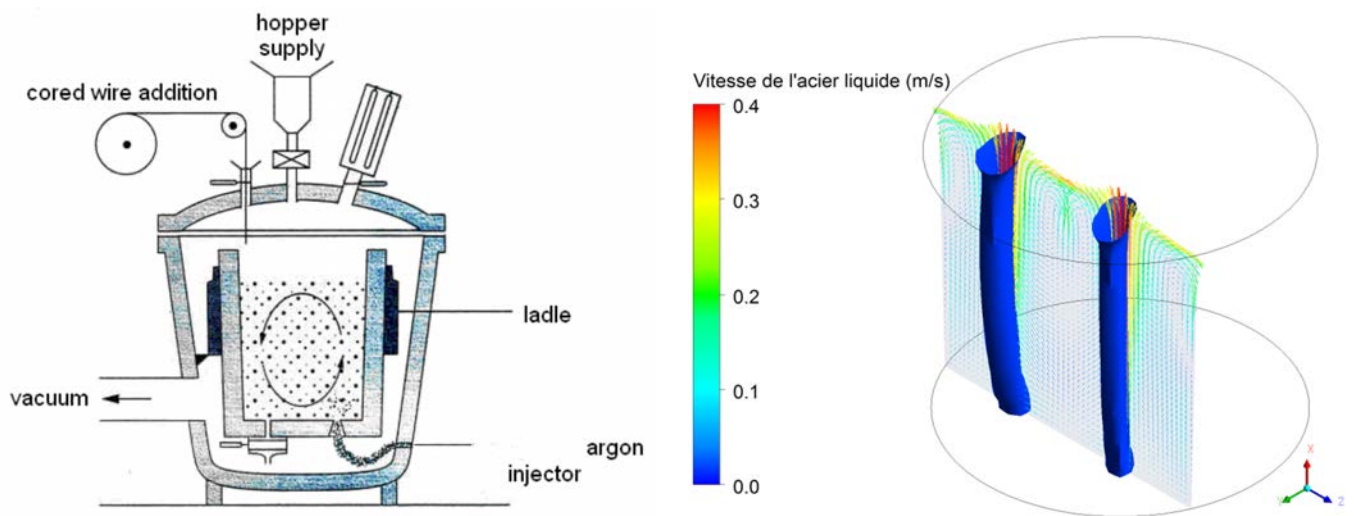


Fig. 1.2 – À gauche : poche industrielle de traitement d'un l'acier liquide. À droite : champ de vitesse dans le plan vertical contenant les trains de bulles d'argon et isosurface du taux de rétention d'argon de 1 %, figure issue de [Daoud *et al.* 2011](#) (2 bouchons poreux, débit gazeux par bouchon : 20 Nl. min^{-1} .)

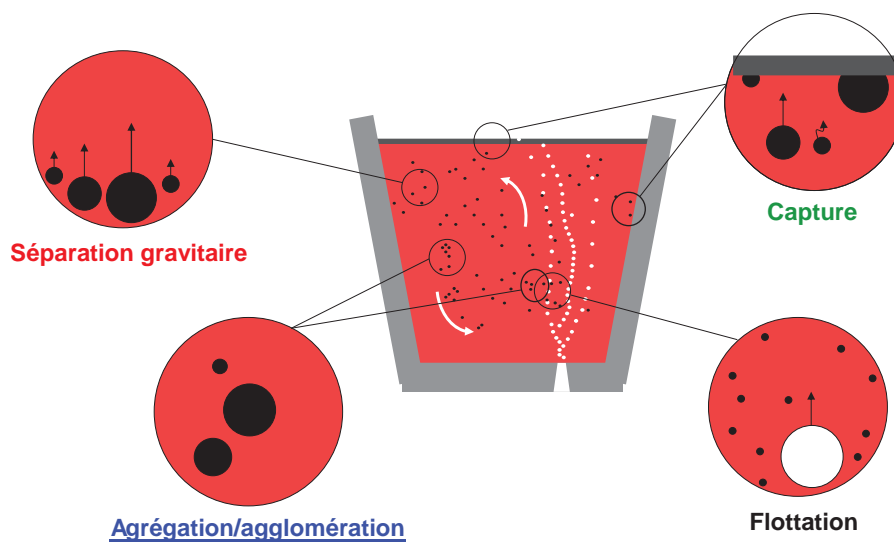


Fig. 1.3 – Mécanismes entraînant une évolution de la population des inclusions lors du traitement en poche d'un acier. Seul le mécanisme d'agrégation est étudié dans ce travail.

l'échelle du procédé grâce à l'équation des bilans de population, décrite pour la première fois par [Smoluchowski \(1918\)](#). Des coefficients traduisant ces phénomènes interviennent ; ils sont appelés « noyaux statistiques ». Cette modélisation est détaillée dans le paragraphe suivant, ainsi que différentes techniques de résolution.

1.2 Modélisation du comportement des particules inclusionnaires à l'échelle macroscopique

Lors du traitement en poche d'un métal, la phase inclusionnaire est constituée d'un très grand nombre de particules (jusqu'à 10^{12} #/m³ pour les aciers) de nature chimique souvent variée et de propriétés physiques comme leur taille et leur morphologie très différentes. Cette population inclusionnaire est transportée dans la poche par le mouvement du métal liquide et évolue avec le temps selon les processus d'agrégation et de capture qui viennent d'être décrits. Le bilan de population est une approche théorique élégante et efficace pour décrire par une loi de conservation l'évolution de la population d'inclusions dans la poche industrielle, et sera utilisée ultérieurement dans le cadre de ce travail. En conséquence, une attention particulière est portée sur cette méthode.

1.2.1 Méthode des bilans de populations

Un bilan de population a pour but d'estimer l'évolution spatio-temporelle des particules à l'aide d'une fonction densité. Ici, on considère la densité numérale notée n . Elle dépend des coordonnées externes \vec{x} , ainsi que d'un certain nombre p de coordonnées internes $\vec{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_p)$ caractérisant les propriétés propres des particules (par exemple la taille, la morphologie, la composition chimique...). L'ensemble de ces coordonnées constituent le vecteur d'état ; ce sont les variables de la densité en nombre n telles que :

$$n(\xi_1, \dots, \xi_p, \vec{x}, t) d\xi_1 \dots d\xi_p = n(\vec{\xi}, \vec{x}, t) d\vec{\xi} \quad [\#.m^{-3}] \quad (1.1)$$

Ainsi, n représente le nombre de particules par unité de volume de métal liquide à la position \vec{x} ayant la propriété comprise entre $\vec{\xi}$ et $\vec{\xi} + d\vec{\xi}$ à l'instant t . Ainsi, l'équation de conservation de la fonction densité n s'écrit :

$$\frac{\partial n(\vec{\xi}, \vec{x}, t)}{\partial t} + \text{div}(n(\vec{\xi}, \vec{x}, t) \vec{v}_p(\vec{\xi}, \vec{x}, t)) = s(\vec{\xi}, \vec{x}, t) \quad (1.2)$$

où s désigne une fonction comportant le transport propre aux propriétés internes ainsi que le terme source net (introduction de nouvelles particules dans le système, cf [Hulburt et Katz 1964](#)). Pour des petites particules, la vitesse moyenne de transport des particules notée \vec{v}_p est généralement assimilée à la vitesse moyenne du fluide \vec{v}_f à la position \vec{x} . Les phénomènes d'interactions mésoscopiques (à l'échelle des inclusions) sont tous compris dans la fonction s , alors que le transport macroscopique est pris en compte dans le terme de gauche. Par la suite, nous ne considérerons que le cas courant où les inclusions ne sont différenciées que par leur volume V . L'équation de conservation (1.2) devient :

$$\frac{\partial n(V, \vec{x}, t)}{\partial t} + \text{div}(n(V, \vec{x}, t) \vec{v}_f(V, \vec{x}, t)) = s(V, \vec{x}, t) \quad (1.3)$$

Bien entendu, l'expression du terme source de l'équation (1.3) n'est pas unique et dépend des mécanismes

que l'on souhaite inclure. Par exemple, dans le cas du traitement en poche de l'acier, [De Felice et al. \(2012\)](#) ont pris en compte, en plus de l'agrégation, la flottation ainsi que la séparation gravitaire. Ces mécanismes font intervenir la taille des bulles ainsi que leur vitesse, la vitesse de glissement bulle/liquide, l'énergie cinétique turbulente ainsi que le taux de dissipation turbulente.

Dans notre travail, seul le terme source d'agrégation est considéré et développé dans ce qui suit. Ainsi, la germination et la croissance des inclusions liées aux conditions thermodynamiques ne seront pas prises en compte. Le terme source peut être décomposé selon des vitesse d'apparition B et de disparition D telles que :

$$s(V, \vec{x}, t) = B(V, \vec{x}, t) - D(V, \vec{x}, t) \quad (1.4)$$

[Smoluchowski \(1918\)](#) est le premier à porter un intérêt pour le phénomène d'agrégation en étudiant un système discret de monomères. Par la suite, ces résultats ont été reformulés pour un système continu. Par exemple, [Marchisio et al. \(2003\)](#) ont exprimé les termes d'apparition et de disparition de l'équation (1.4) comme suit :

$$\left\{ \begin{array}{l} B(V, \vec{x}, t) = \frac{1}{2} \int_0^V \beta(V-u, u) n(V-u, \vec{x}, t) n(u, \vec{x}, t) du \\ D(V, \vec{x}, t) = n(V, \vec{x}, t) \int_0^\infty \beta(V, u) n(u, \vec{x}, t) du \end{array} \right. \quad (1.5)$$

Dans l'équation (1.5), $\beta(V, u)$ désigne le noyau d'agrégation entre les particules de volume V et u . Les premier et second membres du système calculent respectivement le nombre de collisions ayant abouti à la formation et disparition de particules de volume V . Le facteur $1/2$ de l'équation (1.5) permet de ne pas compter deux fois la même collision.

Il faut également souligner que Smoluchowski a étendu son bilan de population pour prendre en compte le phénomène de fragmentation pouvant survenir pour les particules les plus volumineuses soumises à des contraintes hydrodynamiques fortes. Toutefois, pour des particules très peu mouillantes, tel que c'est le cas dans les métaux liquides, de fortes forces de cohésion dues à la formation de ponts gazeux, détaillées dans le chapitre 4, sont présentes. Le phénomène de fragmentation n'est donc pas pris en compte par la suite.

Une des méthodes de résolution de l'équation de bilan de population consiste à discrétiser l'équation (1.3) par rapport à l'espace des coordonnées internes. Dans le cas du volume V des particules, la distribution n est divisée en N_c sections de volumes $[V_i, V_{i+1}]$. Le volume représentatif (ou pivot) de chaque section est noté $V_{r,i}$. Une illustration de cette discrétisation est proposée figure 1.4.

L'équation (1.3) ainsi discrétisée devient un système d'équations qui, en utilisant le terme d'agrégation (1.5), s'écrit :

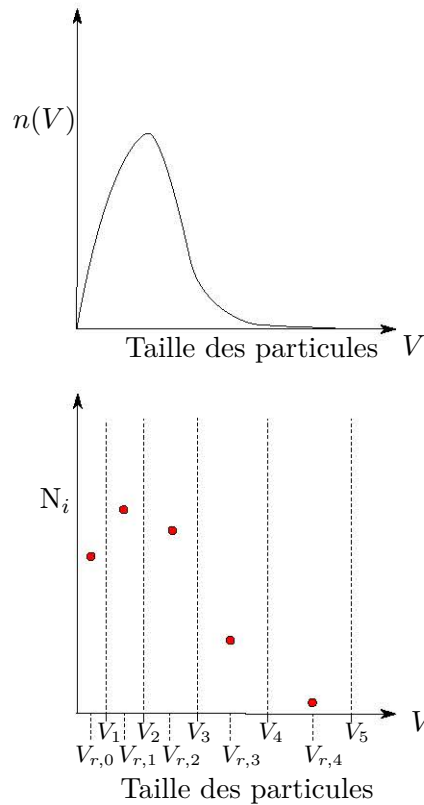


Fig. 1.4 – Distribution en taille des inclusions discrétisées en classes.

$$\forall i, \quad \frac{\partial N_i(\vec{\mathbf{x}}, t)}{\partial t} + \operatorname{div}(N_i(\vec{\mathbf{x}}, t) \vec{\mathbf{v}}_f) = \frac{1}{2} \int_{V_i}^{V_{i+1}} du \int_0^V \beta(V-u, u) n(V-u, \vec{\mathbf{x}}, t) n(u, \vec{\mathbf{x}}, t) du - \int_{V_i}^{V_{i+1}} n(u, \vec{\mathbf{x}}, t) du \int_0^\infty \beta(V, u) n(u, \vec{\mathbf{x}}, t) du, \quad (1.6)$$

où N_i est la densité en nombre moyenne des particules dans la classe i , soit le nombre de particules de volume inclus dans l'intervalle $[V_i, V_{i+1}]$ par unité de volume de fluide de la phase continue :

$$N_i = \int_{V_i}^{V_{i+1}} n(u, \vec{\mathbf{x}}, t) du \quad (1.7)$$

La résolution de cette équation a fait l'objet de nombreuses publications. Parmi elles, la méthode de pivot fixe, initialement développée par [Kumar et Ramkrishna \(1996\)](#), présente un intérêt particulier puisqu'elle permet de conserver deux propriétés intégrales que sont le volume et le nombre total d'inclusions. Pour déterminer l'expression discrétisée des termes d'apparition et de disparition, une méthode de répartition entre classes est utilisée. Comme cela est démontré dans la thèse de [Mirgaux \(2007\)](#), le terme d'apparition des particules de classe i noté B_i devient :

$$B_i = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} (V_{i+1} - V_{i-1}) \int_0^V \beta(V-u, u) n(V-u, \vec{x}, t) n(u, \vec{x}, t) du \right] \quad (1.8)$$

D'autre part, sachant que la population des inclusions est censée être concentrée sur les volumes représentatifs $V_{r,i}$, la densité en nombre peut s'écrire sous la forme suivante :

$$n(V, \vec{x}, t) = \sum_{i=1}^{N_c} N_i \delta(V - V_{r,i}) \quad \text{avec } \delta \text{ la fonction de Dirac} \quad (1.9)$$

Le terme de disparition D_i s'écrit plus simplement :

$$D_i = N_i \sum_{j=1}^{N_c} \beta(V_{r,i}, V_{r,j}) N_j \quad (1.10)$$

Finalement, pour le seul mécanisme d'agrégation, l'équation de conservation discrétisée par la méthode du pivot fixe s'écrit, pour $i \in [1, N_c]$:

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} + \text{div}(N_i \vec{V}_f) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,k \\ V_{r,i-1} \leq V_{r,j} + V_{r,k} \leq V_{r,i+1}}} \kappa \beta(V_{r,j}, V_{r,k}) N_j N_k - N_i \sum_{j=1}^{N_c} \beta(V_{r,i}, V_{r,j}) N_j \quad (1.11)$$

avec

$$\kappa = \begin{cases} \frac{V_{r,i+1} - V}{V_{r,i+1} - V_{r,i}} & \text{pour } V_{r,i} \leq V \leq V_{r,i+1} \\ \frac{V - V_{r,i-1}}{V_{r,i} - V_{r,i-1}} & \text{pour } V_{r,i-1} \leq V \leq V_{r,i} \end{cases} \quad (1.12)$$

La méthode de pivot fixe a été largement appliquée dans la littérature. Pour les métaux liquides, [Li et al. \(2015\)](#) se sont focalisés sur l'étude numérique de l'évolution de la population en taille de bulles au sein d'un acier. En ce qui concerne les inclusions dans les métaux liquides, elle a été utilisée pour étudier numériquement le comportement d'inclusions dans de l'aluminium liquide en réacteur agité par un rotor Alpur ([Mirgaux et al. 2009](#).) Cette méthode a également été retenue pour étudier l'évolution d'oxydes d'inclusions en acier liquide ([Daoud et al. 2011](#), [De Felice et al. 2012](#), [Lou et Zhu 2013](#), [Bellot et al. 2018](#).)

Une autre méthode de résolution indirecte de l'équation de conservation existe. Il s'agit de la méthode des moments, où l'idée sous-jacente est de résoudre la densité pondérée par le volume élevé à une certaine puissance qui détermine l'ordre du moment. En réalité, plusieurs variantes de la méthode des moments existent :

- la méthode standard des moments,
- la méthode de quadrature des moments,
- la méthode de quadrature directe des moments .

Pour plus de détails, le lecteur est invité à se reporter aux travaux de [Marchisio et Fox \(2005\)](#) ainsi qu'à la thèse rédigée par [Claudotte \(2010\)](#). Plus récemment, [Daoud et al. \(2011\)](#) ont eu recours à la méthode de quadrature des moments pour simuler le comportement inclusionnaire d'oxydes métalliques dans un acier liquide traité en poche.

1.2.2 Noyaux d'agrégation

L'équation (1.11) des bilans de population fait intervenir des coefficients β appelés « noyaux d'agrégation ». Ces noyaux permettent de modéliser les origines multiples du phénomène d'agrégation. D'après [Söder et al. \(2002\)](#), l'agrégation peut être due au mouvement brownien, au cisaillement en régime laminaire, à la flottabilité des particules ou à l'agitation turbulente. Les deux premières sont souvent négligées pour les métaux liquides, comme c'est le cas pour [Söder et al. \(2004\)](#) qui ont étudié numériquement les mécanismes d'agrégation dans une poche d'acier agitée par des bulles d'argon. Ainsi, l'agrégation brownienne ne sera pas explicitée ici. Le lecteur intéressé peut se référer à [Sheng et al. \(2002\)](#).

Flottabilité

L'agrégation entre deux particules i et j due à leur différence de flottabilité est également appelée agrégation de Stokes, notée β_{ij}^{Stokes} . En effet, l'origine de ce type de collision est liée à la vitesse terminale de sédimentation v_{St} atteinte lors de l'équilibre entre le poids, la poussée d'Archimède et la force de traînée. Pour une sphère de diamètre d_p , elle vérifie :

$$v_{St} = \frac{g(\rho_l - \rho_p)d_p^2}{18\mu} \quad \text{lorsque } Re_p < 1 \quad (\text{en régime dit de Stokes}), \quad (1.13)$$

avec g l'accélération de la pesanteur, ρ_l et ρ_p les masses volumiques respectives du fluide et de la particule, μ la viscosité dynamique du fluide. D'après (1.13), v_{St} dépend du carré de la taille des particules. Ainsi, une collision induite par une différence de vitesses terminales est possible entre deux particules de même nature chimique (donc de même masse volumique) si elles sont de tailles différentes. En supposant que les effets hydrodynamiques à proximité directe des particules sont négligeables, le noyau d'agrégation de Stokes est le flux de particules à travers la surface de collision formée par le disque de diamètre égal à la somme des diamètres des particules, représenté en annexe A (figure A.1). Ainsi,

$$\beta_{ij}^{Stokes} = \frac{\pi g(\rho_l - \rho_p)}{78\mu} |d_{pi} - d_{pj}| (d_{pi} + d_{pj})^3 \quad (1.14)$$

Turbulence, Saffman & Turner

En écoulement turbulent, les premiers auteurs à avoir établi un noyau statistique de collision β_{ij}^{turb} sont [Saffman et Turner \(1956\)](#) pour décrire la coalescence de gouttelettes présentes dans l'atmosphère. Ces gouttelettes de faible diamètre ont donc une inertie négligeable ainsi qu'une taille inférieure à l'échelle de Kolmogorov. En supposant la turbulence homogène et isotrope, Saffman & Turner montrent que le noyau d'agrégation vérifie :

$$\beta_{ij}^{turb,S\&T} = \sqrt{\frac{8\pi}{15}} \left(\frac{d_{pi} + d_{pj}}{2} \right)^3 \left(\frac{\varepsilon}{\nu} \right)^{1/2}, \quad (1.15)$$

avec ε la dissipation turbulente et ν la viscosité cinématique de la phase continue. Une démonstration complète est fournie en annexe A.

Turbulence, Abrahamson

D'autres auteurs se sont intéressés à des particules d'inertie infinie, toujours en écoulement turbulent. Le premier à avoir développé un modèle de noyau d'agrégation est [Abrahamson \(1975\)](#), qui a étudié l'agglomération d'aérosols dans un cyclone. Le mouvement de telles particules est alors considéré purement stochastique. En supposant que la concentration des particules i est uniforme dans l'espace, que la distribution des vitesses fluctuantes des particules \vec{v}'_p suit une loi normale, et enfin que le temps de réponse des particules est grand devant les échelles macroscopiques de la turbulence, alors la densité de probabilité de trouver une particule comprise dans l'intervalle $[\vec{v}'_p, \vec{v}'_p + d\vec{v}'_p]$ est donnée par :

$$dN_i = \frac{N_i}{(2\pi\langle\|\vec{v}'_p\|^2\rangle)^{3/2}} \exp\left(\frac{-(v'_{px}{}^2 + v'_{py}{}^2 + v'_{pz}{}^2)}{2\langle\|\vec{v}'_p\|^2\rangle}\right) dv_{px} dv_{py} dv_{pz} . \quad (1.16)$$

La collision entre Deux particules i et j est alors liée à la différence de leurs vitesses fluctuantes, et le nombre de collisions par unité de temps et de volume Z_{ij} s'exprime par :

$$Z_{ij} = \iint_{\vec{v}'_{pi}, \vec{v}'_{pj}} dN_i dN_j \left(\frac{d_{pi} + d_{pj}}{2}\right)^2 \|\vec{v}'_{pi} - \vec{v}'_{pj}\| . \quad (1.17)$$

En réinjectant l'expression (1.16) et après calcul de l'intégrale, l'équation (1.17) devient :

$$Z_{ij} = \sqrt{8\pi} N_i N_j \left(\frac{d_{pi} + d_{pj}}{2}\right)^2 \sqrt{\langle\|\vec{v}'_{pi}\|^2 + \|\vec{v}'_{pj}\|^2\rangle} . \quad (1.18)$$

Par identification avec les termes de l'équation (1.11), le noyau de collision d'Abrahamson $\beta_{ij}^{Turb,Ab.}$ s'écrit :

$$\beta_{ij}^{Turb,Ab.} = \sqrt{8\pi} \left(\frac{d_{pi} + d_{pj}}{2}\right)^2 \sqrt{\langle\|\vec{v}'_{pi}\|^2 + \|\vec{v}'_{pj}\|^2\rangle} . \quad (1.19)$$

Le noyau de collision turbulente de [Saffman et Turner \(1956\)](#) considère le cas extrême de particules faiblement inertielles et de petite taille, alors que [Abrahamson \(1975\)](#) s'intéresse à la situation opposée. Il existe des études portant sur des cas intermédiaires (particules de densité et taille variable). C'est l'objet de l'étude menée par [Zaichik et al. \(2010\)](#).

Turbulence, Zaichik et al. (2010)

De nombreux auteurs se sont intéressés à des noyaux de collision turbulente entre deux particules sphériques, pour un temps de réponse dû aux effets inertiels compris entre les plus petites et les plus grandes échelles de turbulence ([Williams et Crane 1983](#), [Kruis et Kusters 1997](#), [Wang et al. 2000](#), [Derevich 2007](#)). Par exemple, [Kruis et Kusters \(1997\)](#) ont établi un noyau de collision pour des petites particules de densité importante en comparaison avec celle du fluide et en ne prenant en compte que la force de traînée de Stokes. Par la suite, [Zaichik et al. \(2006\)](#) ont développé un modèle de collision pour des particules

à haute densité et bidispersées, sans limitation de taille par rapport aux échelles de turbulence. Ces travaux ont été complétés par les mêmes auteurs (Zaichik *et al.*, 2010) qui ont étendu l'expression du noyau de collision à une plus large gamme de densité. Ainsi, leur modèle est également valable pour des collisions binaires entre particules de densité égale voire inférieure à celle du fluide environnant.

Avant de développer leur modèle, Zaichik *et al.* (2010) ont formulé les hypothèses suivantes :

- la turbulence est isotrope,
- la distribution spatiale des particules est uniforme,
- les forces intermoléculaires (Van der Waals) sont négligées,
- les interactions hydrodynamiques et la sédimentation ne sont pas pris en compte.

Ils ont alors montré que le noyau de collision turbulente $\beta_{ij}^{Turb,Zaichik}$ s'écrit

$$\beta_{ij}^{Turb,Zaichik} = 4\sqrt{\pi} \left(\frac{d_{pi} + d_{pj}}{2} \right)^2 V_t, \quad V_t = \sqrt{V_{in}^2 + V_{sp}^2} \quad (1.20)$$

D'après (1.20), la collision turbulente est la contribution de deux phénomènes regroupés dans le même taux de turbulence total V_t . D'une part, le taux V_{in} modélise le défaut de corrélation des vitesses des particules avec le fluide environnant à cause de leurs effets inertiels. D'autre part, la grandeur V_{sp} rend compte des défauts de corrélation des vitesses dû à la distance entre les particules i et j . Ces deux termes vérifient :

$$\begin{cases} V_{in} = \left| 1 - \frac{\rho_f}{\rho_p} \right| \left[\frac{2\Omega_i\Omega_j(\Omega_i + \Omega_j) + z^2(\Omega_i^2 + \Omega_j^2)}{(2\Omega_i + 2\Omega_i^2 + z^2)(2\Omega_j + 2\Omega_j^2 + z^2)} \right]^{1/2} v' \\ V_{sp} = \left[\frac{(2\Omega_i + 2A\Omega_i^2 + z^2)(2\Omega_j + 2A\Omega_j^2 + z^2)S}{2(2\Omega_i + 2\Omega_i^2 + z^2)(2\Omega_j + 2\Omega_j^2 + z^2)} \right]^{1/2} \end{cases} \quad (1.21)$$

Dans l'équation (1.21), Ω_i désigne le rapport entre le temps de réponse de la particule i et le temps caractéristique de la turbulence à grande échelle. La grandeur z est l'inverse du nombre de Reynolds turbulent construit sur l'échelle de Taylor. La vitesse fluctuante du fluide est donnée par v' . L'écart adimensionné entre les vitesses des particules dû à leur distance de séparation est caractérisé par le rapport $S/(2v'^2)$. La grandeur S dépend de la distance de séparation $d_{ij} = (d_{pi} + d_{pj})/2$. D'après Zaichik *et al.* (2010) :

$$S = \begin{cases} \frac{\varepsilon d_{ij}^2}{15\nu} & \text{pour } d_{ij} < \eta_K \\ 2(\varepsilon d_{ij})^{2/3} & \text{pour } \eta_K < d_{ij} < l \\ 2v'^2 & \text{pour } d_{ij} > l \end{cases} \quad (1.22)$$

Dans l'équation (1.22), l désigne les plus grandes échelles turbulentes et η_K les plus petites (échelle de Kolmogorov).

Le noyau de collision turbulente (1.20) étant censé être valide quelles que soient les gammes de densité ou de taille de particule, il est intéressant de vérifier les cas extrêmes. Pour le noyau de Saffman & Turner, les particules sont faiblement inertielles. Ainsi, les temps de réponses sont très petits devant les échelles

de turbulence. A fortiori, $\Omega_\alpha \rightarrow 0$, $\alpha = i$ ou j . En se servant des équations (1.21) et (1.22), les taux V_{in} et V_{sp} se simplifient :

$$V_{in} = 0 \quad , \quad V_{sp} = \frac{S}{2} = \frac{1}{2} \frac{\varepsilon}{15\nu} \left(\frac{d_{pi} + d_{pj}}{2} \right)^2 .$$

En réinjectant cette expression dans le noyau de turbulence $\beta_{ij}^{Turb,Zaichik}$ donné en (1.20), le noyau conduit à :

$$\beta_{ij} = \sqrt{\frac{8\pi}{15}} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\nu}} \left(\frac{d_{pi} + d_{pj}}{2} \right)^3$$

et l'on retrouve bien l'expression de Saffman & Turner.

L'autre cas extrême, le noyau d'Abrahamson, concerne les particules denses, soient $\rho_f/\rho_p \rightarrow 0$ et $\Omega_\alpha \gg 1$. Cette fois, les taux V_{in} et V_{sp} vérifient :

$$\begin{cases} V_{in} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\Omega_i} + \frac{1}{\Omega_j} \right)^{1/2} v' \\ V_{sp} = 0 \end{cases} .$$

Or, d'après Abrahamson (1975),

$$v'^2/\Omega_\alpha = \langle \|\vec{\mathbf{v}}'_{p\alpha}\|^2 \rangle, \quad \alpha = i \text{ ou } j .$$

En réinjectant cette expression dans le noyau de turbulence $\beta_{ij}^{Turb,Zaichik}$ donné en (1.20), le noyau devient :

$$\beta_{ij} = \sqrt{8\pi} \left(\frac{d_{pi} + d_{pj}}{2} \right)^2 \sqrt{\langle \|\vec{\mathbf{v}}'_{pi}\|^2 + \|\vec{\mathbf{v}}'_{pj}\|^2 \rangle} .$$

Cette expression est bien identique au noyau de collision d'Abrahamson (1.19).

Pour le calcul des noyaux d'agrégation, on somme généralement les contributions des mécanismes participant à l'agrégation. Ainsi, en écoulement turbulent, le noyau de collision global β_{ij}^{tot} est la somme des noyaux de collision induite par la flottabilité et la turbulence :

$$\beta_{ij}^{tot} = \beta_{ij}^{Stokes} + \beta_{ij}^{Turb} \quad (1.23)$$

Comparaison des noyaux de collision turbulente - exemple d'inclusions dans un acier liquide (projet CIREM)

L'évolution des trois noyaux de collision turbulente décrits précédemment en fonction de la dissipation turbulente pour des inclusions non-métalliques dans un acier liquide a été tracée figure 1.5. Pour cela, deux couples d'inclusions d'oxydes de forme sphérique deux fois moins denses que l'acier ont été choisis. Les résultats sont issus d'un précédent projet ANR appelé CIREM (ANR06 - MATPR0005) dont le but était de modéliser le comportement inclusionnaire dans une poche d'acier liquide.

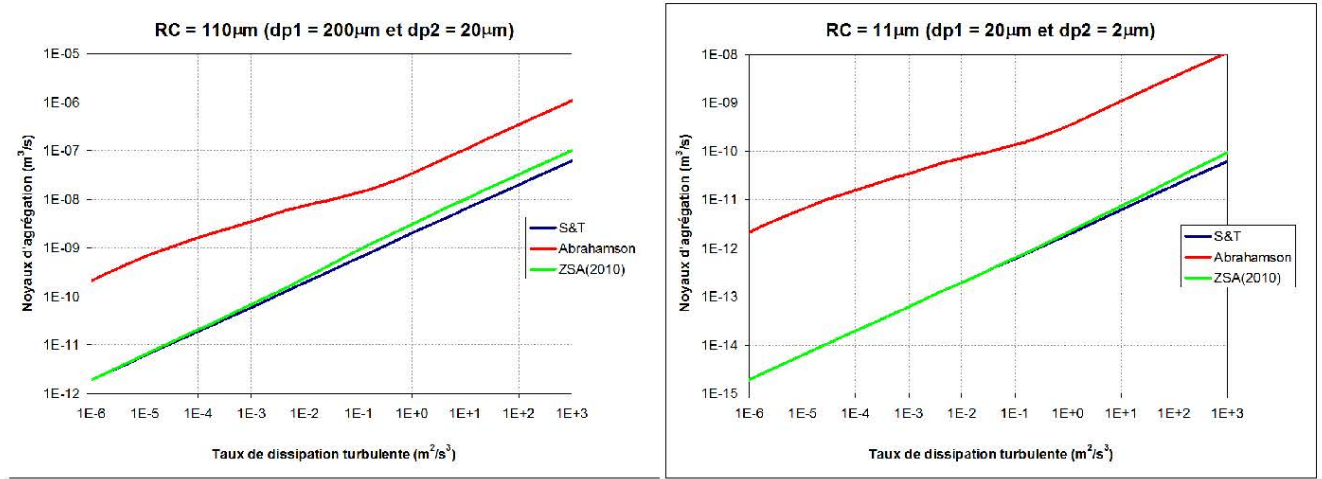


Fig. 1.5 – Comparaison des noyaux de collision turbulente, pour deux paires d'inclusions d'oxydes dans l'acier liquide de différentes tailles : Saffman & Turner (bleu), Abrahamson (rouge), Zaichik (vert) (source : [Daoud et al. 2010](#)).

Les rayons collisionnels $(d_{p1} + d_{p2})/2$ valent respectivement $11 \mu\text{m}$ et $110 \mu\text{m}$. Dans tous les cas, il apparaît que le noyau de collision de Zaichik est compris entre celui de Saffman & Turner (minorant) et Abrahamson (majorant). Pour les plus petites gammes de taux de dissipation, le noyau de Zaichik est très proche de Saffman & Turner. La plus petite échelle de turbulence est définie par l'échelle de Kolmogorov :

$$\eta_K = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \quad (1.24)$$

Dans ces gammes, elle reste supérieure au rayon collisionnel. D'autre part, il s'agit de vérifier que le nombre de Stokes St_K reste inférieur à l'unité. Ce nombre est défini comme le rapport entre le temps de relaxation des particules dans l'écoulement τ_p et l'échelle temporelle caractéristique de Kolmogorov $(\nu/\varepsilon)^{1/2}$ (cf annexe A). Le temps de relaxation, dans le cas des sphères et en prenant en compte la masse ajoutée, s'écrit :

$$\tau_p = \frac{\left(\rho_p + \frac{1}{2}\rho_f \right) d_p^2}{18\mu} \quad (1.25)$$

En utilisant l'expression (1.25) et le temps caractéristique de la turbulence aux petites échelles, le nombre de Stokes s'écrit donc :

$$St_K = \frac{\left(\rho_p + \frac{1}{2}\rho_f \right) d_p^2}{18\mu} \left(\frac{\varepsilon}{\nu} \right)^{1/2} \quad (1.26)$$

Quelle que soit la valeur de l'énergie dissipée, ce nombre reste inférieur à l'unité pour les petites inclusions. Les conditions de Saffman & Turner sont donc vérifiées. En revanche, en augmentant le taux de dissipation, le noyau de Zaichik se distance de celui de Saffman & Turner. En effet, les petites échelles de turbulences diminuent avec la dissipation, au point d'être de taille plus petite que le rayon collisionnel. Pour des rayons de $11 \mu\text{m}$ et $110 \mu\text{m}$, cette limite est franchie respectivement pour $\varepsilon = 24 \text{ m}^2.\text{s}^{-3}$

et $\varepsilon = 2,4 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-3}$, ce qui est cohérent avec les graphes. Pour les gammes supérieures de ε , le noyau de Zaichik ne coïncide pas pour autant avec le noyau d'Abrahamson. Cela peut s'expliquer par le fait que les particules sont peu denses comparé à l'acier, et donc qu'elles réagissent rapidement face aux fluctuations du champ fluide.

1.2.3 Notion d'efficacité de collision

Les hypothèses d'utilisation des noyaux de collision de Saffman & Turner, Abrahamson et Zaichik sont assez restrictives. En particulier, leur utilisation suppose l'absence d'effets hydrodynamiques et de forces d'interactions particulières. Ces hypothèses semblent particulièrement fortes à l'échelle des particules. D'autre part, l'étude expérimentale menée par Higashitani *et al.* (1983) dans un réacteur parfaitement agité montre que, dans les conditions d'application du noyau de Saffman & Turner, l'utilisation de l'équation d'équilibre des populations en appliquant ce noyau ne permet pas de prédire l'évolution de la population des particules. Un coefficient correcteur, appelé efficacité de collision, a ainsi été introduit pour ajuster le noyau de collision et rendre compte de ces effets à la fois hydrodynamiques locaux et physico-chimiques.

De façon générale, l'efficacité de collision entre deux particules notée η_{ij} est définie comme le rapport entre le noyau de collision effectif β_{ij} et un noyau de référence $\beta_{ij,ref}$, qui dépend de la configuration de l'écoulement :

$$\eta_{ij} = \frac{\beta_{ij}}{\beta_{ij,ref}} \quad (1.27)$$

L'efficacité, on le comprend bien, diffère donc du rapport des surfaces de collision.

De nombreuses études numériques ont été réalisées concernant l'établissement de lois d'efficacité pour des suspensions en milieu ionisant, par exemple en milieu aqueux. Pour cela, les effets hydrodynamiques combinés à des forces physico-chimiques telles que la force de Van der Waals ou la répulsion électrique en surface ont été pris en compte. Ces interactions physico-chimiques sont décrites par la théorie DLVO du nom des scientifiques l'ayant développée (Derjaguin et Landau en 1941, indépendamment de Verwey et Overbeek qui l'ont établie en 1948). Cette théorie considère le potentiel d'interaction des forces attractives et répulsives dont la valeur dépend de nombreux paramètres tels que la séparation des particules, leur taille ou encore le milieu dans lequel elles baignent (force ionique). Les forces attractives, de type Van der Waals, sont proportionnelles à la constante de Hamaker A_h qui dépend de la nature du couple particule/fluide. La répulsion double couche électrique est due à la présence d'un nuage électronique à la surface des particules. Pour plus de détails, le lecteur peut consulter l'annexe B.

Les études mentionnées dans cette partie, relatives à la prédiction d'une efficacité pour des particules mouillées par le milieu dans lequel elles baignent, ont toutes eu recours au calcul de la dynamique stokesienne. Cette méthode permet de calculer les trajectoires des particules par superposition de différents modes analytiques : les modes exprimant l'écoulement sans particules ainsi que des modes d'ordres plus élevés traduisant la présence des particules. Ces modes, qui dépendent des positions des particules, vérifient à la fois l'équation de Stokes (donnée au chapitre 3, équation 3.26) et les conditions limites aux particules (adhérence du fluide à leur surface par exemple). Cette méthode ne nécessite donc aucun maillage, ce qui est particulièrement commode pour la résolution des interactions hydrodynamiques des particules à très faible distance (forces de lubrification). De plus, la prise en compte des interactions de nature physico-chimiques est tout-à-fait possible. Pour plus de détails sur la dynamique stokesienne, le lecteur peut se référer aux articles de Batchelor et Green (1972) et Brady et Bossis (1988). À titre d'exemple, pour deux particules sphériques non inertielles et isolées en écoulement cisailé, ces modes

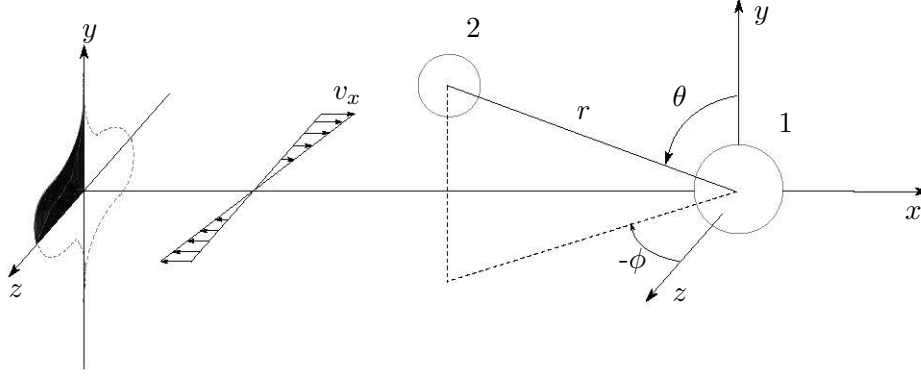


Fig. 1.6 – Coordonnées sphériques utilisées pour le calcul des trajectoires données par l'équation (1.28). La surface coloriée en noir à gauche représente 1/4 de la surface de collision.

permettent de calculer des coefficients hydrodynamiques \mathcal{A} , \mathcal{B} et \mathcal{C} , fonctions de la distance r entre les deux particules et intervenant dans la résolution des trajectoires de ces dernières (Vanni et Baldi, 2002). En utilisant les coordonnées sphériques (r, θ, ϕ) et en prenant la particule 1 comme origine du repère selon la figure 1.6, les composantes de la vitesse de la particule 2 vérifient :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dr}{dt} = \dot{\gamma} r (1 - \mathcal{A}(r)) \sin^2 \theta \sin \phi \cos \phi + \frac{\mathcal{C}(r)}{3\pi\mu d_{p1}} F_{\phi-\chi} \\ r \frac{d\theta}{dt} = r \dot{\gamma} (1 - \mathcal{B}(r)) \sin \theta \cos \theta \sin \phi \cos \phi \\ r \sin \theta \frac{d\phi}{dt} = r \dot{\gamma} \sin \theta \left(\cos^2 \phi - \frac{\mathcal{B}(r)}{2} \cos(2\phi) \right) \end{array} \right. \quad (1.28)$$

Dans l'équation (1.28), $F_{\phi-\chi}$ désigne la résultante radiale des forces physico-chimiques, soient les forces électriques et de Van der Waals.

La surface de collision a également été représentée figure 1.6. Pour des raisons de symétrie (suivant l'axe y et z), la surface peut être calculée dans le quart de plan ($y > 0$, $z > 0$). Initialement, les deux sphères sont placées suffisamment loin l'une de l'autre pour s'assurer que les interactions entre particules, aussi bien hydrodynamiques ou physico-chimique, soient négligeables.

Pour le simple cas de colloïdes en écoulement laminaire cisailé, Curtis et Hocking (1970) ont étudié numériquement la collision de particules sphériques en polystyrène monodispersées. Ils ont pu en extraire une efficacité. Van de Ven et Mason (1977) ont, entre autres, repris les travaux de Curtis et Hocking (1970) pour en extraire une loi d'efficacité qui, en présence de la force physico-chimique de Van der Waals et pour deux particules sphériques de même taille, s'établit comme suit :

$$\eta_{ij} = f(\lambda) C_A^{-0,18} \quad , \quad C_A = \frac{9\pi\mu\dot{\gamma}d_p^3}{2A_h} \in [1, 10^5] \quad (1.29)$$

Dans l'équation (1.29), la variable λ désigne la longueur d'onde de London, c'est-à-dire la longueur de l'onde électromagnétique émanant de l'oscillation des atomes constituant les particules sphériques. Typiquement, $\lambda \simeq 100$ nm et $f(\lambda) \simeq 0,8$ pour des particules de taille micrométriques. Van de Ven et Mason (1977) ont également étudié l'influence de la répulsion électrique. Dans la gamme de valeurs qu'ils

ont utilisées, ils ont montré que cette force avait tendance à limiter l'efficacité comme c'était attendu, mais que pour des valeurs proches des bornes (soit $C_A \simeq 1$ ou $C_A \simeq 10^5$), la répulsion avait une influence très limitée.

Adler (1981) a également calculé des surfaces de collision pour des particules de taille différente. De ces surfaces, il a pu extraire une loi d'efficacité de la forme :

$$\eta_{ij} = k \left(\frac{A_h}{18\pi\mu \max(d_{pi}, d_{pj})^3 \dot{\gamma}} \right)^n \quad \text{avec } k, n \in \mathbb{R} \quad , \quad (1.30)$$

sans toutefois préciser les valeurs de k et n . On remarque que pour $n = 0,18$, cette expression est conforme à celle de Curtis & Hocking fournie équation (1.29).

Parmi les études portant sur des calculs d'efficacité de collision pour des colloïdes de tailles identiques, les travaux de Vanni et Baldi (2002) sont particulièrement exhaustifs. Ils ont en effet distingué le type de doublet qui pouvait se former en fonction des interactions hydrodynamiques et physico-chimiques en jeu. Il peut en effet se former des doublets issus de particules en contact (« collision primaire ») ou alors des particules très proches et dont la distance correspond à l'équilibre entre les forces physico-chimiques (minimum du potentiel), suffisamment fortes devant les interactions hydrodynamiques pour qu'il n'y ait pas rupture de cet équilibre (« collision secondaire », encore appelée « orbite » par les auteurs). Ils ont ainsi calculé des surfaces de collision pour différentes valeurs des interactions, du taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ mais aussi de la taille des particules. Un exemple des surfaces obtenues est donné figure 1.7, où les zones noire et grise représentent les positions initiales ayant menées respectivement à une collision primaire et secondaire. La grandeur ψ_p désigne le potentiel du nuage électronique à la surface des particules (cf annexe B). Lorsque le potentiel ψ_p est nul, l'essentiel des collisions sont fort logiquement de type primaires, et la section de collision décroît avec le cisaillement. Lorsque $\psi_p = 10\text{mV}$, la situation est très différente, puisque ce sont des équilibres de forces conduisant à des situations orbitales (collision secondaire) qui prédominent pour $\dot{\gamma} < 200\text{s}^{-1}$. À noter que le nombre de Reynolds particulaire demeure extrêmement faible, justifiant l'application de la dynamique stokesienne : pour des particules de taille $d_p = 1 \mu\text{m}$ immergées dans de l'eau à température ambiante et un cisaillement dont la gamme de valeur s'étend de 1 à 1000 s^{-1} ,

$$Re_{\dot{\gamma}} = \frac{\dot{\gamma} d_p^2}{\nu} \in [10^{-6}, 10^{-3}] \quad .$$

De ces surfaces, ils ont pu extraire des lois d'efficacité, en particulier en l'absence de répulsion électriques. Pour deux particules de polystyrène identiques de taille d_p dans de l'eau à 20°C , ils ont établi :

$$\eta_{ii} = 1,015 \dot{\gamma}^{-0,186} d_p^{-0,7} \quad (1.31)$$

Dans l'équation (1.31), d_p est exprimé en μm et le cisaillement en s^{-1} . La constante de Hamaker a été prise égale à $0,967 \cdot 10^{-20} \text{ J}$. On retrouve une dépendance de l'efficacité selon $\dot{\gamma}$ et d_p très proche de celle proposée par Curtis et Hocking (1970).

Plus récemment, Bülow *et al.* (2017) ont mené une étude numérique d'évolution déterministe de la population d'une suspension en milieu aqueux uniquement constituée de particules primaires d'alumine sphériques réparties en taille selon une loi log-normale et agitées par un écoulement cisailé couplé à une force centrifuge. Ils ont également calculé des efficacités de collision pour deux sphères isolées. Pour cela, ils ont eu recours à la seule dynamique stokesienne, en utilisant trois potentiels issus de la DLVO :

- le potentiel de Van der Waals avec la constante de Hamaker égale à $4,76 \cdot 10^{-20} \text{ J}$,

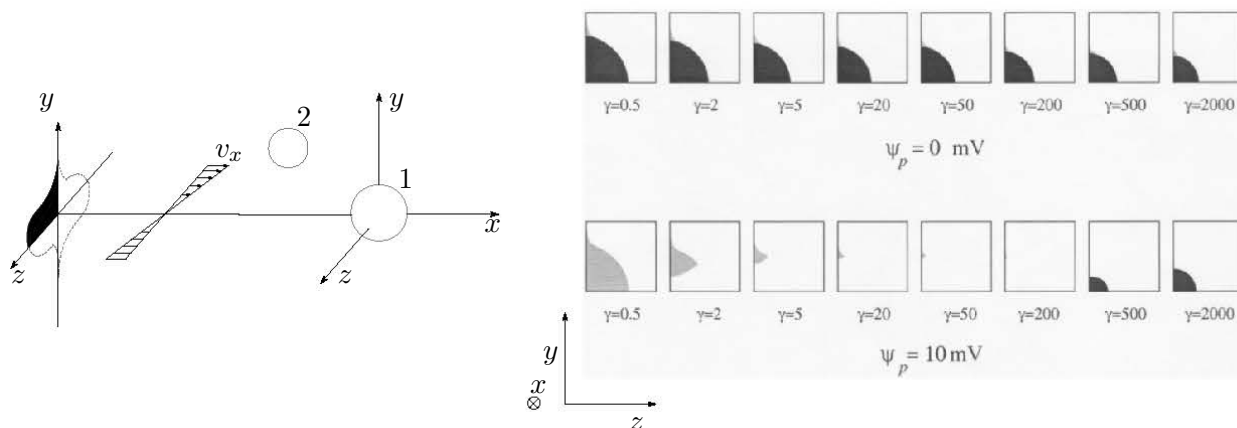


Fig. 1.7 – Forme des surfaces de collision primaire (noir) et secondaire (gris clair) pour des colloïdes en écoulement cisailé. Le graphe de droite est issu de l'article de [Vanni et Baldi \(2002\)](#).

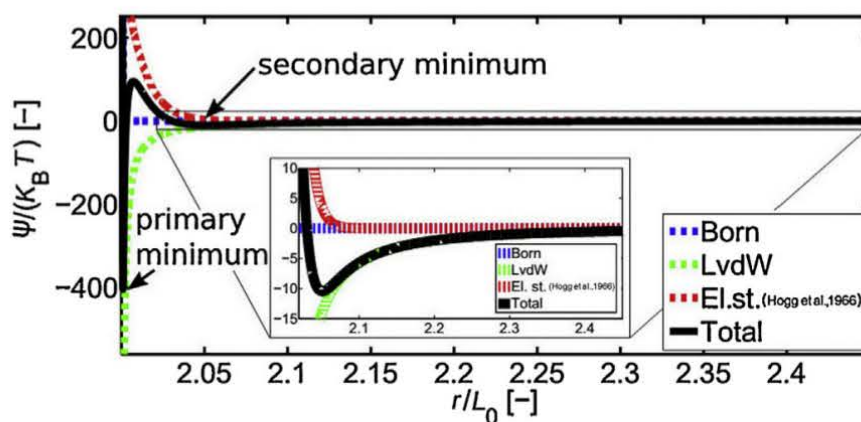


Fig. 1.8 – Potentiels DLVO utilisé dans le cadre des travaux de Bülow et al (source : [Bülow et al., 2017](#)).

- le potentiel dont dérive la répulsion électrique,
- le potentiel dont dérive la force répulsive de Born à très courte distance entre deux atomes.

Ces trois potentiels ainsi que le potentiel résultant sont représentés figure 1.8, où L_0 désigne le rayon moyen des deux sphères, r la distance séparant leur centre de masse et k_B la constante de Boltzmann. D'après ce graphique, deux minima sont observés. Le premier correspond aux particules extrêmement proches l'une de l'autre alors que le second correspond à un équilibre moins stable (puits moins élevé) et donc une agrégation plus fragile. Le second est observé à une distance de séparation de l'ordre de $L_0/20$.

Dans ces conditions, ils ont extrait la loi d'efficacité suivante englobant à la fois le mécanisme de collision induit par le cisaillement ainsi que la flottabilité des particules due à la force centrifuge :

$$\eta_{ij} = 0,33 \left(\frac{d_{p2}}{d_{p1}} \right)^{0,69} \left(\frac{d_{p1} + d_{p2}}{2U_0} \dot{\gamma} \right)^{-0,36}, \quad \frac{d_{p2}}{d_{p1}} < 1. \quad (1.32)$$

Dans l'équation (1.32), U_0 désigne la vitesse de Stokes d'une particule sphérique de taille $(d_{p1} + d_{p2})/2$ soumise au champ généré par la centrifugation. En notant g l'accélération de la force centrifuge, cette vitesse vérifie

$$U_0 = \frac{(d_{p1} + d_{p2})^2 g(\rho_p - \rho_l)}{72\mu} \quad (1.33)$$

En réinjectant l'expression (1.33) dans (1.32)

$$\eta_{ij} = 0,33 \left(\frac{d_{p2}}{d_{p1}} \right)^{0,69} \left(\frac{(d_{p1} + d_{p2})g(\rho_p - \rho_l)}{36\mu\dot{\gamma}} \right)^{0,36}, \quad \frac{d_{p2}}{d_{p1}} < 1. \quad (1.34)$$

Au vu de la loi d'efficacité (1.34), la force centrifuge exerce donc une influence non négligeable dans ce cas, ce qui se traduit par une tendance entre deux particules à s'agréger plus facilement si leur taille augmente, contrairement aux cas précédents. De plus, cette efficacité est d'autant plus faible que le rapport de taille des particules est important, ce qui n'a pas encore été mis en valeur jusqu'à présent.

L'efficacité de collision a été peu utilisée à ce jour pour des particules peu mouillées telles que des inclusions non-métalliques dans du métal liquide. Néanmoins, Wang *et al.* (2005) ont étudié numériquement le comportement statistique des inclusions d'alumine dans un acier liquide lors du bullage dans un réacteur. L'écoulement est résolu par méthode RANS (modèle $k-\varepsilon$) pour les phases fluides. La phase liquide est faiblement couplée à la phase dispersée des inclusions d'alumine (pas de prise en compte des solides dans le calcul de la phase fluide). L'évolution de la distribution en taille des inclusions est résolue par un bilan de population. Ce bilan prend en compte la flottation, la capture par la paroi du réacteur, ainsi que l'agrégation induite par l'écoulement turbulent, la flottabilité, et dans une moindre mesure, la collision brownienne. En ce qui concerne le noyau de collision turbulente, ils ont naturellement pris comme référence celui de Saffman & Turner et l'ont ajusté à l'aide d'une loi d'efficacité. Pour cela, Wang *et al.* (2005) se sont appuyés sur les travaux de Higashitani *et al.* (1982) qui ont étudié numériquement l'interaction binaire de particules sphériques de différentes tailles en écoulement cisailé dans les conditions de Stokes en l'absence de répulsion électrique d'une part, et qui ont calculé des efficacités de collision résultantes d'autre part. De ces efficacités, Wang *et al.* (2005) ont établi la corrélation suivante :

$$\eta_{ij} = 0,9 C_B^{-0,242}, \quad C_B = \frac{3\pi\mu(d_{pi} + d_{pj})^3(\varepsilon/\nu)^{1/2}}{32A_h} \quad (1.35)$$

Les résultats de Wang *et al.* (2005) doivent être pris avec précaution, car la corrélation (1.35), au vu des travaux de Higashitani *et al.* (1982), est valable pour des particules dont le rapport de taille est proche de l'unité. En revanche, cette loi a tendance à surestimer l'efficacité qui décroît d'autant plus que ce rapport est important. De plus, cette relation est valable pour des valeurs de $C_B \in [0,1, 10^5]$, ce qui correspond à des conditions d'écoulement de type Stokes (laminaire). En effet, étant donné que l'étude de Wang *et al.* (2005) porte sur des particules de taille de l'ordre de $10 \mu\text{m}$ pour une valeur de la constante de Hamaker $A_h = 2,3 \cdot 10^{-20} \text{ J}$, le taux de dissipation turbulente n'est pas censé excéder $10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-3}$ ce qui est bien entendu en-deçà des conditions représentatives du procédé de flottation dont les bulles sont censées induire de la turbulence. Enfin, la corrélation (1.35) est valable pour les particules mouillées. En conséquence, son utilisation dans leurs conditions de simulation est discutable.

Pour conclure, les interactions entre particules sphériques en milieu liquide ionisant cisailé et en régime de Stokes ne sont pas négligeables et les efficacités sont loin d'avoir une valeur égale à l'unité dans la plupart des cas considérés. Les paramètres géométriques sont susceptibles d'affecter la valeur de l'efficacité, qui devient d'autant plus faible que le rapport de taille des particules est important. Dans un métal en fusion lors du procédé de flottation, les inclusions dont la taille peut facilement atteindre $10 \mu\text{m}$ subissent un cisaillement local induit par la turbulence. Il est donc très probable, en extrapolant le cas des particules mouillées en régime de Stokes, que les effets hydrodynamiques aient un rôle prépondérant sur la valeur

de l'efficacité de collision. Cette notion d'efficacité est assez pratique pour l'étude du comportement d'inclusions à grande échelle. En effet, elle permet de prendre en compte ces interactions à l'échelle mésoscopique ou microscopique et de les appliquer dans des bilans de population à l'échelle du réacteur métallurgique en s'appuyant sur le formalisme des bilans de population.

Maintenant que les phénomènes microscopiques ont été présentés, il s'agit de décrire la façon dont les phénomènes de transport macroscopiques des particules inclusionnaires sont résolus (terme de gauche de l'équation (1.11)). C'est l'objet de la section suivante, où il est question du couplage de la phase dispersée que constituent les inclusions avec les phases fluides.

1.2.4 Couplage entre phases

Du fait de la faible fraction massique de la phase dispersée solide (de l'ordre de 10 ppm pour les aciers), l'écoulement est peu perturbé à l'échelle du réacteur par les inclusions. Ainsi, le couplage entre solide et fluide est souvent considéré comme unidirectionnel (« one way »). En revanche, l'échange de quantité de mouvement entre les phases fluides (liquide et gaz) n'est pas négligeable ; les fractions volumiques de gaz peuvent approcher localement l'unité ce qui participe au brassage du métal. Ceci est particulièrement vrai dans le cas du traitement en poche de l'acier.

Avant de décrire le couplage fluide-solide, intéressons-nous au couplage fort entre liquide et gaz. La résolution d'un tel écoulement diphasique peut être assurée par une méthode Euler-Euler.

Le système d'équations qui suit se rapporte à une approche de type Euler-Euler, utilisée pour simuler une phase gazeuse (et donc un panache de bulles) présente dans un bain liquide :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k) + \text{div}(\alpha_k \rho_k \vec{v}_k) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k \vec{v}_k) + \overrightarrow{\text{div}}(\alpha_k \rho_k \vec{v}_k \otimes \vec{v}_k) = -\alpha_k \overrightarrow{\nabla} p - \overrightarrow{\text{div}}(\alpha_k \overline{\overline{\tau}}_k) + \alpha_k \rho_k \overrightarrow{\mathbf{g}} + \overrightarrow{\mathbf{F}}_k \end{array} \right. \quad (1.36)$$

où l'indice k désigne indifféremment la phase liquide ou gazeuse. Quelle que soit la phase considérée, α_k est la fraction volumique, ρ_k la densité, \vec{v}_k la vitesse, $\overline{\overline{\tau}}_k$ le tenseur des contraintes totales (visqueuses et de Reynolds). Tous les transferts de quantité de mouvement entre les deux phases sont pris en compte par le terme $\overrightarrow{\mathbf{F}}_k$ (force de masse ajoutée, portance, traînée, dispersion induite par la turbulence...)

Les inclusions n'étant présentes que dans la phase liquide, l'équation de conservation établie en (1.11), est légèrement modifiée :

$$\frac{\partial \alpha_l N_i}{\partial t} + \text{div}(\alpha_l \vec{v}_p N_i) = \alpha_l (B_i - D_i) \quad (1.37)$$

Sa résolution comporte deux étapes. Premièrement, l'équation de transport des populations N_i est résolue, sans terme source :

$$\frac{\partial \alpha_l N_i}{\partial t} + \text{div}(\alpha_l \vec{v}_p N_i) = 0$$

Dans cette équation, la vitesse des particules \vec{v}_p est assimilée à la vitesse moyenne du fluide vue par les particules \vec{v}_f .

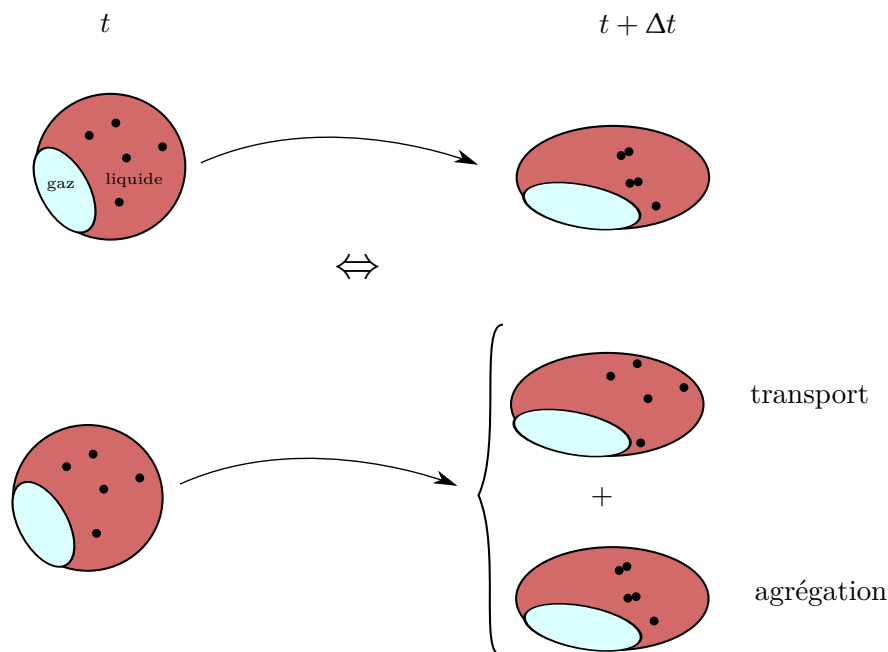


Fig. 1.9 – Décomposition de l'évolution de la densité numérique des inclusions : transport macroscopique et agrégation

Dans un second temps, il est possible de superposer le mécanisme d'agrégation au transport induit par l'écoulement, ce qui revient à résoudre l'équation (1.11). Cette technique de résolution est illustrée figure 1.9.

Les noyaux de collision employés par les modèles macroscopiques ne prennent pas en compte les interactions inclusionnaires telles que les forces physico-chimiques à courte distance ou les effets hydrodynamiques locaux. Afin de préserver l'avantage d'un couplage solide-liquide faible, il est nécessaire d'affiner leur expression grâce à des investigations décrivant de façon déterministe le comportement local des inclusions. Ce travail s'efforce de répondre à cette problématique.

1.3 Un travail collaboratif : le projet ANR-DFG Flotinc

Ce travail s'inscrit dans le cadre d'un projet de recherche franco-allemand cofinancé par l'Agence Nationale de la Recherche et de la DFG (« Deutsche Forschungsgemeinschaft »). Ce projet s'intitule Flotinc (« Inclusion interactions during flotation in liquid metals ») qui s'est étendu sur une durée de 4 ans de 2016 à 2019. Il consiste à étudier numériquement et expérimentalement par une approche multi-échelles le comportement des inclusions présentes dans un métal liquide lors du procédé de flottation à proximité du train de bulles. Les deux échelles concernées sont celle des inclusions, ainsi que celle du train de bulles.

Le projet Flotinc réunit 4 équipes de recherche, responsables chacune d'un « workpackage » (WP) :

- Le laboratoire des Sciences des Processus Industriels et Naturel de Saint-Etienne (« SPIN ») effectuant des recherches expérimentales de cinétique d'agrégation dans un métal à bas point de fusion dans des conditions d'écoulement maîtrisées avec une cellule de Couette (WP1),
- l'Institut Jean Lamour où le travail présenté ici a été mené (WP2),
- l'Université Technique de Dresde chargée de modéliser et d'effectuer des simulations numériques directes à l'échelle des bulles et d'un train de bulles (WP3),

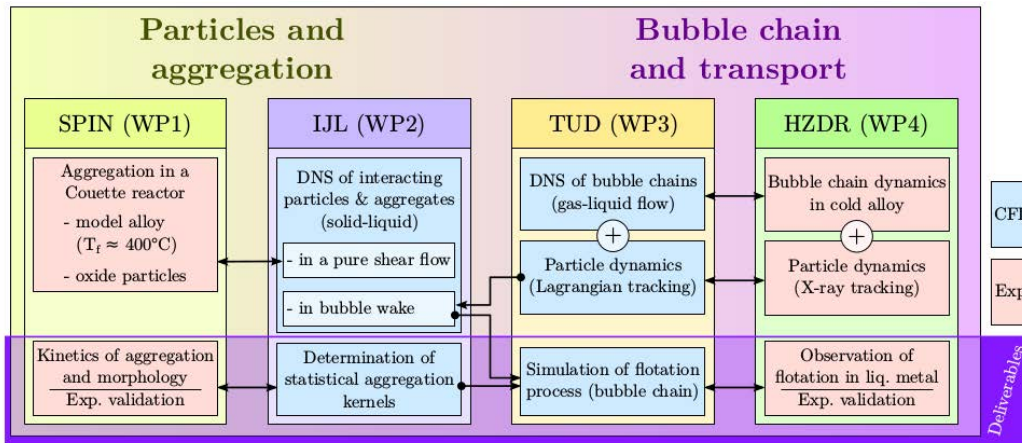


Fig. 1.10 – Liste des travaux des différents partenaires envisagés lors de la création du projet Flotinc.

- le Centre Helmholtz de Dresde-Rossendorf dont la spécialité est l'observation d'un écoulement multiphasique opaque par imagerie à rayon X et neutronique (WP4).

Pour la partie expérimentale, ce projet est marqué par son originalité et la possibilité de visualiser le comportement inclusionnaire au sein du liquide opaque qu'est le métal. Peu de travaux ont été effectués dans ce sens, la dynamique inclusionnaire en temps réel n'ayant été observée que sur des surfaces (Yin *et al.*, 1997), où les phénomènes physiques en jeu diffèrent largement du cas des particules complètement immergées.

D'un point de vue numérique, l'étude approfondie de la dynamique inclusionnaire à petite et moyenne échelle doit contribuer à affiner les modèles macroscopiques utilisés à l'échelle de la poche industrielle.

La façon dont les interactions entre les différentes équipes partenaires étaient envisagées au début du programme est illustrée figure 1.10. L'équipe WP1 a engagé un post-doctorant pour une durée de 18 mois, alors que les équipes WP2, 3 et 4 ont accueilli un doctorant pour mener les travaux de recherche du projet. Des réunions biannuelles d'avancement de projet ont été organisées successivement par les équipes membres, des rapports annuels conjoints synthétisant cet avancement ont été également rédigés. Certains résultats obtenus lors de ce projet sont illustrés figure 1.11.

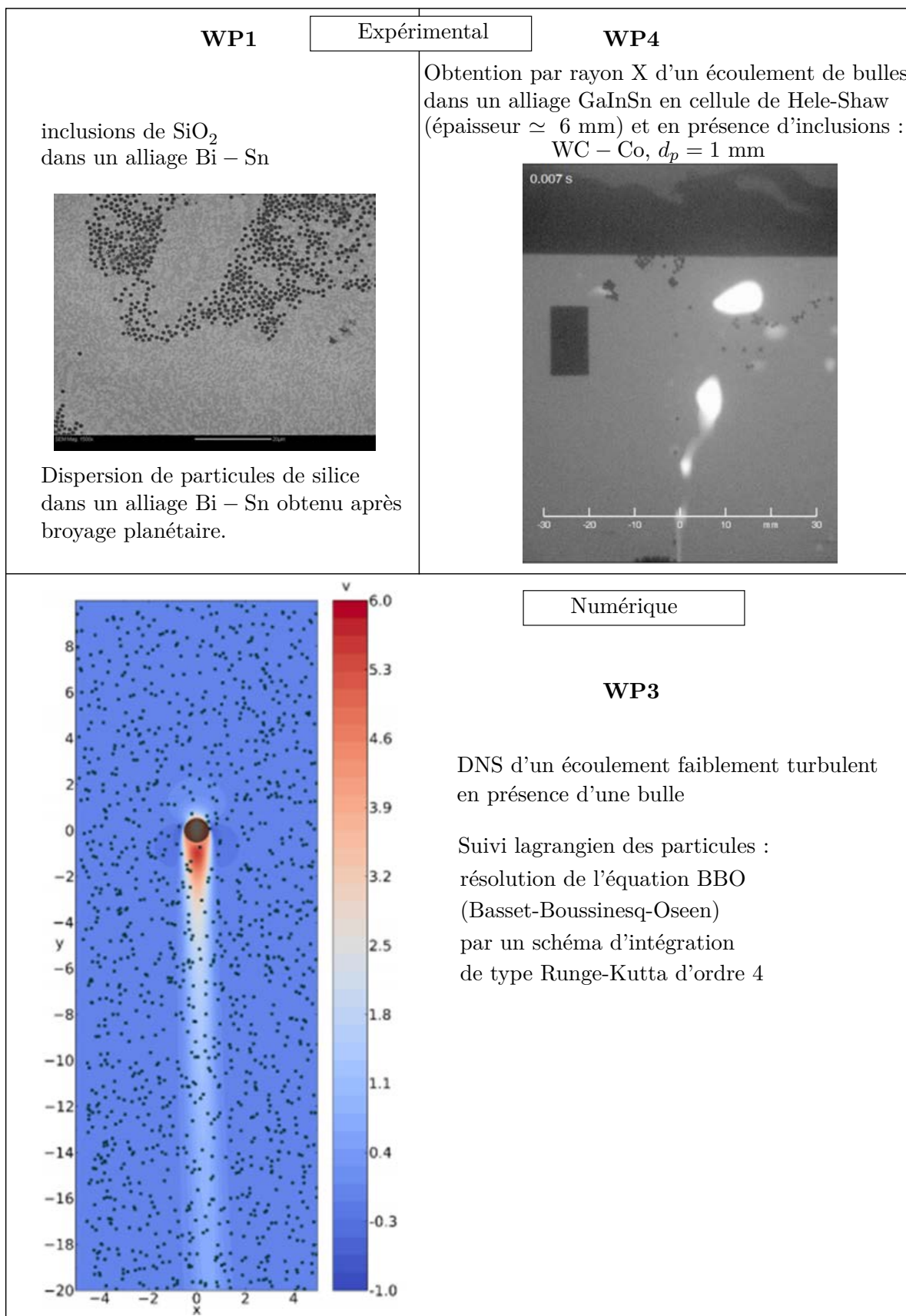


Fig. 1.11 – Exemple de résultats obtenus par les autres équipes partenaire du projet Flotinc.

1.4 Objectifs

Le principe du procédé de flottation est relativement simple ; néanmoins, les phénomènes physiques sous-jacents sont complexes et nécessitent une investigation poussée en vue de décrire correctement le comportement des inclusions à l'échelle du train de bulles, puis du réacteur métallurgique. Au vu du modèle des bilans de populations, un paramètre-clé qui inclut la dynamique inclusionnaire aux petites échelles est le noyau d'agrégation. Les objectifs principaux de ce travail sont donc les suivants :

- décrire localement les conditions représentatives du procédé de flottation à proximité du train de bulles favorisant l'agrégation des particules,
- identifier dans ces conditions les phénomènes à l'échelle mésoscopique qui influencent le comportement inclusionnaire,
- effectuer des simulations numériques pour établir une trajectographie complète des particules,
- extraire des noyaux statistiques d'agrégation,
- exploiter ces noyaux avec la résolution de bilans de population à plus grande échelle.

Les différents solveurs retenus pour cette étude sont présentés dans le chapitre 2.

Afin de convaincre le lecteur de la validité de ces solveurs et de la représentativité des conditions limite et initiale, des simulations de particules isolées sont d'abord effectuées, et les résultats sont confrontés à ceux de la littérature. Ceci est l'objet du chapitre 3.

Conformément aux trois premiers objectifs, le chapitre 4 traite les conditions d'écoulement local autour des inclusions dans un écoulement cisailé plan qui modélise la turbulence produite par le mouvement des bulles. Par la suite, l'étude de la dynamique inclusionnaire à petite échelle est présentée, pour les paramètres retenus influençant la trajectoire des particules.

Comme cela est visible sur la figure 1.10, il a été prévu de valoriser les noyaux de collision obtenus dans ce travail pour simuler le procédé de flottation à proximité directe du train de bulles. Dans cette optique, deux méthodes de travail collaboratif ont été engagées entre notre équipe et celle de la TU de Dresde. La première consiste à exploiter les résultats de noyaux de collision statistiques obtenus pour extraire des lois de collision entre particules. Ceci permet à l'équipe de Dresde d'étudier de façon déterministe l'évolution de la population inclusionnaire dans un train de bulles. La seconde est une approche statistique. Elle consiste à étudier l'évolution de la population des particules, à partir de l'équation de bilan de population et des distributions spatiales des inclusions et de la turbulence obtenues par l'équipe de Dresde. C'est cette dernière méthode qui sera essentiellement développée dans le chapitre 5. De ce fait, ce dernier chapitre répond aux deux derniers objectifs.

Chapitre 2

Outils numériques utilisés pour la simulation d'inclusions en milieu liquide

Les méthodes numériques utilisées dans le cadre de cette thèse ont été implémentées dans un code développé à l'Institut Jean Lamour en grande partie par Jean-Sébastien Kroll-Rabotin. Ce code, nommé « FLUA », est essentiellement écrit en langage Fortran. Il permet de simuler des écoulements multiphasiques et d'effectuer des calculs parallèles (utilisation des standards OpenMP et MPI). Le code se décompose principalement en 3 grandes sous-parties : le suivi lagrangien des particules (LPT), la résolution de l'écoulement par une méthode de Boltzmann sur réseau (LBM), et le couplage entre phases, ici par une méthode de frontière immergée (IBM). Une illustration de ces trois solveurs est proposée figure 2.1.

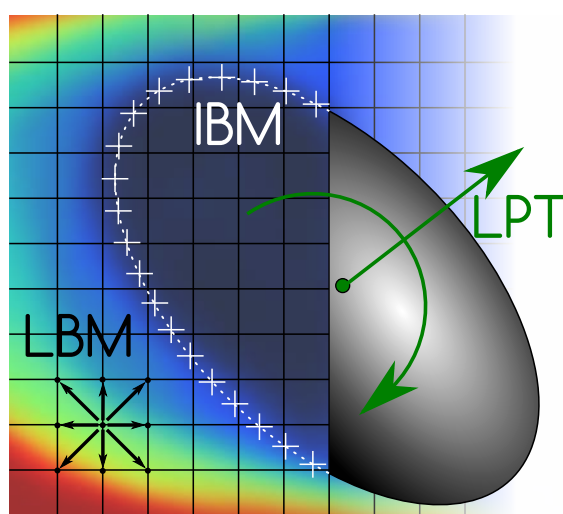


Fig. 2.1 – Illustration des 3 solveurs LBM (« Lattice-Boltzmann Method »), IBM (« Immersed Boundary Method ») et LPT (« Lagrangian Particle Tracking »).

2.1 Suivi lagrangien des particules

Dans ce travail, les vitesses et positions des particules ont été essentiellement résolues de manière explicite. Dans ce qui suit, une description générale du modèle utilisé va être proposée, pour l'appliquer dans les chapitres suivants aux cas particuliers des sphères et des ellipsoïdes. Lorsque les forces et moments résultants sont connus pour un élément solide donné, les vitesses et positions des particules sont mises à jour par résolution des équations traduisant le principe fondamental de la dynamique. Dans le cas d'efforts qui dépendent de la vitesse (comme un modèle de traînée) ou de l'accélération (comme un modèle de masse ajoutée), on approxime la dépendance des forces et des couples à la vitesse et l'accélération par leur tangente locale. Le principe fondamental de la dynamique est donc assuré à partir du système d'équations linéarisé suivant, appliqué à chaque objet solide (p) :

$$\begin{cases} \rho_p V_p \frac{d\vec{v}_p}{dt} = A_v \frac{d\vec{v}_p}{dt} + B_v \vec{v}_p + \vec{C}_v \\ \bar{\mathbf{I}}_p \cdot \frac{d(\vec{\omega}_p)}{dt} = A_\omega \frac{d\vec{\omega}_p}{dt} + B_\omega \vec{\omega}_p + \vec{C}_\omega \end{cases} \quad (2.1)$$

Les équations (2.1) ont chacune trois composantes pour un problème 3D. Si l'on souhaite suivre n particules à un temps donné, il faut donc résoudre $6n$ équations. La résolution de l'équation portant sur la vitesse \vec{v}_p dans (2.1) discrétisée temporellement s'effectue comme suit, en notant δt le pas de temps :

$$\begin{aligned} \rho_p V_p \frac{\vec{v}_p(t) - \vec{v}_p(t - \delta t)}{\delta t} &= A_v \frac{\vec{v}_p(t) - \vec{v}_p(t - \delta t)}{\delta t} + B_v \vec{v}_p(t) + \vec{C}_v \\ \Rightarrow \vec{v}_p(t) &= \frac{\vec{v}_p(t - \delta t) \left(\frac{\rho_p V_p - A_v}{\delta t} \right) + \vec{C}_v}{\frac{\rho_p V_p - A_v}{\delta t} - B_v} \end{aligned} \quad (2.2)$$

Les composantes des vitesses sont exprimées dans un repère fixe. Le moment d'inertie d'un solide dépend de son orientation. Celle-ci est caractérisée dans le code de calcul par un quaternion $\mathbf{q}(t)$ à partir duquel on peut déduire la transformation pour passer du repère fixe au repère lié à la particule (cf annexe C). Il apparaît donc judicieux de travailler dans ce repère, où la matrice représentative du tenseur d'inertie est diagonale. En notant I'_{pi} les composantes du tenseur d'inertie et ω'_{pi} celles de la vitesse angulaire dans la base orthonormée liée à la particule, la vitesse de rotation est mise à jour de façon similaire à la formule (2.2) :

$$\omega'_{pi}(t) = \frac{\omega'_{pi}(t - \delta t) \left(\frac{I'_{pi} - A_\omega}{\delta t} \right) + C'_{\omega i}}{\frac{I'_{pi} - A_\omega}{\delta t} - B_\omega}, \quad \vec{C}'_\omega = q^{-1} \times \vec{C}_\omega \times q \quad (2.3)$$

L'opérateur \times désigne le produit de Hamilton défini en annexe C. Dans un second temps, les composantes de la vitesse sont déduites par transformation inverse : $\vec{\omega}_p = q \times \vec{\omega}'_p \times q^{-1}$

Dans la majeure partie de ce travail, la position \vec{x}_p est calculée à partir d'un schéma d'Euler explicite :

$$\vec{x}_p(t) = \vec{x}_p(t - \delta t) + \delta t \vec{v}_p(t) \quad (2.4)$$

L'orientation quant à elle est mise à jour en appliquant la rotation de vecteur $\vec{\omega}_p(t)\delta t$:

$$\mathbf{q}(t) = \vec{\omega}_p(t)\delta t \times \mathbf{q}(t - \delta t) \quad (2.5)$$

où \times est, on le rappelle, le produit de Hamilton. Ce schéma d'intégration a été utilisé pour des objets sphériques. En revanche, en ce qui concerne les ellipsoïdes, un schéma de type Adams-Bashforth a été employé, ce qui se traduit de la manière suivante :

$$\begin{cases} \vec{\mathbf{x}}_p(t) = \vec{\mathbf{x}}_p(t - \delta t) + \delta t \vec{\mathbf{v}}_p(t) + \frac{\delta t}{2} (\vec{\mathbf{v}}_p(t) - \vec{\mathbf{v}}_p(t - \delta t)) , \\ \mathbf{q}(t) = \left[\vec{\omega}_p(t)\delta t + \frac{\delta t}{2} (\vec{\omega}_p(t) - \vec{\omega}_p(t - \delta t)) \right] \times \mathbf{q}(t - \delta t) \end{cases} \quad (2.6)$$

2.1.1 Détection de collision

Dans cette partie, seuls les objets de forme sphériques et ellipsoïdales seront évoqués car ce travail n'a porté que sur ces derniers.

Numériquement, étant donné qu'aucune contrainte n'est appliquée entre les surfaces des objets, la détection de collision porte sur un critère d'interpénétration. Dans le cas de sphères, la détection de collision est élémentaire, car il existe une expression analytique simple permettant de voir si deux sphères se sont interpénétrées. Concrètement, pour que deux sphères de diamètre d_i et d_j dont les centres de masse ont pour coordonnées respectives $\vec{\mathbf{x}}_i$ et $\vec{\mathbf{x}}_j$ soient entrées en collision, il suffit de vérifier que :

$$\|\vec{\mathbf{x}}_{pi} - \vec{\mathbf{x}}_{pj}\| - \frac{1}{2}(d_{pi} + d_{pj}) \leq 0 \quad (2.7)$$

En ce qui concerne les ellipsoïdes, la détection de collision porte également sur le critère d'interpénétration. Malheureusement, il n'existe pas d'expressions analytiques générales permettant de déterminer si deux ellipsoïdes s'interpénètrent. Afin de palier ce problème, ce travail a recours à l'emploi de N marqueurs répartis à la surface des ellipsoïdes. Ces marqueurs sont caractérisés par leur position $\vec{\mathbf{x}} = (x, y, z)$ ainsi que leur poids w (surface élémentaire occupée). Les ellipsoïdes étudiées ici sont des ellipsoïdes de révolution autour de l'axe $c > a$. L'aire A d'une telle ellipsoïde est estimée par exemple par [Klamkin \(1971\)](#) comme suit :

$$A = 4\pi \left(\frac{(a^2)^p + 2(ac)^p}{3} \right)^{1/p} , \quad p = 1,6075 \quad (2.8)$$

Ainsi, les marqueurs $i \in [1, N]$, de position (x_i, y_i, z_i) par rapport au centre de masse de l'ellipsoïde et de poids w_i doivent vérifier :

$$\begin{cases} \frac{x_i^2 + y_i^2}{a^2} + \frac{z_i^2}{c^2} \simeq 1 \\ \sum_{i=1}^N w_i \simeq A , \text{ cf (2.8)} \end{cases} \quad (2.9)$$

La détection de collision nécessite l'emploi des normales extérieures des ellipsoïdes aux positions de

chaque marqueur $i \in [1, N]$. Ces normales extérieures sont orientées selon le gradient de la fonction de surface caractérisant l'ellipsoïde :

$$\begin{cases} \vec{\mathbf{n}}_i \wedge \vec{\nabla} \left(\frac{x_i^2 + y_i^2}{a^2} + \frac{z_i^2}{c^2} \right) = \vec{0} \\ \vec{\mathbf{n}}_i \cdot \vec{\nabla} \left(\frac{x_i^2 + y_i^2}{a^2} + \frac{z_i^2}{c^2} \right) > 0 \end{cases} \quad (2.10)$$

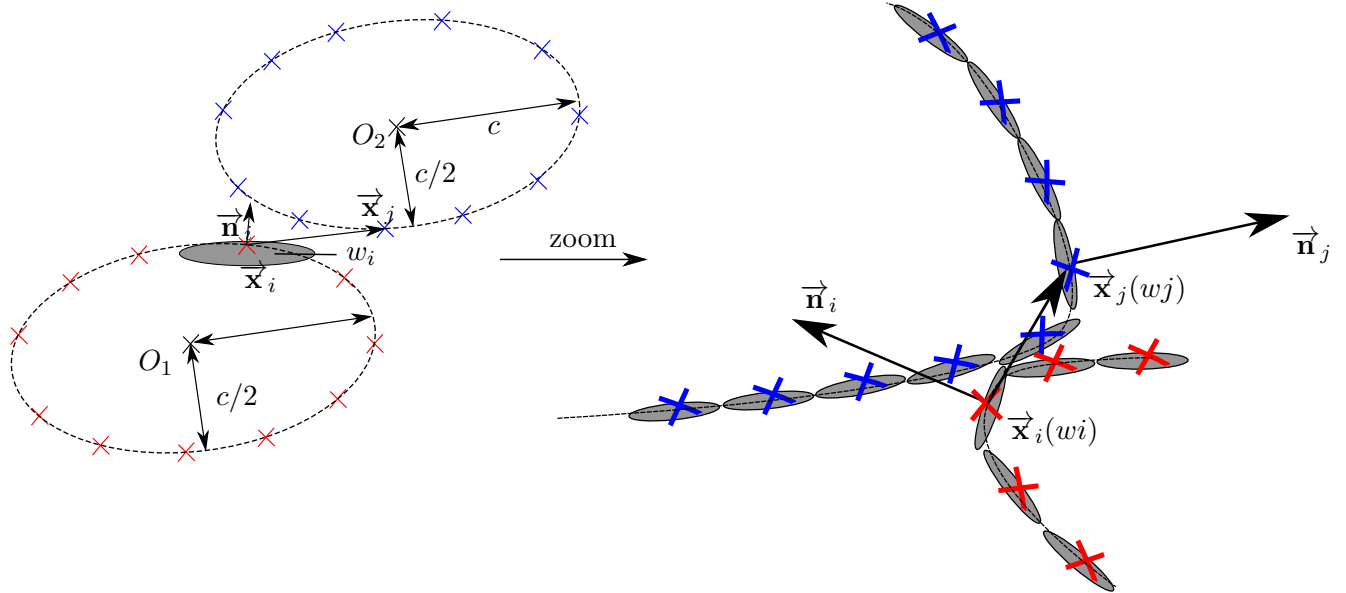
La détection de collision (interpénétration) de deux ellipsoïdes à l'aide des marqueurs passe par une série de vérifications, dont l'ordre, grâce à des critères de plus en plus restrictifs, permet d'optimiser le temps de calcul. Tout d'abord, la série de tests décrits ci-après est effectuée uniquement si les sphères circonscrites à chacune des ellipsoïdes s'interpénètrent (soient les sphères de rayon le plus grand demi-axe). Si c'est le cas, alors les tests suivants portant sur les marqueurs appartenant respectivement aux deux ellipsoïdes sont effectués dans l'ordre :

- Si une paire de marqueurs sont en-deçà d'une distance critique (ici égale à $2c$), alors le test suivant est lancé :
- On vérifie que le produit scalaire $\vec{\mathbf{n}}_i \cdot (\vec{\mathbf{x}}_i - \vec{\mathbf{x}}_j) > 0$ (interpénétration potentielle au point $\vec{\mathbf{x}}_i$).
- Si c'est effectivement le cas, on regarde ensuite si la projection de la position $\vec{\mathbf{x}}_i$ dans le plan tangent à l'ellipsoïde j et passant par $\vec{\mathbf{x}}_j$ est incluse dans la surface représentative w_j et réciproquement.

Une illustration complète de la détection à l'aide de marqueur ainsi que l'algorithme associé et précédemment décrit sont proposés figure 2.2.

Afin de limiter l'interpénétration, un nombre important de marqueurs a été utilisé. Le présent travail a eu recours à un code préexistant, développé à l'aide du logiciel Matlab[®] et décrit par [Persson et Strang \(2004\)](#). Il permet de générer ces marqueurs et de les espacer uniformément. Grâce à ce code, les marqueurs, au nombre de 3204, vérifient bien $w_i \simeq A/N$ avec A l'aire de l'ellipsoïde considérée, définie en (2.8). Avec ce nombre de marqueurs, la profondeur d'interpénétration n'excède pas $1/2000^{\text{ème}}$ du grand axe.

Le critère développé pour les ellipsoïdes peut s'appliquer à des objets quelconques, à condition que ces derniers présentent une forme convexe.



Données: marqueurs (positions \vec{x} , normales \vec{n} , poids w)

si ($\|O_1 - O_2\| < 2c$) alors

 pour marqueur $i \in \text{ellipse1}$ faire

 pour marqueur $j \in \text{ellipse2}$ faire

 si $\|\vec{x}_i - \vec{x}_j\| > 2c$ alors

 | itérer

 fin si

 si $(\vec{x}_i - \vec{x}_j) \cdot \vec{n}_j > 0$ ou $(\vec{x}_j - \vec{x}_i) \cdot \vec{n}_i > 0$ alors

 | itérer

 fin si

 si $(\pi \|(\vec{x}_i - \vec{x}_j) \times \vec{n}_i\|^2 > w_i)$ ou $(\pi \|(\vec{x}_j - \vec{x}_i) \times \vec{n}_j\|^2 > w_j)$ alors

 | itérer

 fin si

 collision

 fin pour

fin pour

fin si

Fig. 2.2 – Algorithme implémenté pour la détection de collision des ellipsoïdes.

2.2 Solveur fluide : méthode de Boltzmann sur réseau

La résolution de l'écoulement en trois dimensions est effectuée à l'aide d'une méthode de Boltzmann sur réseau implémentée dans le solveur fluide du code utilisé dans ce travail.

2.2.1 Équation de Boltzmann

Dans le cadre de la théorie cinétique des gaz, Ludwig Boltzmann a utilisé une approche statistique afin de décrire l'évolution d'un gaz hors équilibre. Cette approche, décrite de façon exhaustive par Wild (1951), a pour inconnue la fonction de distribution du fluide considéré. L'équation régissant son évolution est la suivante :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{c} \cdot \vec{\nabla}_x f + \vec{F}_m \cdot \vec{\nabla}_c f = \Omega(f) \quad (2.11)$$

Avec

- $f = f(\vec{x}, \vec{c}, t)$ la **fonction de distribution massique du gaz** dans l'espace des vitesses. Elle représente la masse de fluide situées à l'instant t dans un petit volume d'espace d^3x autour du point \vec{x} et ayant une vitesse \vec{c} définie à d^3c près. Elle est donc exprimée, dans le cas 3D, en $[\text{kg} \cdot \text{m}^{-6} \cdot \text{s}^3]$
- \vec{F}_m la densité massique des forces que subit le gaz exprimée en $[\text{N} \cdot \text{kg}^{-1}]$,
- Ω l'opérateur de **collision**.

Pour un milieu dense, la théorie cinétique des gaz (cf Rocard, 1927) suppose que l'ensemble des très nombreuses collisions entre éléments constitutifs du fluide résulte en une relaxation vers une distribution à l'équilibre f_{eq} , qui n'est autre que la distribution de Maxwell-Boltzmann :

$$f_{eq} = \rho \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left(- \frac{m(\vec{c} - \vec{v})^2}{kT} \right) \quad (2.12)$$

Dans la relation (2.12), m désigne la masse d'une particule élémentaire constitutive du gaz (kg), k la constante de Boltzmann ($\text{J} \cdot \text{K}^{-1}$), et T la température (K).

Chez certains auteurs, l'approche de la fonction de distribution comme quantité numérale (et non massique) est parfois utilisée. Dans ce cas, le nombre de particules occupant un volume d^3x autour du point \vec{x} et ayant la vitesse \vec{c} à d^3c près serait la grandeur $f d^3x d^3c$. Néanmoins, la densité massique sera privilégiée par la suite, ce qui permettra de retrouver les équations de conservation classiques dans un milieu continu, ie les liquides ou les gaz denses. Il est possible de repartir directement de l'équation cinétique de Boltzmann (2.11) pour retrouver les équations de Navier-Stokes. L'exemple est donné ci-après pour l'équation portant sur le moment d'ordre 0, soit la conservation de la masse, par intégration sur l'espace des directions \vec{c} . Pour imposer la conservation de la masse, il faut que l'intégration sur \vec{c} de l'opérateur de collision, qui peut être vu comme un terme source de l'équation de Boltzmann, soit nulle.

$$\int_{\vec{c} \in \mathbb{R}^3} \Omega(f) d^3c = 0 \quad (2.13)$$

Au vu de la définition de la fonction de distribution, la masse volumique et la vitesse vérifient

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho(\vec{x}, t) = \int_{\vec{c} \in \mathbb{R}^3} f(\vec{x}, \vec{c}, t) d^3 c \\ \rho(\vec{x}, t) \vec{v}(\vec{x}, t) = \int_{\vec{c} \in \mathbb{R}^3} \vec{c} f(\vec{x}, \vec{c}, t) d^3 c \end{array} \right. \quad (2.14)$$

Le premier terme intégré du membre de gauche de l'équation de Boltzmann donne :

$$\int_{\vec{c}} \frac{\partial f}{\partial t} d^3 c = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\vec{c}} f d^3 c$$

ce qui n'est autre que la grandeur $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ au vu de (2.14). En ce qui concerne le second terme, étant donné que les variables \vec{x} et \vec{c} sont indépendantes, on peut poser

$$\int_{\vec{c}} \vec{c} \cdot \vec{\nabla}_x f d^3 c = \vec{\nabla}_x \cdot \int_{\vec{c}} f \vec{c} d^3 c = \text{div}(\rho \vec{v}) \quad , \text{ toujours d'après (2.14).}$$

En tant que grandeur macroscopique massique, la force \vec{F}_m ne dépend pas des directions \vec{c} . Il est donc possible de changer le troisième terme de gauche de (2.11) et écrire

$$\int_{\vec{c}} \vec{F}_m \cdot \vec{\nabla}_c f d^3 c = \vec{F}_m \cdot \int_{\vec{c}} \vec{\nabla}_c f d^3 c = \vec{F}_m \cdot \int_{\partial c} f \vec{n} d^2 S$$

La notation ∂c désigne les bords de l'espace des directions définies dans \mathbb{R}^3 , ce qui correspond à des vitesses infinies. Or, la probabilité pour que des particules de gaz ait une vitesse infinie est nulle. Il vient immédiatement que $\int_{\vec{c}} \vec{F}_m \cdot \vec{\nabla}_c f d^3 c = 0$.

D'après ce qui précède, on retrouve bien l'équation de continuité classique :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{v}) = 0 \quad (2.15)$$

De manière similaire, l'équation de Navier-Stokes portant sur la quantité de mouvement peut être obtenue par intégration de l'équation de Boltzmann en prenant son moment d'ordre 1 (cf équation 2.14). Le détail du calcul n'est pas présenté ici, mais a été largement détaillé dans la littérature sous le nom d' « expansion de Chapman-Enskog » (Chapman, 1916 ; Enskog, 1917).

2.2.2 Discrétisation sur un réseau : méthode LBM

La méthode de Boltzmann sur réseau (LBM) connaît un intérêt croissant depuis maintenant plusieurs décennies, d'abord dans la branche de la dynamique des fluides - en écoulement laminaire ou turbulent - puis pour des problèmes multiphysiques (Younsi, 2015). Historiquement, elle se base sur un modèle développé pour la simulation du comportement dynamique des gaz par des automates cellulaires, c'est-à-dire des nœuds reliés en réseau auxquels est affectée une variable booléenne indiquant la présence

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} + \vec{c}_i \cdot \vec{\nabla}_x N_i = \Omega_i(N(\vec{x}, t)) \quad (2.18)$$

Le schéma d'intégration étant explicite, l'équation (2.18) intégrée en temps entre t et $t + \delta t$ devient :

$$N_i(\vec{x} + \vec{c}_i \delta t, t + \delta t) - N_i(\vec{x}, t) = \Omega_i(N(\vec{x}, t)) \delta t \quad (2.19)$$

Le membre de gauche de (2.19) correspond à une étape de propagation (« streaming »); le second à la collision qui comme cela a été vu en (2.12), se traduit pour un milieu dense par une relaxation vers un état d'équilibre.

L'opérateur de collision le plus couramment utilisé est BGK, qui a recours à un unique coefficient de relaxation vers l'équilibre τ :

$$\Omega_i(\vec{N}) = \frac{1}{\tau} (N_i - N_{i,eq}) \quad (2.20)$$

où $N_{i,eq}$ est une fonction de distribution garantissant les lois de conservation voulues, que l'on peut rapprocher de (2.12) sous une forme discrète :

$$N_{i,eq} = \rho t_i \left[1 + \frac{\vec{v} \cdot \vec{c}_i}{c_s^2} + \frac{(\vec{v} \cdot \vec{c}_i)^2}{2c_s^4} - \frac{\vec{v}^2}{2c_s^2} \right] \quad (2.21)$$

Dans l'équation (2.21), t_i désigne le poids associé à la direction i et c_s est la vitesse du son dans le réseau :

$$c_s = \left(\sum_i t_i (\vec{c}_i \cdot \vec{e}_x)^2 \right)^{1/2} \quad (2.22)$$

De plus, il est possible de relier le temps de relaxation à la viscosité d'un milieu dense ν par la relation suivante (cf Qian *et al.*, 1992) :

Tab. 2.1 – Expression des vecteurs de déplacement adimensionnés ($\vec{c}_i^* = \vec{c}_i / (\delta x / \delta t)$) pour le réseau D3Q18 dans l'ordre du schéma figure 2.3

$\vec{c}_1^* = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\vec{c}_2^* = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\vec{c}_3^* = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\vec{c}_4^* = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\vec{c}_5^* = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\vec{c}_6^* = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$
$\vec{c}_7^* = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\vec{c}_8^* = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\vec{c}_9^* = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\vec{c}_{10}^* = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\vec{c}_{11}^* = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\vec{c}_{12}^* = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$
$\vec{c}_{13}^* = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$	$\vec{c}_{14}^* = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$	$\vec{c}_{15}^* = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\vec{c}_{16}^* = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\vec{c}_{17}^* = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$	$\vec{c}_{18}^* = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

$$\nu = c_s^2 \left(\tau - \frac{\delta t}{2} \right) \quad (2.23)$$

L'opérateur BGK est très populaire car facile à implémenter. Il possède cependant l'inconvénient d'avoir des cas d'application limités car il est fortement susceptible d'entraîner des instabilités numériques. Au vu de l'expression du temps de relaxation (2.23), dans un milieu dense, la méthode de relaxation unique BGK ne s'applique que pour des gammes de Reynolds restreintes. Le recours à des méthodes de relaxation multiples (« multiple relaxation time », MRT) consiste à remplacer le facteur $1/\tau$ par une matrice de relaxation (cf [Lallemand et Luo, 2000](#) ; [d'Humières *et al.*, 2002](#)). Afin de garantir la conservation de la masse et de la quantité de mouvement, il faut s'assurer que l'on a :

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_i \Omega_i = 0 \\ \sum_i \Omega_i(N) \vec{c}_i = \vec{0} \end{array} \right. \quad (2.24)$$

2.2.3 Application à la résolution des équations de Navier-Stokes

Comme mentionné dans la partie 2.2.2, il est possible de résoudre les équations de Navier-Stokes à partir de l'équation discrétisée de Boltzmann sur réseau (« lattice Boltzmann equation », LBE) sous certaines hypothèses. Dans un premier temps, il faut satisfaire les contraintes de séparation d'échelles microscopiques et macroscopiques pour aboutir à une formulation statistique continue. On suppose de plus que l'on est proche de l'équilibre thermodynamique local et que le temps de diffusion est petit devant le temps d'advection (transport) de l'information d'un nœud à l'autre du réseau. C'est ce second point qui rend l'opérateur BGK inexploitable pour des écoulements à faible nombre de Reynolds (cf expression de la viscosité dans l'équation (2.23)). Ces hypothèses permettent d'effectuer un développement de Taylor combiné à l'expansion dite de Chapman-Enskog et d'obtenir un système d'équations indépendantes, de différents ordres. L'équation de conservation de la masse et de la quantité de mouvement sont obtenues respectivement par sommation d'une part (moment d'ordre 0 dans l'espace des vitesses, cf équations 2.13 à 2.15), et par multiplication par \vec{c}_i et sommation d'autre part (moment d'ordre 1). Ces calculs sont présentés de façon exhaustive par [Chen et Doolen \(1998\)](#).

Par la suite, la méthode LBM de [Eggels et Somers \(1995\)](#), implémentée dans le code de calcul de ce travail, est expliquée et partiellement démontrée. Dans cette méthode, l'opérateur de collision est modifié pour prendre en compte l'ajout d'une contrainte extérieure massique \vec{F}_m . L'équation de Boltzmann discrète (2.18) devient donc :

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} + \vec{c}_i \cdot \vec{\nabla}_x N_i = \underbrace{\Omega_i(N) - \vec{F}_m \cdot \vec{\nabla}_c N_i}_{\Omega_{i,E\&S}(N, \vec{F}_m)} \quad (2.25)$$

La première contrainte mentionnée dans (2.24) est conservée. En revanche, du fait de la présence du terme source \vec{F}_m , la deuxième devient :

$$\sum_i \Omega_{i,E\&S} \vec{c}_i = \vec{F}_m \delta t \quad (2.26)$$

Dans leur étude, Frisch *et al.* (1986) ont montré que l'équation (2.25) était équivalente à celles de Navier-Stokes si la distribution N_i^* tend vers un état d'équilibre

$$N_{i,eq}^* = t_i \rho^* \left[1 + 2 \vec{c}_i^* \cdot \vec{v}^* + 3 \left((\vec{c}_i^* \cdot \vec{v}^*)^2 - \frac{1}{2} \vec{v}^{*2} \right) - 6\nu^* \left(\vec{c}_i^* \cdot \vec{\nabla}_{x^*} (\vec{c}_i^* \cdot \vec{v}^*) - \frac{1}{2} \text{div}^* \vec{v}^* \right) + O(v^{*3}, v^* \nabla v^*) \right] \quad (2.27)$$

Les termes d'ordre élevé sont très petits étant donné que pour un milieu dense, on travaille à faible nombre de Mach, $v/c_s \ll 1$ avec c_s la vitesse du son. Cela justifie le fait que l'on peut négliger les termes d'ordres supérieurs à 2 dans l'expression de $N_{i,eq}^*$.

Les grandeurs suivies d'une astérisque (*) sont adimensionnées à l'aide de l'épaisseur de maille δx et du pas de temps δt . Le symbole t_i désigne le poids dans la direction i , qui dépend du nombre de fois où la direction \vec{c}_i apparaît si l'on projette le réseau dans les 3 plans principaux de normales respectives $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$. Ainsi, en se référant au schéma du réseau figure 2.3 et à l'ordre des vecteurs de déplacement fournis tableau 2.1, on a :

$$t_i = \begin{cases} \frac{1}{12} & \text{pour les directions 1 à 6} \\ \frac{1}{24} & \text{pour les directions 7 à 18} \end{cases} \quad (2.28)$$

Dans ce réseau, la vitesse du son c_s définie en (2.22) est la vitesse de propagation de l'information d'un nœud à l'autre, soit ici :

$$c_s = \left(\sum_{i=1}^{18} t_i (\vec{c}_i \cdot \vec{e}_x)^2 \right)^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\delta x}{\delta t} \quad (2.29)$$

La fonction de distribution à l'équilibre (2.27) vérifie bien les égalités de conservation (2.24). En utilisant les égalités

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^{18} t_i = 1 \\ \sum_{i=1}^{18} t_i c_{i\alpha}^* = 0 \quad \forall \alpha \in [1, 2, 3] \\ \sum_{i=1}^{18} t_i c_{i\alpha}^* c_{i\beta}^* = c_s^{*2} \vec{e}_\alpha \cdot \vec{e}_\beta \quad \forall (\alpha, \beta) \in [1, 2, 3]^2 \\ \sum_{i=1}^{18} t_i c_{i\alpha}^* c_{i\beta}^* c_{i\gamma}^* = 0 \quad \forall (\alpha, \beta, \gamma) \in [1, 2, 3]^3 \end{array} \right. \quad (2.30)$$

on obtient pour le moment d'ordre 0 sur N_i :

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=1}^{18} N_{i,eq}^* &= \rho^* \left[\sum_{i=1}^{18} t_i + v_\alpha^* \sum_{i=1}^{18} t_i c_{i\alpha}^* + 3v_\alpha^{*2} \sum_{i=1}^{18} t_i c_{i\alpha}^{*2} - \frac{3}{2} v_\alpha^* v_\alpha^* \sum_{i=1}^{18} t_i \right. \\
 &\quad \left. - 6\nu^* \left(\partial_\alpha^* v_\beta^* \sum_{i=1}^{18} t_i c_{i\alpha}^* c_{i\beta}^* - \frac{1}{2} \partial_\alpha^* v_\alpha^* \sum_{i=1}^{18} t_i \right) \right] \\
 &= \rho^* \left[1 + v_\alpha^* \times 0 + 3v_\alpha^* v_\alpha^* \left(\frac{1}{2} \right) - \frac{3}{2} v_\alpha^* v_\alpha^* - 6\nu^* \left(\frac{1}{2} \partial_\alpha^* v_\alpha^* - \frac{1}{2} \partial_\alpha^* v_\alpha^* \right) \right] \\
 &= \rho^*
 \end{aligned}$$

On a utilisé la convention d'Einstein pour alléger la notation où l'on fait déjà appel aux sommes portant sur les directions i . En ce qui concerne le moment d'ordre 1, toujours en se servant de (2.30), on obtient :

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=1}^{18} N_{i,eq}^* c_{i\alpha}^* &= \rho^* \left[\sum_{i=1}^{18} t_i c_{i\alpha}^* + v_\beta^* \sum_{i=1}^{18} t_i c_{i\beta}^* c_{i\alpha}^* + 3v_\beta^{*2} \sum_{i=1}^{18} t_i c_{i\beta}^{*2} c_{i\alpha}^* - \frac{3}{2} v_\beta^* v_\beta^* \sum_{i=1}^{18} t_i c_{i\alpha}^* \right. \\
 &\quad \left. - 6\nu^* \left(\partial_\beta^* v_\gamma^* \sum_{i=1}^{18} t_i c_{i\beta}^* c_{i\gamma}^* c_{i\alpha}^* - \frac{1}{2} \partial_\beta^* v_\beta^* \sum_{i=1}^{18} t_i c_{i\alpha}^* \right) \right] \\
 &= \rho^* \left[0 + v_\beta^* \vec{e}_\alpha \cdot \vec{e}_\beta + 3v_\beta^* v_\beta^* \times 0 - \frac{3}{2} v_\beta^* v_\beta^* \times 0 - 6\nu^* (0 - 0) \right] \\
 &= \rho^* v_\alpha^*
 \end{aligned}$$

soit

$$\sum_i N_{i,eq}^* \vec{c}_i^* = \rho^* \vec{v}^*$$

Les moments d'ordre 2 en $N_{i,eq}^*$ sont obtenus de façon similaire à ceux d'ordres 0 et 1. Le calcul ne sera toutefois pas développé dans ce rapport, seul le résultat est donné ci-après :

$$\sum_{i=1}^{18} N_{i,eq}^* \vec{c}_i^* \otimes \vec{c}_i^* = \frac{1}{2} \rho^* \left(1 - \frac{1}{2} \vec{v}^{*2} \right) \bar{\mathbf{I}} - \rho^* \nu^* \left(\overline{\nabla}_{x^*} \vec{v}^* + \overline{\nabla}_{x^*} \vec{v}^{*T} \right) + \rho^* \vec{v}^* \otimes \vec{v}^* + \frac{1}{2} \rho^* \nu^* \left(\text{div}_{x^*} \vec{v}^* \right) \bar{\mathbf{I}} \quad (2.31)$$

L'équation de Navier-Stokes incompressible portant sur la quantité de mouvement vérifie :

$$\frac{\partial \rho^* \vec{v}^*}{\partial t^*} = -\overline{\nabla}_{x^*} \cdot \left(\rho^* \vec{v}^* \otimes \vec{v}^* + P^* \bar{\mathbf{I}} - \rho^* \nu^* \left(\overline{\nabla}_{x^*} \vec{v}^* + \overline{\nabla}_{x^*} \vec{v}^{*T} \right) \right) \quad (2.32)$$

où la grandeur P désigne la pression. On en déduit que le moment d'ordre 2 en $N_{i,eq}^*$ doit vérifier :

$$\sum_{i=1}^{18} N_{i,eq}^* \vec{c}_i^* \otimes \vec{c}_i^* = P^* \bar{\mathbf{I}} - \rho^* \nu^* \left(\overline{\nabla}_{x^*} \vec{v}^* + \overline{\nabla}_{x^*} \vec{v}^{*T} \right) + \rho^* \vec{v}^* \otimes \vec{v}^* \quad (2.33)$$

Par identification entre (2.31) et (2.33), en supposant que l'on a $\text{div} \vec{v}^* \simeq 0$, la pression dans la méthode

de [Eggels et Somers \(1995\)](#) est définie par l'équation d'état suivante :

$$P^* = \frac{1}{2}\rho^* \left(1 - \frac{1}{2}\vec{v}^{*2}\right) \quad (2.34)$$

On voit là un avantage conséquent de la méthode de Boltzmann sur réseau : la pression n'est qu'une équation d'état, alors que si l'on travaillait directement à partir des équations de Navier-Stokes, on aurait une équation de Poisson à résoudre (avec des contraintes portant sur le champ de vitesse comme terme source). Résoudre cette équation de Poisson numériquement n'est pas évident, et requiert des méthodes de calculs coûteuses en temps. À l'inverse, comme la pression n'est pas résolue directement, le champ P^* n'est pas toujours bien estimé dans les simulations LBM et l'incompressibilité de l'écoulement n'est assurée qu'au prix de contraintes fortes sur le pas de temps ($v\delta t/\delta x \ll 1$).

Le développement qui suit concerne la recherche d'un opérateur de collision susceptible de convenir. Pour cela, un développement de Taylor de la fonction de distribution discrétisée est d'abord effectué à l'ordre 1, en réinjectant l'expression de la distribution en (2.27) et en négligeant les termes de la forme $\vec{v}^* \cdot \vec{\nabla}_{x^*} \rho^*$, petits dans le cas de l'équation de Navier-Stokes faiblement compressible :

$$\begin{aligned} N_i^*(\vec{x}^* + \vec{c}_i^*, t^* + 1) &\simeq N_i^*(\vec{x}^*, t^*) + \vec{c}_i^* \cdot \vec{\nabla}_{x^*} N_i^*(\vec{x}^*, t^*) + \frac{\partial N_i^*(\vec{x}^*, t^*)}{\partial t^*} \\ &\simeq N_i^*(\vec{x}^*, t^*) + \frac{t_i}{2} \vec{c}_i^* \cdot \vec{\nabla}_{x^*} \rho^* + t_i \rho^* \vec{c}_i^* \cdot \vec{\nabla}_{x^*} (\vec{c}_i^* \cdot \vec{v}^*) + \frac{t_i}{2} \frac{\partial \rho^*}{\partial t^*} \\ &\quad + t_i \vec{c}_i^* \cdot \frac{\partial (\rho^* \vec{v}^*)}{\partial t^*} \end{aligned} \quad (2.35)$$

Sachant que $\partial_{t^*} \rho^* \simeq -\rho^* \text{div}_{x^*} \vec{v}^*$ et $\partial_{t^*} (\rho^* \vec{v}^*) \simeq -\frac{1}{2} \vec{\nabla}_{x^*} \rho^* + \vec{F}_m^*$ d'après [Somers \(1993\)](#), l'opérateur de collision peut être défini comme suit, par identification avec la relation (2.35) :

$$\Omega_i^*(N, \vec{F}_m^*) = 2t_i \left[\vec{c}_i^* \cdot \vec{\nabla}_{x^*} (\vec{c}_i^* \cdot \vec{v}^*) - \frac{1}{2} \text{div}_{x^*} \vec{v}^* \right] + 2t_i \vec{c}_i^* \cdot \vec{F}_m^* \quad (2.36)$$

Au vu des relations (2.27) et (2.28), il est possible de créer une matrice de passage E_{ik} permettant de passer de l'espace des champs de masse volumique et de quantité de mouvement que l'on notera α_i à l'espace des distributions N_i , telle que :

$$\alpha_i = \sum_{k=1}^{18} E_{ik} N_k^* \quad (2.37)$$

Seuls les termes physiques présentent un intérêt ici, soit les moments d'ordre 0 (masse), 1 (quantité de mouvement) et 2 (énergie) ayant respectivement 1, 3 et 6 composantes en dimension 3. En effet, l'équation de continuité est scalaire, celle sur la quantité de mouvement est à 3 dimensions (vectorielle), et l'énergie est régie par une loi de comportement d'un fluide newtonien fonction du tenseur des taux de déformation (tenseur symétrique à 6 composantes en 3 dimensions). De ce fait, le champ α comporte dix composantes physiques auxquelles s'ajoutent des termes d'ordre plus élevés (notés T et U) pour que α ait autant de composantes que N . Les composantes de ce vecteur peuvent s'arranger comme suit ([Eggels et Somers, 1995](#)) :

$$\alpha = \begin{pmatrix} \rho^* \\ \rho^* \vec{v}^* \\ \rho^* [\vec{v}^* \otimes \vec{v}^* - \nu^* (\overline{\nabla}_{x^*} \vec{v}^* + \overline{\nabla}_{x^*}^T \vec{v}^*)] \\ T, U \text{ (termes d'ordre élevé)} \end{pmatrix} \quad (2.38)$$

Les colonnes de la matrice E_{ik} ont alors pour expression :

$$[E_i]^T = [1, c_{ix}^*, c_{iy}^*, c_{iz}^*, 2c_{ix}^{*2} + c_{iy}^{*2} + c_{iz}^* - 2, c_{ix}^* c_{iy}^*, 2c_{iy}^{*2} + c_{ix}^{*2} + c_{iz}^{*2} - 2, c_{ix}^* c_{iz}^*, c_{iy}^* c_{iz}^*, 2c_{iz}^{*2} + c_{ix}^{*2} + c_{iy}^{*2} - 2, c_{ix}^* (3c_{iy}^{*2} - 1), c_{iy}^* (3c_{ix}^{*2} - 1), 3c_{ix}^* (2c_{iz}^{*2} + c_{iy}^{*2} - 1), 3c_{iy}^* (2c_{iz}^{*2} + c_{ix}^{*2} - 1), c_{iz}^* (3c_{ix}^{*2} + c_{iy}^{*2} - 2), 3c_{iz}^* (c_{iy}^{*2} - c_{ix}^{*2}), 3(c_{ix}^{*2} - c_{iy}^{*2})^2 - 2, (c_{ix}^{*2} - c_{iy}^{*2})(1 - 2c_{iz}^{*2})] \quad (2.39)$$

La matrice complète, ainsi que son inverse, sont exprimées en annexe D.

Le vecteur α est mis à jour en appliquant l'opérateur de collision. D'après les équations (2.19) et (2.37), en notant α_i la composante i , la relation suivante est obtenue :

$$\alpha_i \left(t + \frac{\delta t}{2} \right) - \alpha_i \left(t - \frac{\delta t}{2} \right) = E_{ik} \Omega_k(N, \vec{\mathbf{F}}_m^*) \quad (2.40)$$

Par la suite, on notera avec un exposant $+$ les termes post-collision et avec un exposant $-$ les termes de pré-collision, soit par exemple, pour une collision à l'instant t :

$$\begin{cases} \alpha^+ = \alpha \left(t + \frac{\delta t}{2} \right) \\ \alpha^- = \alpha \left(t - \frac{\delta t}{2} \right) \end{cases}$$

En reprenant les notations de l'expression complète de α fournie en annexe D (expression D.4), les termes non hydrodynamiques sont d'ordre 3 et 4 et sont notés T et U respectivement. Ceux d'ordre 3 sont relaxés en imposant $T^+ = -0,8 T^-$. Les termes d'ordre 4 ne sont pas pris en compte, ce qui se traduit par l'annulation des 2 dernières composantes de α :

$$\alpha_{17} = \alpha_{18} = 0 \quad (2.41)$$

On comprend l'intérêt de passer de l'espace des distributions aux modes hydrodynamiques : d'une part, il est plus facile d'initialiser le champ de distribution en utilisant les champs physiques ($\rho, \rho \vec{v}, \rho \vec{v} \otimes \vec{v}, \overline{\nabla} \vec{v}$). D'autre part, il est possible d'enrichir la physique de l'opération de collision à partir des propriétés d'écoulement pour y ajouter par exemple un modèle de turbulence de type LES (« Large Eddy Simulation », cf Eggels et Somers, 1995) ou un couplage multiphasique (Sungkorn et Derksen, 2012). De plus, comme les modes physiques sont relaxés avec des coefficients appropriés, cet opérateur ne souffre pas de limitation aussi forte que l'opérateur de BGK sur sa gamme de validité. Ceci explique les raisons pour laquelle l'opérateur de Eggels et Somers (1995) a été choisi dans ce travail.

Par application des formules (2.36) à (2.40), il est possible de prouver que les vecteurs α_k^+ et α_k^- sont

reliés par une relation non linéaire. Leur expression est fournie annexe D.

Avec ce qui précède, la résolution d'un écoulement de fluide dense par la méthode de Boltzmann sur réseau s'effectue donc grâce aux étapes suivantes, entre un instant t^* et $t^* + 1$:

1. processus de « streaming » : $N_i^*(\vec{\mathbf{x}}^*, t^* + 1) = N_i^*(\vec{\mathbf{x}}^* - \vec{\mathbf{c}}_i^*, t^*)$,
2. calcul des modes hydrodynamiques (vecteur α_k^-) par inversion de la formule (2.37),
3. mise à jour de ces modes,
4. calcul des distributions après ce procédé par application de la formule (2.37).

Afin d'assurer le couplage entre la phase solide résolue par suivi lagrangien et la phase liquide résolue par LBM, la méthode de frontière immergée a été retenue. Elle permet de traduire la présence de particules par le biais d'un terme de couplage injecté dans le terme source ($\vec{\mathbf{F}}_m$).

2.3 Couplage fluide-solide : méthode de frontière immergée

Les méthodes de frontières immergées sont des méthodes numériques qui consistent à effectuer le couplage d'une surface, mobile ou non, avec le fluide environnant en discrétisant la surface en un ensemble de points marqueurs de surface. Historiquement, elle a été utilisée pour la première fois par [Peskin \(1977\)](#), qui a étudié la circulation sanguine dans des veines à proximité du cœur en utilisant une frontière immergée mobile.

Étant donné que l'écoulement est résolu par une méthode de Boltzmann sur réseau, il s'agit d'adapter cette méthode en traduisant les conditions limites que l'on souhaite appliquer en terme de distributions. Certains auteurs ont eu recours à une méthode de pénalisation en calculant une force de restitution de type rappel par l'intermédiaire d'un coefficient d'élasticité, se référer par exemple à [Feng et Michaelides \(2004\)](#). Pour des solides indéformables, le choix de ce coefficient n'est pas forcément évident et est susceptible d'altérer l'efficacité et la précision de calcul. C'est pourquoi le calcul du forçage est basé ici sur le principe d'échange de quantité de mouvements à la surface du solide décrit et utilisé par [Niu et al. \(2006\)](#). Ces derniers ont validé cette méthode d'une part par simulation d'un écoulement stationnaire autour d'un cylindre et par calcul de la force de traînée d'autre part. Ils ont également exploité cette méthode en déterminant la trajectoire d'une particule immergée dans un écoulement cisailé plan, avec des résultats satisfaisants. Si l'on souhaite appliquer une condition d'adhérence aux parois, les distributions de Boltzmann évaluées à la surface du solide doivent correspondre à une quantité de mouvement nulle dans le repère du solide. C'est cette condition qui a été implémentée pour l'ensemble de ce travail. Ainsi, la suite de cette partie traitera premièrement la façon dont sont représentés les solides. Ensuite sera décrite la façon dont les conditions limites d'adhérence sont assurées en ayant recours à des conditions de type « rebond » (« bounceback ») pour les distributions. Enfin, le calcul des fonctions de distribution à la surface des solides sera détaillé.

2.3.1 Représentation des solides

Afin de garantir une bonne efficacité de la méthode de la frontière immergée, les particules sont représentées à l'aide de marqueurs à leur surface, suffisamment nombreux pour se rapprocher le mieux possible de la forme souhaitée. Un pavage de Voronoi assure la bonne représentation et répartition des éléments de surface (poids w) associés aux marqueurs. Ainsi, un solide peut être représenté par une surface fermée. Ces marqueurs étant liés au mouvement de la frontière, le maillage est dit « lagrangien » par opposition au réseau « eulérien » de la phase fluide.

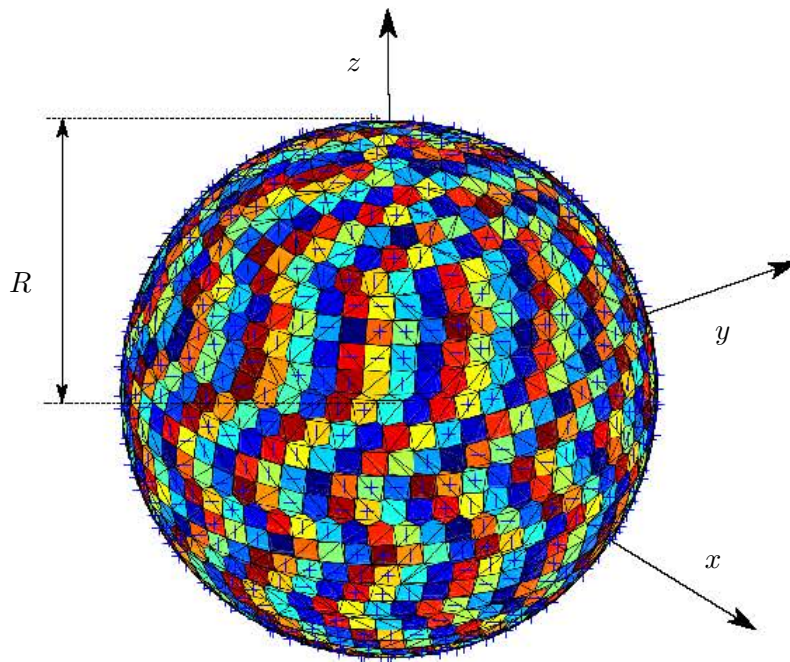


Fig. 2.4 – Représentation d’une surface sphérique à l’aide de marqueurs caractérisés par leur position et leur poids (éléments de surface représentés par les couleurs).

Pour rappel, ce travail n’a porté que sur des solides de forme sphérique ou ellipsoïdale. Dans ce dernier cas, les marqueurs utilisés sont identiques à ceux auquel le code a eu recours pour la détection de collision, décrite dans la section 2.1.1. Chaque marqueur i est caractérisé par sa position par rapport au centre de masse de l’objet ainsi que sa surface élémentaire w_i (cf équation (2.9) pour les ellipsoïdes). Pour une sphère de rayon R , une représentation du maillage lagrangien associé est donnée figure 2.4. Les marqueurs $i \in [1, N]$, de position (x_i, y_i, z_i) et de surface w_i doivent vérifier :

$$\left\{ \begin{array}{l} x_i^2 + y_i^2 + z_i^2 \simeq R^2 \\ \sum_{i=1}^N w_i \simeq 4\pi R^2 \\ w_i \simeq \frac{4\pi R^2}{N} \end{array} \right. \quad (2.42)$$

Dans ce travail, les sphères ont été décrites par 1302 marqueurs qui vérifient au mieux les relations données par l’équation (2.42), sachant qu’il est impossible de distribuer des points de façon parfaitement homogène à la surface d’une sphère.

C’est à chaque point de ces marqueurs qu’est calculé le forçage, avant d’être distribué sur chaque nœud voisin du réseau LBM. Les étapes de ce calcul sont décrites dans la section suivante.

2.3.2 Échanges de quantité de mouvement entre phases

Dans cette partie, toutes les grandeurs sont adimensionnées de façon similaire à celles utilisées tout au long de la section 2.2. Pour alléger les notations, les astérisques sont omis.

Les distributions de Boltzmann à la position de chaque marqueur peuvent être interpolées à partir de celles, connues, aux nœuds voisins dans la phase eulérienne. Finalement, en chaque marqueur (M) positionné en \vec{x}_M , la distribution N_M est estimée telle que :

$$N_M(\vec{x}_M, t) = \sum_{\vec{x}} \Delta(\vec{x} - \vec{x}_M) N(\vec{x}, t), \quad (2.43)$$

avec \vec{x} la position des nœuds du réseau et Δ une fonction d'interpolation.

Afin de mieux comprendre la façon dont la condition d'adhérence peut être traduite en terme de distribution, il peut être intéressant, en premier lieu, de regarder une surface immergée immobile à l'instant t par rapport au réseau LBM eulérien. Si l'on souhaite une condition limite d'adhérence, la quantité de matière arrivant sur le point d'un marqueur doit être compensée par une même quantité de matière sortant de ce dernier dans la direction opposée. Ceci peut être assuré par une condition de type rebond (« bounce-back »). Cette condition peut s'exprimer comme un flux de matière nul, soit un équilibre des distributions de Boltzmann à travers la paroi. Une manière d'imposer cette condition est donc d'opposer à chaque distribution qui arrive sur la paroi, une distribution identique dans la direction opposée. En notant N_M^{\sim} la fonction de distribution après application de cette condition, cela implique, quel que soit l'indice i d'une direction donnée :

$$N_M^{\sim}(\vec{c}_i) = N_M(-\vec{c}_i) \quad (2.44)$$

Une illustration est fournie figure 2.5 dans le cas d'un réseau 2D ayant 8 directions (« 2DQ8 »), où les distributions discrétisées à l'instant t et selon la direction \vec{c}_i sont notées N_{Mi} . Afin de mettre en évidence la notion de rebond, les distributions N_i avant l'application de cette condition sont également représentées en traits fins.

Pour que la vitesse de la frontière immergée soit imposée nulle, il faut appliquer le forçage adéquat

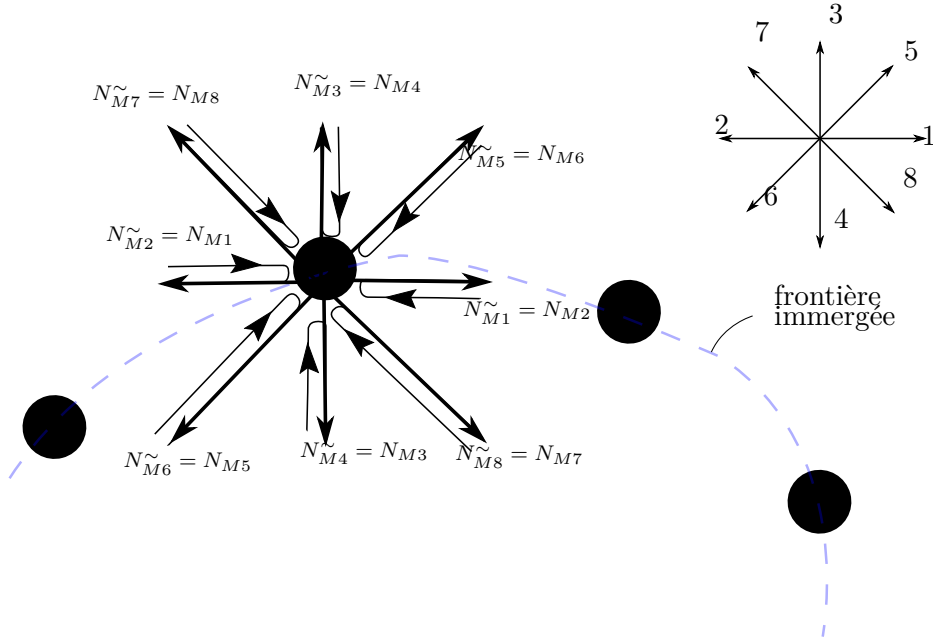


Fig. 2.5 – Condition limite de non-glissement caractérisé par un rebond en terme de distribution pour un réseau de type D2Q8. Les points noirs représentent le centre des marqueurs.

correspondant à la condition limite de type rebond, qui implique une variation de quantité de mouvement $\delta\rho\vec{\mathbf{v}}_M$. À partir de l'équation (2.44), cette variation s'écrit :

$$\begin{aligned}\delta\rho\vec{\mathbf{v}}_M &= \sum_i \vec{\mathbf{c}}_i \delta N_{Mi} \\ &= \sum_i \vec{\mathbf{c}}_i (N_{Mi}^{\sim} - N_{Mi}) \\ &= \vec{\mathbf{c}}_i (N_M(-\vec{\mathbf{c}}_i) - N_M(\vec{\mathbf{c}}_i))\end{aligned}\tag{2.45}$$

En se servant de l'équation (2.45), la force à imposer en chaque marqueur en un pas de temps est alors :

$$\begin{aligned}\vec{\mathbf{F}}_M(\vec{\mathbf{x}}_M) &= -\delta\rho\vec{\mathbf{v}}_M \\ &= \sum_i 2\vec{\mathbf{c}}_i N_M(\vec{\mathbf{c}}_i)\end{aligned}\tag{2.46}$$

Dans le cas d'une frontière en mouvement, il faut alors y ajouter la variation de quantité de mouvement pour passer d'une vitesse nulle à celle du solide. Pour exprimer cette quantité de mouvement en terme de distribution, il est possible de recourir au vecteur des moments α (2.38), relié à la fonction de distribution discrétisée à l'aide de la matrice de passage E_{ij} définie équation (2.39). En notant α_M le vecteur α exprimé à la position du marqueur M à l'instant t , alors ce dernier a pour forme :

$$[\alpha_M]^T = [0, \rho v_{xM}, \rho v_{yM}, \rho v_{zM}, 0, \dots, 0]\tag{2.47}$$

Connaissant la vitesse du centre de masse du solide $\vec{\mathbf{v}}_p$, ainsi que sa vitesse instantanée de rotation $\vec{\boldsymbol{\omega}}_p$, la vitesse de chaque marqueur est simplement calculée à l'aide de la loi de composition des vitesses :

$$\vec{\mathbf{v}}_M = \vec{\mathbf{v}}_p + \vec{\boldsymbol{\omega}}_p \wedge (\vec{\mathbf{x}}_M - \vec{\mathbf{x}}_p)$$

Le calcul de la position des marqueurs par rapport au centre de masse s'effectue à l'aide de l'orientation de la particule, se reporter à l'annexe C pour plus de détails.

Finalement, par extension du cas d'une frontière immobile, le forçage total à imposer en chaque marqueur pour passer d'une quantité de mouvement nulle à celle du solide est le suivant, en notant $(-i)$ la direction opposée à celle indiquée i ($\vec{\mathbf{c}}_{(-i)} = -\vec{\mathbf{c}}_i$) :

$$\begin{aligned}\vec{\mathbf{F}}_M(\vec{\mathbf{x}}_M, t+1) &= \sum_{i=1}^{18} \vec{\mathbf{c}}_i \underbrace{\left(N_{M,i}(\vec{\mathbf{x}}_M, t+1) - N_{M,(-i)}(\vec{\mathbf{x}}_M, t+1) \right)}_{\text{« rebond »}} \\ &\quad + \underbrace{\left(\sum_{k=1}^{18} [E_{ik}]^{-1} \alpha_{k,M} \right)_i - \left(\sum_{k=1}^{18} [E_{ik}]^{-1} \alpha_{k,M} \right)_{(-i)}}_{\text{solide en mouvement}},\end{aligned}\tag{2.48}$$

Le calcul de la résultante de ces forces et des couples associés, notés respectivement $\vec{\mathbf{F}}_{tot}$ et $\vec{\mathbf{T}}_{tot}$, permettent de prendre en compte les interactions hydrodynamiques dans le suivi lagrangien des particules, en mettant à jour les actions extérieures des équations de la dynamique (2.1). Ces résultantes se calculent à partir des forces élémentaires sur chaque marqueur de surface :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{\mathbf{F}}_{tot} = \sum_M w_M \vec{\mathbf{F}}_M \\ \vec{\mathbf{T}}_{tot} = \sum_M w_M (\vec{\mathbf{x}}_M - \vec{\mathbf{x}}_p) \wedge \vec{\mathbf{F}}_M \end{array} \right. \quad (2.49)$$

Le forçage calculé à partir de l'équation (2.48) est redistribué à chaque nœud fluide à l'aide de fonctions de distributions qui ont été choisies identiques aux fonctions d'interpolation de la distribution aux positions des marqueurs (2.43), pour des raisons de performance des simulations :

$$\vec{\mathbf{F}}_m(\vec{\mathbf{x}}, t) = \sum_M \Delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_M) \vec{\mathbf{F}}_M \quad (2.50)$$

Comme fonctions d'interpolation des distributions (2.43) et de distribution des forces (2.50), une approximation discrète de la fonction de Dirac a été utilisée. (Peskin, 2002). Dans le cadre de ce travail, cette fonction s'étend sur trois nœuds dans les trois directions x, y, z . Dans ce cas, elle vérifie $\Delta(x, y, z) = \Delta(x)\Delta(y)\Delta(z)$ avec :

$$\Delta(r) = \begin{cases} \frac{1}{3}(1 + \sqrt{-3r^2 + 1}) & \text{pour } |r| \leq 0,5, \\ \frac{1}{6}(5 - 3|r| - \sqrt{-3(1 - |r|)^2 + 1}) & \text{pour } 0,5 \leq |r| \leq 1,5, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.51)$$

On vérifie facilement que la somme de Δ sur les nœuds, ainsi que l'aire sous la courbe, valent 1.

Dans la pratique, un coefficient de relaxation $\kappa < 1$ est introduit pour le forçage de tous les points M de la surface. Dans le cadre de ce travail, les valeurs de ce coefficient ont été typiquement prises égales à $1/20^{\text{ème}}$. L'équation (2.48) est mise à jour comme suit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{\mathbf{F}}_M(t+1) \leftarrow \kappa \vec{\mathbf{F}}_M(t+1) + (1 - \kappa) \vec{\mathbf{F}}_M(t) \\ \vec{\mathbf{F}}_M(0) = \vec{\mathbf{0}} \end{array} \right. \quad (2.52)$$

Les étapes de calcul du forçage des nœuds fluides du fait de la présence de la surface solide sont résumées ci-dessous :

- Interpolation des distributions en chaque marqueur à partir de (2.43) ,
- Calcul des d'interaction entre les phases liquide et solide en chaque marqueur par application des formules (2.48) et (2.52) ,
- Distribution sur les nœuds du réseau LBM d'après la formule (2.50).

Afin d'avoir une vue d'ensemble de la manière dont ces différentes méthodes sont employées pour la résolution de l'écoulement fluide et le mouvement des solides immergés, l'algorithme correspondant est schématisé figure 2.6. Les critères d'arrêts utilisés sont détaillés dans les chapitres 3 et 4.

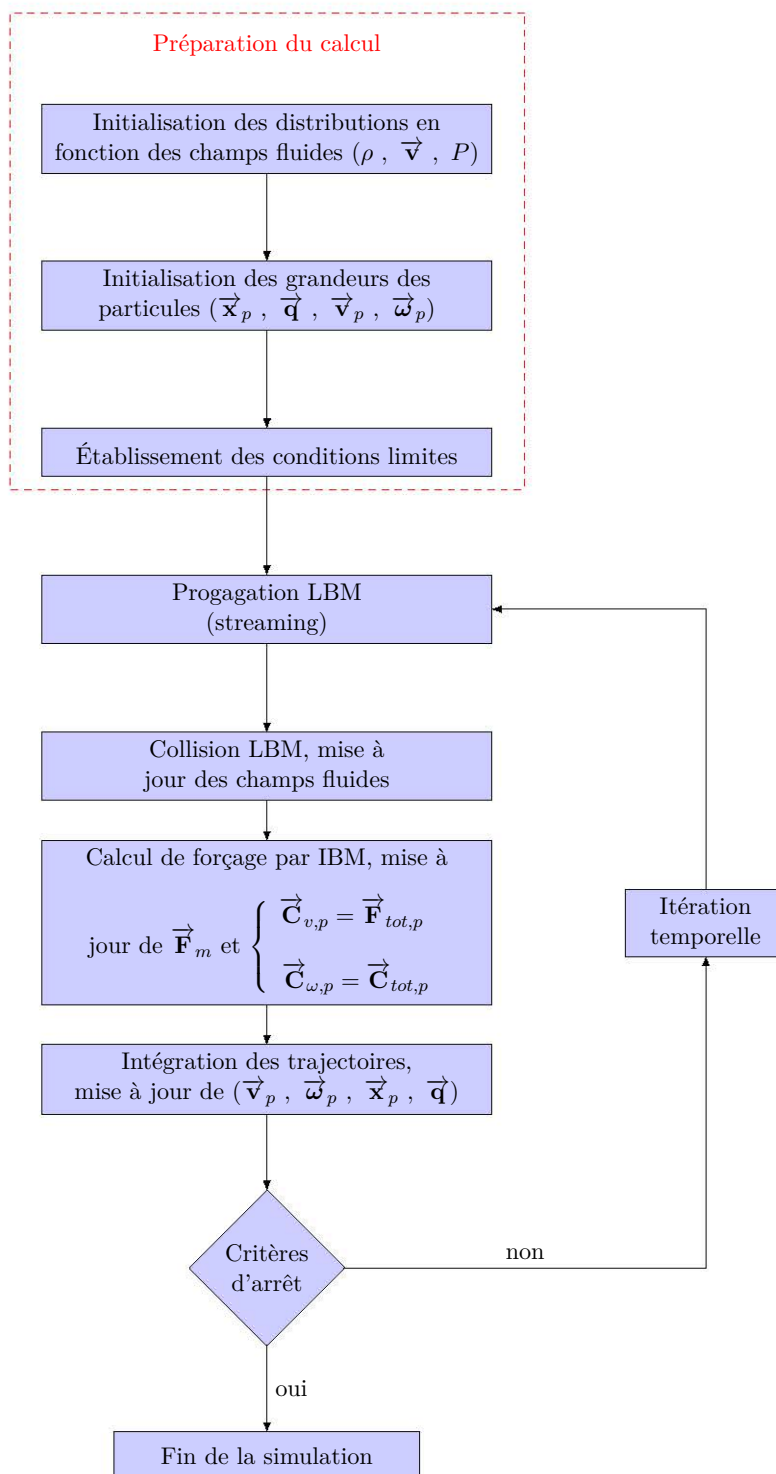


Fig. 2.6 – Diagramme générique de l'algorithme utilisé dans ce travail.

Chapitre 3

Dynamique d'une particule de forme globulaire dans un écoulement

Ce chapitre a pour but d'étudier le comportement d'un objet solide immergé dans un fluide dans des conditions de faible Reynolds. L'écoulement est perturbé par la présence du solide. Le régime correspondant à un Reynolds nul, appelé régime de Stokes, est linéaire. Il est alors possible de retrouver analytiquement le champ de vitesse dans le fluide par superposition de différents écoulements.

3.1 Validation dynamique des solveurs et comparaisons à des solutions analytiques

Afin de vérifier que les méthodes numériques évoquées précédemment sont valides, le comportement de particules isolées centrées dans un volume de fluide au repos et soumises à un couple permanent constant est simulé dans les conditions proches de Stokes. Ces étapes permettent d'évaluer la qualité de la résolution numérique des particules, et d'estimer la taille du domaine nécessaire pour éviter le phénomène de confinement.

3.1.1 Réponse à un couple constant extérieur imposé : étude théorique

Dans un premier temps, des résultats théoriques sont présentés ici, d'abord pour le cas des ellipsoïdes, puis des sphères. Seuls le couple constant extérieur imposé et le couple résistant du fluide s'appliquent sur les objets solides.

Cas de l'ellipsoïde

Les composantes du couple extérieur exprimées dans la base liée à l'ellipsoïde sont notées Γ'_{px} , Γ'_{py} et Γ'_{pz} . En régime permanent, ce couple égalise le couple résistant fluide, proportionnel à la vitesse de rotation et dépendant de la viscosité dynamique μ ainsi que des paramètres géométriques a , b et c . En reprenant les équations dans le cas général établies par [Jeffery \(1922\)](#), en régime permanent, on montre que les composantes des couples et des vitesses de rotation ω'_{px} , ω'_{py} et ω'_{pz} sont liées par :

$$\begin{cases} \Gamma'_{px} = \frac{16\pi\mu(b^2 + c^2)}{3(b^2\beta + c^2\gamma)}\omega'_{px} \\ \Gamma'_{py} = \frac{16\pi\mu(c^2 + a^2)}{3(c^2\gamma + a^2\alpha)}\omega'_{py} \\ \Gamma'_{pz} = \frac{16\pi\mu(a^2 + b^2)}{3(a^2\alpha + b^2\beta)}\omega'_{pz} \end{cases} \quad (3.1)$$

où

$$\begin{cases} \alpha = \int_0^\infty \frac{d\lambda}{(a^2 + \lambda)\Delta} \\ \beta = \int_0^\infty \frac{d\lambda}{(b^2 + \lambda)\Delta} \\ \gamma = \int_0^\infty \frac{d\lambda}{(c^2 + \lambda)\Delta} \end{cases}, \quad \Delta = \sqrt{(a^2 + \lambda)(b^2 + \lambda)(c^2 + \lambda)} \quad (3.2)$$

Les grandeurs α, β, γ définies en (3.2) sont homogènes à une densité volumique (m^{-3}).

Si l'on note I'_{px}, I'_{py} et I'_{pz} les composantes principales du tenseur d'inertie dans la base liée à la particule, alors

$$\begin{cases} I'_{px} = \frac{4\pi}{15}\rho_p abc(b^2 + c^2) \\ I'_{py} = \frac{4\pi}{15}\rho_p abc(a^2 + c^2) \\ I'_{pz} = \frac{4\pi}{15}\rho_p abc(a^2 + b^2) \end{cases} \quad (3.3)$$

L'évolution de la vitesse de rotation de la particule vérifie le principe fondamental de la dynamique, qui s'écrit, en utilisant les expressions (3.1) et (3.3) :

$$\begin{cases} \frac{4\pi}{15}\rho_p abc(b^2 + c^2)\frac{d\omega'_{px}}{dt} = \Gamma'_{px} - \frac{16\pi\mu(b^2 + c^2)}{3(b^2\beta + c^2\gamma)}\omega'_{px} \\ \frac{4\pi}{15}\rho_p abc(a^2 + c^2)\frac{d\omega'_{py}}{dt} = \Gamma'_{py} - \frac{16\pi\mu(c^2 + a^2)}{3(c^2\gamma + a^2\alpha)}\omega'_{py} \\ \frac{4\pi}{15}\rho_p abc(a^2 + b^2)\frac{d\omega'_{pz}}{dt} = \Gamma'_{pz} - \frac{16\pi\mu(a^2 + b^2)}{3(a^2\alpha + b^2\beta)}\omega'_{pz} \end{cases}, \quad \vec{\omega}'_p(t=0) = \vec{0}. \quad (3.4)$$

La résolution de (3.4) donne

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega'_{px}(t) = \frac{\Gamma'_{px}}{\frac{\pi}{15}\rho_p abc(b^2 + c^2)} \left(1 - \exp\left(-\frac{20\mu t}{\rho_p abc(b^2\beta + c^2\gamma)}\right)\right) \\ \omega'_{py}(t) = \frac{\Gamma'_{py}}{\frac{\pi}{15}\rho_p abc(a^2 + c^2)} \left(1 - \exp\left(-\frac{20\mu t}{\rho_p abc(a^2\alpha + c^2\gamma)}\right)\right) \\ \omega'_{pz}(t) = \frac{\Gamma'_{pz}}{\frac{\pi}{15}\rho_p abc(b^2 + a^2)} \left(1 - \exp\left(-\frac{20\mu t}{\rho_p abc(b^2\beta + a^2\alpha)}\right)\right) \end{array} \right. \quad (3.5)$$

Cas de la sphère

Pour des raisons évidentes de symétrie, la sphère tournera dans le sens imposé par le couple et l'étude peut s'effectuer directement dans le repère orthonormé fixe dont l'un des axes est colinéaire au couple. De ce fait, les développements qui suivent peuvent être effectués directement dans le repère fixe. À partir de l'équation de Stokes intégrée, le couple constant Γ , en régime permanent, égalise le couple résistant fluide, soit :

$$\Gamma = \pi\mu d_p^3 \omega_p(t_\infty) \quad (3.6)$$

L'équation fondamentale de la dynamique projetée sur l'axe de rotation donne

$$I_p \frac{d\omega_p}{dt} = \Gamma - \pi\mu d_p^3 \omega_p \quad (3.7)$$

avec I_p l'inertie de la sphère,

$$I_p = \frac{\pi}{60} \rho_p d_p^5 . \quad (3.8)$$

Ainsi, et en utilisant (3.6) :

$$\omega_p = \frac{\Gamma}{\pi\mu d_p^3} \left(1 - \exp\left(-\frac{60\mu t}{\rho_p d_p^2}\right)\right) \quad (3.9)$$

En régime permanent, l'expression analytique du champ de vitesse dans le fluide induit par le couple est fournie par exemple par [Lomholt et Maxey \(2003\)](#). En se plaçant dans un repère fixe de sorte que le couple $\vec{\Gamma} = \Gamma \vec{e}_y$, il vient

$$\vec{v}_f = \frac{\Gamma}{8\pi\mu r^3} (x\vec{e}_z - z\vec{e}_x) \quad , \quad r^2 = x^2 + y^2 + z^2 \geq d_p^2/4 \quad (3.10)$$

Les isocontours et les lignes de courant de ce champs dans le plan traversant la sphère en son centre et normal à la direction du couple imposé sont des cercles concentriques. Une représentation est fournie figure 3.1, où la vitesse est normalisée par la vitesse maximale atteinte, soit $\frac{\Gamma}{2\pi\mu d_p^2}$ d'après (3.6).

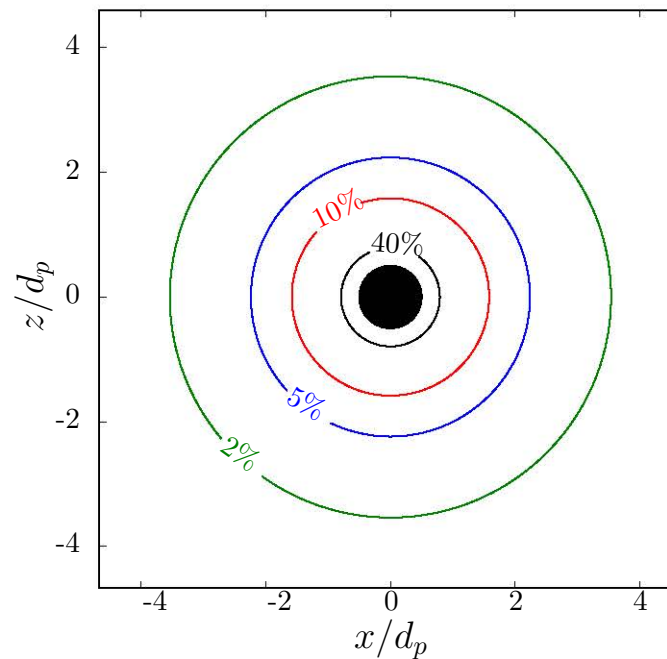


Fig. 3.1 – Isocontours du champ de vitesse adimensionné $\left(\frac{2\pi\mu d_p^2}{\Gamma} \vec{\nabla}_f\right)$ dans le plan xOz pour un couple Γ appliqué à la sphère suivant l'axe y .

3.1.2 Résultats numériques et comparaison

Maintenant que la théorie a été développée, les résultats issus de simulations numériques sont présentés, d'abord pour le cas d'ellipsoïdes, puis pour celui de sphères. L'écoulement est initialement au repos, de même que la particule. Une condition limite de périodicité est imposée sur tous les bords du domaine. Ce dernier est supposé suffisamment grand pour considérer que la particule est isolée. Une étude préalable a montré que les résultats sur la vitesse de rotation restaient invariants dès lors que la taille du domaine, cubique était de l'ordre de cinq fois le diamètre dans toutes les directions.

Cas de l'ellipsoïde

Les paramètres géométriques sélectionnés ici sont $a = c = b/2$, ce qui permet de déduire les coefficients α , β et γ en fonction de a à partir du calcul des intégrales fournies dans l'équation (3.2). À l'aide du logiciel Mathematica¹, le calcul donne :

$$\begin{cases} \alpha = \gamma = 0,413/a^3 \\ \beta = 0,174/a^3 \end{cases} \quad (3.11)$$

Le couple permanent imposé est uniquement suivant y . Si l'hypothèse du régime de Stokes est vérifiée, il est possible de déduire la vitesse de rotation en régime permanent d'après (3.1). Afin de vérifier la pertinence de cette hypothèse, il est possible de calculer un nombre de Reynolds Re_ω construit à partir de la différence de vitesse de part et d'autre de l'ellipsoïde, l'axe $2a$ et la viscosité cinématique du fluide :

1. Logiciel de calcul scientifique développé par Wolfram Research (<http://www.wolfram.com/>)

$$Re_\omega = \frac{\omega_{py}(t_\infty)(2a)^2}{\nu} \quad (3.12)$$

En supposant que les conditions sont proches de celles de Stokes (c'est-à-dire $Re_\omega \ll 1$), il est possible de calculer le couple Γ_{py} à appliquer. En réinjectant les valeurs de α et β données en (3.11) dans la deuxième égalité de (3.2) et en utilisant l'équation (3.12), Γ'_{py} vérifie :

$$\Gamma'_{py} = Re_\omega \left(\frac{4\pi}{3 \times 0,413} \right) \rho_f \nu^2 a \quad (3.13)$$

En choisissant un nombre de Reynolds de $0,05 \ll 1$ et en se servant de l'équation (3.13), le couple à appliquer est

$$\Gamma'_{py} \simeq 0,507 \rho_f \nu^2 a$$

L'évolution temporelle des vitesses angulaires pour différentes résolutions spatiales est illustrée figure 3.2, où les particules ont été choisies deux fois plus denses que le fluide qui les entoure. Les résultats montrent que le régime transitoire est rapidement établi, pour un temps $t\nu/(2a)^2 < 1$.

D'autre part, la vitesse angulaire terminale est sous-estimée par rapport à la valeur théorique dans tous les cas ; néanmoins, cette différence décroît en augmentant la résolution de la particule. Les différents écarts relatifs sur la vitesse angulaire terminale correspondants ϵ sont reportés figure 3.3. Graphiquement, cette erreur décroît suivant une droite dont la pente est proche de -1 en échelle logarithmique, ce qui permet d'estimer que cette erreur est proportionnelle à l'inverse de la résolution. Ce résultat est cohérent d'un point de vue numérique. Pour une résolution $2a/\delta x = 13$, l'erreur vaut approximativement 8 % et reste supérieure à 5 % même en affinant la résolution à $2a/\delta x = 18$, ce qui est assez conséquent pour les simulations de ce travail.

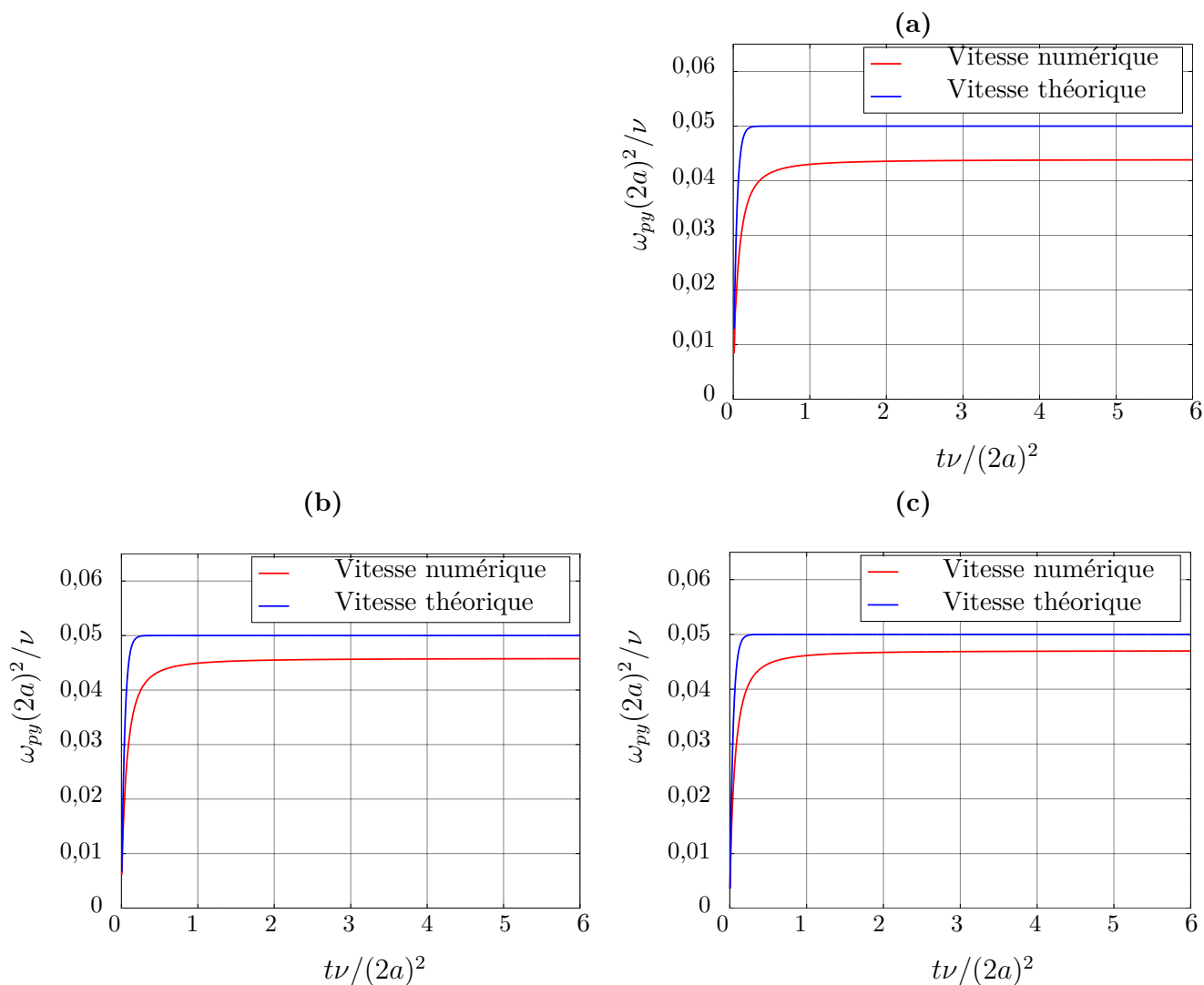


Fig. 3.2 – Évolution de la vitesse angulaire d'un ellipsoïde de révolution dans le plan de cisaillement et isolée pour différentes résolutions $2a/\delta x$: 9 (a), 13 (b), 18 (c).

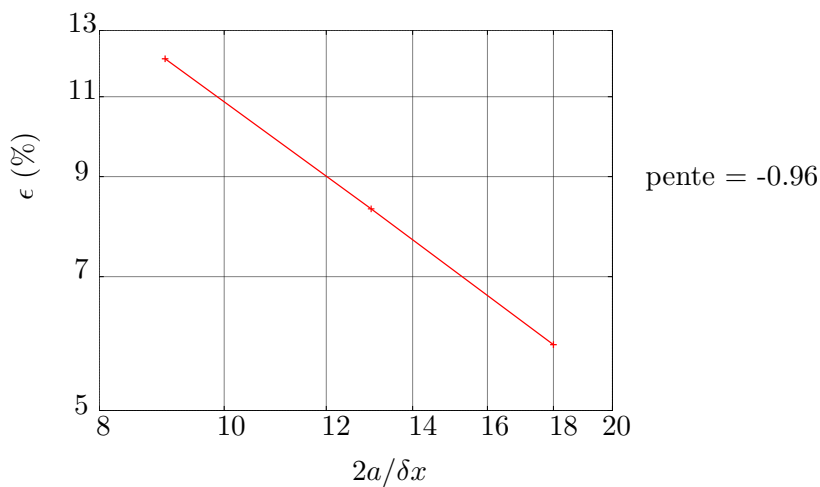


Fig. 3.3 – Évolution de l'erreur de la vitesse terminale de rotation en fonction de la résolution de la particule.

Cas de la sphère

Le développement propre à la vitesse angulaire de la sphère sera plus concis, puisqu'il s'agit d'un ellipsoïde particulier de demi-axes $a = b = c$. De façon analogue au cas précédent, le couple imposé est suivant l'axe y , et le nombre de Reynolds Re_ω est défini par substitution de l'axe $(2a)$ avec le diamètre de la sphère d_p :

$$Re_\omega = \frac{\omega_{py}(t_\infty)d_p^2}{\nu} \quad (3.14)$$

Le couple théorique à appliquer pour atteindre cette vitesse est obtenu en réinjectant l'égalité (3.14) dans (3.6) :

$$\Gamma_{py} = Re_\omega \pi \rho_f \nu^2 d_p \quad (3.15)$$

Le nombre de Reynolds est également pris égal à 0,05 ce qui permet de supposer que les conditions numériques sont bien proches de celles de Stokes. L'évolution temporelle de la vitesse angulaire pour une sphère deux fois plus dense que le fluide est illustrée 3.4. Comme dans le cas des ellipsoïdes, le régime est rapidement établi (pour $td_p^2/\nu \lesssim 1$). La vitesse numérique en régime permanent, qui diminue avec la résolution de la sphère, est à nouveau sous-estimée par rapport à la vitesse théorique.

De façon plus quantitative, l'écart relatif entre la vitesse de rotation numérique et théorique en fonction de la résolution des sphères est représentée figure 3.5. Cet écart décroît de 12 % à 6 % pour une résolution $d_p/\delta x$ de 13 à 19. De façon similaire aux ellipsoïdes, cet écart est proportionnel à l'inverse de la résolution (pente égale à -1 en échelle logarithmique).

Qu'il s'agisse de sphères ou d'ellipsoïdes de révolution, ces erreurs numériques, qui peuvent être acceptables pour certains usages, sont en revanche trop importantes pour les simulations de ce travail, à visée quantitative. Par contre, les résultats publiés par Niu *et al.* (2006) qui emploient des méthodes numériques similaires sont beaucoup plus encourageants pour des frontières fixes. Dans le cas où les particules ont une inertie faible et qu'aucune action extérieure ne s'applique sur elle, le couplage en vitesse liquide/solide semble donc plus précis que ne laisse présager les résultats de dynamique des particules. Dans la suite, la précision de la méthode va donc être testée dans des conditions plus proches de celles sur lesquelles s'appuient les conclusions de cette étude. En l'occurrence, la partie qui suit est consacrée à l'étude d'une particule dans un écoulement cisailé.

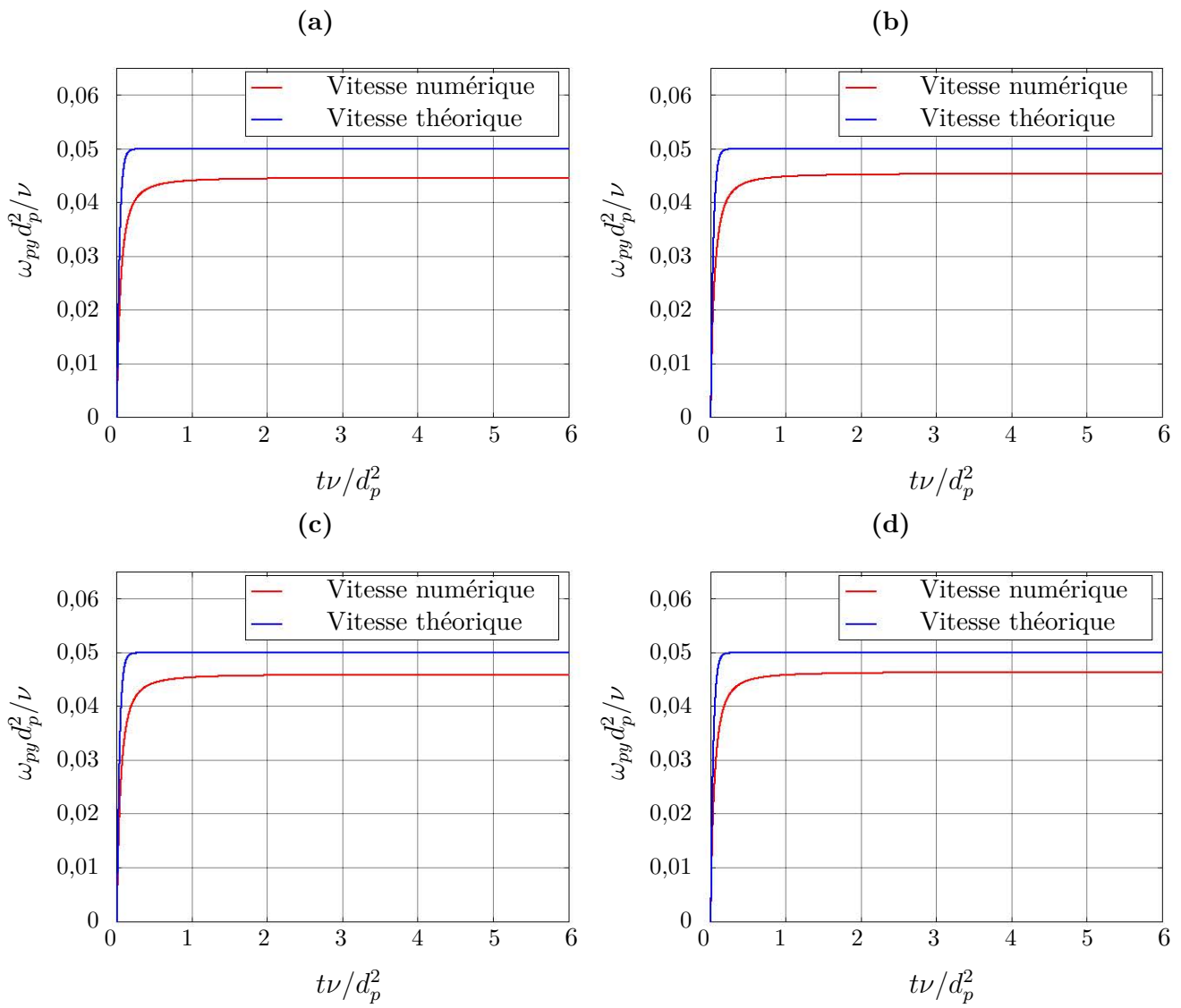


Fig. 3.4 – Évolution de la vitesse angulaire d'une sphère isolée pour différentes résolutions $d_p/\delta x$: 13 (a), 15 (b), 17 (c), 19 (d).

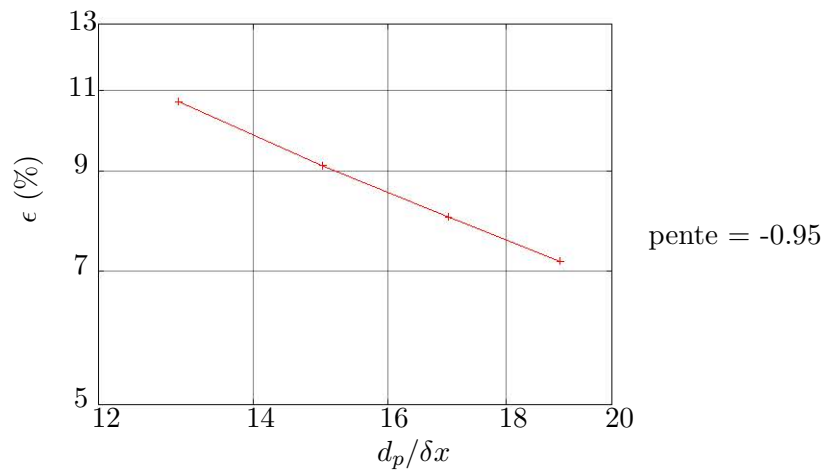


Fig. 3.5 – Évolution de l'erreur sur la vitesse terminale de rotation en fonction de la résolution de la sphère.

3.2 Validation cinématique : particule libre en écoulement cisailé plan

Le profil d'écoulement considéré est un cisaillement plan, dont la direction principale d'écoulement est notée x , et celle de cisaillement est notée z . Ainsi, le champ de vitesse \vec{v}_{f0} non perturbé, c'est-à-dire en l'absence de particule solide, s'écrit :

$$\vec{v}_{f0}(x, y, z) = \dot{\gamma}z \vec{e}_x \quad (3.16)$$

Une illustration de cet écoulement est fournie figure 3.6. Au vu de son expression (3.16), le champ de gradient qui en découle est uniforme. Ses parties symétrique (tenseur des taux de déformation) et antisymétrique (rotation) sont notées respectivement $\overline{\mathbf{D}}$ et $\overline{\mathbf{\Omega}}$. Leurs composantes sont nulles sauf celles dans le plan de cisaillement xz qui vérifient :

$$\left\{ \begin{array}{l} D_{xz} = D_{zx} = \frac{\dot{\gamma}}{2} \\ \Omega_{xz} = -\Omega_{zx} = \frac{\dot{\gamma}}{2} \end{array} \right. \quad (3.17)$$

L'étude de la dynamique de particules isolées présentée dans cette partie permettra d'identifier les conditions de simulation, notamment les conditions initiales et limites, dans lesquelles devront être menées les études d'interaction entre particules, détaillées au chapitre 4.

3.2.1 Étude théorique de la perturbation induite par une particule solide dans un cisaillement

Dans ce qui suit, les profils théoriques de vitesses des particules ellipsoïdales, puis sphériques en régime de Stokes sont présentés. Dans ce dernier cas, il est intéressant de s'attarder sur le profil de vitesse du fluide environnant. En effet, il est d'un intérêt particulier comme démontré plus loin dans ce chapitre, ainsi que dans le chapitre 4.

Vitesse angulaire d'une ellipsoïde

On s'intéresse au comportement d'un ellipsoïde de demi-axes notés a, b, c dont le centre de masse a pour coordonnée $z = 0$. En ne considérant que les efforts hydrodynamiques de l'écoulement cisailé, cet ellipsoïde a une vitesse linéaire nulle, mais sa vitesse de rotation ne l'est pas et est même susceptible de varier dans le temps. Cette dernière a été décrite pour la première fois par Jeffery (1922) dans le cas général d'un écoulement laminaire. D'autres auteurs tels que Freeman (1985) et Ježek *et al.* (1999) ont tenté d'explicitier un tel mouvement, en exprimant les composantes de la vitesse de rotation dans la base (x_p, y_p, z_p) liée à la particule, colinéaire à ses axes principaux. Une illustration est fournie figure 3.7. Cette vitesse de rotation dépend du champ de vitesse fluide loin de la particule et des paramètres géométriques (ie demi-axes). Les composantes de la partie symétrique et antisymétrique du grandient de vitesse fluide en l'absence de particule et exprimées dans la base (x_p, y_p, z_p) sont notées respectivement D'_{ij} et Ω'_{ij} . D'après Jeffery (1922), cette vitesse de rotation vérifie :

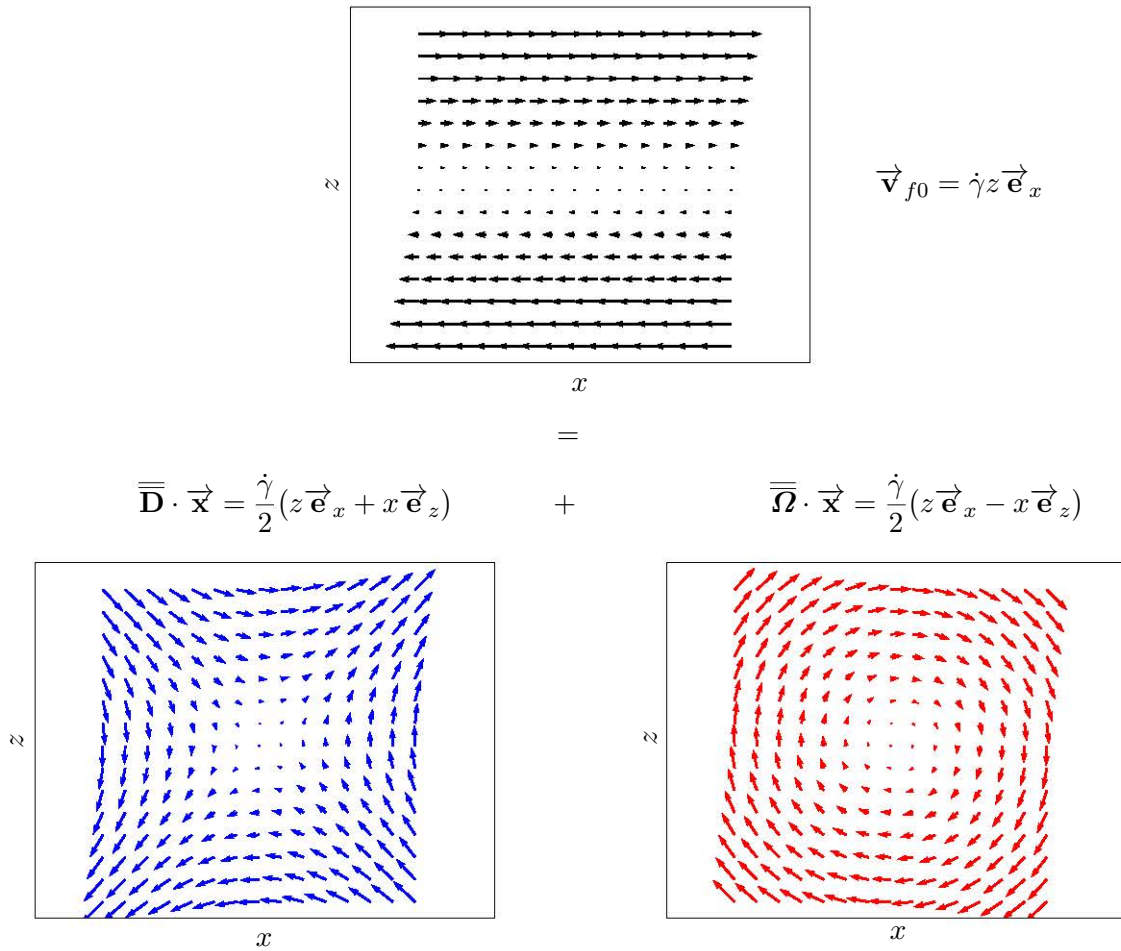


Fig. 3.6 – Champ de cisaillement plan (en haut), ainsi que sa décomposition en un écoulement purement élongationnel (bleu) et rotationnel (rouge.)

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega'_{px} = \left(\frac{b^2 - c^2}{b^2 + c^2} \right) D'_{zy} + \Omega'_{zy} \\ \omega'_{py} = \left(\frac{c^2 - a^2}{c^2 + a^2} \right) D'_{xz} + \Omega'_{xz} \\ \omega'_{pz} = \left(\frac{a^2 - b^2}{a^2 + b^2} \right) D'_{yx} + \Omega'_{yx} \end{array} \right. , \quad (3.18)$$

Exprimer cette vitesse dans la base fixe (x, y, z) est plus pratique, car le code FLUA calcule les composantes dans cette dernière. Il en est de même pour les champs fluides. La transformation permettant de passer de la base fixe à la base locale liée à la particule est une rotation dont les composantes sont notées R_{ij} . Afin de connaître les composantes dans la base fixe, il suffit alors d'opérer la transformation, avec les conventions d'Einstein :

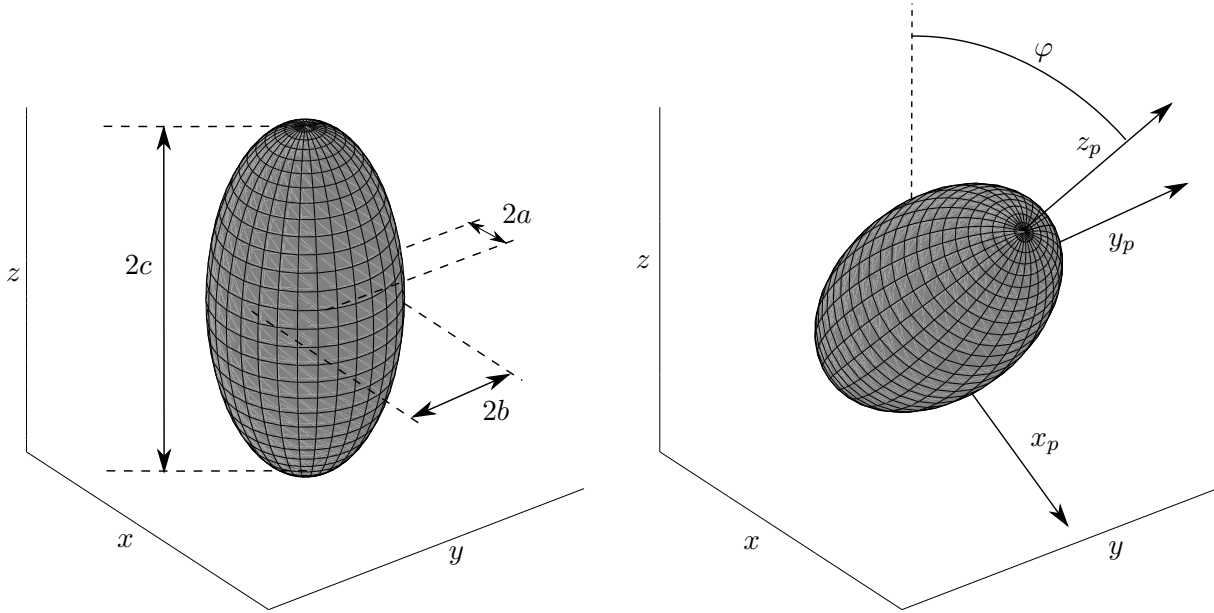


Fig. 3.7 – Représentation des bases fixe (x, y, z) et locale (x_p, y_p, z_p) liée à l'ellipsoïde. Lorsque l'angle φ est nul (cas de la représentation à gauche), les deux bases sont confondues et les longueurs a , b et c correspondent aux grands-axes suivant x , y et z respectivement.

$$\begin{cases} D'_{ij} = R_{ik}^{-1} D_{kl} R_{lj} \\ \Omega'_{ij} = R_{ik}^{-1} \Omega_{kl} R_{lj} \end{cases}, \quad (3.19)$$

puis d'appliquer la transformation à l'équation (3.18) :

$$\omega_{pi} = R_{ij} \omega'_{pj} \quad (3.20)$$

La matrice de rotation est connue, elle s'exprime à partir du quaternion caractérisant l'orientation de l'ellipsoïde (voir annexe C). Dans ce qui suit, deux cas particuliers sont considérés, où la base fixe et celle liée à la particule sont initialement confondues. Au vu de l'équation (3.16) et pour un ellipsoïde centré, il y a symétrie de l'écoulement par rotation de 180° autour de l'axe y . S'il en est de même pour l'ellipsoïde, la représentation de sa matrice de rotation instantanée dans la base fixe peut s'écrire :

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & 0 & \sin \varphi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \varphi & 0 & \cos \varphi \end{pmatrix}. \quad (3.21)$$

Ces deux cas, étudiés ci-après, concernent des ellipsoïdes de révolution en fonction de l'orientation de leur grand axe par rapport au cisaillement.

Paramètres géométriques : cas d'une ellipsoïde de grand axe dans le plan de cisaillement

Comme paramètres géométriques, on impose $a = b = c/2$. Différentes configurations sont représentées figure 3.8.

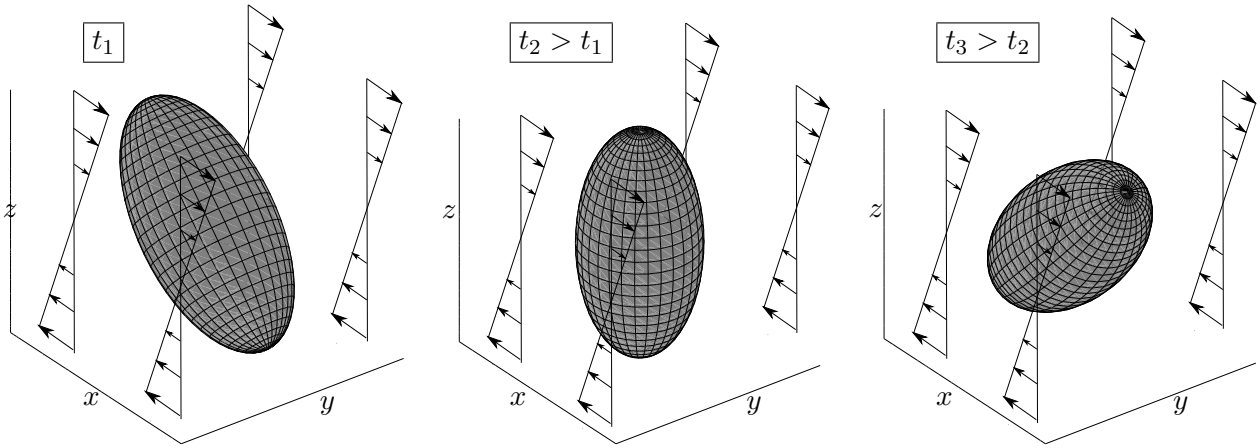


Fig. 3.8 – Évolution de l'orientation de l'ellipsoïde de grand axe dans le plan de cisaillement de dimension $a = b = c/2$.

Dans le cas d'un écoulement cisailé décrit par l'équation (3.16), en utilisant les formules (3.18), (3.19), (3.20) et (3.21), on obtient :

$$\begin{cases} \omega_{px} = 0 \\ \omega_{py} = \dot{\gamma} \left(\frac{3}{5} \cos^2 \varphi + \frac{1}{5} \right) \\ \omega_{pz} = 0 \end{cases} \quad (3.22)$$

On peut remarquer que la vitesse de rotation dépend de l'inclinaison de l'ellipsoïde φ . De plus, la valeur moyenne de cette vitesse, égale à $\dot{\gamma}/2 \vec{e}_y$, est donc identique à la moitié de la vorticité du fluide (ie le taux de cisaillement ici), ce qui est cohérent car c'est aussi la vitesse de rotation locale du fluide.

Paramètres géométriques : cas d'une ellipsoïde de grand axe normal au plan de cisaillement

Comme paramètres géométriques, on impose $a = c = b/2$, représenté figure 3.9. L'expression de la vitesse angulaire instantanée se retrouve de façon analogue à ce qui précède,

$$\begin{cases} \omega_{px} = 0 \\ \omega_{py} = \dot{\gamma}/2 \\ \omega_{pz} = 0 \end{cases} \quad (3.23)$$

On remarque cette fois que la vitesse de rotation est invariante, égale à tout instant à la moitié de la vorticité du fluide. Ceci était attendu pour la même raison qu'évoquée précédemment, mais aussi par le fait que l'on a une invariance de la géométrie de l'ellipsoïde par rotation autour de l'axe y . Une sphère étant un cas particulier d'un tel ellipsoïde, sa vitesse de rotation dans un écoulement cisailé est donc de $\dot{\gamma}/2$.

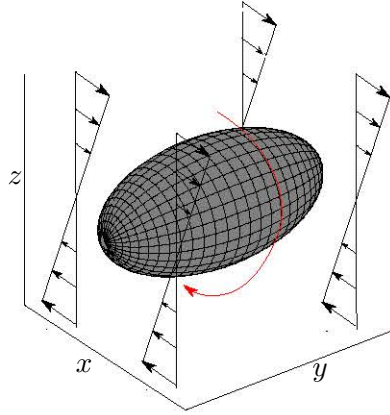


Fig. 3.9 – Ellipsoïde de dimension $a = c = b/2$.

Champs de vitesse et de pression autour d'une sphère

Des études numériques existent concernant le comportement des sphères dans un écoulement en régime de Stokes, dont les solutions analytiques constituent un moyen commode de validation des méthodes utilisées. Par exemple, [Lomholt et Maxey \(2003\)](#) ont comparé leurs résultats numériques d'une sphère isolée aux résultats analytiques fournis par [Batchelor et Green \(1972\)](#). Dans le cas d'une sphère isolée et libre, c'est-à-dire soumise aux seules forces hydrodynamiques induite par l'écoulement, sa présence n'affecte pas la composante rotationnelle du champ de vitesse du fluide en régime de Stokes ([Batchelor et Green, 1972](#)). Elle n'affecte que la contribution purement élongationnelle du cisaillement.

Champ de vitesse

Le champ de vitesse de perturbation, le champ non perturbé et le champ non perturbé sont notés respectivement \vec{v}' , \vec{v}_f et \vec{v}_{f0} . Ce champ peut être déterminé analytiquement dans n'importe quelle configuration d'écoulement en régime de Stokes ([Batchelor et Green, 1972](#), [Lomholt et Maxey, 2003](#)). En notations cartésiennes, en prenant comme origine le centre de la sphère et en utilisant la convention d'Einstein, le champ \vec{v}' s'écrit :

$$v'_i = -\frac{5d_p^3}{16} \frac{x_i(x_j D_{jk} x_k)}{r^5} - \frac{d_p^5}{32} D_{jk} \left(\frac{\delta_{ij} x_k}{r^5} - \frac{5}{2} \frac{x_i x_j x_k}{r^7} \right) \quad \text{avec } r^2 = x^2 + y^2 + z^2 \geq d_p^2/4 \quad (3.24)$$

Dans l'expression ci-dessus, δ_{ij} est le symbole de Kronecker. De plus, les indices $i, j, k \in [1, 2, 3]$ sont tels que $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$.

Il est alors possible d'explicitier, dans le cas particulier de l'écoulement cisaillé plan, les composantes de la partie perturbée du champ à partir de (3.24) et du tenseur des taux de déformation de l'équation (3.17). En réinjectant ce tenseur dans l'expression (3.24), le champ de vitesse absolu \vec{v}_f est le suivant :

$$\vec{v}_f = \vec{v}_{f0} + \vec{v}' = \dot{\gamma}z \vec{e}_x + \vec{v}'$$

avec

$$\vec{v}' = \frac{\dot{\gamma} d_p^3}{16 r^5} \begin{pmatrix} -5x^2z + 5\frac{d_p^2 x^2 z}{4r^2} - \frac{d_p^2}{4}z \\ -5xyz + 5\frac{d_p^2 xyz}{4r^2} \\ -5xz^2 + 5\frac{d_p^2 xz^2}{4r^2} - \frac{d_p^2}{4}x \end{pmatrix}, \quad r^2 = x^2 + y^2 + z^2 \geq \frac{d_p^2}{4} \quad (3.25)$$

L'expression ci-dessus est par ailleurs corroborée par Mikulencak et Morris (2004). De plus, le champ de vitesse en tout point de la frontière de la sphère dans le plan xOz est bien égal à la composante rotationnelle de l'écoulement libre, soit $\dot{\gamma}d_p/4$.

Le champ de vitesse \vec{v}_f est représenté dans le plan xOz sur la figure 3.10.

Le champ de vitesse de perturbation dans ce même plan est également tracé figure 3.10. Ce champ s'oppose à la compression-dilatation induite par la composante élongationnelle du champ libre \vec{v}_{f0} (ie $\overline{D} \cdot \vec{x}$) afin d'assurer le comportement solide indéformable de la particule.

Champ de pression

À partir du champ de vitesse précédent, il est facile de déterminer le gradient du champ de pression, puisqu'en régime de Stokes :

$$\vec{\nabla} P = \mu \vec{\Delta} \vec{v} \quad (3.26)$$

D'après les expressions (3.25) et (3.26), après calcul à l'aide de Mathematica, on a :

$$\vec{\nabla} P = 5\mu\dot{\gamma}\frac{d_p^3}{8} \begin{pmatrix} \frac{z(4x^2 - y^2 - z^2)}{r^7} \\ 5\frac{xyz}{r^7} \\ \frac{x(4z^2 - y^2 - x^2)}{r^7} \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

En intégrant le gradient de pression donné en (3.27), le champ de pression est alors :

$$P(x, y, z) = -\frac{5}{8}\mu\dot{\gamma}d_p^3\frac{xz}{r^5} + P_0 \quad (3.28)$$

où P_0 désigne la pression de référence. Le champ de pression relatif $P - P_0$ fourni par (3.28) est tracé à la figure 3.11.

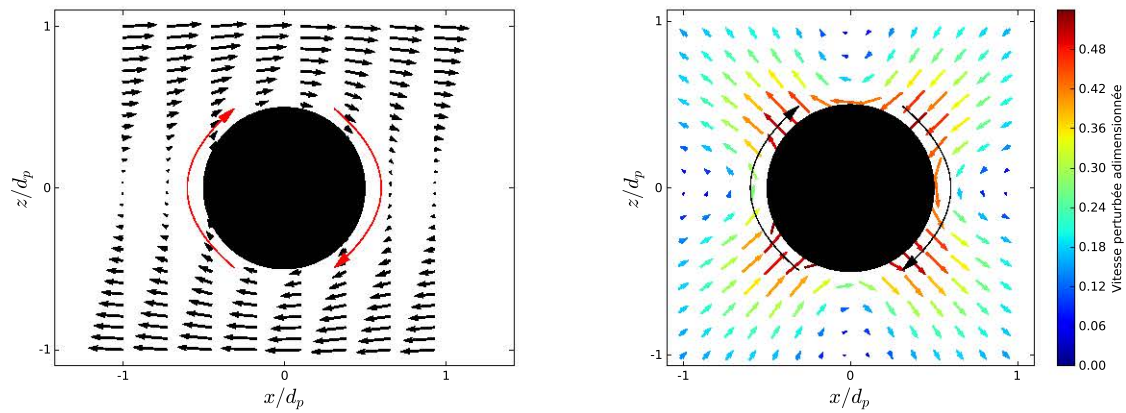


Fig. 3.10 – Profil du champ de vitesse autour d'une sphère libre dans un écoulement cisailé (à gauche), ainsi que le champ de vitesse perturbée adimensionnée $\left(\frac{2\vec{v}'}{d_p\dot{\gamma}}\right)$ dans le plan xOz (à droite).

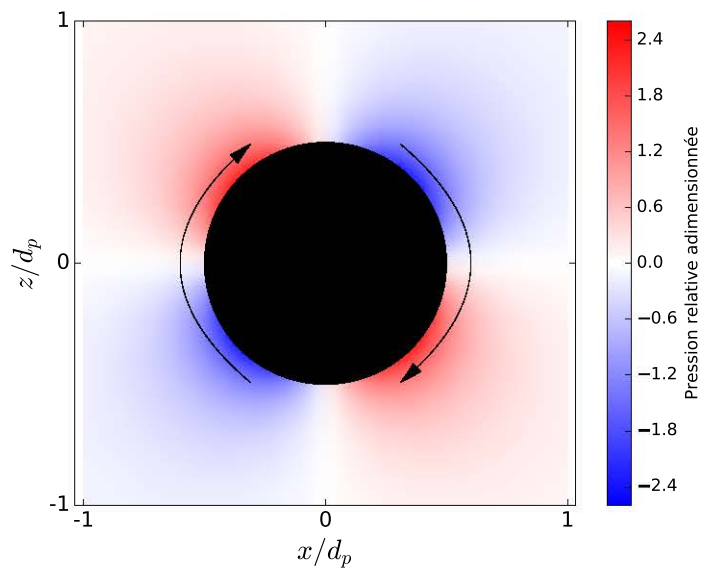


Fig. 3.11 – Profil du champ de pression relatif adimensionnée $\left(\frac{P - P_0}{\mu\dot{\gamma}}\right)$ dans le plan xOz de cisaillement.

Lignes de courant

À partir de l'expression analytique de la vitesse fournie par l'équation (3.25), il est possible de tracer les lignes de courant de l'écoulement de Stokes. Une représentation est fournie dans le plan xOz figure 3.12. Ces lignes sont parfaitement symétriques par rapport à l'axe Oz . Elles forment une série d'enveloppes, en particulier à proximité de la particule, qui s'étend davantage dans la direction principale de l'écoulement, sans qu'il y ait de recirculation. Ainsi, toutes les lignes entrent par une extrémité du domaine pour en ressortir, à la même hauteur, à l'extrémité opposée.

Portée de la perturbation hydrodynamique

Afin de déterminer la portée de la perturbation engendrée par la particule, il s'agit de déterminer la distance au bout de laquelle l'écart n'est pas significatif entre la vitesse effective et celle de l'écoulement sans particule \vec{v}_{f0} , soit le champ \vec{v}' donné en (3.25). Le champ scalaire $\epsilon(\vec{x})$ associé à cet écart est défini par

$$\epsilon(\vec{x}) = \frac{\|\vec{v}'(\vec{x})\|}{\max(\vec{v}')} = \frac{\|\vec{v}'(\vec{x})\|}{\frac{1}{4}\dot{\gamma}d_p} \quad (3.29)$$

Il permet de quantifier la région dans laquelle la perturbation induite par la particule est significative. En ce sens, il peut être dénommé « fonction écart ». La figure 3.13 est une représentation de l'isosurface de la fonction écart $\epsilon(\vec{x}) = 5\%$. Au vu de la forme de cette isosurface et comme cela était attendu, la portée principale du champ perturbé est suivant le plan xOz , c'est-à-dire le plan de cisaillement traversant la sphère. Le profil de ce champ dans ce plan est également représenté sur les figures 3.13 et 3.14.

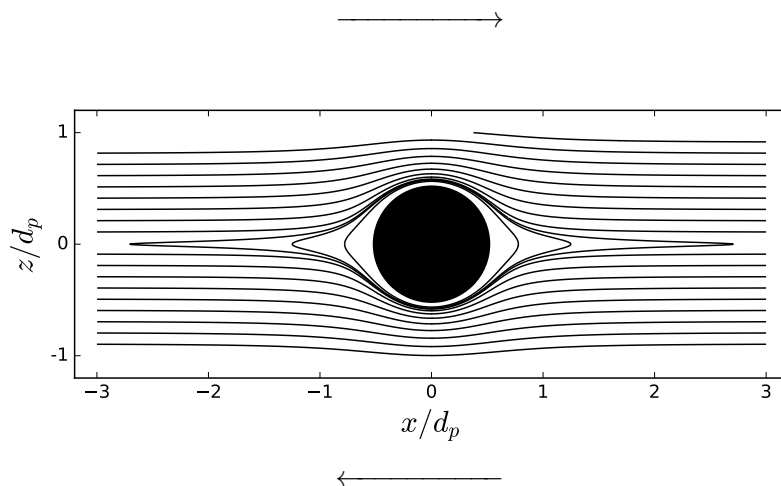


Fig. 3.12 – Lignes de courant d'une sphère libre en régime de Stokes en écoulement cisailé dans le plan xOz de cisaillement.

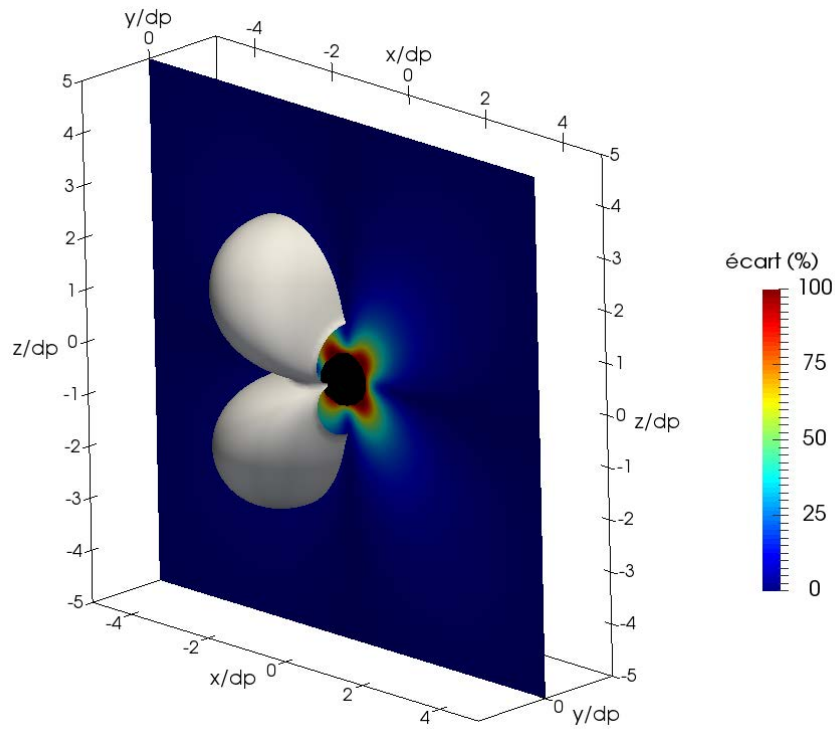


Fig. 3.13 – Isosurface $\epsilon = 5\%$ représentée sur une moitié de domaine pour une sphère isolée en écoulement cisailé dans les conditions de Stokes.

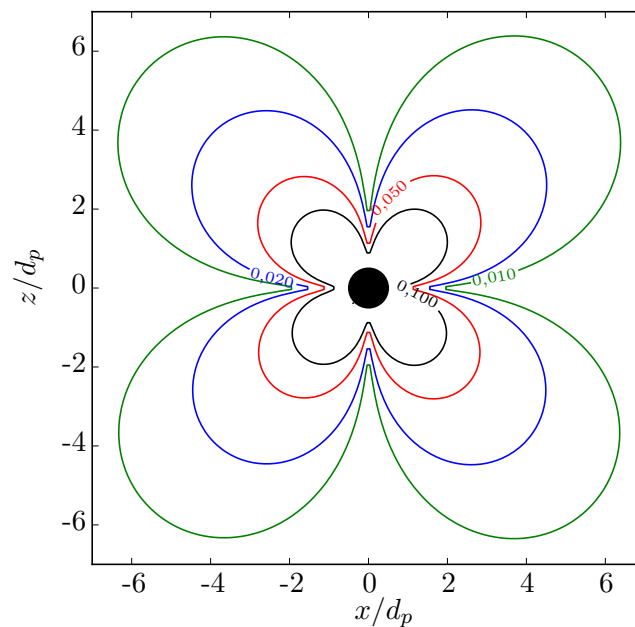


Fig. 3.14 – Isocontours de la perturbation de l'écoulement provoquée par une sphère, d'équation $4\|\vec{\nabla}'(x, z)\|/(\dot{\gamma}d_p) = C$ avec $C \in \{1, 2, 5, 10\}\%$.

L'étude de cette perturbation portera donc sur le plan xOz , où la fonction écart associée vérifie :

$$\epsilon(x, 0, z) = \frac{\|\vec{\nabla}'(x, 0, z)\|}{\frac{1}{4}\dot{\gamma}d_p} = \frac{d_p^2}{4r^5} \left\| \begin{array}{c} -5x^2z + 5\frac{d_p^2x^2z}{4r^2} - \frac{d_p^2}{4}z \\ 0 \\ -5xz^2 + 5\frac{d_p^2xz^2}{4r^2} - \frac{d_p^2}{4}x \end{array} \right\|$$

Exprimé en coordonnées adimensionnelles (normées par le diamètre de la sphère), le champ ϵ devient :

$$\epsilon(x^*, 0, z^*) = \frac{1}{4r^{*5}} \left[\left(-5x^{*2}z^* + 5\frac{x^{*2}z^*}{4r^{*2}} - \frac{z^*}{4} \right)^2 + \left(-5x^*z^{*2} + 5\frac{x^*z^{*2}}{4r^{*2}} - \frac{x^*}{4} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (3.30)$$

Pour évaluer la portée de la perturbation provoquée par une sphère de rayon donné, les isocontours de ce champ sont tracés sur la figure 3.14 pour des valeurs allant de 0,5 % à 10 %. Plusieurs phénomènes peuvent être observés : d'une part, la perturbation est prépondérante dans les directions portées par $\pm \vec{e}_x \pm \vec{e}_z$, ce qui était attendu puisqu'il s'agit des directions principales des déformations (partie élongationnelle) du cisaillement.

D'autre part, la distance maximale de perturbation par rapport au centre de la sphère n'excède pas l'équivalent de $3,5 d_p$ pour une erreur tolérée de 5 %. D'après la remarque qui précède, cela correspond donc à une distance d'environ $2,5 d_p$ suivant l'axe x , soit une distance de séparation de $2d_p$.

La distance maximale de ces isocontours par rapport au centre de la particule a également été tracée figure 3.15. On peut constater que la perturbation décroît de façon quadratique avec la distance. La loi reliant la distance à l'amplitude $\epsilon(r_{max}^*)$ de la perturbation est approximativement :

$$\epsilon(r_{max}^*) \simeq \frac{60}{r_{max}^{*2}} \%$$

La notation r_{max}^* désigne la grandeur (adimensionnée par le diamètre pour rappel) correspondant à la distance maximale d'un isocontour dans le plan xOz par rapport au centre de masse de la sphère.

3.2.2 Mise en place des simulations

Avant de décrire le comportement des particules isolées en écoulement cisailé permanent, une série de tests préliminaires sont présentés afin de prouver la validité des méthodes décrites dans le chapitre 2 et implémentées dans les différents solveurs. Ceci fait, l'étude proprement dite des particules seules en écoulement purement cisailé au-delà des conditions de Stokes sera abordée, tout en évoquant les conditions initiales et limites, similaires aux cas qui suivront ce chapitre.

Conditions initiales

Afin de limiter le temps d'établissement de l'écoulement autour des particules, il est intéressant d'utiliser le profil analytique du cisaillement plan sans particules par défaut, voire des profils analytiques de Stokes.

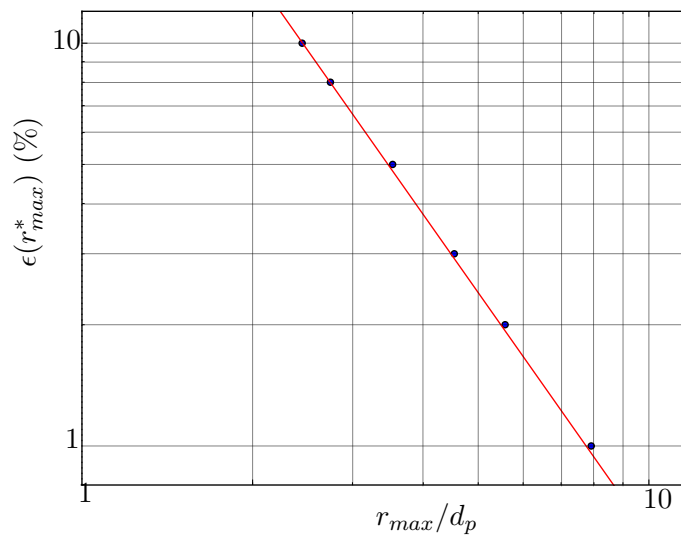


Fig. 3.15 – Évolution de l'amplitude de la perturbation avec la distance adimensionnée au centre de la particule dans le plan de cisaillement (xOz).

Quelle que soit la particule utilisée, son centre de masse est situé au milieu du domaine, sa vitesse linéaire est donc nulle. Dans les deux paragraphes qui suivent, les conditions initiales sont d'abord décrites, suivies des conditions limites.

Cas de l'ellipsoïde

La vitesse de rotation initiale de l'ellipsoïde choisie est celle de Stokes exprimée dans la base fixe. Pour rappel, elle se retrouve grâce aux équations (3.18), (3.19) et (3.20).

Il faut mentionner qu'en régime de Stokes, il existe un profil analytique du champ de vitesse du fluide, qui dépend des propriétés physiques du fluide (viscosité, densité), des paramètres géométriques de la particule ainsi que de son orientation. Son expression, donnée par exemple par Ježek *et al.* (1999), est assez complexe. Étant donné que l'écoulement s'établit rapidement à faible Reynolds, un profil initial d'écoulement libre a été privilégié.

Cas de la sphère

Tout comme le cas de l'ellipsoïde, la vitesse de Stokes est celle qui a été choisie, ie la moitié de la vorticit  de l'écoulement libre. Ainsi, et en utilisant l'expression (3.16), cette vitesse v rifie $\vec{\omega}_p = \dot{\gamma}/2 \vec{e}_y$. La solution analytique  tant ici relativement simple, l' coulement initial suit un profil analytique de Stokes dont les champ de vitesse et de pression sont fournis dans les expressions (3.25) et (3.28) respectivement.

Les conditions initiales sont repr sent es figure 3.16.

Conditions limites

Quels que soient la forme ou le nombre d'objets solides en jeu, les conditions limites dans le cadre de cette  tude ont toutes  t  identiques. L'id e de base est d'imposer un cisaillement permanent de sorte que l' coulement en l'absence de particules solides a un profil sym trique dans le plan de cisaillement

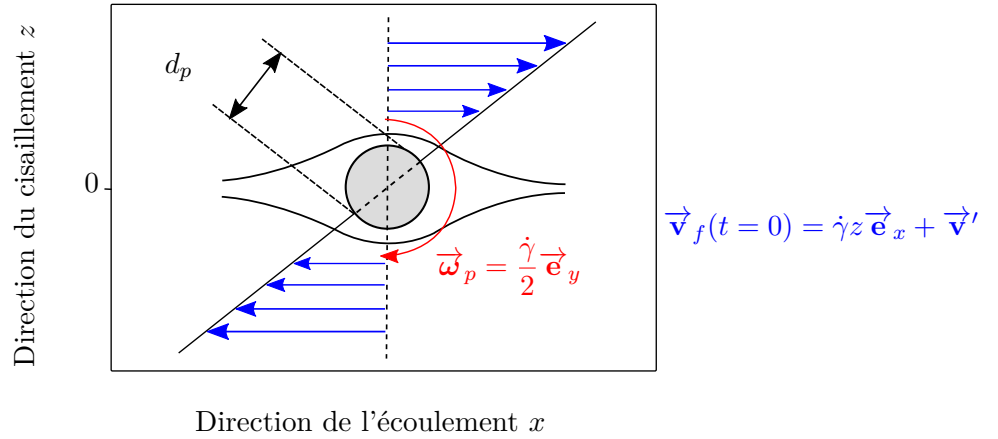


Fig. 3.16 – Conditions initiales dans le cas de la sphère.

xz comme représenté figure 3.6. Pour réduire l'impact des conditions limites sur les simulations, des conditions en contrainte plutôt qu'en vitesse ont été utilisées pour les surfaces inférieures et supérieures du domaine. Sur ces faces, une condition de glissement est imposée, qui ne contraint qu'une composante de la vitesse, en l'occurrence la composante normale aux deux faces. Des contraintes tangentielles ($\vec{\tau}$) de sens opposé sur les faces supérieures et inférieures ont été ajoutées à la condition de glissement pour maintenir le cisaillement.

Dans le cas d'un écoulement plan sans particule, il est possible de lier le taux de cisaillement à ces contraintes par la relation

$$\vec{\tau}(\pm \frac{L_z}{2}) = \pm \mu \dot{\gamma} \vec{e}_x \quad (3.31)$$

en notant μ la viscosité dynamique du fluide et L_z la taille du domaine selon z . Afin de rendre l'écoulement-plan infini suivant x et y , des conditions de périodicité ont été imposées aux faces latérales du domaine. Si les solides sont suffisamment éloignés des conditions limites pour qu'ils ne ressentent pas la perturbation de l'écoulement provoquée par leur image par périodicité, cette condition limite est satisfaisante. Des éléments de justification quantitatifs sont discutés dans la suite de cette section.

Stickel et Powell (2005) ont reporté et synthétisé de nombreuses études sur le comportement rhéologique de suspensions. Einstein en est un précurseur (Einstein, 1906, 1911). Plus tard, Krieger (1972) a établi, par une analyse dimensionnelle et moyennant quelques hypothèses simplificatrices (force de flottabilité nulle et cisaillement constant), que la viscosité apparente adimensionnée par μ dépend de trois nombres :

- Le nombre de Péclet $Pe = \frac{3\pi\mu d_p^2 \dot{\gamma}}{4kT}$, très grand si le mouvement brownien est négligeable
- le nombre de Reynolds $Re_\gamma = \frac{\rho_f d_p^2 \dot{\gamma}}{\mu}$,
- la fraction volumique des particules dans le domaine.

D'après Hoffman (1972) ou encore les travaux expérimentaux de Chang et Powell (1994), la viscosité

apparente dépend du cisaillement appliqué et augmente avec la fraction volumique dès que celle-ci excède 10 %. Dans ce travail, le taux d'occupation est très faible et n'excède pas 0,5 %. Pour rappel, ce taux est dans le cas d'inclusions dans un acier l'ordre de 10^{-4} d'après [Zhang et Thomas \(2003\)](#).

Ici, pour s'assurer que le taux de cisaillement vu par les particules est bien celui imposé par les conditions limites en contrainte, il est possible de comparer la puissance dissipée par les effets visqueux avec celle de l'écoulement libre en l'absence de particules (notée $P_{0,diss}$). La puissance dissipée prenant en compte la présence d'une sphère au centre du domaine est notée $P_{sph,diss}$. Le domaine choisi est cubique de côté L , au centre duquel est placé la sphère et où la vitesse moyenne d'écoulement est nulle conformément aux figures 3.6 et 3.10. En utilisant la convention d'Einstein sur les sommes, la puissance dissipée P_{diss} vérifie dans le cas général :

$$P_{diss} = 2 \mu \iiint_V D_{ij} D_{ij} dV \quad , \quad V : \text{volume du domaine fluide} . \quad (3.32)$$

Dans le cas d'un écoulement libre, $\overline{\mathbf{D}}$ est le tenseur des taux de déformation défini équation (3.17). $P_{0,diss}$ vérifie alors simplement :

$$P_{0,diss} = 2 \mu \iiint_{-L/2}^{+L/2} D_{ij} D_{ij} dV = \mu \dot{\gamma}^2 L^3 \quad (3.33)$$

L'estimation de $P_{sph,diss}$ est faite en écoulement de Stokes, à partir de l'équation (3.25). Le rapport des puissances $P_{sph,diss}/P_0$, calculé à l'aide de Mathematica, est fourni dans le graphe figure 3.17. La dissipation est plus importante pour une particule immergée, mais le ratio diminue en augmentant la taille du domaine L . Une différence inférieure à 1 % est observée dès lors que la taille du domaine excède $4 d_p$, ce qui correspond à un taux d'occupation volumique de la particule d'environ 0,8 %. Ce dernier est au-delà des taux usuels rencontrés lors du procédé de flottation (de l'ordre, on le rappelle, de 10^{-4} en acier liquide) ou dans les simulations de ce travail (0,5 %).

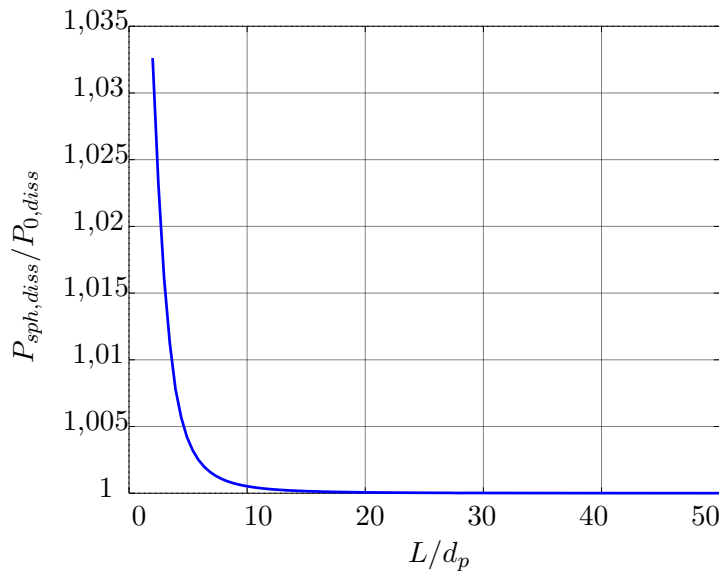


Fig. 3.17 – Rapport des puissances dissipées par effet visqueux entre le cas d'une sphère immergée et d'un écoulement cisailé libre en fonction de la taille du domaine.

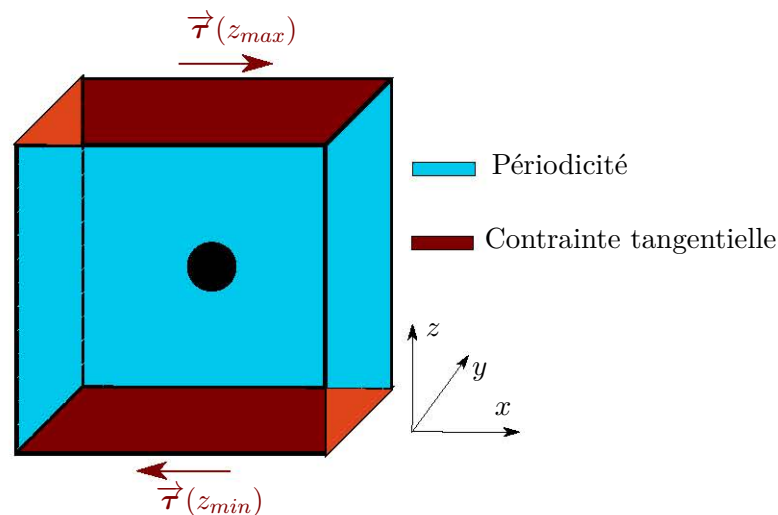


Fig. 3.18 – Conditions limites imposées au bord du domaine de calcul.

Ainsi, le cisaillement moyen n'est pas sensible à la présence de particules dans le domaine, étant donné qu'il n'y en aura pas plus de deux dans cette étude. Cela permet de choisir les mêmes conditions limites à la bordure du domaine que dans le cas d'un écoulement monophasique, et de considérer que la condition limite en contrainte équivaut à celle en vitesse du point de vue du cisaillement imposé. Les conditions limites sont représentées figure 3.18. En ce qui concerne les objets immergés, une conditions d'adhérence est imposée à leur surface.

3.2.3 Analyse des résultats de simulations numériques

Les conditions de calculs établies précédemment permettent d'effectuer des simulations de particules en écoulement cisailé. Une meilleure occasion de prouver la validité des solveurs est donnée en présentant des résultats de simulation d'objets dans les conditions proches de Stokes. Pour cela, le comportement d'une ellipsoïde suivant son orientation est d'abord étudié, suivi de celui d'une sphère. Une réflexion supplémentaire sera ensuite apportée concernant les problèmes de confinement.

Comparaison avec la solution analytique de Stokes

Cas de l'ellipsoïde

Le comportement d'une ellipsoïde est étudié numériquement dans le but de comparer les simulations aux solutions analytiques présentées en section 3.2.1 : les dimensions choisies sont $a = b = c/2$. Pour cette simulation, les nombres de Reynolds et Stokes ont pour valeur :

$$\begin{cases} Re_{\dot{\gamma}} = \frac{\dot{\gamma}(4a)^2}{\nu} = 0,014 \quad , \\ St = \frac{1}{18} \frac{\rho_p(4a)^2 \dot{\gamma}}{\rho_f \nu} = 2 \cdot 10^{-3} \end{cases}$$

Ces conditions sont relativement proches de celles de Stokes. La vitesse de rotation en fonction de l'inclinaison de l'ellipsoïde est représentée figure 3.19, où sont comparées les solutions numériques et analytiques. La résolution de l'ellipsoïde est de $1/13^{\text{ème}}$ de l'axe $2a$. On peut constater que les résultats

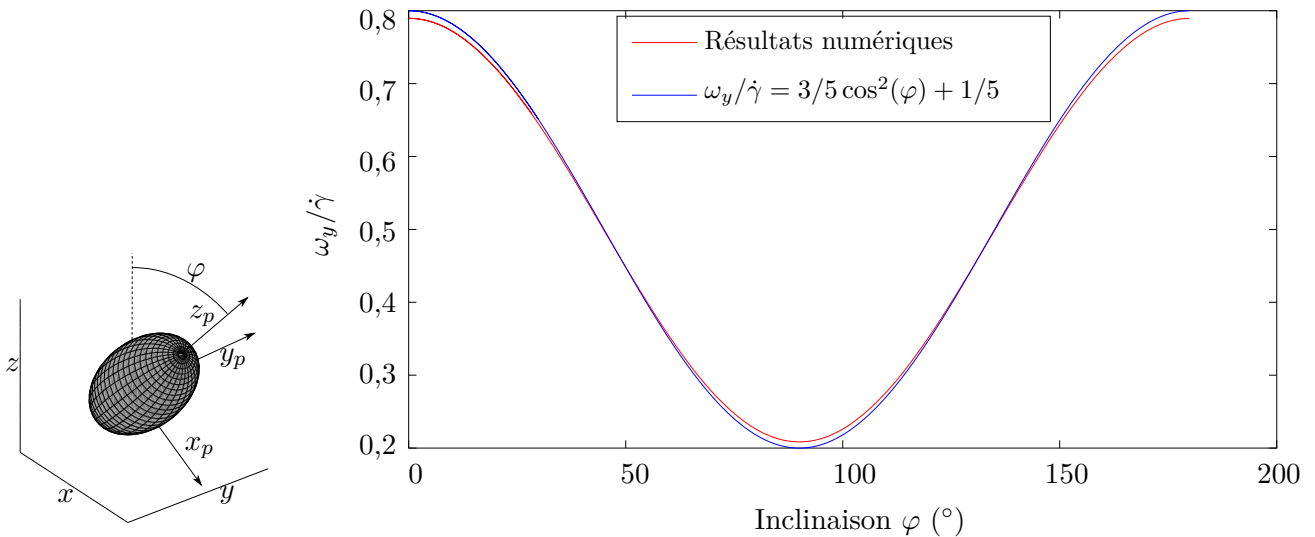


Fig. 3.19 – Vitesse de rotation d'un ellipsoïde en fonction de son inclinaison, $a = b = c/2$, $2a/\delta x = 13$.

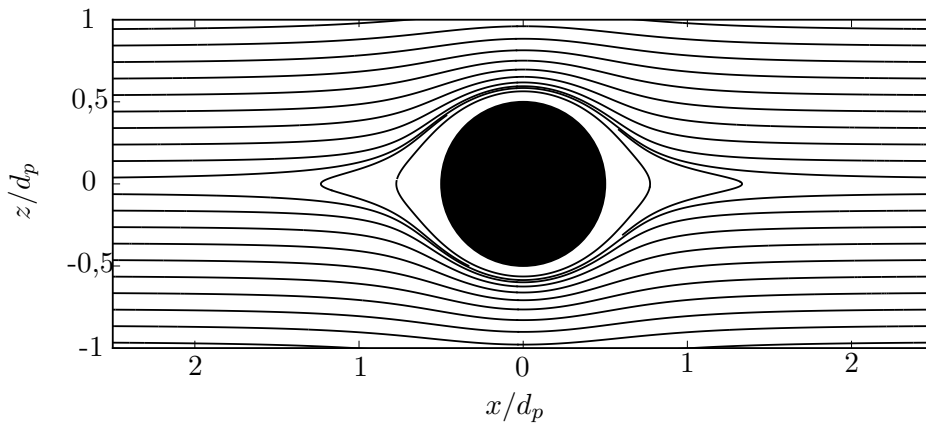


Fig. 3.20 – Lignes de courant obtenues par simulation à $Re_\gamma = 0,009$.

numériques sont en adéquation avec la théorie, ce pour une marge d'erreur qui n'excède pas 2%, ce qui est satisfaisant.

Cas de la sphère

Les nombres de Reynolds et de Stokes, cette fois, valent respectivement 0,0089 et $7 \cdot 10^{-4}$.

Les lignes de courant du champ de vitesse, tracées figure 3.20, ont la même allure que dans le cas théorique figure 3.12 : ces dernières sont symétriques et passent d'une extrémité à l'autre du plan.

De façon plus quantitative, le champ de vitesse en régime permanent est étudié sur la figure 3.21 en traçant les isocontours du champ écart.

$$\epsilon(x, z) = \|4(\vec{\nabla}_f - \vec{\nabla}_{f0})/(\dot{\gamma}d_p)\|$$

Ces isocontours, tracés en continu, sont comparés à la solution analytique de Stokes représentée en pointillé. Le comportement de la sphère isolée est effectivement très proche de celui de Stokes en analysant ce graphe. De légères dyssimétries peuvent être observées, ce qui traduit sans doute les premiers effets

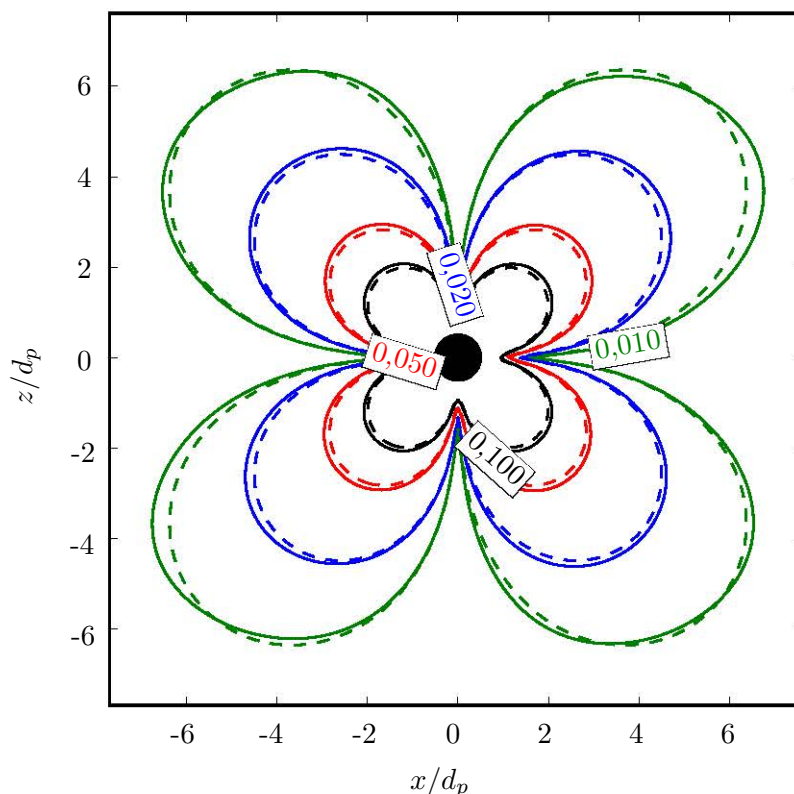


Fig. 3.21 – Isocontours du champ écart $4\vec{V}'/(\dot{\gamma}d_p)$ à $Re_\gamma = 0,0089$ (en continu) et à $Re_\gamma = 0$ (solution analytique de Stokes, en pointillé).

inertiels de l'écoulement, car le nombre de Reynolds n'est pas tout-à-fait nul.

En conclusion de ce paragraphe, les solveurs permettent de réaliser des calculs cohérents dans des conditions proches de Stokes. Cependant, il est aussi nécessaire de valider les solutions à plus haut nombre de Reynolds puisque cette étude cherche à montrer l'effet de l'hydrodynamique (donc de Re_γ) sur la dynamique de collision. La section suivante est consacrée à l'étude d'une sphère seule, cette fois dans des conditions d'écoulement où les effets inertiels dans le fluide ne sont plus négligeables.

Influence de l'inertie du fluide

Le comportement d'une sphère libre isolée en écoulement cisailé plan pour des nombres de Reynolds finis a déjà fait l'objet d'études. Par exemple, [Lin et al. \(1970\)](#) ont étudié théoriquement les effets d'un écoulement faiblement inertielle dans le cadre de la rhéologie de suspensions diluées. Grâce à un développement limité sur les champs de vitesse et de pression, ils ont pu tracer les lignes de courant et montrer que les symétries observés dans le cas de Stokes disparaissaient. À partir des nouvelles conditions limites portant sur la sphère, ils ont également établi une expression analytique de la vitesse angulaire en fonction de Re_γ . En reprenant les notations des sections précédentes, la vitesse de rotation de la sphère vérifie :

$$\frac{\omega_{py}}{\dot{\gamma}/2} = 1 - 0,03845Re_\gamma^{3/2} \quad (3.34)$$

en posant

$$Re_{\dot{\gamma}} = \frac{\dot{\gamma} d_p^2}{\nu} \quad (3.35)$$

Cette loi est représentée sur la figure 3.22 mais son domaine de validité est très restreint et ne couvre pas les conditions envisagées par la suite.

D'un point de vue expérimental, [Poe et Acrivos \(1975\)](#) ont étudié le comportement d'un cylindre et d'une sphère seule dans un écoulement de canal plan cisailé à l'aide d'un système de rouleaux et de courroies parallèles. Grâce à leur dispositif, ils ont pu travailler avec des effets inertiels beaucoup plus marqués ($Re_{\dot{\gamma}} \rightarrow 40$.) Numériquement, [Nirschl et al. \(1995\)](#), par simulation avec une méthode de volumes finis, ont étudié le cas d'une sphère immergée pour des nombres de Reynolds compris entre 0,1 et 100. [Mikulencak et Morris \(2004\)](#) ont étendu cette étude pour $Re_{\dot{\gamma}}$ s'étendant de $4 \cdot 10^{-3}$ à quelques centaines en ayant recours à la méthode des éléments finis.

La vitesse de rotation adimensionnée calculée par les simulations de ce travail est confrontée aux résultats de ces auteurs sur la figure 3.22. Celle-ci diminue d'autant plus que les effets inertiels du fluide sont importants. La tendance qui ressort des simulations correspond bien aux résultats expérimentaux menés par [Poe et Acrivos \(1975\)](#). Néanmoins, la vitesse calculée a tendance à être plus importante que ces mesures lorsque les effets inertiels augmentent. Les investigations numériques menées par [Mikulencak et Morris \(2004\)](#) donnent des valeurs en bonne adéquation avec celles obtenues dans ce travail.

Les lignes de courant sont également représentées pour différents nombres de Reynolds figure 3.23. Les effets inertiels de l'écoulement provoquent une recirculation du fluide, dont les lignes sont représentées en bleu. Ces zones de recirculation n'existent pas dans la solution analytique de Stokes. Ainsi, certaines lignes de courant arrivent d'un côté du plan et repartent par du même côté. Ces zones de recirculation croissent avec les effets inertiels et se rapprochent de la sphère. Cela induit la formation d'une enveloppe

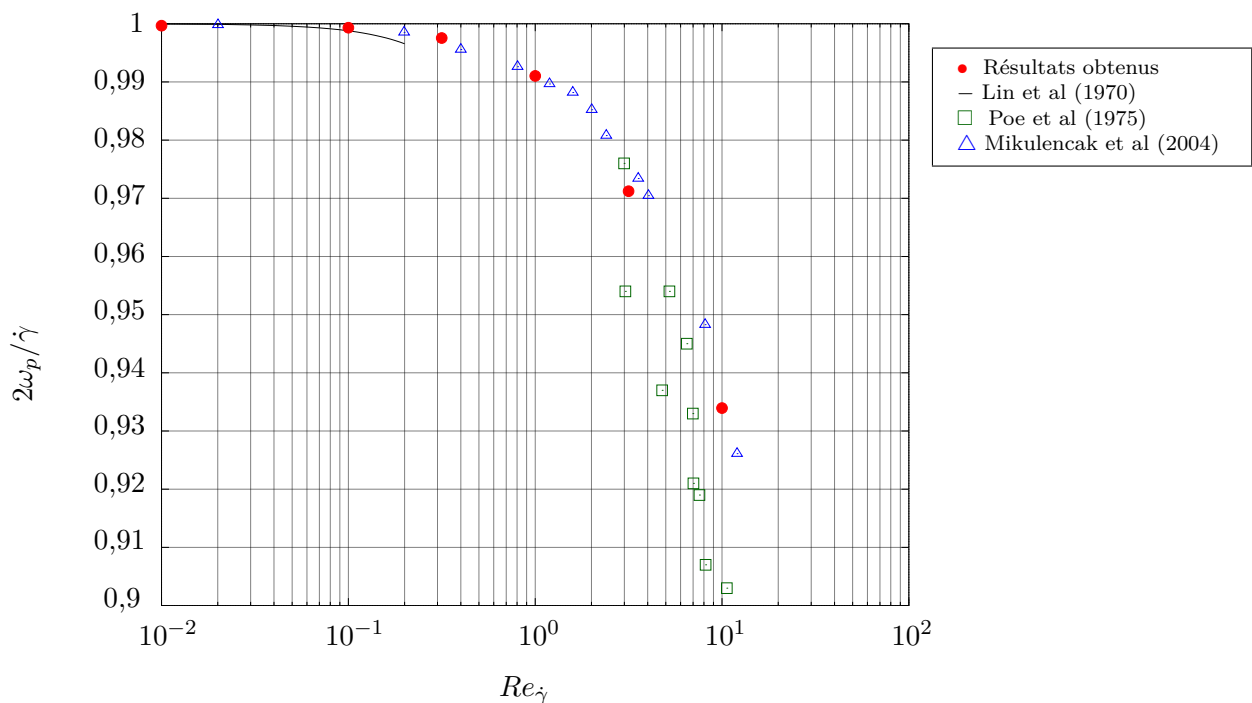


Fig. 3.22 – Vitesse angulaire terminale d'une sphère libre en écoulement cisailé en fonction du nombre de Reynolds de cisaillement : représentation des résultats obtenus ainsi que ceux issus d'autres études expérimentale et numérique.

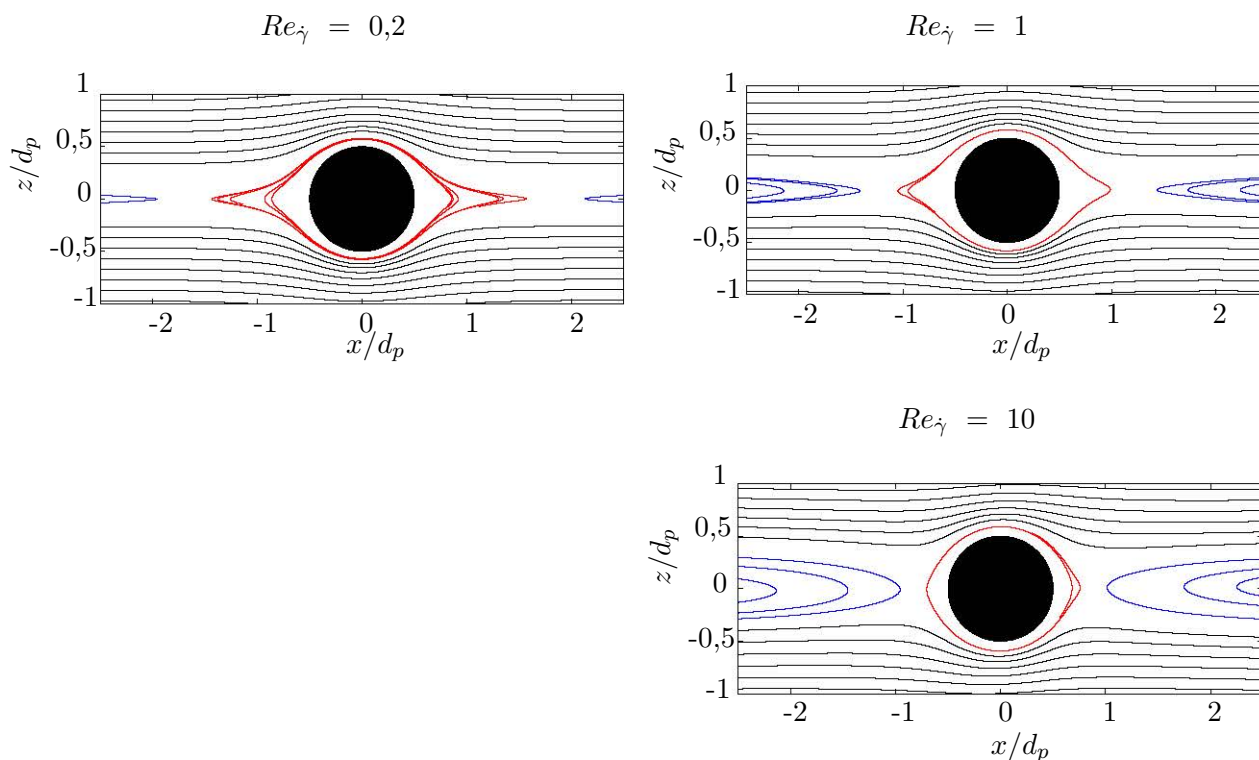


Fig. 3.23 – Lignes de courant du champs de vitesse projeté dans le plan de cisaillement passant par la sphère en régime permanent.

de circulation autour de la sphère (représentée en rouge dans la figure 3.23), d'autant plus reserrée que ces effets sont importants. Ces phénomènes et tendances ont déjà été observés, notamment par [Haddadi et Morris \(2015\)](#).

Les isocontours caractérisant l'écart entre le champ libre et le champ réel perturbé par la particule sont représentés figure 3.24 pour différents nombres de Reynolds, $Re_\gamma \in \{0,0089, 0,2, 1\}$. Il est clair que les symétries observées dans le cas analytique de Stokes disparaissent avec les effets inertiels. En comparant ces isocontours avec la solution analytique de Stokes (représentée en pointillées dans le cas $Re_\gamma = 0,0089$), la portée de la perturbation diminue selon la direction du cisaillement (z), ainsi que dans la direction principale de l'écoulement (x) dans une moindre mesure.

Effets de confinement et dimensionnement du domaine

Si la portée de la perturbation hydrodynamique engendrée par le solide est inférieure à la taille du domaine, la particule peut être considérée comme isolée. Il s'agit donc de s'assurer que l'épaisseur du domaine est suffisamment importante dans les directions x et y où la condition limite de périodicité est appliquée. Au vu des figures 3.14 et 3.15, cette condition est remplie dès lors que l'épaisseur du domaine suivant x dépasse $6d_p$ (écart à 5 %). La perturbation dans la direction normale au plan de cisaillement y , moindre selon la figure 3.13, implique que l'épaisseur $4d_p$ est suffisante. Afin d'assurer l'isolement des particules, les dimensions dans les directions x et y ont été prises égales à $24d_p$ et $12d_p$ respectivement dans la série de simulations clôturant ce chapitre.

D'autres effets de confinement concernent la direction du cisaillement z , où, on le rappelle, des conditions limites de type glissement ont été appliquées. Il s'agit donc d'étudier l'influence de cette épaisseur sur les profils de champ de vitesse.

Les effets de confinement sont illustrés figure 3.25, où les isocontours du champ écart ϵ défini en (3.29) ont été tracés à $Re_\gamma = 0,0089$ (soit dans des conditions proches de Stokes) et superposés pour trois épaisseurs de domaine différentes : $7d_p$, $15d_p$, $24d_p$. La différenciation des cas est assurée par l'emploi de différentes épaisseurs d'isocontours qui augmentent avec le confinement. Il est visible que ces isocontours sont d'autant plus aplatis dans la direction du cisaillement z que le confinement est important. En revanche, en observant l'isocontour à 5%, cet aplatissement est peu compensé par une élongation dans la direction principale de l'écoulement x . Ceci est peut-être dû au fait que la condition limite de glissement, associée à une contrainte entretenant le cisaillement, est moins contraignante qu'une condition limite de type vitesse imposée. L'aplatissement est peu prononcé lorsque l'écart entre le champ réel et l'écoulement libre excède 5%.

Ce chapitre a été l'occasion de valider les solveurs numériques employés tout au long de ce travail. Le comportement hydrodynamique de particules isolées dans différentes configurations d'écoulement ont été testées avec des tendances conformes à ce qui était attendu. Les simulations présentées ont nécessité l'emploi simultané des 3 solveurs LBM, IBM et LPT.

Puisque le code employant ces solveurs fonctionne dans le cas de particules seules, il est naturellement attendu qu'il en soit de même pour une paire de particules isolées dans les mêmes conditions hydrodynamiques. Il s'agit de l'objet principal du chapitre suivant. En guise d'introduction, il sera montré que l'écoulement local à proximité d'un train de bulle peut être vu comme un cisaillement plan en première approximation. Cela justifie les conditions hydrodynamiques utilisées dans le présent chapitre. Au vu des résultats du confinement, la distance de séparation entre la particule et la paroi seront imposées supérieures à $3d_p$ pour toutes les simulations. En ce qui concerne la direction principale de l'écoulement (x), le domaine sera étendu de sorte à assurer une distance de séparation des particules d'au moins quatre diamètres. Quant à la direction normale au plan de cisaillement (y), la distance de séparation entre les particules et les bords du domaine où est appliquée la condition limite de périodicité sera choisie supérieure ou égale à $2d_p$.

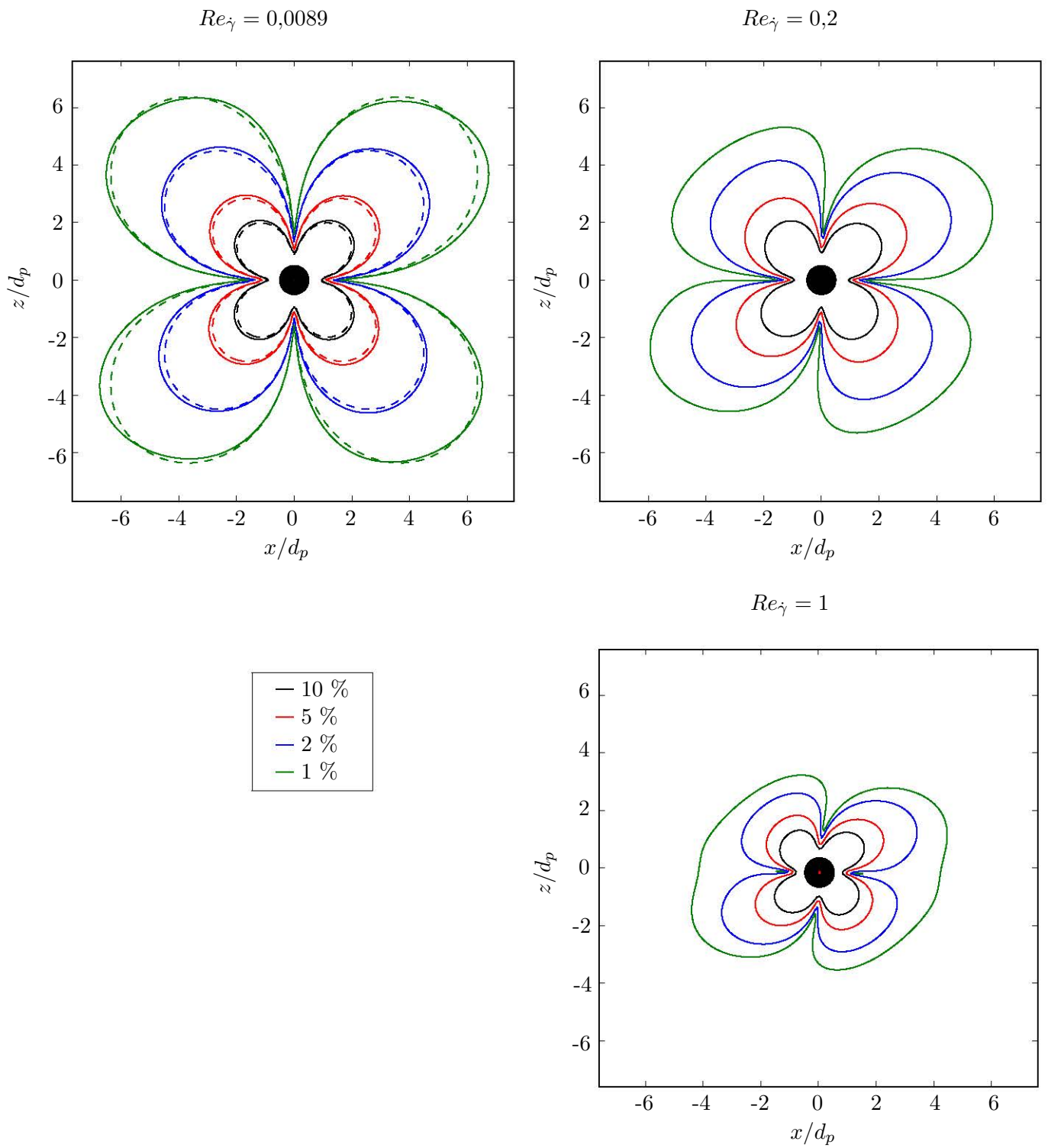


Fig. 3.24 – Isocontours du champ écart obtenus pour trois nombres de Reynolds différents ($Re_\gamma = 0,0089 ; 0,2 ; 1$).

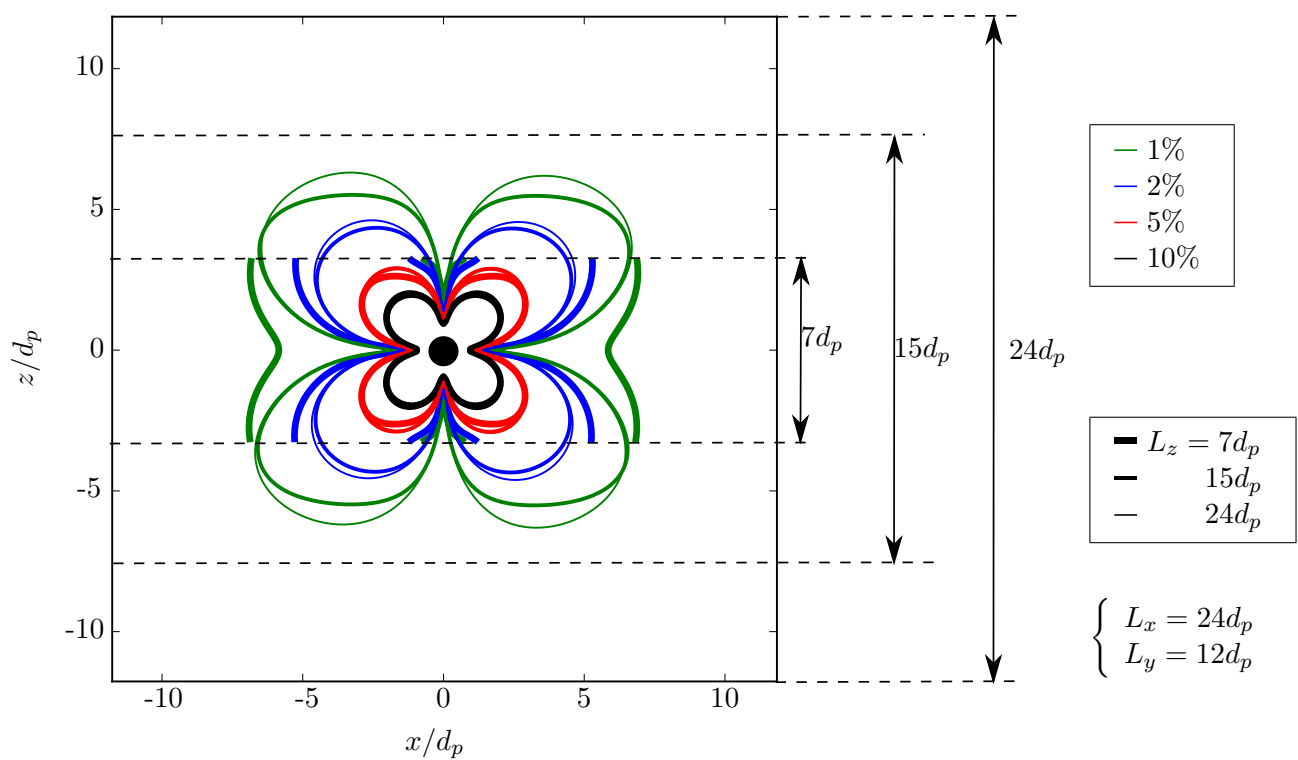


Fig. 3.25 – Isocontours obtenus pour une particule isolée en vue de quantifier les effets de confinement en variant l'épaisseur du domaine dans la direction de cisaillement (z).

Chapitre 4

Surfaces de collision binaire dans un écoulement cisailé plan

Ce chapitre présente les résultats de simulations d'interactions entre deux particules dans les conditions représentatives du procédé de flottation en métallurgie. Ces résultats permettent d'affiner les noyaux de collisions utilisés dans les modèles statistiques à l'échelle macroscopique, en y prenant en compte les interactions d'origine hydrodynamiques.

Les conditions hydrodynamiques sont caractérisées par un écoulement cisailé plan. Des éléments de justification d'une telle configuration sont fournis dans la première partie. Les parties suivantes traitent essentiellement des résultats de suivis de particules en écoulement résolu en trois dimensions et des surfaces de collision qui en découlent (cf chapitre 1, section 1.2.2).

4.1 Choix de l'écoulement cisailé plan

Cette partie apporte des éléments justifiant que l'étude des interactions entre deux particules, à l'échelle mésoscopique et dans les conditions du procédé métallurgique de flottation, peut être menée en écoulement cisailé plan quasi-stationnaire.

4.1.1 Modélisation de la turbulence

En écoulement turbulent, l'échelle de Kolmogorov (η_K , définie au chapitre 1, section 1.2.2) caractérise l'échelle spatiale à partir duquel les cisaillements permettent de dissiper toute l'énergie cinétique par viscosité moléculaire. L'inverse de l'échelle de temps correspondante τ_K (égale à $(\nu/\varepsilon)^{1/2}$, cf annexe A) donne la valeur de cisaillement local $\dot{\gamma}$, qui s'écrit donc :

$$\dot{\gamma} = \left(\frac{\varepsilon}{\nu}\right)^{1/2}. \quad (4.1)$$

Comme les cisaillements à cette échelle dissipent suffisamment d'énergie, ils n'entraînent pas d'échelle plus petite en espace et en temps dans l'écoulement. Par conséquent, des particules immergées dans un écoulement turbulent et ayant une taille plus petite que l'échelle de Kolmogorov (η_K) subissent la valeur

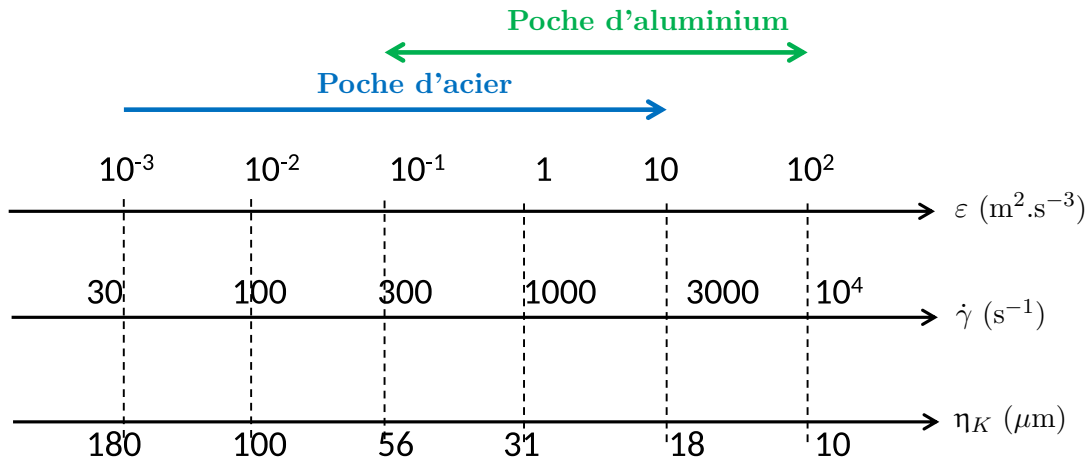


Fig. 4.1 – Échelles typiques de la turbulence d'un métal liquide lors de son traitement par flottation (aluminium et acier).

de cisaillement correspondante. De plus, si ces dernières sont suffisamment proches, alors cela implique que leur durée d'interaction sera petite comparée au temps caractéristique de la turbulence ($1/\dot{\gamma}$).

La figure 4.1 montre les échelles typiques de turbulence, dont la gamme de valeur est déduite de simulations de procédés de flottation en poche d'acier et d'aluminium (Daoud *et al.*, 2011 ; Mirgaux *et al.*, 2009). Dans un bain d'acier ou d'aluminium liquide, une taille caractéristique pour des inclusions d'oxyde est de l'ordre de $10 \mu\text{m}$, ce qui est en deçà de la plus petite échelle de Kolmogorov dans les deux cas. En conséquence, cela justifie la pertinence de l'étude d'interaction binaire d'inclusions de taille $\simeq 10 \mu\text{m}$ en écoulement cisailé permanent.

4.1.2 Noyaux usuels : Saffman & Turner et Smoluchowski

Le noyau binaire de collision turbulente de Saffman & Turner $\beta_{ij}^{turb,S\&T}$ a déjà été introduit dans le chapitre 1 (section 1.2.2) et son expression, pour rappel, s'écrit :

$$\beta_{ij}^{turb,S\&T} = \sqrt{\frac{\pi}{120}} (d_{pi} + d_{pj})^3 \left(\frac{\varepsilon}{\nu}\right)^{1/2}$$

Son utilisation est pertinente si les particules ont une taille inférieure à l'échelle de Kolmogorov et si le nombre de Stokes St_k est inférieur à l'unité. Dans le cas d'un écoulement turbulent, ce nombre est défini comme le produit du taux de cisaillement induit par la turbulence ($1/\tau_K$) avec le temps de relaxation de la particule (τ_p).

Le tableau 4.1 présente les valeurs calculées du nombre de Stokes pour des inclusions d'alumines de taille $d_p = 10 \mu\text{m}$ et de densité $\rho_p = 3950 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$. Ces alumines sont immergées respectivement dans de l'acier et de l'aluminium liquide, dont les propriétés sont également incluses dans ce tableau. Il peut être immédiatement constaté que le nombre de Stokes reste petit devant l'unité quelle que soit la gamme de valeurs considérée. Ainsi, les hypothèses nécessaires pour l'utilisation du noyau de collision de Saffman & Turner sont vérifiées.

Par construction, le noyau de Saffman & Turner néglige les interactions hydrodynamiques à courte distance entre les particules, il est donc valide si la perturbation de l'écoulement engendrée par la présence des particules est négligeable. Ces hypothèses semblent fortes ici. Il sera effectivement prouvé que les

milieu \ paramètres	ρ_f (kg.m ⁻³)	μ (Pa.s)	$\dot{\gamma}$ (s ⁻¹)	St_k
aluminium	2360	1,3 10 ⁻³	$\in \{300, 10000\}$	$\in \{6,6 \cdot 10^{-3}, 0,22\}$
acier	7800	5,5 10 ⁻³	$\in \{30, 3000\}$	$\in \{3 \cdot 10^{-4}, 3 \cdot 10^{-2}\}$

Tab. 4.1 – Valeurs du nombre de Stokes pour des particules d'alumines $d_p = 10 \mu\text{m}$, $\rho_p = 3950 \text{ kg.m}^{-3}$. La densité et la viscosité de l'aluminium et de l'acier ont été choisies pour une température de 1800 K et 1000 K respectivement.

interactions hydrodynamiques influencent les trajectoires des particules et influent donc sur l'efficacité de collision.

En récapitulant, les inclusions d'oxyde de taille égale à $10 \mu\text{m}$ sont transportées par la turbulence, créant un cisaillement local qui, en première approximation, peut être considéré constant pendant l'interaction entre deux particules.

Dans le cas particulier d'un écoulement cisailé plan permanent, [Smoluchowski \(1916\)](#) a établi l'expression du noyau de collision entre deux particules, moyennant des hypothèses similaires à celles de Saffman & Turner :

- les effets inertiels sont négligeables ($St_k \ll 1$),
- les forces motrices en dehors de l'écoulement cisailé (forces de Van der Waals ou la répulsion électrique), sont ignorées,
- la perturbation de l'écoulement engendrée par la présence des particules n'est pas prise en compte.

Ces hypothèses permettent de supposer que les particules suivent les lignes de courant du fluide, dont le profil reste analytique. Le champ de vitesse peut alors être décrit selon l'équation (3.16). La surface de collision est alors un disque de diamètre égale à la somme des diamètres des deux particules. Une illustration de cette configuration d'écoulement est donnée figure 4.2. En reprenant les notations de cette figure, le noyau de collision, défini comme le flux de particules à travers cette surface, peut alors être calculé analytiquement. Le calcul détaillé du noyau de collision donne alors, en utilisant les coordonnées polaires (r, θ) :

$$\begin{aligned}
\beta_{ij}^{Smol} &= \iint_{S_{coll}} \dot{\gamma} z d^2 S \\
&= 4 \int_{r=0}^R \int_{\theta=0}^{\pi/2} \dot{\gamma} r \sin(\theta) r dr d\theta \quad , \quad R = \frac{1}{2}(d_{pi} + d_{pj}) \\
&= 4\dot{\gamma} \left[\frac{r^3}{3} \right]_0^R \left[-\cos(\theta) \right]_0^{\pi/2}
\end{aligned}$$

Finalement, le noyau de collision de Smoluchowski a pour expression :

$$\beta_{ij}^{Smol} = \frac{1}{6} \dot{\gamma} (d_{pi} + d_{pj})^3 . \quad (4.2)$$

Ce noyau, tout comme celui de Saffman & Turner, est proportionnel à la somme des diamètres élevée au cube ainsi qu'au taux de cisaillement. De plus, les coefficients de $\beta_{ij}^{turb, S\&T}$ et β_{ij}^{Smol} , respectivement $1/6$

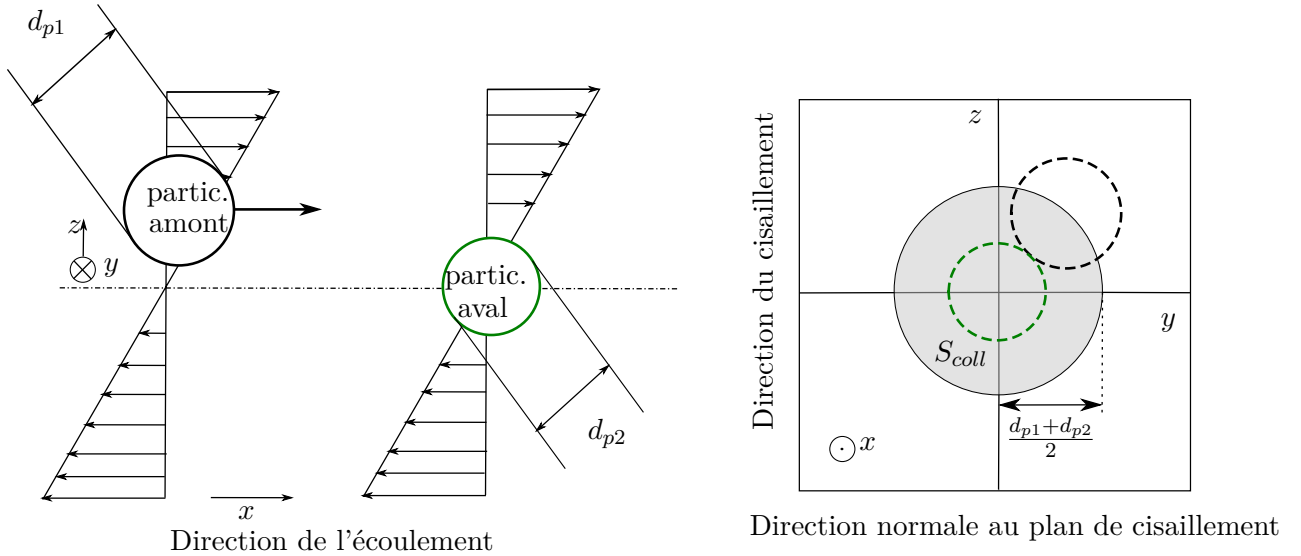


Fig. 4.2 – Configuration de l'écoulement pour des particules dans les conditions idéales de Smoluchowski et disque de collision associé.

et $\sqrt{\pi/120}$, sont très proches,

$$\left(\frac{\pi}{120}\right)^{1/2} \simeq \frac{1}{6} \simeq 0.16 .$$

Ces deux noyaux sont similaires tant du point de vue des hypothèses sur lesquelles ils sont bâtis que du point de vue de leur valeur quantitative. Il est donc possible de supposer que l'efficacité de collision calculée pour une configuration pour rendre compte des interactions hydrodynamiques est généralisable à la seconde. Des exemples d'une telle approche sont présents dans la littérature : [Higashitani *et al.* \(1982\)](#) ont effectué des simulations de particules en écoulement cisailé plan en vue d'extraire des efficacités de collision binaire. Ces dernières ont été réutilisées pour le calcul théorique d'évolution de populations de colloïdes en milieu aqueux turbulent, avec des résultats qui coïncident ([Higashitani *et al.* 1983](#)).

Dans le cadre du projet Flotinc, l'étude des collisions dans un cisaillement plan était également motivée par les travaux collaboratifs envisagés entre les équipes en charge des approches numériques (IJL) et expérimentales en réacteur de Couette (SPIN). De ce fait, les études numériques ont été menées pour des écoulements cisailés plans en considérant qu'il s'agit d'une bonne modélisation locale de la turbulence.

En raison du couplage entre les phases liquide et solide, les solides immergés vont percevoir les perturbations de l'écoulement induites par les particules en approche, ce qui va générer des interactions hydrodynamiques. Si ces dernières sont importantes, elles influenceront sur la trajectoire des particules et par conséquent sur la section de collision qui est un paramètre-clé pour calculer le noyau de collision. Une méthode permettant d'estimer cette section de façon efficiente a été développée au cours de ce travail.

4.2 Détermination de surfaces de collision

En fonction des différentes positions relatives initiales et des interactions en jeu, deux particules dans l'écoulement cisailé vont entrer en collision ou s'éviter. La surface de collision est tracée dans le plan normal à la direction principale de l'écoulement. Elle correspond à l'ensemble des positions relatives initiales ayant aboutis à une collision. Le cisaillement plan, ainsi qu'un exemple de surface de collision

entre les deux particules sont illustrés figure 4.3, où les points en bleus et rouges correspondent à des positions relatives initiales ayant menées respectivement à une collision et un évitement. Une méthode de tirage permet d’optimiser le calcul des surfaces et de concentrer les simulations vers sa frontière. Un résultat de calcul de surface est illustré figure 4.4. Sur cette figure, les points situés dans la zone la plus sombre sont situés dans la surface, alors que ceux localisés dans la zone blanche en sont exclus. Les éléments de surface triangulaire ayant des nuances intermédiaires sont au voisinage de la frontière de la surface de collision, et constituent donc la zone d’intérêt.

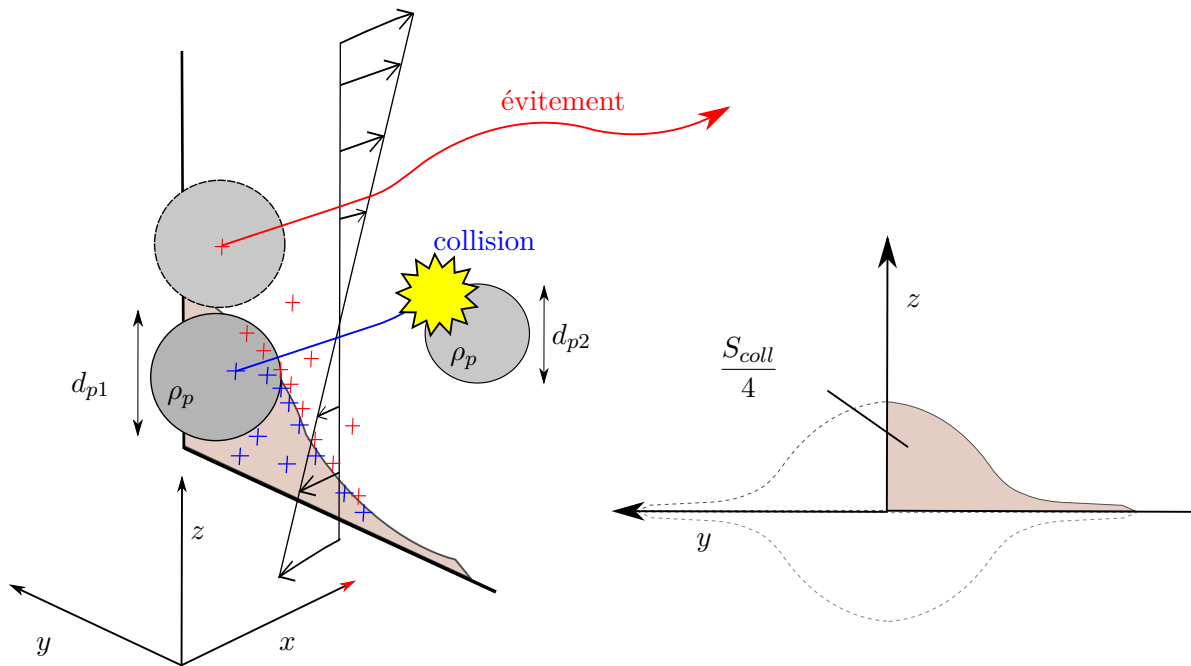


Fig. 4.3 – Configuration de l’écoulement cisailé plan et illustration de la surface de collision à déterminer.

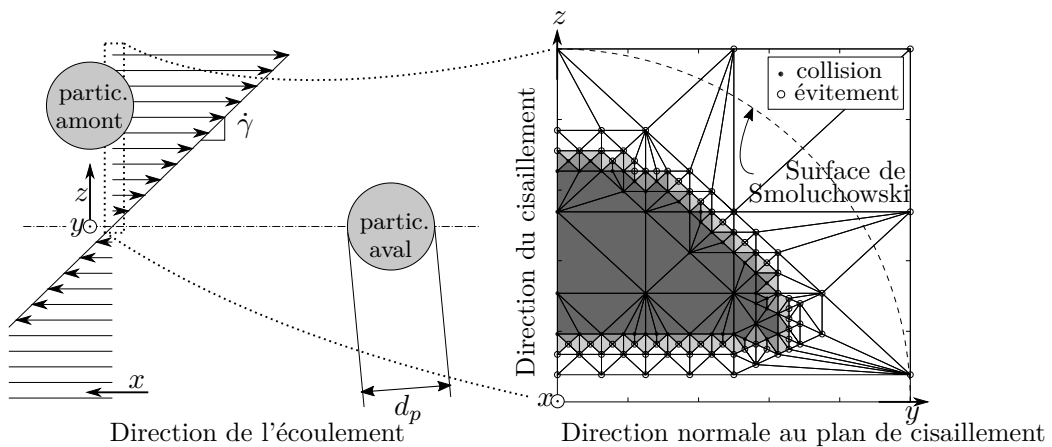


Fig. 4.4 – Détermination itérative de la surface de collision par simulation numérique (résultat issu de 115 simulations d’interaction de sphères à $Re_\gamma = 0,213$).

4.2.1 Méthode de tirage déterministe

Le voisinage de la limite de la surface de collision à déterminer constitue la zone d'intérêt. Afin d'optimiser son tracé, une méthode itérative privilégiant le choix des points situés à proximité directe de la bordure de la surface a été développée. Elle consiste à tirer des positions relatives initiales dans le plan amont. Une valeur binaire est affectée à ce point en fonction du résultats obtenus après calcul des trajectoires des deux particules :

- 1 si la collision a eu lieu,
- 0 sinon.

Le domaine est subdivisé en triangles T_i dont les sommets correspondent aux points tirés. Ces triangles sont complémentaires, de sorte que la somme de leur aire égale celle du domaine.

Suivant sa taille et les valeurs binaires de ses sommets, ce triangle sera subdivisé ou non au cours du tirage. Les triangles les plus grands et dont les sommets n'ont pas tous la même valeur binaire sont subdivisés en priorité. Ainsi, les points auront tendance à être concentrés près de la frontière de la surface de collision. Le principe de cette méthode itérative est illustré figure 4.5. Pour des raisons de symétrie, la zone de tirage peut être réduite à un quart de la surface. Dans la figure 4.5, les cercles blancs et les points noirs correspondent aux positions relatives initiales de la particule amont ayant menés respectivement à des collisions et des évitements. Si la surface est suffisamment régulière ou le maillage assez fin, les triangles sombres sont intégralement compris dedans (« triangles complets ») et les blancs en sont totalement exclus. La frontière passe alors dans les triangles ayant une teinte intermédiaire. Ces derniers peuvent être alors dénommés « triangles hybrides ».

Une fois la surface estimée par le tirage, il est possible de déduire son aire, ainsi qu'une borne d'incertitude. En effet, la frontière de la surface étant censée être strictement comprise entre les triangles complets et hybrides d'aire respective $\mathcal{A}_{i,complet}$ et $\mathcal{A}_{i,hybride}$, son aire \mathcal{A}_{coll} vérifie :

$$4 \sum_i \mathcal{A}_{i,complet} < \mathcal{A}_{coll} < 4 \left(\sum_i \mathcal{A}_{i,complet} + \sum_i \mathcal{A}_{i,hybride} \right) \quad (4.3)$$

Le facteur 4 présent dans l'équation (4.3) est dû au fait que le tirage est effectué sur un quart de section, par symétrie. L'aire exacte \mathcal{A}_{coll} peut être approximée en pondérant les aires des triangles en fonction du nombre de leurs sommets inclus dans la surface de collision (\mathcal{N}_i) :

$$\mathcal{A}_{coll} \simeq \sum_{i=1}^{N_{triangles}} \frac{\mathcal{N}_i}{3} \mathcal{A}_i \quad (4.4)$$

La méthode de tirage est efficace si la surface a une forme suffisamment régulière. Elle présente des limites dans le cas où le domaine étudié n'est pas simplement connexe. Par la suite, on suppose que les paramètres physiques en jeu n'engendrent pas de telle forme.

4.2.2 Critères d'arrêt

Initialement dans ce travail, les critères d'arrêt implémentés qui portent sur le phénomène de collision ou d'évitement se sont grandement inspirés de ceux de [Vanni et Baldi \(2002\)](#). Pour rappel, ils ont étudié numériquement la trajectoire relative de deux particules colloïdales sphériques isolées en écoulement cisailé à l'aide d'une résolution par la dynamique stokesienne. En notant r la distance entre les deux centres de masse des particules,

$$r = \|\vec{x}_{pi} - \vec{x}_{pj}\| ,$$

La collision est détectée dès lors que les particules se touchent ou se sont interpénétrées. Dans le cas de la sphère, cette détection a lieu si :

$$r - \frac{1}{2}(d_{pi} + d_{pj}) \leq 0$$

Une présentation complète des interactions physico-chimiques à courte distance est détaillée en annexe B.

Le cas d'ellipsoïdes est plus délicat car il n'existe pas de formule analytique simple pour savoir s'il y a interpénétration en fonction des distances des centres de masse et des orientations respectives. C'est donc un critère sur les surfaces des ellipsoïdes discrétisées qui a été choisi. L'algorithme implémenté réutilise les marqueurs de surface de l'IBM. Il est décrit dans la section 2.1.1. Il a été vérifié a posteriori que la profondeur de pénétration n'excède jamais $c/2000$, ce qui justifie la bonne précision de ce critère.

Il faut souligner que Vanni et Baldi (2002) étudient le phénomène de coagulation de colloïdes de tailles micrométriques en faisant intervenir des interactions de type Van der Waals qui tendent vers une valeur infinie dès lors que les particules entrent en contact. Pour palier les problèmes de divergence d'ordre numérique, ils considèrent que la coagulation a lieu dès lors que les particules sont à une distance inférieure à $5.10^{-8}d_p$. Néanmoins, ce problème n'entre pas en compte dans ce travail comme expliqué à la section 4.3.

Les critères d'évitement sont communs aux sphères et aux ellipsoïdes. Il y a évitement dès lors que les particules sont passées à hauteur l'une de l'autre sans être entrées en collision. Afin de visualiser cet évitement et de mettre en évidence ce contournement, les simulations sont stoppées lorsque les deux particules se sont dépassées d'une distance suivant l'écoulement d'environ un rayon. Concrètement,

$$\text{il y a évitement si } x_{p1} - x_{p2} > \frac{1}{2} \min(d_{p1}, d_{p2}) \quad (4.5)$$

Dans l'équation 4.5, par convention, les particules amont et aval ont l'indice 1 et 2 respectivement, de sorte que $x_{p1} < x_{p2}$ au début des simulations. Pour des raisons qui seront détaillées à la section 4.5, un critère supplémentaire a été implémenté au cours de ce travail. Contrairement à la dynamique stokesienne, à nombre de Reynolds non nul, les particules sont susceptibles de traverser le plan de vitesse nulle $\vec{v}_f = \vec{0}$. Dans ce cas, elles ne passent jamais à hauteur l'une de l'autre ($x_{p2} - x_{p1}$ toujours positif). Ceci a amené à ajouter le critère suivant :

$$\text{il y a évitement si, pendant une période } \Delta t = \frac{d_p}{\dot{\gamma} |\Delta z|}, \quad \begin{cases} x_{p1} - x_{p2} < 0 , \\ v_{x,p1} - v_{x,p2} < 0 , \end{cases} \quad (4.6)$$

Un diagramme où l'ensemble de ces critères sont regroupés est proposé figure 4.6.

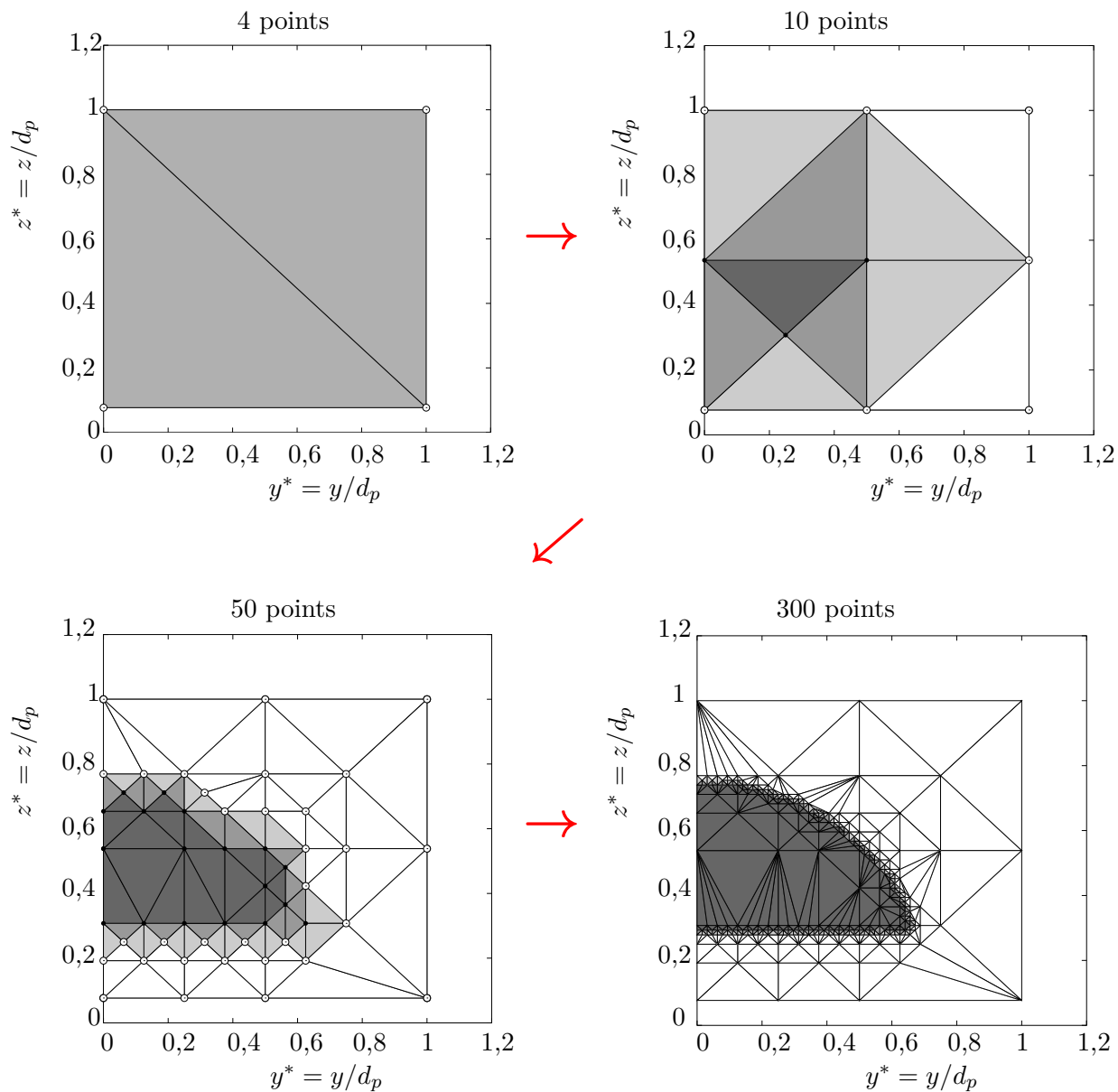


Fig. 4.5 – Principe de la méthode de tirage développée pour ce travail.

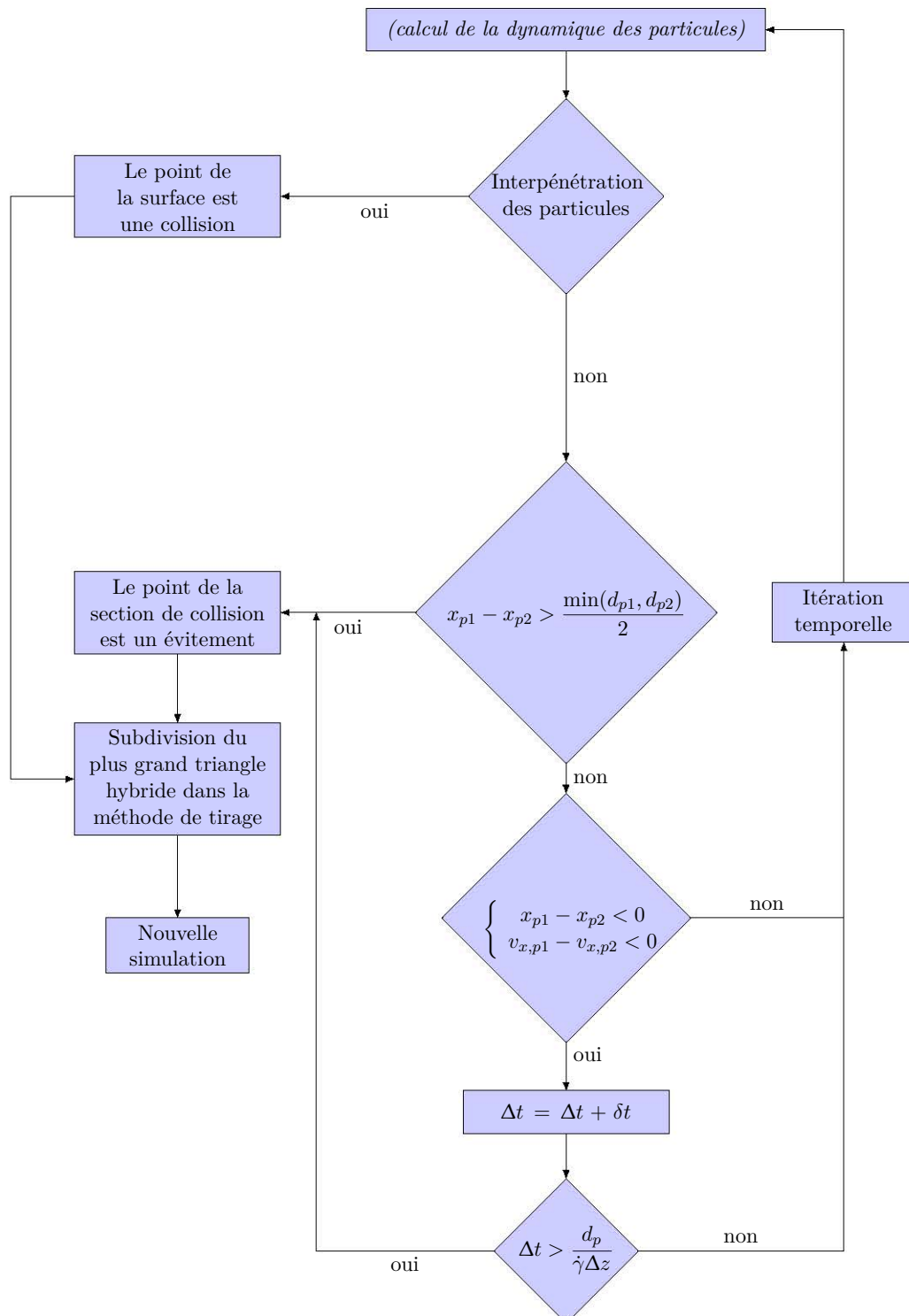


Fig. 4.6 – Diagramme générique de l'ensemble des critères d'arrêt utilisés dans ce travail.

4.3 Paramètres influents sur la collision binaire

4.3.1 Liste des paramètres

Les trajectoires relatives des particules dépendent de leurs positions initiales et du taux de cisaillement qui, à lui seul, caractérise le profil de l'écoulement ($\vec{\nabla}_f = \dot{\gamma}z \vec{\mathbf{e}}_x$). Les autres paramètres susceptibles d'influer sur la section de collision sont les propriétés physiques des deux phases. Elles sont notamment caractérisées par leur masse volumique respective (ρ_f et ρ_{pi} , $i \in [1, 2]$). La phase fluide est par ailleurs caractérisée par sa viscosité dynamique (μ). Les particules étant sphériques ellipsoïdales, leur géométrie est caractérisée par leur taille (d_{pi}) ainsi que leur sphéricité (ψ_p). Cette grandeur caractérise le rapport entre la surface d'une sphère de volume identique V_p par la surface effective A_p et est donc définie par :

$$\psi_p = \frac{\pi^{1/3}(6V_p)^{2/3}}{A_p} \quad (4.7)$$

D'autres paramètres d'ordre physico-chimiques à l'origine de forces d'interaction à courte distance entre les deux particules seraient susceptibles d'intervenir, telles que la constante de Hamaker A_h , le potentiel électrostatique pour des milieux ionisants, l'épaisseur de la double couche électrique ou encore celle d'un pont gazeux. Toutefois, les interactions non-hydrodynamiques, ou hydrodynamique à faible distance, ont été négligées. En effet, leur portée, représentée figure 4.7, est en-deçà de la résolution numérique. De plus, il n'est pas forcément évident de quantifier certaines longueurs caractéristiques comme l'épaisseur du pont gazeux. Les résultats illustrés dans la figure 4.7 sont issus de réflexions détaillées en annexe B.

Par conséquent, seuls les paramètres listés précédemment et reportés dans le tableau 4.2 ont été pris en compte.

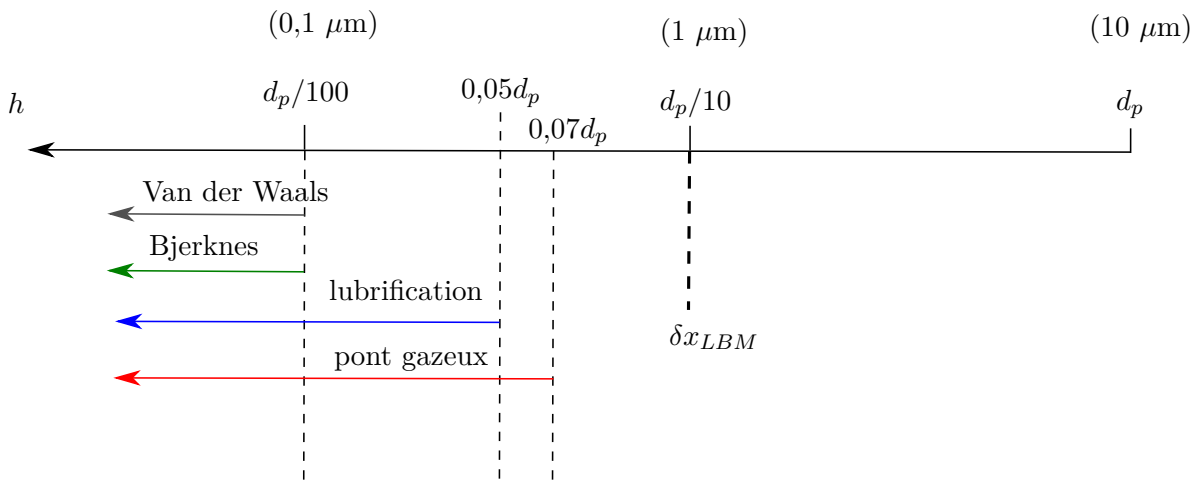


Fig. 4.7 – Portée quantitative des interactions à courte distance pour des inclusions d'une taille $10 \mu\text{m}$, étudiées en annexe B.

Tab. 4.2 – Liste des paramètres dimensionnés.

Nomenclature	Description	Unité
ρ_{p1}, ρ_{p2}	masse volumique des particules	kg.m^{-3}
ρ_f	masse volumique du fluide	kg.m^{-3}
μ	viscosité dynamique du fluide	$\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$
d_{p1}, d_{p2}	diamètre des particules	m
ψ_{p1}, ψ_{p2}	sphéricité des particules	(-)
$\dot{\gamma}$	taux de cisaillement	s^{-1}

Tab. 4.3 – Liste des paramètres adimensionnés indépendants.

Nomenclature	Description
$\rho_{pi}^* = \frac{\rho_{pi}}{\rho_f}$	masse volumique adimensionnée des particules
$d_{pi}^* = \frac{\max_i(d_{pi})}{\min_i(d_{pi})}$	rapport de taille entre les particules
ψ_{pi}	sphéricité des particules
$Re_{\dot{\gamma}} = \frac{\rho_f \dot{\gamma} \max_i(d_{pi})^2}{\mu}$	nombre de Reynolds

4.3.2 Choix d'un jeu de paramètres indépendants et adimensionnement

Au vu du tableau 4.2, la masse, la longueur et le temps sont les seules dimensions utilisées. Il s'agit donc de trouver trois grandeurs dimensionnellement indépendantes. La masse volumique du fluide, le plus grand diamètre des deux particules et la viscosité dynamique conviennent, puisque :

- $\rho_f d_p^3$ est homogène à une masse,
- d_p est homogène à une longueur,
- la grandeur $\rho_f d_p^2 / \mu$ est homogène à un temps.

Ainsi, par application du théorème de Vashy-Buckingham (ou théorème π), ces trois paramètres peuvent être utilisés pour adimensionner tous les autres, et seules les quantités adimensionnées présentes dans le tableau 4.3 sont indépendantes. L'influence des effets hydrodynamiques se retrouve dans le nombre de Reynolds particulaire construit sur le taux de cisaillement $Re_{\dot{\gamma}}$

Un bon critère pour savoir si l'inertie des particules exerce une influence ou non pour des valeurs données est d'avoir recours au nombre de Stokes (St), déjà défini au chapitre 1 (expression (1.26)) :

$$St_i = \frac{(\rho_{pi} + \frac{1}{2}\rho_f)\dot{\gamma}d_p^2}{18\mu}$$

Ce dernier ne figure pas dans le tableau 4.3 car il peut être construit à partir des masses volumiques adimensionnées et du nombre de Reynolds :

$$St = \frac{1}{18} \left(\frac{\rho_p}{\rho_f} + \frac{1}{2} \right) Re_{\dot{\gamma}} \quad (4.8)$$

Dans les simulations qui suivent, les nombres de Stokes restent toujours nettement inférieurs à l'unité, ce qui permet d'affirmer que l'influence de l'inertie des particules est négligeable. De ce fait, seuls les deux paramètres $Re_{\dot{\gamma}}$ et d_p^* seront pris en compte. Une justification plus approfondie grâce à la comparaison de trajectoires pour des densités ρ_p^* différentes sera néanmoins discutée à la section 4.5.1.

4.4 Validations préliminaires : calculs de déviation

De nombreux travaux de recherches ont été menés pour étudier le comportement de particules sphériques en écoulement cisailé plan permanent en régime de Stokes (voir chapitre 1, section 1.2.3). En particulier, Adler (1981) a étudié, à partir de la dynamique stokesienne, le cas où seules les interactions hydrodynamiques sont présentes pour des particules de différentes tailles situées dans le même plan de cisaillement. Ses résultats sont comparés à ceux issus des simulations effectuées dans ce travail dans des conditions similaires.

4.4.1 Conditions initiales et limites

Afin de résoudre la trajectoire de deux sphères isolées à l'aide de la dynamique stokesienne, Adler (1981) a placé initialement les particules suffisamment loin l'une de l'autre afin qu'elles ne voient pas la perturbation de l'écoulement due à leur présence. À partir des résultats obtenus, il a pu calculer la hauteur relative maximale qui est atteinte lorsque les particules passent à hauteur l'une de l'autre. Cette hauteur dépend de la hauteur relative initiale. Le principe de cette simulation est illustré figure 4.8, où les hauteurs relatives initiale et maximale sont notées respectivement z_0 et z_{max} . Les effets hydrodynamiques engendrés par les particules génèrent une déviation, d'autant plus marquée qu'elles sont à proximité l'une de l'autre du fait des effets visqueux accrus dans la zone de séparation.

Le profil de cisaillement plan permanent est obtenu par application des conditions initiales et des conditions limites décrites dans le chapitre 3 (section 3.2.2). Initialement, les particules sont placées de sorte que leur distance soit de l'ordre de cinq fois leur diamètre ($5d_p$). Les particules de tailles différentes sont quant à elles distantes de cinq fois leur diamètre moyen ($5(d_{p1} + d_{p2})/2$).

Afin de comparer les résultats de ce travail à ceux d'Adler (1981), des calculs d'évitement entre deux particules sont effectués dans des conditions relativement proches de celles de Stokes (cf chapitre 3, figure 3.21), avec les paramètres suivants :

$$\begin{cases} \rho_p^* = 2 \\ Re_{\dot{\gamma}} = 0,01 \end{cases}$$

Initialement, les vitesses linéaire et angulaire de la particule sont égales à celle de la solution analytique du champ fluide en leur centre de masse :

$$\begin{cases} \vec{v}_{pi}(t=0) = \dot{\gamma} z_{pi} \vec{e}_x \\ \vec{\omega}_{pi}(t=0) = \frac{1}{2} \dot{\gamma} \vec{e}_y \end{cases} \quad (4.9)$$

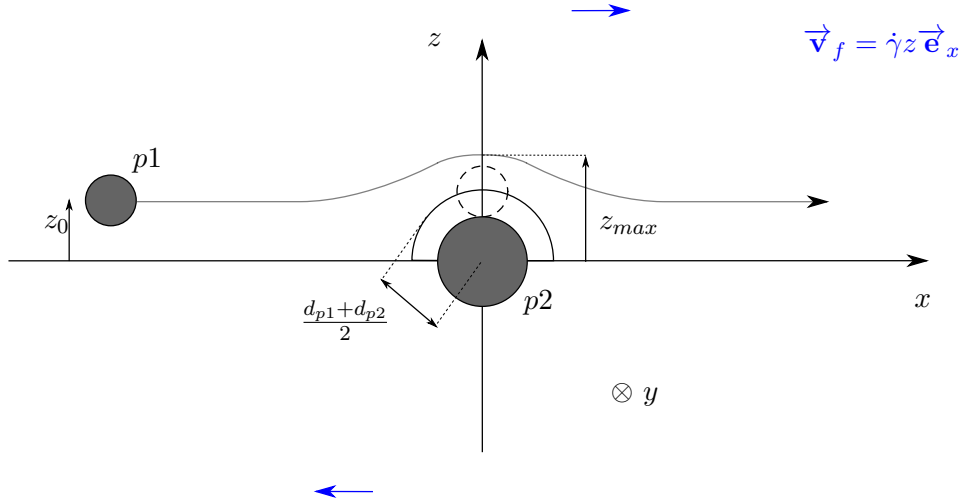


Fig. 4.8 – Illustration de la trajectoire d’une particule (p_1) dans le repère de la seconde particule (p_2) en régime de Stokes avec les seuls effets hydrodynamiques.

Les particules sont placées de part et d’autre et à égale distance du plan médian xz , de sorte qu’elles ne sortent pas du domaine pendant la durée de la simulation. Dans le cas où elles ont une taille différente, leur distance par rapport à ce plan médian $D_{pi,median}$ est ajustée de la façon suivante :

$$D_{pi,median} = z_0 \frac{d_{pj}^2}{d_{pi}^2 + d_{pj}^2}, \quad i \neq j$$

Étant donné que le nombre de Reynolds est très petit ici, l’écoulement autour des particules est initialisé avec la solution de Stokes, décrite dans le chapitre 3 (équations 3.25 et 3.28). La méthode de frontière immergée de ce travail utilise un écoulement de fluide virtuel à l’intérieur des particules. Afin d’assurer la continuité avec la solution de Stokes à la surface des solides, le champ de vitesse dans cette zone est initialisé avec une rotation du solide. Le champ de pression initial est quant à lui décroissant de façon linéaire de la surface au centre de la sphère. Ceci permet de limiter une brusque variation de ce champ à la surface des particules, générant des ondes acoustiques parasites.

Cette initialisation est pertinente pour des régimes à faible nombre de Reynolds comme c’est le cas ici. Pour des valeurs de Re_γ plus importantes, il faut que l’écoulement ait le temps de s’établir avant l’interaction des deux particules, dont la durée t_{inter} peut être estimée comme le temps que mettent les deux particules pour se retrouver à la hauteur l’une de l’autre, soit :

$$\begin{aligned} t_{inter} &= \frac{|x_{p2} - x_{p1}|_{t=0}}{|v_{p2} - v_{p1}|_{t=0}} \\ &= \frac{|x_{p2} - x_{p1}|_{t=0}}{2\dot{\gamma}z_0} \end{aligned} \quad (4.10)$$

Le temps d’établissement est difficile à estimer. Étant donné que le nombre de Reynolds est généralement inférieur à l’unité dans ce travail, le temps de diffusion t_{diff} est donc un temps caractéristique supposé pertinent. Il s’agit de la durée nécessaire à la diffusion de la quantité de mouvement du fluide suivant une longueur de l’ordre le diamètre de la particule d_p , soit :

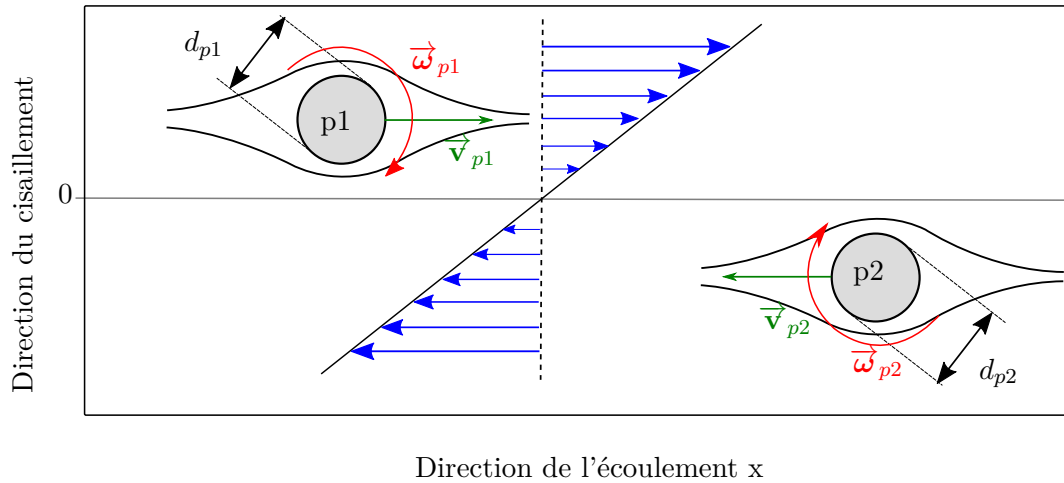
$$t_{diff} = \frac{d_p^2}{\nu} \quad (4.11)$$

En comparant cette durée au temps d'interaction défini équation (4.10), avec des valeurs $|x_{p2} - x_{p1}|_{t=0}$ et z_0 respectivement égales à $5d_p$ et d_p :

$$\frac{t_{diff}}{t_{inter}} = \frac{1}{5} \frac{\dot{\gamma} d_p^2}{\nu} = \frac{1}{5} \underbrace{Re_\gamma}_{<1} \ll 1$$

Ainsi, l'écoulement a bien le temps de s'établir avant que les particules n'interagissent. Afin de limiter la durée nécessaire à l'établissement de l'écoulement pour $Re_\gamma < 1$, les champs initiaux de vitesse et de pression du fluide sont égaux au profil analytique de Stokes. De tels profils ont également été choisis pour l'initialisation des champs à des nombres de Reynolds de l'ordre de l'unité, en supposant que les effets inertiels de l'écoulement ont une influence limitée sur l'établissement de l'écoulement.

Les conditions initiales sont représentées figure 4.9 dans le cas de deux sphères de même taille.



$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{v}_f(t=0) = \dot{\gamma} z \vec{e}_x + \vec{v}' \quad (\text{voir chapitre 3, section 3.2.1}) \\ \vec{v}_{pi}(t=0) = \dot{\gamma} z_{pi} \vec{e}_x \\ \vec{\omega}_{pi}(t=0) = \frac{\dot{\gamma}}{2} \vec{e}_y \end{array} \right.$$

Fig. 4.9 – Conditions initiales appliquées dans le cas de deux sphères isolées identiques.

Les résultats sont présentés dans la section suivante, où l'évolution de la hauteur relative maximale z_{max} en fonction de z_0 est étudiée.

4.4.2 Déviation pour deux sphères isolées

Dans un premier temps, une trajectographie complète pour deux sphères de taille identique est présentée, avec l'évolution de la hauteur maximale en fonction de la hauteur initiale. Cette évolution est ensuite analysée pour un rapport de taille double.

Déviation pour deux sphères identiques

La résolution du maillage des deux sphères étudiées ici est de 13 mailles LBM par diamètre. Elles sont initialement placées à une distance de séparation d'environ quatre diamètres ($4d_p$).

L'évolution de la trajectoire de la particule amont par rapport à la particule aval pour différentes hauteurs z_0 est représentée figure 4.10. Conformément à ce qui est attendu, la hauteur relative maximale z_{max} est bien atteinte lorsque les deux sphères sont à hauteur l'une de l'autre ($x_{p2} = x_{p1}$).

La différence maximale de position z_{max} selon le plan de cisaillement en fonction de la hauteur initiale z_0 est représentée figure 4.11. Les résultats d'Adler (1981), obtenus par lecture graphique, ont également été fournis en vue d'une comparaison. Si les résultats obtenus sont en excellente adéquation avec ceux obtenus en régime de Stokes pour les gammes de valeur supérieures de z_0 , une différence plus notable est observée pour les plus faibles hauteurs relatives initiales, où la déviation maximale calculée est moins importante que les résultats d'Adler (1981). Cela peut s'expliquer en partie par le fait que l'on travaille à un nombre de Reynolds qui, bien que petit, possède une valeur finie. Une autre raison est que les particules de plus faible hauteur initiale sont celles qui se rapprochent le plus. Or, dans de telles configurations, du fait de la résolution de l'écoulement sur un maillage discret, les forces hydrodynamiques sont susceptibles de ne pas être correctement résolues par les outils numériques de ce travail lorsque les sphères sont distantes de moins d'une demi-maille, soit de l'ordre de 5% de leur diamètre. Il s'avère que la distance minimale entre les deux sphères est effectivement en-deçà de $0,05d_p$ pour une hauteur initiale inférieure à 80% du diamètre des particules. Au vu de la figure 4.11, cela correspond bien à la gamme de valeur où ces différences sont observées.

Résultats pour un rapport de taille double

La taille de la sphère aval est deux fois plus importante que la sphère amont, correspondant à une résolution du maillage respective de 26 et 13 mailles LBM par diamètre. La hauteur relative maximale en fonction de z_0 est fournie figure 4.12, qui comprend également les résultats d'Adler obtenus par lecture graphique.

De façon analogue aux particules de même diamètre, les résultats obtenus diffèrent de ceux en régime de Stokes pour les plus faibles valeurs de hauteurs initiales, cette fois inférieures au diamètre moyen des particules. Ceci concerne également les sphères qui se rapprochent à une distance inférieure à une demi-maille. Des techniques de modélisation des forces hydrodynamiques existent pour de telles distances. Néanmoins, cela sort du cadre de ce travail pour des raisons évoquées en annexe B.

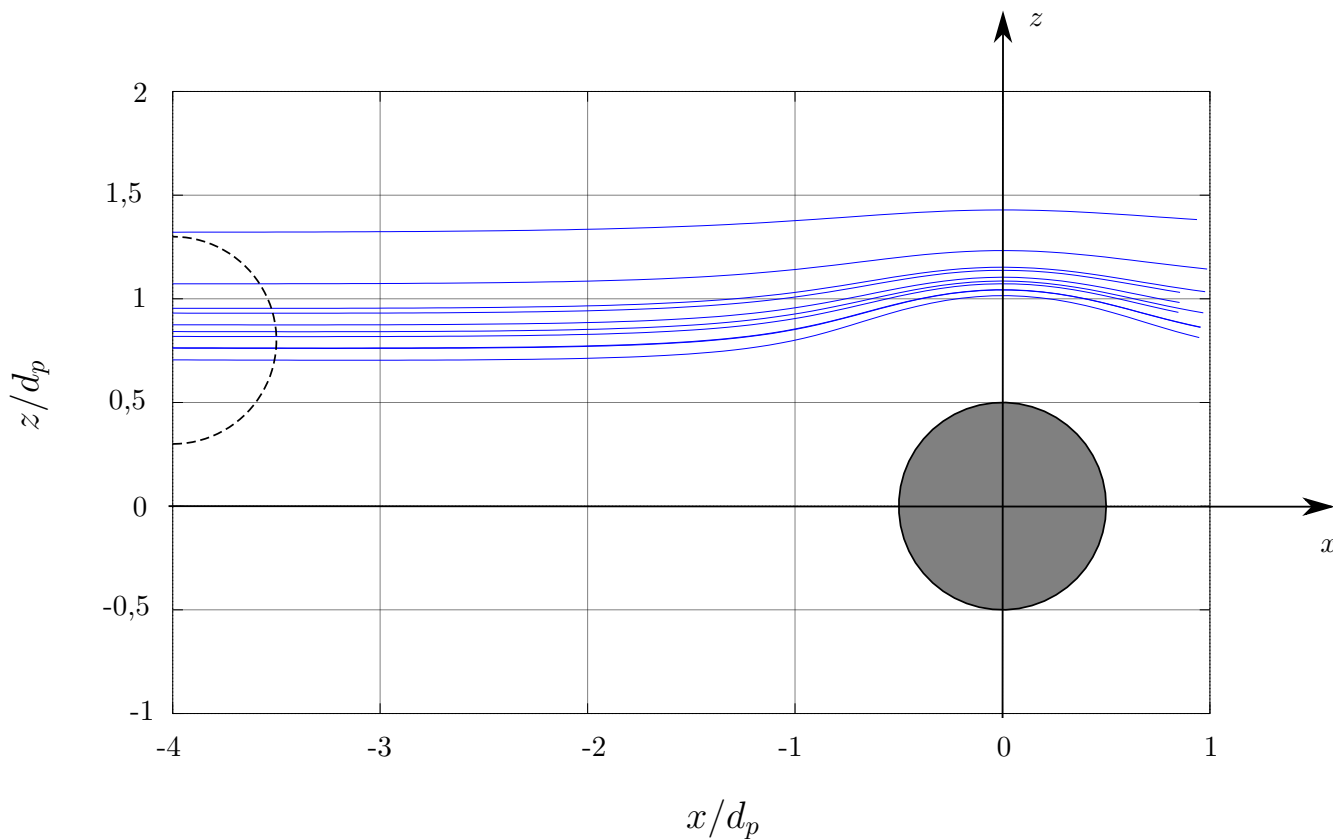


Fig. 4.10 – Trajectographie pour deux particules de taille identique ($Re_\gamma = 0,01$, $\rho_p^* = 2$).

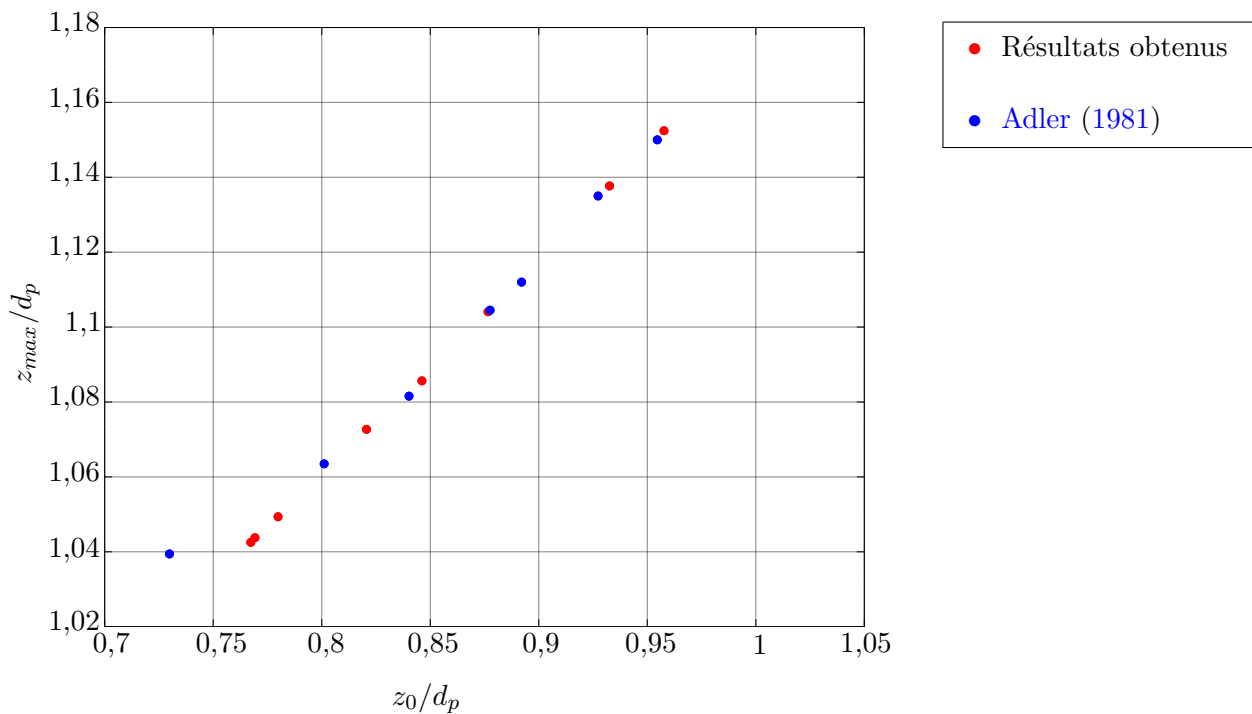


Fig. 4.11 – Évolution de la hauteur relative maximale en fonction de la hauteur initiale pour deux sphères de même taille.

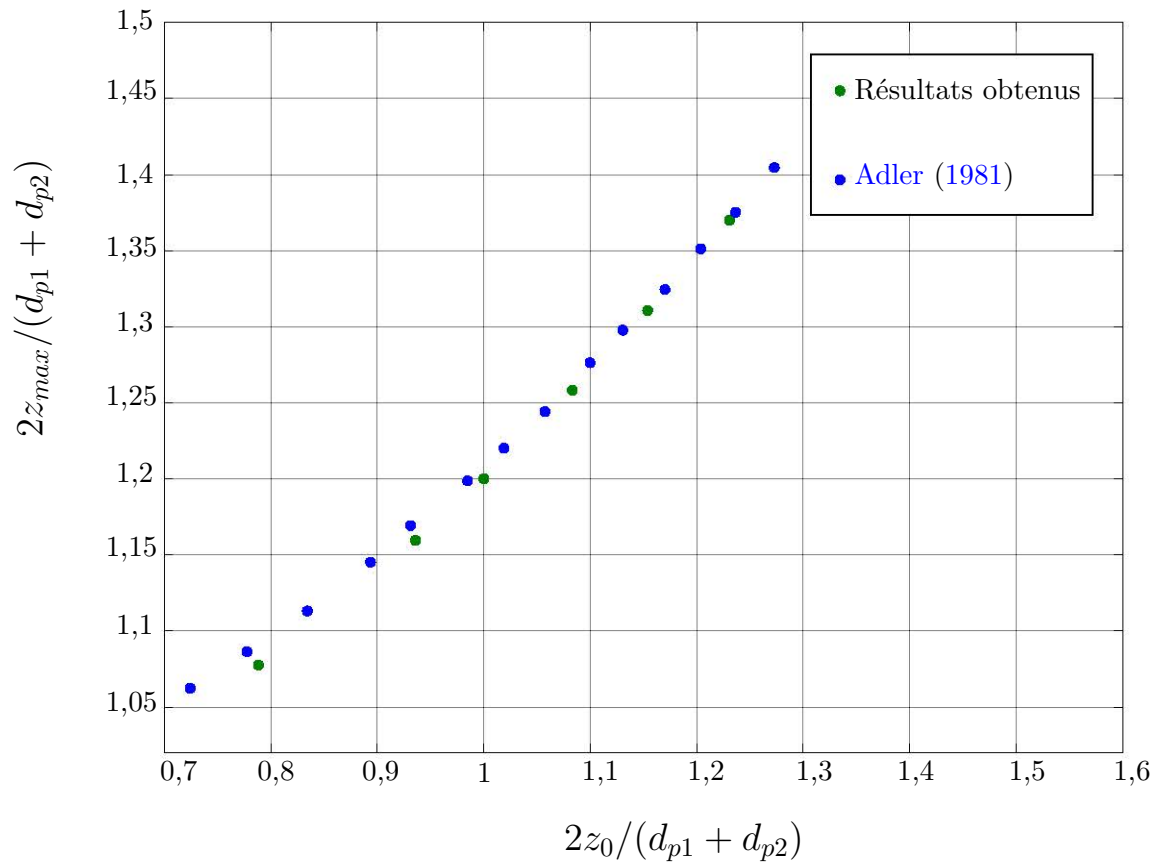


Fig. 4.12 – Évolution de la hauteur relative maximale en fonction de la hauteur initiale pour deux sphères avec un rapport de taille de 2.

4.5 Analyse des interactions hydrodynamiques

Les résultats de déviation des particules dû aux effets hydrodynamiques montrent que ces derniers favorisent l'évitement entre deux particules. Dans les conditions de Stokes, il n'y a même aucune collision possible en l'absence d'une autre force motrice de nature non hydrodynamique. Il est donc attendu que la surface de collision ait une aire réduite par rapport à celle de Smoluchowski. Cette partie est consacrée à l'influence des différents paramètres sur la forme de la surface de collision dans des gammes de valeur proches des conditions du procédé de flottation d'un métal liquide.

4.5.1 Influence des effets inertiels des particules

Cette partie est particulièrement importante dans la mesure où il faut montrer que les effets inertiels ne sont pas prépondérants dans les conditions représentatives du procédé de flottation. En effet, la méthode de frontière immergée utilisée ici limite les calculs de trajectoire à des particules plus denses que le fluide environnant puisque cette méthode ne permet pas de s'affranchir des effets de l'inertie du fluide compris dans les particules. En pratique, certaines inclusions comme les alumines dans l'acier sont plus légères que le métal liquide environnant.

Afin de quantifier l'impact que peut avoir l'inertie des solides sur la surface de collision, des surfaces ont été tracées figure 4.13 pour des rapports de densité $\rho_p^* \in [2, 10]$ et pour deux nombres de Reynolds différents. Le premier, pris égal à 0,319, correspond au cas limite maximal des conditions du procédé de flottation dans un acier pour des inclusions de taille moyenne de 10 μm (cf l'introduction générale ainsi que la figure 4.1). La seconde valeur de Re_γ , égale à 1,42, correspond à un écoulement fortement cisailé, a priori favorable à l'apparition des effets inertiels des particules au vu du nombre de Stokes égal à 0,2 d'après l'expression 4.8. Les points correspondant à des positions initiales ayant abouties à une collision et un évitement sont représentés respectivement en bleu et en rouge.

Dans tous les cas, les surfaces sont incluses dans celle de Smoluchowski, ce qui montre bien que les effets hydrodynamiques limitent la probabilité de collision entre particules. Il apparaît également que la surface à $Re_\gamma = 0,319$ change peu avec l'inertie des solides. Son aire augmente d'environ 5 % sachant qu'il subsiste des marges d'incertitude liées à ce calcul (cf section 4.2.1). Ainsi, les effets inertiels ont peu d'impact sur le comportement de deux particules isolées en interaction dans les conditions de flottation.

En revanche, l'aire augmente avec ρ_p^* dans le cas de l'écoulement fortement cisailé (environ 11 %). En particulier, la surface est élargie pour les plus grandes valeurs de z correspondantes aux vitesses relatives les plus importantes ie les zones où les effets inertiels de particules sont les plus marqués, ce qui est cohérent. Sachant que de telles valeurs de Re_γ constituent les limites de cette étude et que les effets inertiels sont largement surestimés avec $\rho_p^* = 10$, dans les résultats présentés ci-après, le rapport de densité ρ_p^* est pris égal à 2 et l'inertie des particules est supposée négligeable par la suite.

4.5.2 Interactions entre sphères de taille identique

L'importance des effets hydrodynamiques ayant été déjà mise en évidence, il s'agit de quantifier cette dernière. Les surfaces de collision sont ici calculées pour deux particules sphériques de même taille à différents nombre de Reynolds. De telles surfaces sont représentées figure 4.14 pour une gamme de Re_γ comprise entre 0,028 et 1,42. Les surfaces superposées sont modélisées à l'aide d'un paramétrage permettant d'estimer leur frontière et décrit ultérieurement, section 4.5.5.

Dans tous les cas, les surfaces sont inscrites dans celle de Smoluchowski comme observé précédemment. Ces surfaces, d'allure similaire, permettent de distinguer trois zones dans le plan amont comme cela

est illustré figure 4.15. Les points inclus à l'intérieur de la surface correspondent naturellement à des positions relative des sphères ayant menées à une collision. Pour les limites de surface correspondant aux plus importantes hauteurs relatives initiales, l'évitement est conforme à celui déjà observé dans la figure 4.10. Une zone d'évitement moins attendue apparaît également pour des particules dont la vitesse initiale relative est faible ($z/d_p \ll 1$). Ce type d'évitement est différent de la limite supérieure de la surface. En effet, dans ce cas, les particules, au lieu de passer à hauteur l'une de l'autre, traversent la

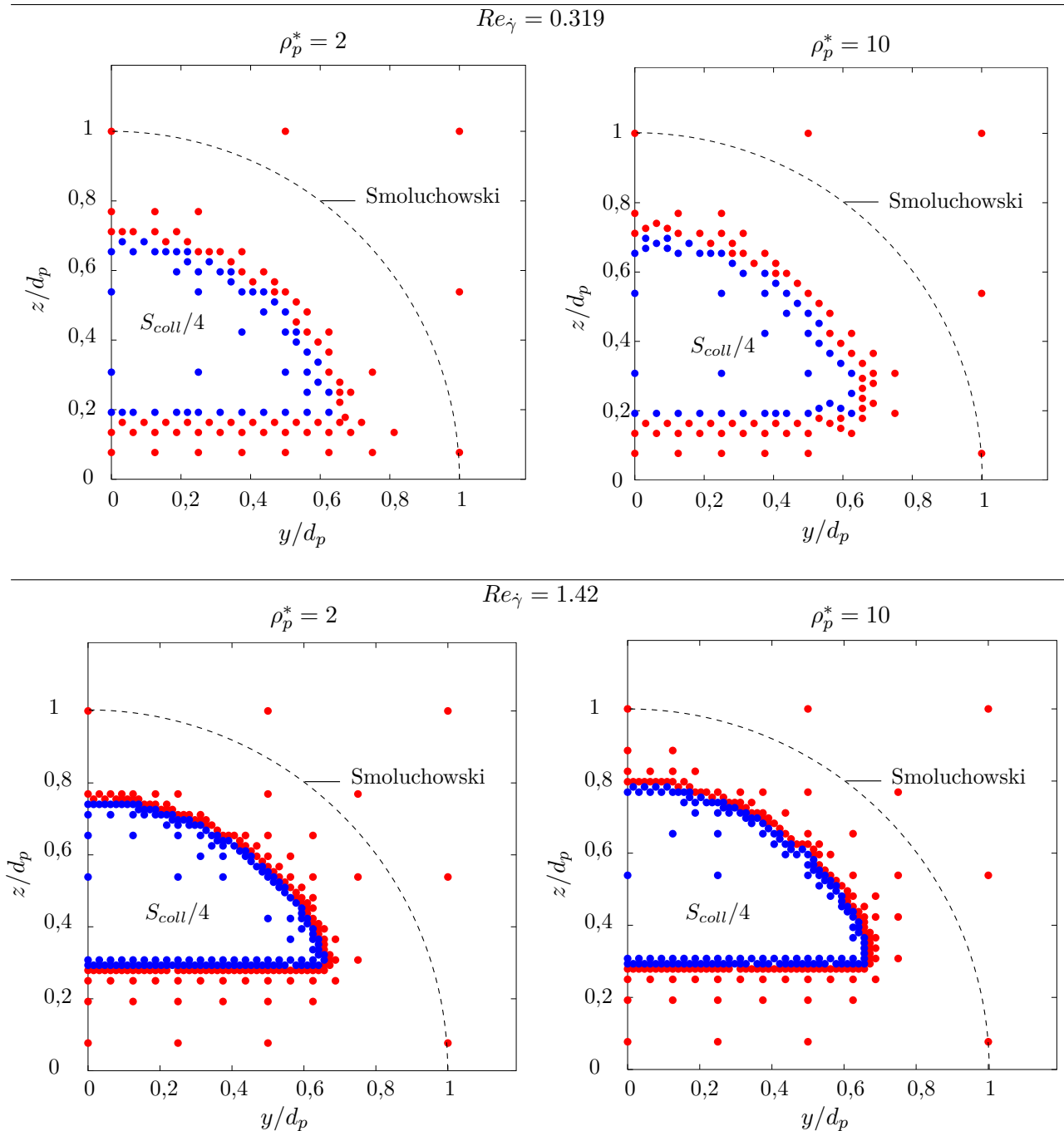


Fig. 4.13 – Surfaces de collision obtenues pour deux sphères de taille identique à $Re_\gamma = 0.319$ (en haut) et $Re_\gamma = 1.42$ (en bas) pour deux densités différentes : particules deux fois plus denses que la phase fluide (à gauche), dix fois plus denses (à droite).

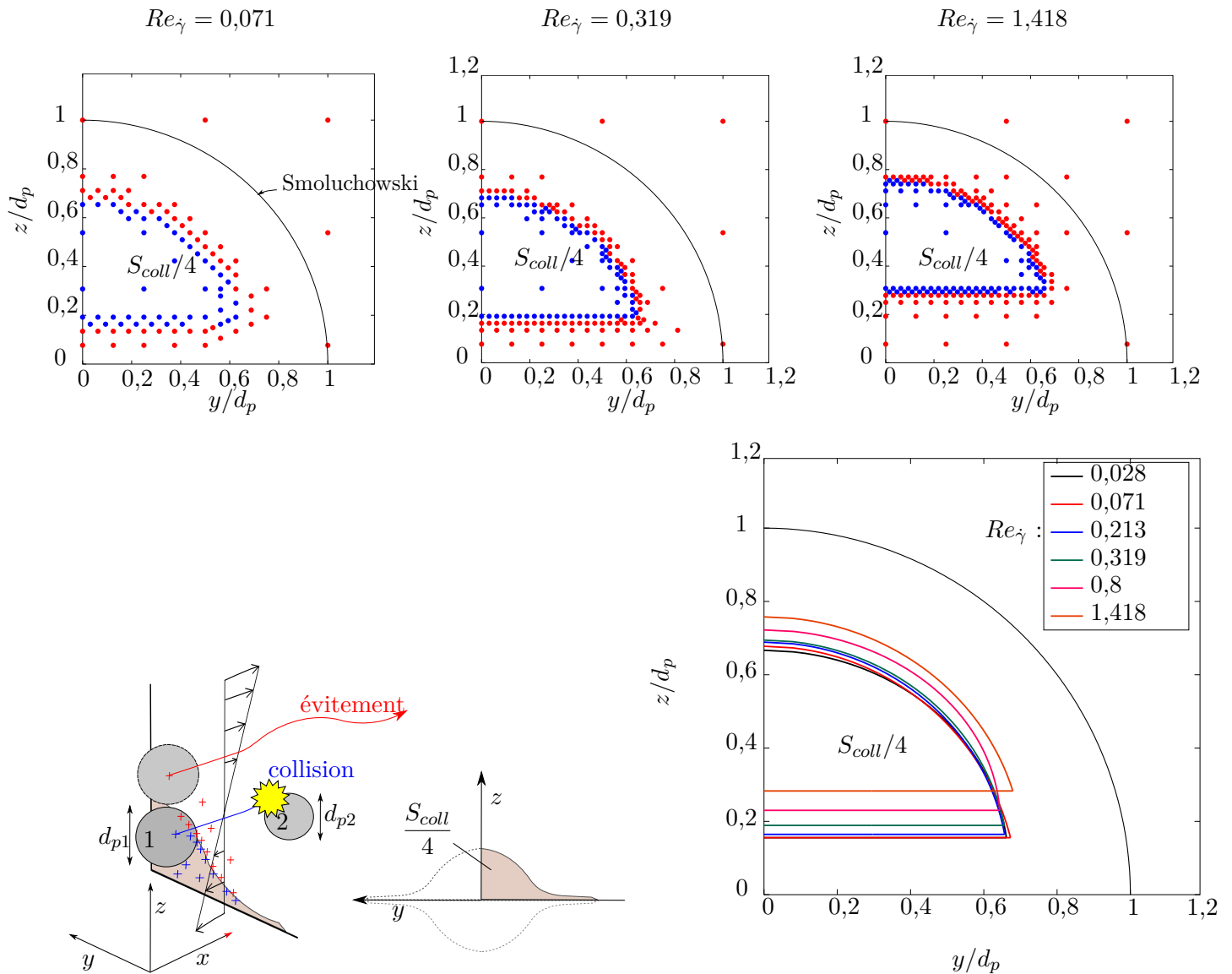


Fig. 4.14 – Surfaces de collision obtenues à différents nombres de Reynolds cisailés.

zone annulant la composante de leur vitesse relative suivant la direction de l'écoulement x . De ce fait, après s'être rapprochées dans un premier temps, elles finissent par s'éloigner l'une de l'autre avec une vitesse relative suivant x qui change de signe. Ce comportement des particules s'explique par la présence de zones de recirculation de l'écoulement déjà présentées pour des particules isolées au chapitre 3 (figure 3.23). Ce type d'évitement, pouvant être qualifié de « demi-tour », justifie l'ajout du troisième test du critère d'arrêt des calculs exposé dans la section 4.2.2 (figure 4.6). Les trois zones du plan où est calculée la surface de collision sont représentées figure 4.15.

D'après la figure 4.14, une translation de la surface dans la direction du cisaillement z est observée en augmentant Re_γ qui s'accompagne d'une légère décroissance de son aire (10% de diminution entre $Re_\gamma = 0,028$ et $Re_\gamma = 1,42$). L'augmentation de la zone de recirculation avec le cisaillement est responsable du décalage de la partie inférieure de la frontière de la surface. En ce qui concerne la partie supérieure, cette translation s'explique par le fait que les effets inertiels du fluide deviennent comparables aux effets visqueux à proximité des particules lorsque le taux de cisaillement augmente (et donc le champ de vitesse

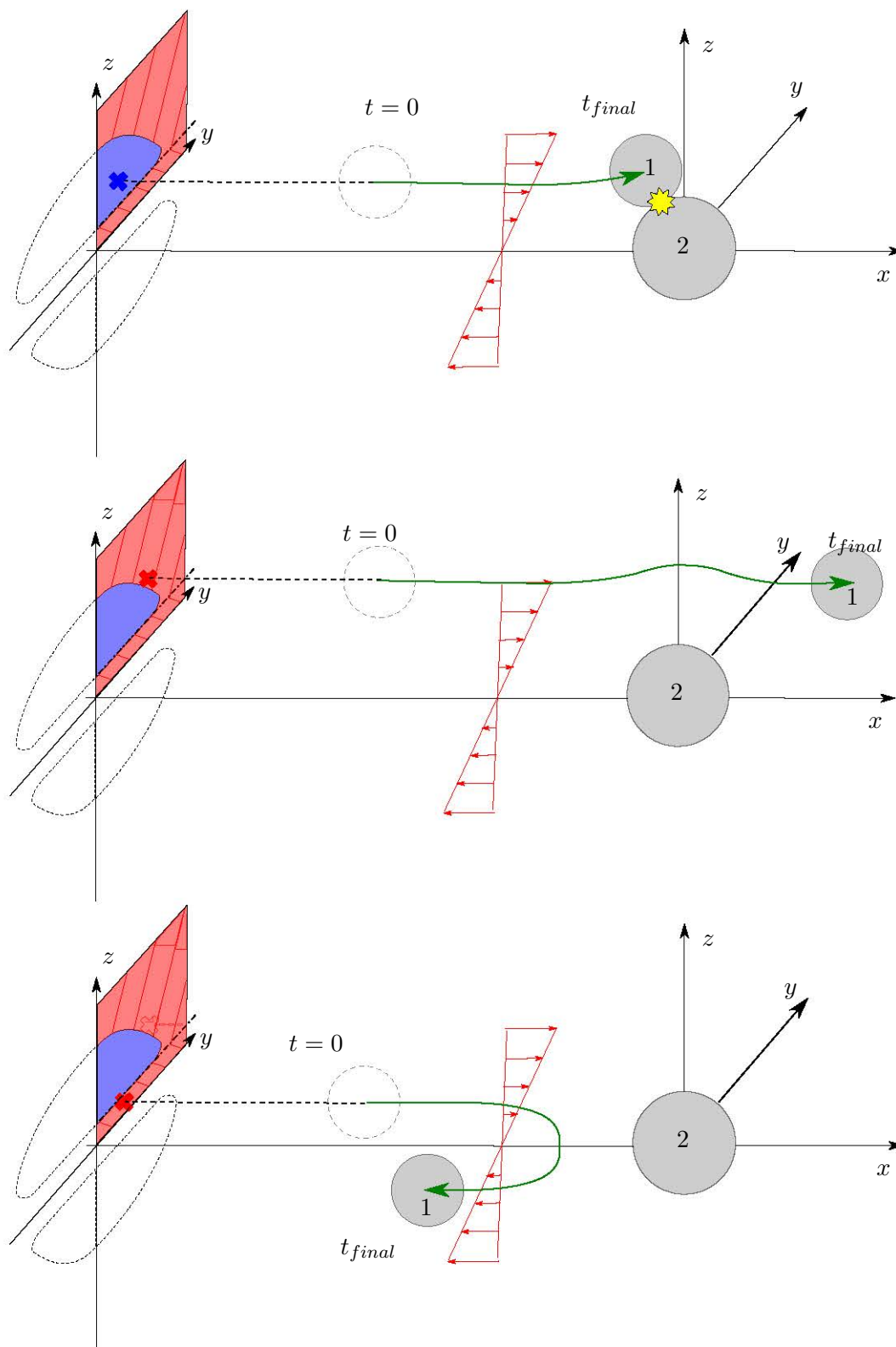


Fig. 4.15 – Représentation schématique des trois zones du plan de collision distinguées par le comportement de deux particules en interaction : collision (en haut), évitement avec les particules traversant le domaine (au milieu) et évitement de type « demi-tour » (en bas).

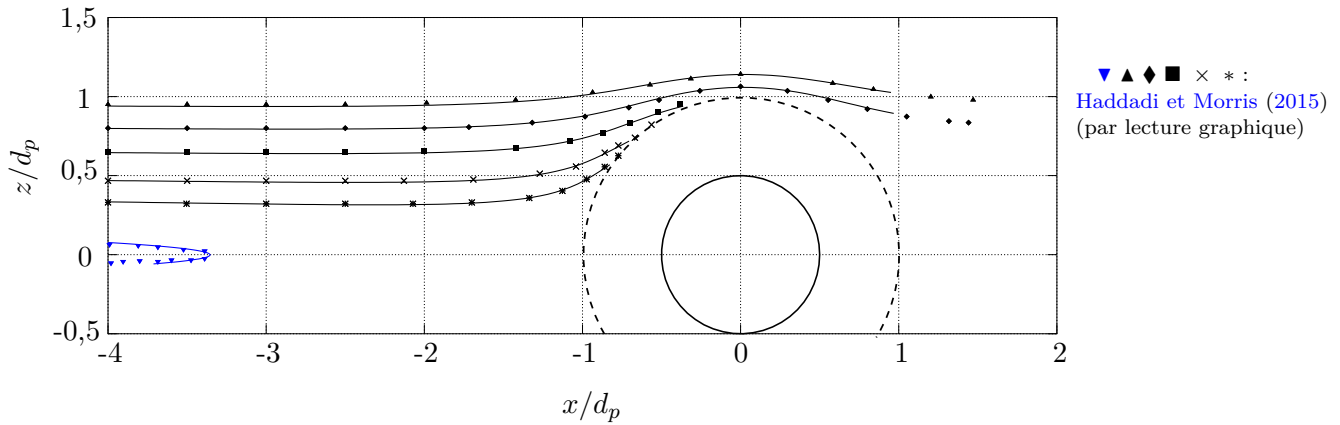


Fig. 4.16 – Trajectoires d’une sphère relativement à la seconde pour différentes positions initiales à $Re_\gamma = 0,2$: les points sont les résultats de [Haddadi et Morris \(2015\)](#) alors que les lignes continues sont issues de simulations de ce travail.

fluide). Cela explique la translation globale de la limite supérieure des surfaces de collision.

Il est important de mentionner que la dynamique stokesienne ne permet pas de mettre en valeur la dernière zone d’évitement de type « demi-tour », car la zone de recirculation de l’écoulement à l’origine de cet évitement n’existe pas en écoulement de Stokes, où elle est rejetée à l’infini. Ce comportement, valable donc pour des nombres de Reynolds finis, a déjà été mis en lumière par [Haddadi et Morris \(2015\)](#), qui ont étudié numériquement le comportement de particules en suspension soumises à un écoulement cisailé, en résolvant l’écoulement et le couplage fluide/solide respectivement avec une méthode de Boltzmann sur réseau et de frontière immergée. Leurs résultats de trajectoires relatives de deux sphères isolées en écoulement cisailé à $Re_\gamma = 0,2$ et dans le même plan de cisaillement sont représentés figure 4.16. Leurs résultats sont superposés aux résultats présents, ce qui peut faire office d’une validation supplémentaire des solveurs utilisés dans ce travail.

4.5.3 Influence du rapport de taille

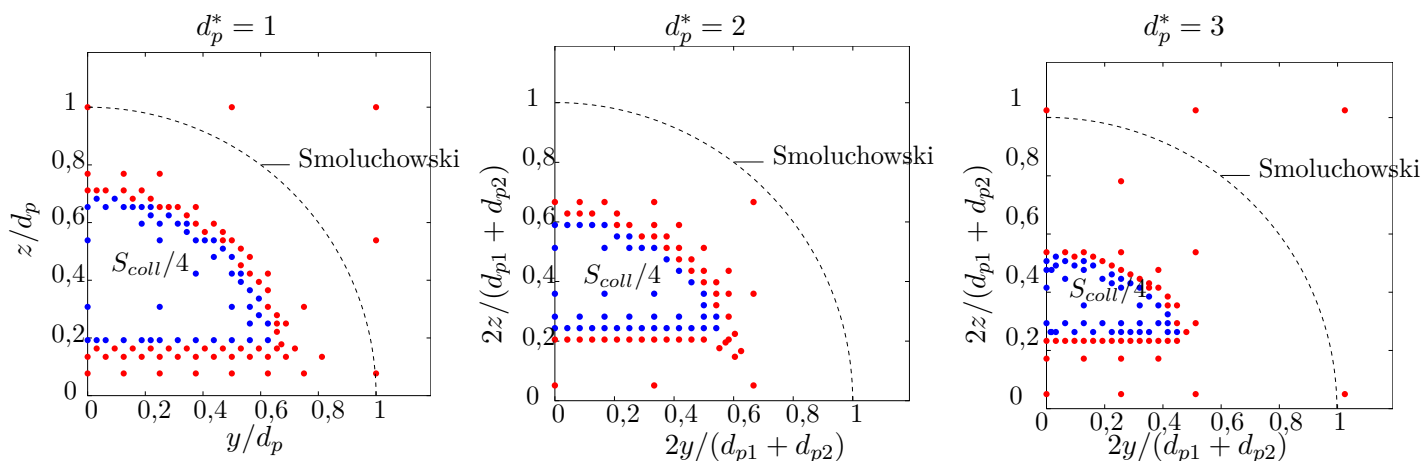
La flottation ayant pour objectif entre autres d’augmenter la taille des inclusions via l’agrégation, il est important d’étudier l’effet de ce paramètre sur les sections de collision. Dans ce travail, des rapports de taille de valeur entière de 1 à 4 ont été étudiés.

La figure 4.17 présente des points de collision et d’évitement obtenus dans le plan de collision pour des rapports de taille de 1 à 3, et pour des nombres de Reynolds $Re_\gamma \in [0,319; 0,8; 1,42]$. Le nombre de Reynolds, pour rappel, est défini à partir de la particule la plus grosse (cf tableau 4.2).

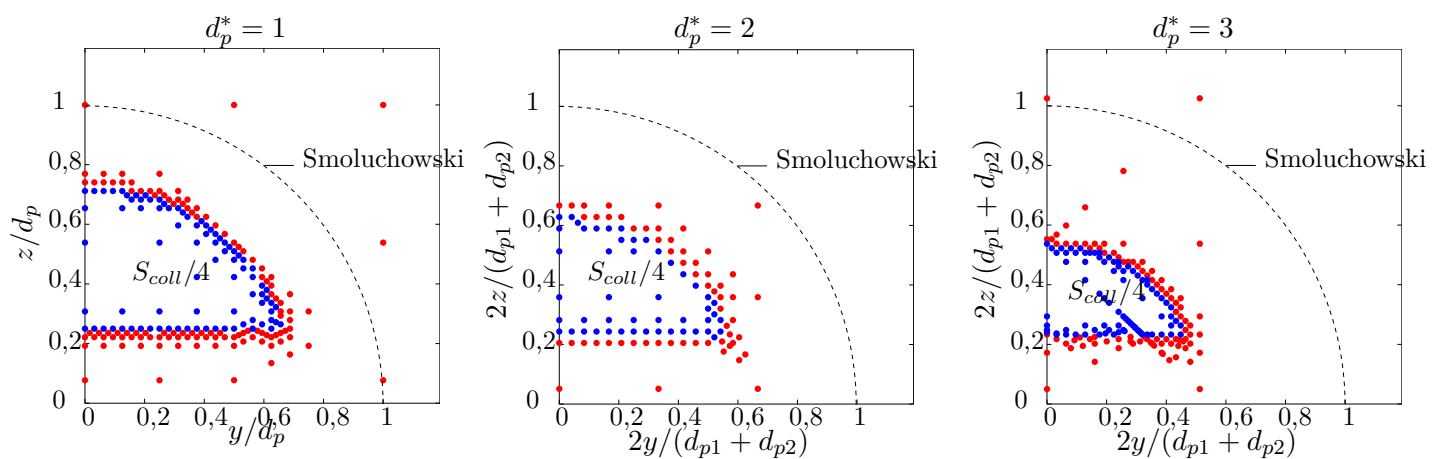
Dans le cas où $Re_\gamma = 0,319$, correspondant aux cisaillements locaux les plus importants que des particules de $10\mu\text{m}$ sont susceptibles de subir dans les conditions du traitement par flottation de l’acier liquide, un rétrécissement de la surface est observé dans toutes les directions du plan amont en augmentant le rapport de taille. Ce rétrécissement est d’autant plus important au niveau des limites supérieures suivant z , ce qui est cohérent avec le fait que les plus petites particules, qui induisent une perturbation moindre, sont plus enclines à suivre les lignes de courant perturbées par la plus grosse particule.

Sur la figure 4.18, trois graphes de surfaces superposées en fonction du rapport de taille de 1 à 4 sont représentés, correspondants aux mêmes nombres de Reynolds que la figure 4.17. Cette fois, la précision des surfaces calculées est mise en avant grâce à la représentation de la zone occupée par les triangles hybrides incluant les frontières des surfaces (cf section 4.2.1). Pour un nombre de Reynolds proche de

$Re_\gamma = 0.319$



$Re_\gamma = 0.8$



$Re_\gamma = 1.42$

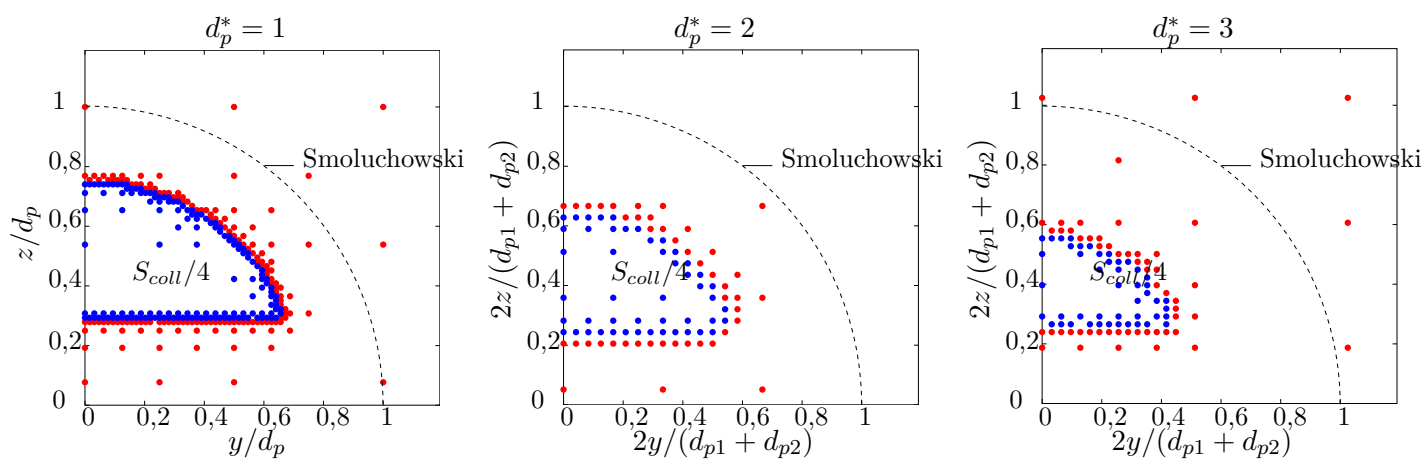


Fig. 4.17 – Surfaces de collision obtenues à différents nombres de Reynolds cisailés : rapports de taille 1, 2 et 3 (de gauche à droite) et Re_γ croissant (de haut en bas)

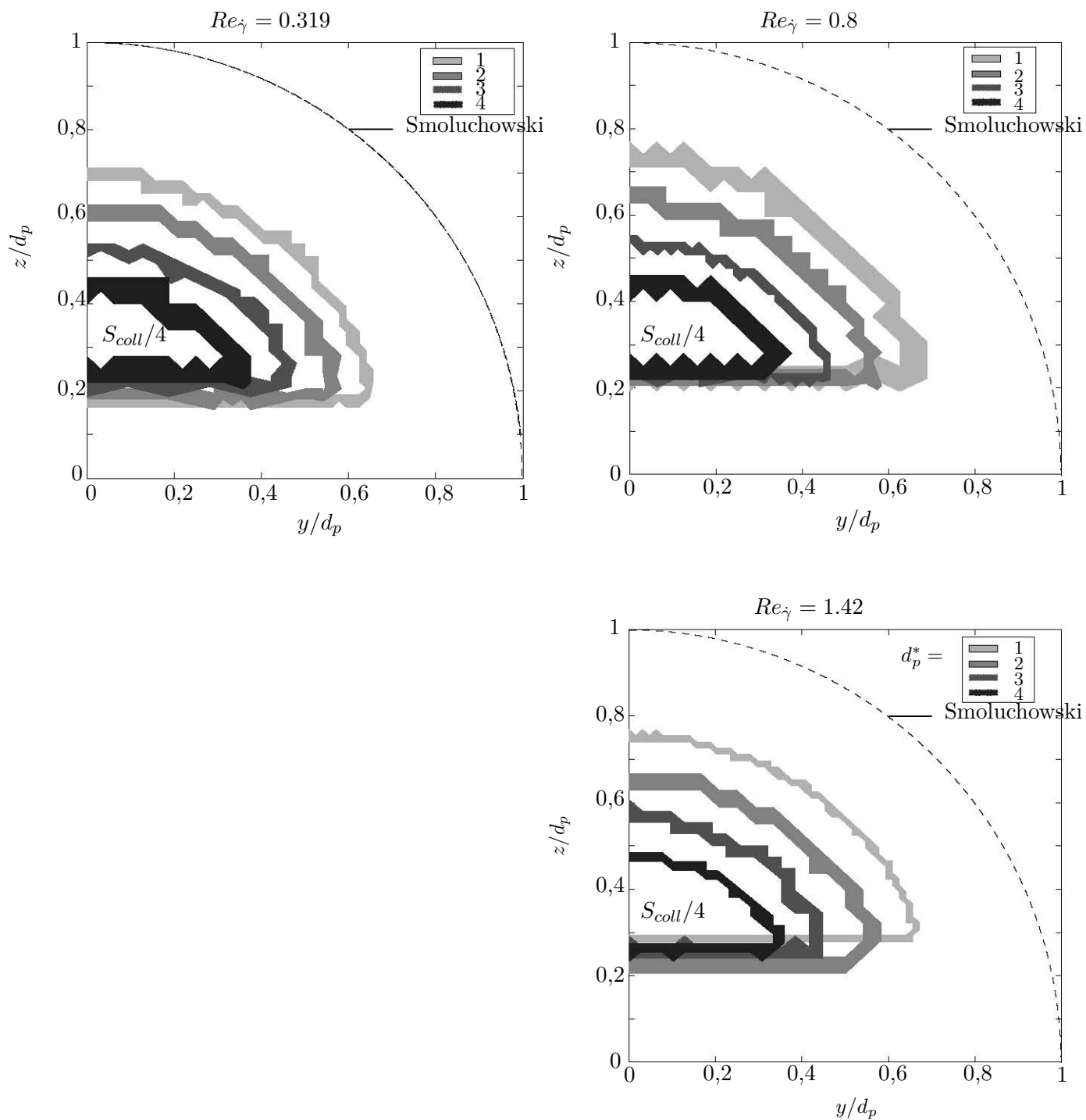


Fig. 4.18 – Superposition des frontières des surfaces de collision pour différents rapport de taille à différents nombres de Reynolds.

l'unité, les effets de recirculation sont particulièrement limitants pour des particules de même taille. Cela résulte du choix de définir le nombre de Reynolds à partir du plus grand diamètre. De ce fait, pour $Re_\gamma \gtrsim 1$ et $d_p^* = 1$, les effets inertiels sont significatifs pour les deux particules. La normalisation des hauteurs par le rayon moyen des particules est un moyen commode de représenter les surfaces avec celle de Smoluchowski, mais il faut toutefois préciser que la limite de la zone de demi-tour est bien décroissante avec le rapport de taille quel que soit le nombre de Reynolds considéré si l'on n'opère pas de renormalisation.

Dans tous les cas, il est évident que l'aire de la surface de collision diminue de façon conséquente avec le rapport de taille, passant d'environ 30 à 7 % de la surface de Smoluchowski pour des rapport $d_p^* = 1$ et 4 respectivement.

4.5.4 Influence de la sphéricité

Pour étudier qualitativement l'influence de la sphéricité sur la section de collision, une géométrie proche de la sphère a été étudiée. Il s'agit d'ellipsoïdes de révolution de type prolata et de demi-axes $a = b = c/2$. Leur volume vaut alors :

$$V_p = \frac{8}{3}\pi a^3 \quad (4.12)$$

Leur aire A_p est fournie par l'équation (2.8) et a pour valeur :

$$A_p \simeq 6,83 \pi a^2 \quad (4.13)$$

Après calcul à l'aide des expressions (4.12) et (4.13) ainsi que de sa définition à l'équation (4.7) la sphéricité d'un ellipsoïde de révolution et de demi-axe $a = b = c/2$ a pour valeur $\psi_p \simeq 0.93$.

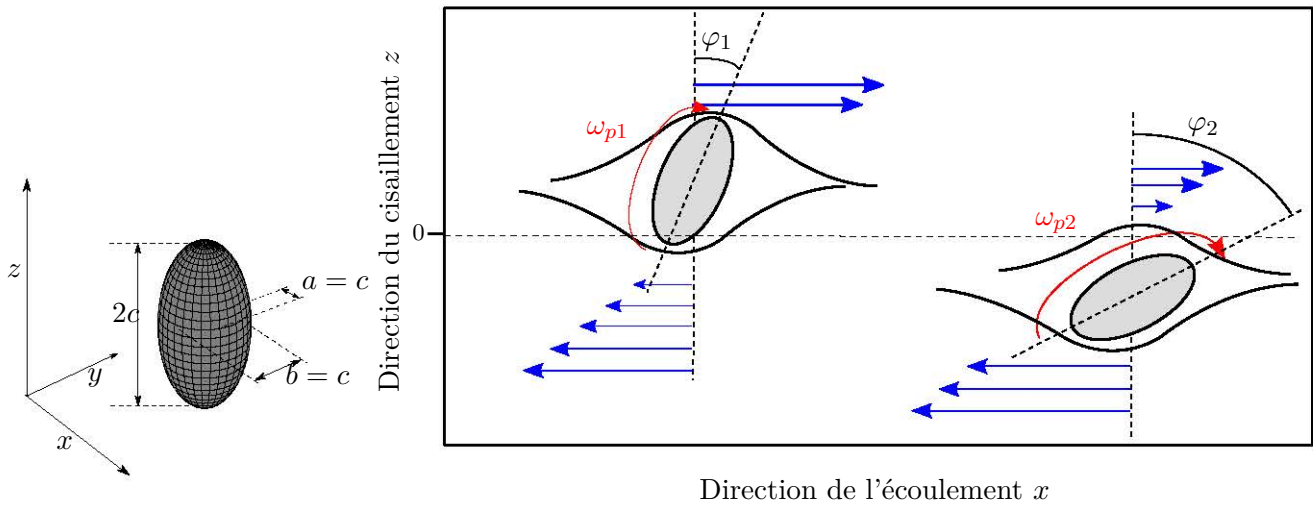
Avec la perte d'isotropie de la forme géométrique, le nombre de degré de liberté augmente considérablement, et une étude paramétrique complète de la collision est difficile. En conséquence, cette étude de l'influence de la sphéricité ne se veut pas exhaustive mais s'efforce néanmoins de mettre en évidence le comportement des ellipsoïdes de manière qualitative. Pour ce faire, deux cas particuliers sont considérés :

- l'influence de la rotation initiale des ellipsoïdes autour de la direction normale au plan de cisaillement (axe y),
- l'interaction de deux ellipsoïdes de grand axe initialement confondu avec la direction y .

Des ellipsoïdes de taille identiques ont été étudiés. Pour caractériser les conditions hydrodynamiques, la longueur caractéristique du solide considérée est le maximum de sa longueur projetée sur le plan de cisaillement. Pour les ellipsoïdes, dont le grand axe est dans le plan de cisaillement et tournant uniquement autour de l'axe y , cette longueur caractéristique est égale au grand axe ($2c = 4a$). Pour les ellipsoïdes dont le grand axe est suivant y , leur longueur caractéristique est cette fois-ci égale à leur petit axe $c = 2a$.

La première configuration est représentée figure 4.19, où le plus grand axe est inclus dans ce plan. Le nombre de Reynolds $Re_\gamma = \dot{\gamma}(4a)^2/\nu$ est pris égal à 0,14. La vitesse angulaire initiale des ellipsoïdes est égale à celle dans les conditions de Stokes. Cette vitesse peut être retrouvée à partir de la formule générale établie par Jeffery (1922) (cf chapitre 3, section 3.2.1).

L'initialisation du champ de vitesse du fluide est plus délicate car le profil analytique, bien qu'existant et également fourni par Jeffery (1922), est particulièrement complexe. Afin de palier cette difficulté,



$$\vec{\nabla}_f(t=0) = \dot{\gamma}z \vec{e}_x + \text{importation du champ}$$

autour d'un ellipsoïde seul

$$\vec{\omega}_{pi}(t=0) = \dot{\gamma} \left(\frac{3}{5} \cos^2 \varphi_i + \frac{1}{5} \right) \vec{e}_y \quad (\text{Jeffery, 1922})$$

Fig. 4.19 – Configuration initiale pour la simulation de deux ellipsoïdes dans le même plan de cisaillement et inclinés suivant y .

les champs autour d'une particule isolée ont été calculés avec des simulations proches des conditions de Stokes et décrites dans le chapitre 3 (section 3.2.3). Les champs calculés ont ensuite été importés dans les simulations à deux particules comme coordonnées initiales. Afin de garantir la continuité des champs, le raccord entre le sous-domaine importé et le domaine complet comprenant les deux particules est assuré par l'application de pondérations atténuant la perturbation induite par la présence des particules loin de celles-ci.

Des interactions d'ellipsoïdes ont été simulées pour différentes hauteurs relatives initiales dans la direction du cisaillement et pour différentes inclinaisons initiales. L'évolution des hauteurs limites séparant les collisions et les évitements en fonction de l'inclinaison φ_2 que forme la particule aval avec la configuration de référence (cf figure 4.19). Pour cela, cette inclinaison a été affectée des valeurs comprises entre 0° et 180° par pas de 30° . Comme le résultat de l'interaction entre les deux ellipsoïdes dépend de leurs deux inclinaisons, la figure 4.20 superpose les résultats pour plusieurs inclinaisons initiales, caractérisées par l'angle φ_1 que forme la particule amont avec la configuration de référence. Les résultats ont été tracés en continu, avec les différents points obtenus reliés entre eux par une fonction d'interpolation de type « spline cubique ».

De façon analogue aux sphères, la zone de collision présente une limite inférieure et supérieure. La partie $z/a \ll 1$ correspond à des évitements de type « demi-tour » alors que la partie supérieure est la zone d'évitement où les ellipsoïdes passent à hauteur l'une de l'autre (cf figure 4.15). La limite inférieure ne dépend pas des orientations initiales (environ égale à $0,2 a$, $\forall \varphi_1, \forall \varphi_2$). Le peu de sensibilité de la région d'évitement par « demi-tour » s'explique par le fait que les ellipsoïdes effectuent plusieurs rotations et interagissent à longue distance. Les échelles d'écoulement en jeu sont donc liées à la projection de leur taille dans le plan de cisaillement et non à une orientation particulière.

La zone supérieure est quant à elle fortement dépendante des orientations. Cette dernière varie en effet de 30 à 60% du grand axe. Ceci peut s'expliquer par le fait que les ellipsoïdes ne tournent pas à la

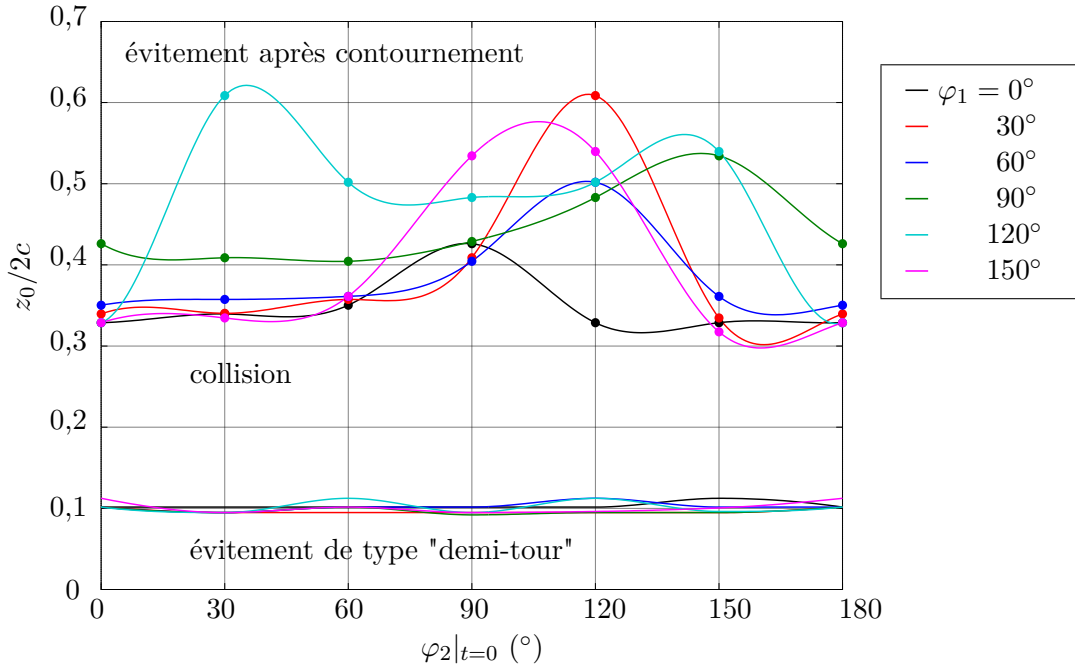
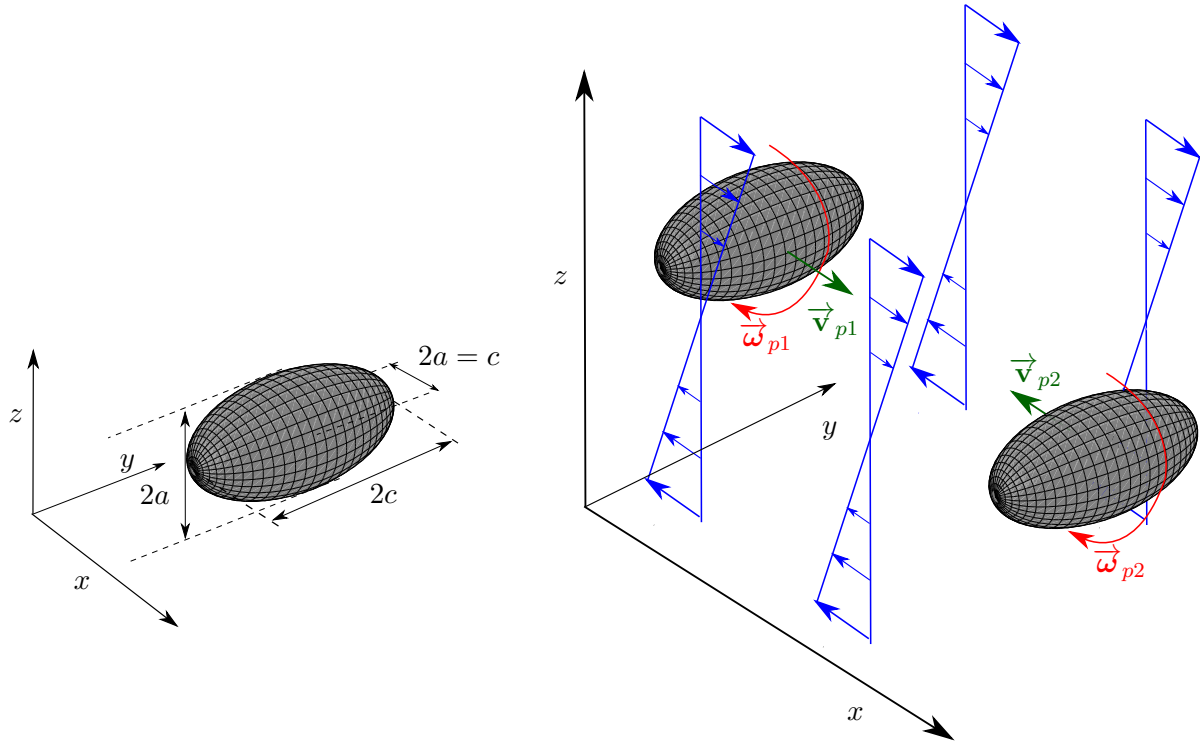


Fig. 4.20 – Limites supérieures et inférieures de la zone de collision pour deux ellipsoïdes dans le même plan de cisaillement en fonction de l'orientation initiale de la particule aval.

même vitesse étant donné que cette dernière dépend de leur orientation ainsi que de leur interaction hydrodynamique. Pour une hauteur initiale donnée, les particules à proximité l'une de l'autre peuvent soit se trouver dans un cas favorable à la collision (quand leur grand axe est à peu près aligné avec la direction du cisaillement), soit s'éviter (grand axe aligné avec la direction de l'écoulement, favorisant de ce fait le contournement). La valeur limite supérieure de cette frontière, plus petite que le grand axe des ellipsoïdes, montre que les effets hydrodynamiques limitent la probabilité de collision comme cela a déjà été observé pour les sphères.

Le second cas d'étude concerne la collision binaire d'ellipsoïdes de grand axe perpendiculaire au plan de cisaillement, assez similaires au cas des sphères. Le positionnement des solides est donné sur le schéma de gauche de la figure 4.21, où le grand axe des ellipsoïdes est confondu avec la direction transverse y . La configuration initiale est représentée à droite de cette figure. La vitesse initiale est prise égale à celle de Stokes, soit $\dot{\gamma}/2\vec{e}_y$. La vitesse linéaire est prise égale à celle de l'écoulement libre à la position des particules. De même que dans le cas précédent, le profil de l'écoulement autour de chaque ellipsoïde a été importé de simulations de particules isolées dans les conditions proches de Stokes. Le nombre de Reynolds $Re_{\dot{\gamma}} = \dot{\gamma}(2a)^2/\nu$ est pris égal à 0,035.

La surface de collision obtenue, représentée figure 4.22, est le fruit de trois séries de simulations correspondant à trois positions relatives initiales différentes suivant y , égales à 0, 30 et 60 % du grand axe ($4a$). Les axes y et z sont adimensionnés respectivement par le grand axe et le demi grand-axe. Ce choix est motivé par le fait qu'avec cet adimensionnement, la surface dans les hypothèses de Smoluchowski (pas d'effets hydrodynamiques, pas d'effets inertiels et absence d'interactions de nature électro-chimiques) est alors un disque de rayon égal à l'unité comme dans le cas des sphères. Ceci permet de comparer plus facilement les surfaces pour différentes sphéricités. Ainsi, la surface de collision dans le cas des sphères obtenue à $Re_{\dot{\gamma}} = 0,028 \simeq 0,035$, a pu être également représentée sur la figure 4.22, où la section de collision semble intégralement comprise dans celle issue des hypothèses de Smoluchowski. D'autre part, il



$$\vec{v}_f(t=0) = \dot{\gamma}z \vec{e}_x + \text{importation du champ autour d'un ellipsoïde seul}$$

$$\vec{\omega}_{pi}(t=0) = \frac{\dot{\gamma}}{2} \vec{e}_y \quad (\text{Jeffery, 1922})$$

Fig. 4.21 – Configuration initiale pour la simulation de deux ellipsoïdes dont le grand axe est aligné suivant la direction normale au plan de cisaillement.

est visible que la section de collision des ellipsoïdes est moins étendue dans la direction z , de sorte que les limites supérieure et inférieure en $y = 0$ sont incluses dans celles de la sphère. Cela est probablement dû à la dimension des ellipsoïdes qui, du fait de l'alignement de leur grand axe dans la direction transverse y , augmente les zones de recirculations de l'écoulement et donc accroissent les effets hydrodynamiques non favorables à une collision. En revanche, d'un point de vue géométrique, l'alignement des grands axes suivant y explique que l'on observe une extension de la frontière dans cette direction.

4.5.5 Paramétrage des surfaces pour les sphères

Les résultats présentés dans la section précédente mettent en évidence que les surfaces de collision ont une forme proche d'une ellipse pour deux particules sphériques. Elles sont légèrement excentrées par rapport à l'axe z et tronquées pour des faibles hauteurs relatives initiales. Ces constatations ont naturellement amené à effectuer dans ce travail un paramétrage à l'aide de quatre variables (a_y, a_z, z_0, z_1) telles que :

$$M = (y, z) \in S_{coll} \quad \text{si} \quad \begin{cases} \frac{y^2}{a_y^2} + \frac{(z - z_0)^2}{a_z^2} < 1 \\ z > z_1 \end{cases} \quad (4.14)$$

Une illustration de ce paramétrage est proposée figure 4.23, où la surface paramétrée correspond au cas

de deux particules de même taille à $Re_\gamma = 0,028$. Au vu de cette figure, l'intégralité des points en bleu (c'est-à-dire les positions initiales ayant abouti à une collision) sont bien tous inclus dans la surface de collision paramétrée. De même, les points rouge (points d'évitement) sont bien tous en dehors de cette surface. Pour les gammes de valeur des paramètres physiques (Re_γ, d_p^*) considérées, ce paramétrage est satisfaisant dans la mesure où 98 % du nombre de points total calculés sont en adéquation avec les critères donnés par l'équation (4.14). C'est en utilisant un tel paramétrage que les courbes continues ont été tracées sur les figures 4.14 et 4.23.

Les sections de collision permettent de déterminer des grandeurs macroscopiques telles que des noyaux et des efficacités de collision. L'exploitation quantitative de ces résultats est effectuée dans le chapitre suivant.

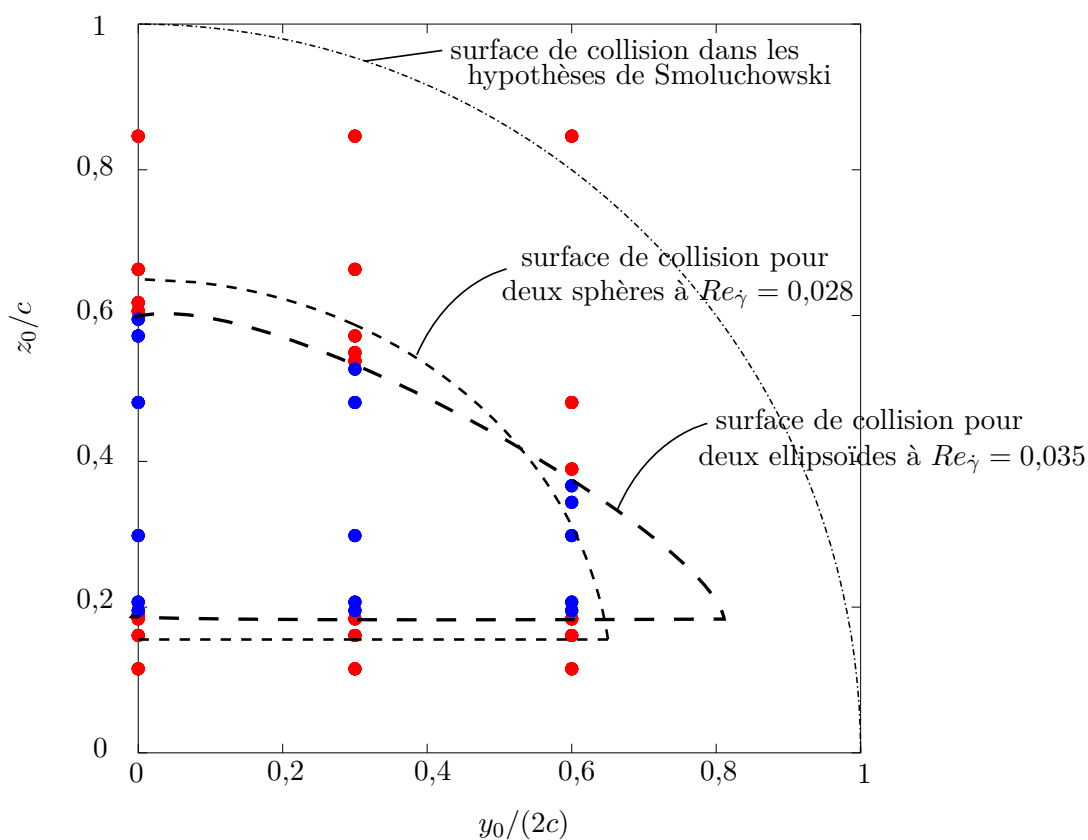


Fig. 4.22 – Points de collision (bleu) et d'évitement (rouge) obtenus pour deux ellipsoïdes dont le grand axe est initialement aligné suivant la direction normale au plan de cisaillement.

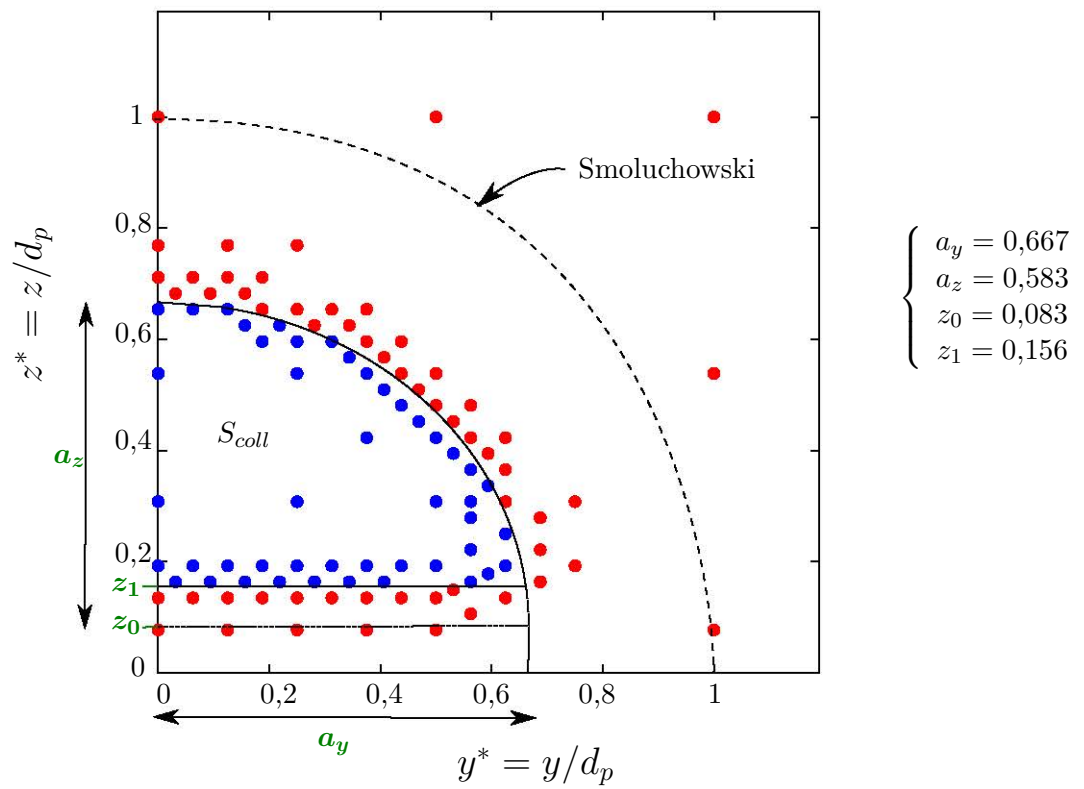


Fig. 4.23 – Illustration du paramétrage de la surface de collision (contour en trait continu) pour deux particules sphériques de même taille à $Re_\gamma = 0,028$.

Chapitre 5

Application au procédé de flottation du métal liquide

Le présent chapitre a pour but d'exploiter les surfaces de collision issues de suivi lagrangien de particules sphériques en vue de calculer la fréquence de collision d'inclusions à des échelles macroscopiques. Une première approche, permettant de calculer une fréquence de collision à partir d'un suivi lagrangien des particules à grande échelle, sera brièvement évoquée. L'essentiel de ce chapitre consistera à étudier statistiquement l'évolution de la population inclusionnaire, en utilisant des noyaux de collision et en exploitant des efficacités hydrodynamiques qui seront calculées. Par la suite, deux exemples de calcul statistique de fréquence de collision vont être traités : le premier consiste à estimer la fréquence de collision de particules inclusionnaires en écoulement canal plan vertical agité par des bulles. Il est le fruit d'un travail collaboratif avec l'équipe partenaire de la TU de Dresde du projet Flotinc qui fournit des données macroscopiques issues de simulations directes à l'échelle des bulles. Le second exemple exploite les résultats de simulations d'un acier liquide en poche à l'échelle d'une poche industrielle. Dans tous les cas, les inclusions étudiées, sphériques, ne sont différenciées que par leur taille (volume).

5.1 Critère de collision à implémenter en calcul DNS d'un panache de bulles

Dans le cadre du projet Flotinc, une série de travaux collaboratifs ont été envisagés dans le but d'effectuer des bilans de population inclusionnaire, en particulier avec l'équipe de Dresde chargée d'effectuer des simulations à l'échelle des bulles.

Pour des questions de temps, le critère décrit ici n'a pas été implémenté et appliqué par l'équipe de Dresde dans leur code DNS. Néanmoins, il présente un réel intérêt dans la mesure où les calculs effectués par cette équipe impliquent des suivis lagrangien de particules non couplées avec la phase fluide. De ce fait, il est envisageable d'exploiter les surfaces de collision issues des simulations présentées tout le long du chapitre 4. Ces surfaces expriment les perturbations locales de l'écoulement induites par la présence des particules, ce qui permet non seulement d'affiner le suivi lagrangien des particules, mais aussi de s'affranchir d'un couplage entre les phases fluide et solide à l'échelle des bulles susceptible d'être gourmand en temps de calcul.

Le chapitre 4 a mis en lumière la possibilité de paramétrer de manière relativement simple et efficace les surfaces de collision approximées par des ellipses tronquées (paramètres géométriques (a_y, a_z, z_0, z_1) , cf

l'équation 4.14). Des lois ont pu être extraites en fonction des paramètres exerçant une influence sur la forme de la surface de collision (Re_γ et d_p^* , cf section 4.3).

Le critère de collision proposé ici consiste à détecter si deux particules à proximité l'une de l'autre sont situées dans la surface de collision d'une part, et si elles sont passées à proximité l'une de l'autre d'autre part. Par exemple, et avec la dynamique des particules à petite échelle, ce critère peut être activé dès lors que :

$$\|\vec{x}_{p2} - \vec{x}_{p1}\| < 5 \left(\frac{d_{p1} + d_{p2}}{2} \right) \quad (5.1)$$

et

$$\begin{cases} (\vec{x}_{p1} - \vec{x}_{p2}) \cdot (\vec{v}_{p2} - \vec{v}_{p1})|_{t-\delta t} < 0 \\ (\vec{x}_{p1} - \vec{x}_{p2}) \cdot (\vec{v}_{p2} - \vec{v}_{p1})_t > 0 \end{cases} \quad (5.2)$$

Les équations (5.1) et (5.2) correspondent respectivement au critère de proximité d'une part, et au critère dynamique d'approchement ($t - \delta t$) et éloignement (t) d'autre part, de sorte que les particules ont dû interagir entre $t - \delta t$ et t .

Au vu des réflexions apportées tout le long de ce document, dans les conditions représentatives du procédé de flottation, les inclusions voisines (critère 5.1) et petites devant l'échelle de Kolmogorov sont soumises à un taux de cisaillement identique. La difficulté principale réside dans le fait de trouver le plan de cisaillement approximé. Ce dernier est indispensable car il permet de déterminer le plan yz dans lequel se trouve la surface de collision, et donc de construire un repère orienté selon ce plan et dans lequel on exprime les positions relatives y et z des particules. Pour cela, le principe est de se servir du champ de vitesse exprimé dans la cellule de position \vec{x} , de volume δx^3 pour extraire le plan de cisaillement (\vec{e}_x, \vec{e}_z) tel que :

$$\begin{aligned} \vec{v}(\vec{x} + \delta \vec{x}) &= \vec{v}(\vec{x}) + \overline{\nabla}_x \vec{v}(\vec{x}) \cdot \delta \vec{x} \\ &\simeq \vec{v}(\vec{x}) + \dot{\gamma} (\vec{e}_x \otimes \vec{e}_z) \cdot \delta \vec{x} \end{aligned} \quad (5.3)$$

Si les particules sont comprises dans la surface de collision, cela se traduit, au vu du paramétrage décrit par l'équation (4.14), par :

$$\begin{cases} \frac{(y_{p1} - y_{p2})^2}{a_y^2} + \frac{(|z_{p1} - z_{p2}| - z_0)^2}{a_z^2} < 1 \\ |z_{p1} - z_{p2}| > z_1 \end{cases}, \quad (5.4)$$

où, on le rappelle, (a_y, a_z, z_0, z_1) sont les paramètres géométriques de l'ellipse collisionnelle.

Les coordonnées des particules sont exprimées dans le repère lié au plan de cisaillement (x, y, z). Dans le cas où l'équation (5.4) est vérifiée, alors les deux particules se sont agrégées. Les deux particules à l'instant t sont alors supprimées et remplacées par un agrégat créé en fonction de leur taille et ayant pour coordonnées les positions moyennes des deux particules supprimées à l'instant t . Le choix de la valeur de la vitesse peut être celui du champ fluide à la position de cet agrégat selon l'équation (5.3).

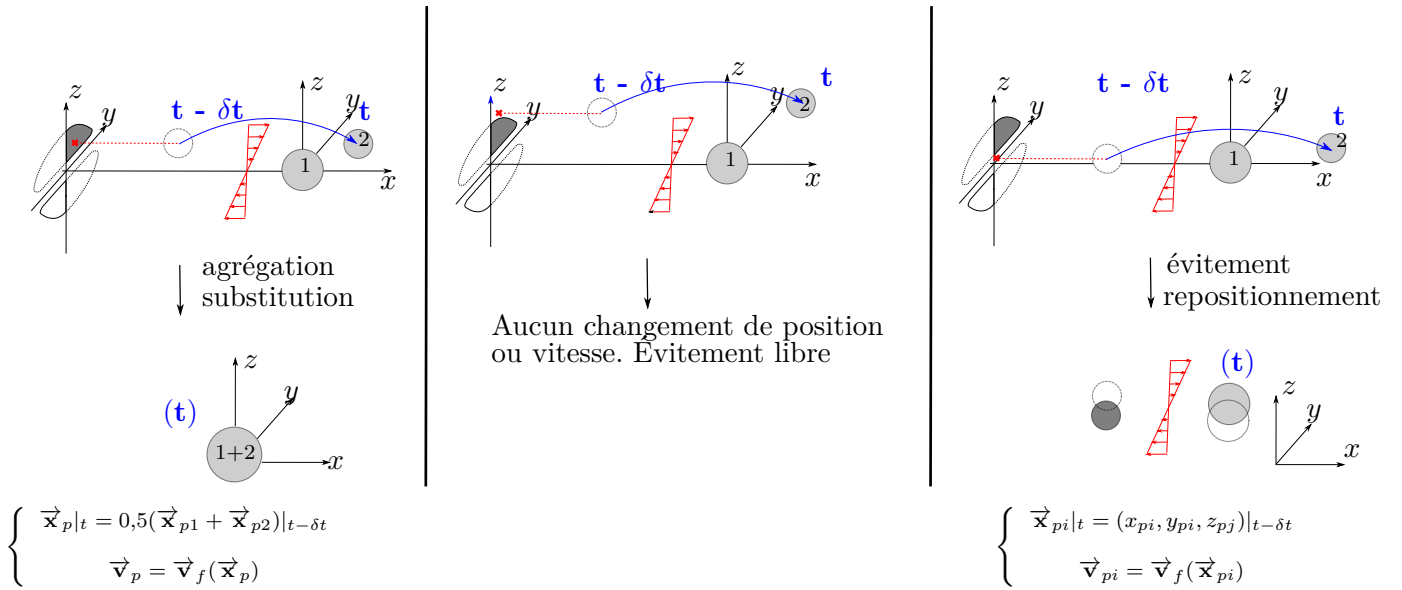


Fig. 5.1 – Critères de collision (à gauche) et évitements (au milieu et à droite) à partir de la forme des surfaces de collision.

Dans le cas où les inégalités (5.4) ne sont pas vérifiées, les particules sont situées en dehors de la surface de collision. Il s'agit alors de considérer l'alternative suivante :

- la hauteur relative absolue des particules est supérieure à z_1 , soit la zone de « demi-tour », cf section 4.5. Aucun changement ni dans le positionnement, ni dans la vitesse des particules n'est à effectuer dans ce cas.
- la hauteur relative absolue est inférieure à la zone de demi-tour. Dans ce cas, les deux particules à l'instant t sont repositionnées telles que :

$$\begin{cases} (x_{p1}, y_{p1}, z_{p1})|_t = (x_{p1}, y_{p1}, z_{p2})|_{t-\delta t} \\ (x_{p2}, y_{p2}, z_{p2})|_t = (x_{p2}, y_{p2}, z_{p1})|_{t-\delta t} \end{cases} \quad (5.5)$$

Le choix de la valeur des vitesses associées peut être celui du champ fluide selon l'équation (5.3)

Un récapitulatif de ce critère, répertoriant toutes les situations de collision potentielle, est illustré figure 5.1.

5.2 Estimation du noyau de collision à partir de calculs d'efficacités

L'efficacité de collision s'applique aux noyaux statistiques de collision, nécessaires au calcul de la fréquence d'agrégation et à l'étude de l'évolution de la population des inclusions par la méthode des bilans de population (cf section 1.2). Le but de cette section est d'extraire une expression de cette efficacité en fonction de la surface de collision calculée.

5.2.1 Expression de l'efficacité collisionnelle à partir de la surface de collision

L'efficacité, par définition, désigne le rapport entre le noyau de collision et un noyau de référence. Le choix du noyau de référence dépend de la configuration de l'écoulement étudié. En écoulement turbulent,

le noyau de collision de référence est celui de Saffman & Turner. En écoulement cisailé plan permanent, le choix se porte naturellement vers le noyau de Smoluchowski. Pour rappel (chapitre 4, section 4.1), l'expression du noyau de Saffman & Turner est très proche de celle de Smoluchowski, en posant $\dot{\gamma} = \sqrt{\varepsilon/\nu}$. Pour le développement des calculs qui suivent, le noyau de référence choisi est celui de Smoluchowski.

Le noyau de collision est défini comme étant le flux de particules transportées à travers la surface de collision. En repartant de l'expression (1.27), l'efficacité notée $\eta_{ij,Smol}$ s'exprime ainsi :

$$\eta_{ij,Smol} = \frac{\beta_{ij}}{\beta_{ij,Smol}} \underbrace{=}_{\text{d'après 4.2}} \frac{\int_{S_{coll}} \dot{\gamma} z d^2S}{\frac{1}{6} \dot{\gamma} (d_{pi} + d_{pj})^3} \quad (5.6)$$

En adimensionnant les longueurs par le rayon de la surface de Smoluchowski, égale à la somme des rayons des particules, l'expression (5.6) devient :

$$\eta_{ij,Smol} = \frac{3}{4} \int_{S_{coll}^*} z^* d^2S^* \quad , \quad (5.7)$$

avec $z^* = 2z/(d_{p1} + d_{p2})$ et $S_{coll}^* = 4S_{coll}/(d_{p1} + d_{p2})^2$.

L'expression met en évidence le fait que les efficacités dépendent fortement de la surface de collision, elle-même dépendante, d'après la section 4.5, du nombre de Reynolds et du rapport de taille des particules.

Dans toute la fin de ce paragraphe 5.2.1, les grandeurs restent adimensionnées. Pour alléger les notations, les astérisques sont omis.

En reprenant le paramétrage sous forme d'ellipse des surfaces décrit par l'équation (4.14), il est possible d'établir une expression analytique de cette efficacité qui, au vu de l'expression 5.7, est fournie par l'intégrale :

$$\eta_{ij,Smol} = 3 \int_{z_1}^{z_0+a_z} zy(z) dz = 3 \int_{z_1}^{z_0+a_z} a_y z \sqrt{1 - \frac{(z - z_0)^2}{a_z^2}} dz \quad . \quad (5.8)$$

Le nombre 4 du dénominateur de l'expression (5.7) est omis dans l'équation (5.8), car l'intégrale est faite sur un quart de surface pour des raisons de symétrie sur la forme de la surface de collision (cf section 4.2).

L'expression (5.8) peut être explicitée, ce qui aboutit à la formule suivante :

$$\eta_{ij,Smol} = 3a_y \left[\frac{a_z}{12} (3\pi z_0 + 4\sqrt{a_z^2 - (z_0 - z_1)^2}) + \frac{1}{6a_z} (z_0^2 + z_0 z_1 - 2z_1^2) \sqrt{a_z^2 - (z_0 - z_1)^2} + \frac{a_z}{2} z_0 \arcsin \left(\frac{z_0 - z_1}{a_z} \right) \right] \quad (5.9)$$

L'expression (5.9) est particulièrement intéressante pour extraire des lois en fonction de paramètres physiques. Toutefois, elle ne quantifie pas la précision des valeurs de l'efficacité de collision, directement liée à la précision de la surface obtenue par tirage. Cet aspect est détaillé dans ce qui suit.

5.2.2 Principe du calcul d'efficacité et des bornes d'incertitude

Le calcul de ces bornes est correct si les surfaces ont une forme suffisamment régulière, ce qui est supposé être le cas ici.

L'aire de la surface de collision est comprise entre les triangles « complets » (gris sombre) et les triangles « hybrides » (gris clair) qui englobent ces derniers comme le montre pour illustration la figure 5.2. Les triangles hybrides étant traversés par la frontière de la surface d'après l'expression (5.7), l'efficacité est d'autant plus importante que la frontière est élargie. La discrétisation de l'équation (5.7) à partir de ces triangles permettent d'encadrer l'efficacité par deux bornes :

$$3 \sum z_i \mathcal{A}_{complet} < \eta_{ij,Smol} < 3(\sum z_i \mathcal{A}_{complet} + \sum z_i \mathcal{A}_{hybride}) \tag{5.10}$$

En notant $\mathcal{A}_{complet}$ et $\mathcal{A}_{hybride}$ l'aire des triangles complet et hybride respectivement. La hauteur moyenne du triangle i est notée z_i , il s'agit de la coordonnée z de son centre de gravité.

Tout comme le calcul des surfaces de collision, afin d'estimer l'efficacité, des poids sont appliqués à chaque triangle en fonction de leur nature, comme cela est illustré figure 5.2 :

- Les triangles dont tous les sommets correspondent à un évitement (valeur 0) ne sont pas pris en compte dans l'estimation de l'efficacité (poids nul),
- les triangles complets (valeur 1) ont un poids égal à l'unité,
- les triangles hybrides sont affectés d'un poids proportionnel au nombre de sommets correspondant à une collision : 1/3 s'il n'y en a qu'un seul, 2/3 s'il en comporte deux.

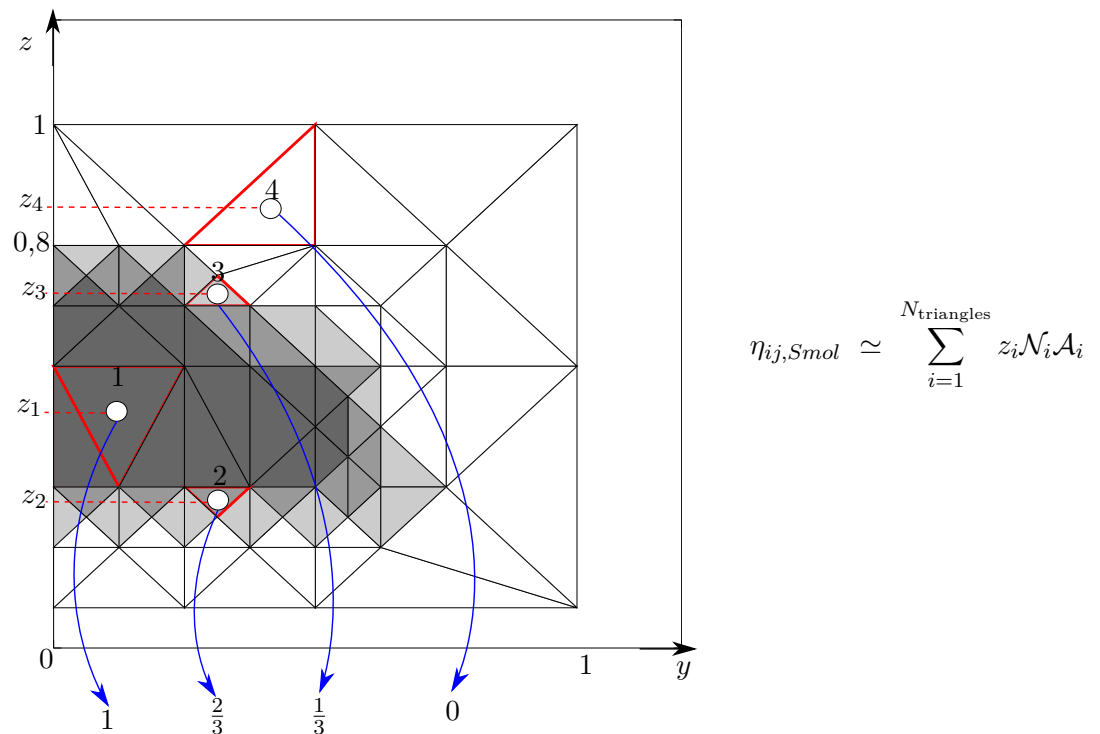


Fig. 5.2 – Principe du calcul de l'efficacité d'agrégation par application de poids dépendants de la nature des triangles.

En d'autres termes, l'efficacité collisionnelle est estimée à l'aide de l'expression suivante :

$$\eta_{ij,Smol} \simeq \sum_{i=1}^{N_{\text{triangles}}} z_i \mathcal{N}_i \mathcal{A}_i \quad (5.11)$$

avec \mathcal{N}_i le nombre de sommets inclus dans la surface de collision, de façon analogue au calcul des surfaces dans le chapitre 4 (cf expression 4.4).

5.2.3 Valeurs d'efficacité et corrélation

Pour rappel, l'efficacité d'agrégation dépend dans cette étude du nombre de Reynolds et du rapport de taille des particules, définis comme suit :

$$\begin{cases} Re_{\dot{\gamma}} = \frac{\dot{\gamma} \max(d_{p1}^2, d_{p2}^2)}{\nu} \\ d_p^* = \max\left(\frac{d_{p1}}{d_{p2}}, \frac{d_{p2}}{d_{p1}}\right) \end{cases}$$

Les différentes valeurs ainsi que les bornes inférieures et supérieures, calculées respectivement à l'aide des formules (5.11) et (5.10) sont répertoriées dans le tableau 5.1. La représentation graphique associée, avec les intervalles d'erreur, est proposée figure 5.3. Les efficacités ont des valeurs bien inférieures à l'unité, ce qui est conforme à ce qui était attendu au vu de l'analyse des surfaces de collision (cf chapitre 4). Ainsi, les effets hydrodynamiques locaux ont une influence significative sur l'évolution de la population des particules. En revanche, bien que la forme des surfaces varie avec le nombre de Reynolds, la valeur d'efficacité résultante en dépend très peu. Par contre, les valeurs de cette efficacité sont fortement dépendantes du rapport de taille des particules. En effet, elle décroît d'autant plus que la différence de taille est conséquente et de façon presque linéaire : la valeur maximale est de l'ordre de 0.3 jusqu'à atteindre des valeurs faibles ($\lesssim 0,05$) pour un rapport de 4.

En ce qui concerne les particules de taille identiques, la valeur 0,3 correspond à l'ordre de grandeur des efficacités calculées par Higashitani *et al.* (1982). En effet, et bien que leurs conditions de simulation soient différentes ($Re_{\dot{\gamma}} < 10^{-3}$), les efficacités extraites de leur étude sont comprises entre 10 % et 30 % pour deux particules de taille identique mouillées en milieu aqueux.

Pour la mise en perspective dans la situation du traitement d'acier liquide en poche, les valeurs de cisaillement $\dot{\gamma}$ correspondant à des inclusions de taille de 10 μm sont reportées sur le tableau 5.1 ($\nu_{\text{acier}} = 7,85 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$).

Ces résultats et réflexions ont amené à établir une loi d'efficacité rudimentaire mais néanmoins assez juste, dépendant uniquement du rapport de taille des particules. Cette loi est donnée par :

$$\eta_{ij} = \max(0 ; 0,4 - 0,1 d_p^*) \quad (5.12)$$

L'efficacité collisionnelle permet d'affiner les noyaux de collisions utilisés dans la méthode des bilans de population en vue d'étudier numériquement l'évolution de la concentration des différentes classes d'inclusions coexistantes au sein d'une phase liquide.

Tab. 5.1 – Valeur de l’efficacité binaire d’agrégation $\eta_{ij,Smol}$ en fonction du nombre de Reynolds et du rapport de taille des particules.

$\dot{\gamma}$ ($d_{p,max} = 10 \mu\text{m}$)	220 s^{-1}	558 s^{-1}	1813 s^{-1}	2504 s^{-1}	6280 s^{-1}	11147 s^{-1}
$Re_{\dot{\gamma}}$	0,028	0,071	0,213	0,319	0,8	1,42
d_p^*						
1	0,290 ^{+0,041} _{-0,041}	0,293 ^{+0,022} _{-0,021}	0,296 ^{+0,020} _{-0,019}	0,304 ^{+0,025} _{-0,024}	0,322 ^{+0,021} _{-0,024}	0,334 ^{+0,016} _{-0,016}
2			0,198 ^{+0,030} _{-0,033}	0,192 ^{+0,029} _{-0,028}	0,204 ^{+0,031} _{-0,029}	0,224 ^{+0,028} _{-0,027}
3			0,103 ^{+0,024} _{-0,026}	0,114 ^{+0,017} _{-0,016}	0,114 ^{+0,012} _{-0,012}	0,119 ^{+0,024} _{-0,027}
4				0,047 ^{+0,021} _{-0,020}	0,053 ^{+0,016} _{-0,017}	0,058 ^{+0,009} _{-0,009}

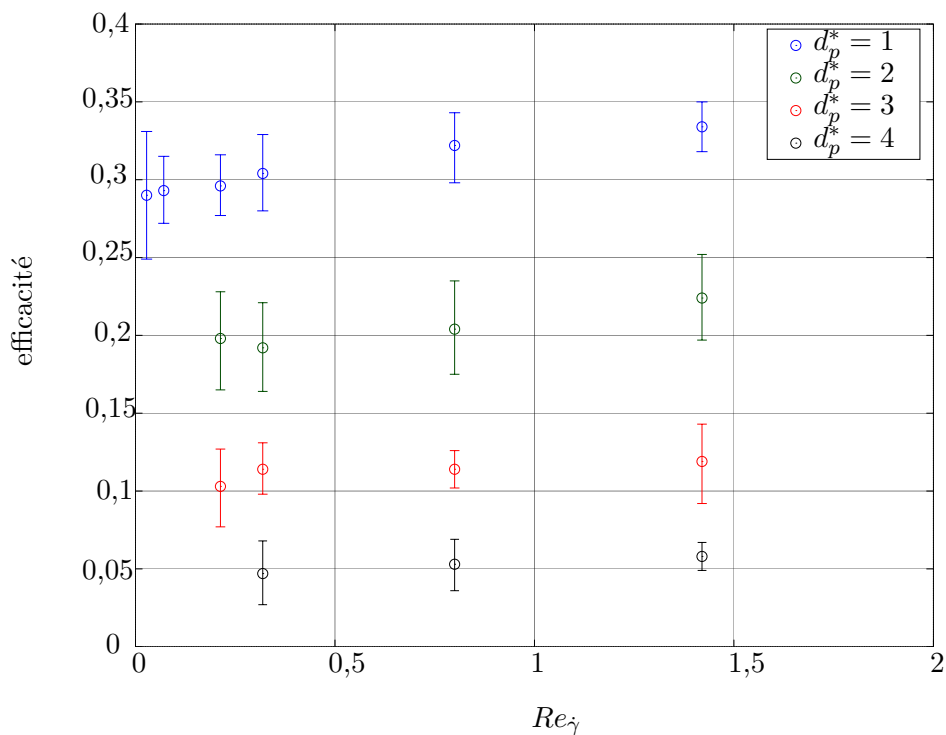


Fig. 5.3 – Efficacité d’agrégation en fonction du nombre de Reynolds pour les différents rapports de taille des particules, avec les intervalles d’erreur.

5.3 Exploitation pour des calculs de fréquence de collision dans des bilans de population

Dans cette partie, le développement des calculs s'effectue à partir de l'équation des bilans de populations discrétisées par classe selon la méthode de pivot fixe (cf section 1.2.1). L'intégration de cette équation exprimée en (1.11) sur le volume total occupé par la phase liquide permet d'établir l'évolution du nombre total d'inclusions de classe i (volume représentatif $V_{r,i}$) :

$$\frac{d\#N_{i,tot}}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,k \\ j+k=i}} \kappa \int_{V_{liq}} \beta_{ij} N_j N_k dV - \sum_{j=1}^{N_c} \int_{V_{liq}} \beta_{ij} N_i N_j dV$$

(5.13)

avec

$$\kappa = \begin{cases} \frac{V_{r,i+1} - (V_{r,j} + V_{r,k})}{V_{r,i+1} - V_{r,i}} & \text{pour } V_{r,i} \leq V_{r,j} + V_{r,k} \leq V_{r,i+1} \\ \frac{(V_{r,j} + V_{r,k}) - V_{r,i-1}}{V_{r,i} - V_{r,i-1}} & \text{pour } V_{r,i-1} \leq V_{r,j} + V_{r,k} \leq V_{r,i} \end{cases}$$

avec $\#N_{i,tot}$ le nombre total d'inclusions de classe i inclus dans la phase liquide occupant le volume V_{liq} . De manière plus compacte, l'équation 5.13 peut être réécrite de la façon suivante :

$$\frac{d\#N_{i,tot}}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,k \\ j+k=i}} \kappa f_{jk} - \sum_{j=1}^{N_c} f_{ij}$$

(5.14)

avec

$$f_{ij} = \int_{V_{liq}} \beta_{ij} N_i N_j dV$$

Les termes f_{ij} sont appelés **fréquence de collision** entre les classes i et j . Ils expriment le nombre total d'agréations survenues entre ces deux classes de particules du volume V_{liq} par unité de temps. Leur sommation décrite dans l'équation (5.14) constitue le flux net d'apparition des particules de classe i dû au phénomène d'agréation.

L'équation (5.13) est difficilement exploitable telle quelle car le noyau d'agréation dépend du taux de cisaillement et non directement du volume. Étant donné que ce travail s'est concentré, entre autres, sur l'influence du noyau de collision en fonction de Re_γ , il semble plus approprié de raisonner selon le spectre de cisaillement rencontré dans le volume V_{liq} . Il s'agit donc de transformer les fréquences de collision f_{ij} exprimées par l'équation (5.14). Les étapes de cette transformation sont décrites dans ce qui suit.

Tout d'abord, la densité numérale N_i des inclusions de classe i est liée au nombre total de ces particules $\#N_{i,tot}$ par la relation :

$$\#N_{i,tot} = \int_{V_{liq}} N_i dV \quad , \quad (5.15)$$

La relation (5.15) est vérifiée indépendamment de la fonction dont le volume est cumulé : l'intégration peut porter dans n'importe quelle partie du domaine de la phase liquide. En particulier, les volumes cumulatifs peuvent être vus comme une fonction du champ de cisaillement $\dot{\gamma}$ telle que :

$$V(\dot{\gamma}_0) = \int_{V_{liq}} \left\{ \begin{array}{l} 1 \text{ si } \dot{\gamma} < \dot{\gamma}_0 \\ 0 \text{ sinon} \end{array} \right\} d\dot{\gamma} \quad (5.16)$$

Autrement dit, $V(\dot{\gamma})$ est le volume total de la phase liquide où le champ de cisaillement a une valeur inférieure à $\dot{\gamma}$. En repartant de l'expression (5.16), il vient :

$$N_i = \frac{\partial \#N_i(V(\dot{\gamma}))}{\partial V} = \frac{\frac{\partial \#N_i}{\partial \dot{\gamma}}}{\frac{\partial V}{\partial \dot{\gamma}}} = \frac{\partial \#N_i}{\partial \dot{\gamma}} \left(\frac{\partial V}{\partial \dot{\gamma}} \right)^{-1} \quad (5.17)$$

De façon similaire à $V(\dot{\gamma})$, $\#N_i(\dot{\gamma})$ désigne le nombre total d'inclusions de classe i soumises à un taux de cisaillement inférieur à $\dot{\gamma}$, liée à la fonction de la distribution du nombre d'inclusions dans le spectre de cisaillement $\frac{\partial \#N_i}{\partial \dot{\gamma}}$ par :

$$\#N_i(\dot{\gamma}) = \int_0^{\dot{\gamma}} \frac{\partial \#N_i}{\partial \dot{\gamma}} d\dot{\gamma} \quad (5.18)$$

D'autre part, étant donné que les éléments de volumes peuvent être vus comme une fonction du taux de cisaillement d'après l'équation (5.16), il est possible de transformer l'expression intégrale de f_{ij} (équation 5.14) à l'aide du changement de variable :

$$f_{ij} = \int_{V_{liq}} \beta_{ij} N_i N_j dV = \int_{\dot{\gamma}} \beta_{ij} N_i N_j \frac{\partial V}{\partial \dot{\gamma}} d\dot{\gamma} \quad (5.19)$$

En réinjectant l'expression (5.17) dans l'équation (5.19), la fréquence de collision f_{ij} peut donc s'écrire :

$$\begin{aligned} f_{ij} &= \int_{\dot{\gamma}} \beta_{ij}(\dot{\gamma}) \left(\frac{\partial \#N_i}{\partial \dot{\gamma}} \left(\frac{\partial V}{\partial \dot{\gamma}} \right)^{-1} \right) \left(\frac{\partial \#N_j}{\partial \dot{\gamma}} \left(\frac{\partial V}{\partial \dot{\gamma}} \right)^{-1} \right) \frac{\partial V}{\partial \dot{\gamma}} d\dot{\gamma} \\ &= \int_{\dot{\gamma}} \beta_{ij}(\dot{\gamma}) \frac{\partial \#N_i}{\partial \dot{\gamma}} \frac{\partial \#N_j}{\partial \dot{\gamma}} \left(\frac{\partial V}{\partial \dot{\gamma}} \right)^{-1} d\dot{\gamma} \end{aligned} \quad (5.20)$$

Il vient d'être prouvé que les fréquences de collision peuvent être exprimées dans le spectre du cisaillement de l'écoulement, ce qui facilite l'exploitation des noyaux de collision fonctions de ce cisaillement. En réinjectant l'expression de la fréquence (5.20) dans (5.14), le bilan de population dans le spectre de cisaillement s'écrit finalement :

$$\frac{d\#N_{i,tot}}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,k \\ j+k=i}} \kappa \int_{\dot{\gamma}} \beta_{jk}(\dot{\gamma}) \frac{\partial \#N_j}{\partial \dot{\gamma}} \frac{\partial \#N_k}{\partial \dot{\gamma}} \left(\frac{\partial V}{\partial \dot{\gamma}} \right)^{-1} d\dot{\gamma} - \sum_{j=1}^{N_c} \int_{\dot{\gamma}} \beta_{ij}(\dot{\gamma}) \frac{\partial \#N_i}{\partial \dot{\gamma}} \frac{\partial \#N_j}{\partial \dot{\gamma}} \left(\frac{\partial V}{\partial \dot{\gamma}} \right)^{-1} d\dot{\gamma} \quad (5.21)$$

D'après l'expression (5.21), déterminer la fréquence de collision ou le flux net à un instant donné requiert trois séries de données :

- Le *noyau d'agrégation* $\beta_{ij}(\dot{\gamma})$, issue des simulations de ce travail,
- la *distribution du nombre de particules de classe i dans le spectre de cisaillement* $\frac{\partial \#N_i}{\partial \dot{\gamma}}(\dot{\gamma})$, donnée issue de simulations à plus grande échelle (par exemple celle du train de bulle ou de la poche industrielle d'acier liquide),
- la *distribution volumique du taux de cisaillement* $\frac{\partial V}{\partial \dot{\gamma}}$, donnée issue de simulations d'écoulements également à grande échelle.

5.4 Calcul de la fréquence instantanée de collision pour un train de bulles résolu

L'écoulement multiphasique DNS décrit dans cette partie est celle d'un canal plan vertical. Les conditions de simulations sont détaillées avant de spécifier le domaine d'intérêt à partir duquel sont extrait des fréquences instantanées de collision.

5.4.1 Conditions de simulation et domaine d'étude

Le code de mécanique des fluides numérique PRIME (utilisé par exemple dans les travaux de [Kempe et Fröhlich, 2012](#); [Santarelli et Fröhlich, 2015](#); [Ma et al., 2017](#); [Tschisgale et al., 2018](#)), développé par la TU de Dresde, résout de manière directe les équations de Navier-Stokes par la méthode des volumes finis. Le domaine complet utilisé pour les simulations est représenté sur la figure 5.4. L'écoulement comprend 2880 bulles avec une résolution du maillage de $1/12^{\text{ème}}$ de diamètre. Le couplage entre les phases liquide et gazeuse est assuré par une méthode de frontière immergée qui est décrite en détail par [Kempe et Fröhlich \(2012\)](#). Dans le cadre de cette étude, les bulles gardent leur forme sphérique, y compris en cas de proximité directe avec une bulle avoisinante ou la paroi. Aucune coalescence ni fragmentation n'est donc modélisée. Une condition de glissement est imposée à la surface des bulles. La présence des parois physiques est assurée par une condition limite d'adhérence (non-glissement) sur les faces de normale y délimitant le domaine de simulation. Afin de représenter le canal infini suivant les directions x et z , une condition de périodicité est imposée sur les faces de normales x et z du domaine complet. De ce fait, la masse liquide, les bulles et les particules sortantes du domaine sont automatiquement réinjectées à l'extrémité opposée. La verticalité du canal est assurée par l'imposition d'un champ de gravité \vec{g} descendant suivant x . Afin de contrôler le flux de l'écoulement ascendant, une force supplémentaire est appliquée à l'aide d'un coefficient correcteur dont la valeur, adaptée à chaque pas de temps, permet d'imposer une vitesse moyenne constante des deux phases liquide et gaz et notée v_{bulk} . Pour plus de détails, le lecteur est invité à consulter l'article de [Santarelli et Fröhlich \(2015\)](#), où les conditions de simulations de l'écoulement liquide/gaz sont identiques à celles-ci.

Le profil de la vitesse instantanée verticale u moyennée suivant x et z en régime établi est donné figure

5.5. Les composantes principales xx, yy, zz, xy du tenseur des contraintes de Reynolds adimensionné ($\overline{\mathbf{R}}$) moyenné également suivant x et z sont également représentées. Ce tenseur est égal à la moyenne quadratique des composantes adimensionnées de la vitesse fluctuante de l'écoulement $\vec{\mathbf{v}}'_f$ par :

$$\overline{\mathbf{R}} = \frac{\langle \vec{\mathbf{v}}'_f \otimes \vec{\mathbf{v}}'_f \rangle}{v_{bulk}^2} \quad \text{avec} \quad \vec{\mathbf{v}}'_f = \vec{\mathbf{v}}_f - \langle \vec{\mathbf{v}}_f \rangle . \quad (5.22)$$

L'écoulement est établi pour tous les profils représentés sur la figure 5.5. Les courbes noires, bleues et rouge correspondent au cas de l'écoulement sans bulles (« unladen »), l'écoulement avec un faible nombre de bulles (« SmFew », 0,29 % en fraction volumique) et le cas présent (« SmMany », fraction volumique gazeuse de 1,5 %).

Le comportement des particules ponctuelles solides est résolu selon une approche lagrangienne. Elles sont toutes identiques (monodisperses) et faiblement couplées à la phase fluide (« one way ») par résolution de l'équation Basset-Boussinesq-Oseen. Les positions des particules sont mises à jour par un schéma d'intégration de type Runge-Kutta d'ordre 4. Le nombre initial de particules de $2,4 \cdot 10^6$ est susceptible de diminuer car les particules sont définitivement supprimées lorsqu'elles entreront en contact avec la phase gazeuse (« capture par les bulles »). En revanche, ni l'agrégation, ni la capture aux parois n'ont été modélisées ici, si bien que les particules primaires gardent leur intégrité. En conclusion, si le régime établi de l'écoulement moyen liquide-bulles est supposé être simulé, aucun régime établi pour la population d'inclusions n'est atteint du fait de leur élimination au contact des bulles.

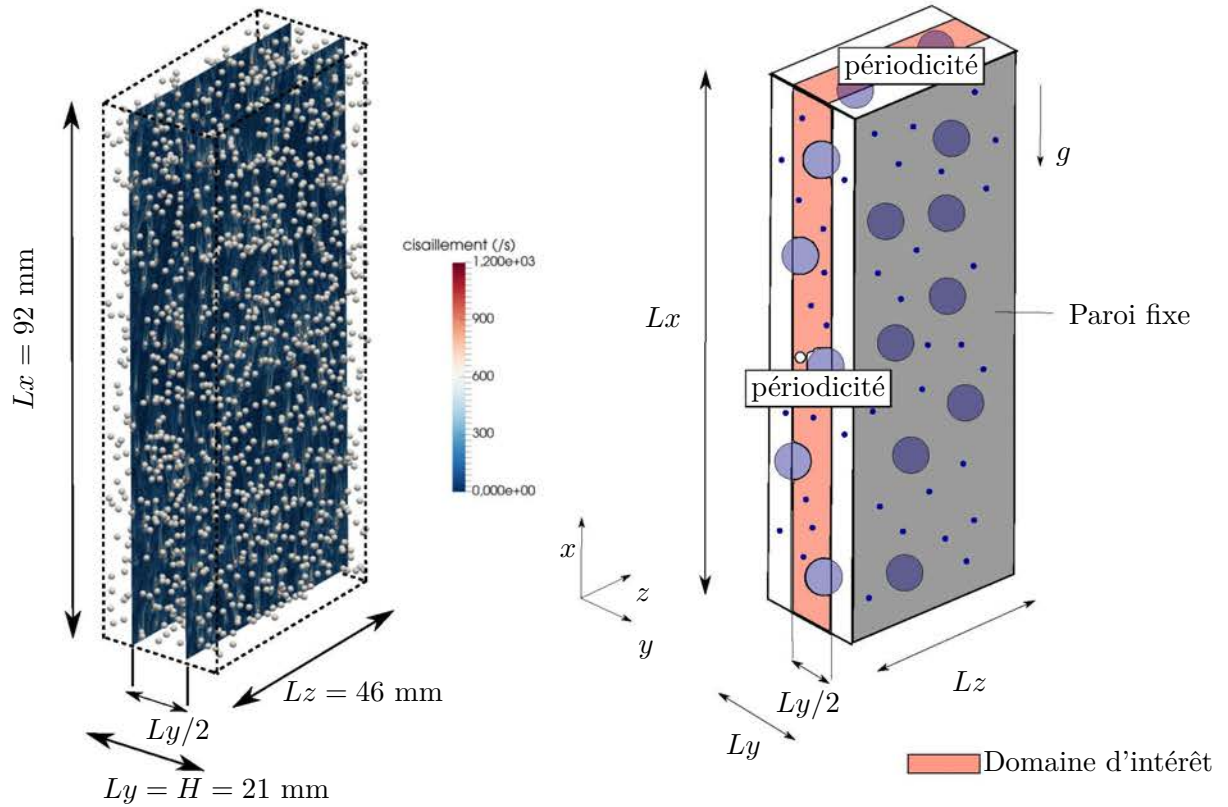
Le champ de cisaillement, également représenté sur la figure 5.4, est calculé au centre de chaque maille à partir d'un développement spatial au premier ordre de chaque composante du champ de vitesse exprimées sur les faces des cellules (emploi d'une grille décalée, ou « staggered grid » pour la résolution des équations de Navier-Stokes) afin d'en exprimer les composantes du gradient. Une fois ce développement effectué, la formule suivante est appliquée en chaque nœud du domaine (excepté les cellules où la fraction volumique de gaz est majoritaire) :

$$\dot{\gamma}(\vec{\mathbf{x}}, t) = \left(2 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 D_{ij}^2 \right)^{1/2} , \quad D_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \quad (5.23)$$

Dans l'équation (5.23), les grandeurs D_{ij} désignent les composantes du tenseur des taux de déformation $\overline{\mathbf{D}}$ déjà introduit dans le chapitre 3.

Le calcul du taux de cisaillement vu par les particules, nécessaire pour extraire la distribution des particules dans le spectre de cisaillement $\frac{\partial \#N_i}{\partial \dot{\gamma}}$, est assuré par l'interpolation des valeur du champ de cisaillement aux nœuds fluides voisins $\dot{\gamma}(\vec{\mathbf{x}}, t)$ par des fonctions de Dirac lissées sur trois nœuds dans chaque direction. Une description exhaustive est fournie dans le chapitre 2 (section 2.3.2).

Les conditions de calcul et les propriétés physiques choisies pour cette simulation sont données tableau 5.2. Elles sont proches des valeurs typiquement rencontrées dans un procédé de traitement d'acier liquide par flottation, à l'exception notable de la taille des bulles. En effet, les bulles d'argon dans les conditions réelles du procédé de flottation ont souvent une taille bien supérieure au millimètre, lié notamment à leur grossissement lors de leur ascension dans le bain. Ceci peut entraîner d'importantes déformations des bulles, voire l'apparition d'un engorgement. Dans les conditions de la simulation DNS, les bulles, étant donné leur petite taille, ne sont pas déformées. En conséquence, les bulles sont considérées comme des solides indéformables sphériques dans cette simulation.



taille du domaine complet = $92 \times 21 \times 46 \text{ mm}^3$
 taille du domaine d'intérêt = $90,6 \times 10,5 \times 44,4 \text{ mm}^3$

Fig. 5.4 – Simulations DNS d'un train de bulle résolu : visualisation de la position des bulles et du cisaillement selon deux plans (x, z) (à gauche), domaine d'étude complet et d'intérêt avec les conditions limites (à droite).

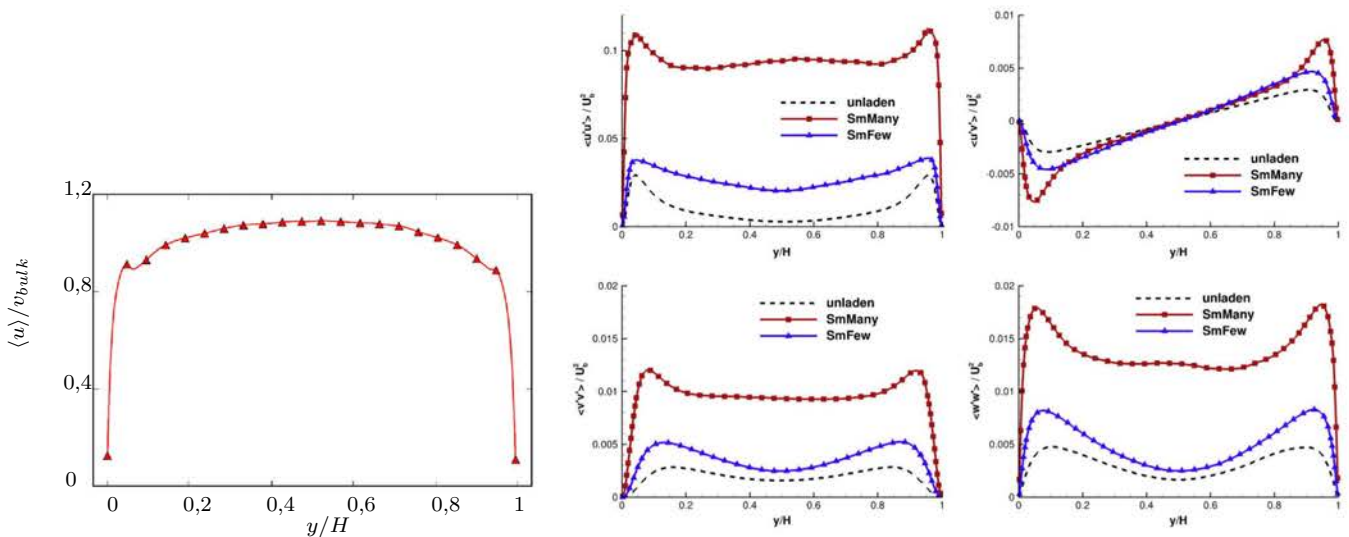


Fig. 5.5 – profil de la composante verticale de la vitesse moyennée suivant x et z en régime établi (résultats DNS de la TU de Dresde, à gauche), et composantes du tenseur des contraintes de Reynolds également moyenné suivant x et z (source : Santarelli et Fröhlich, 2015).

Tab. 5.2 – Propriétés physiques utilisées pour la simulation DNS du train de bulles et comparaison avec le cas d'un acier liquide traité par flottation.

Paramètres et propriétés	Nomenclature	Valeurs DNS	Valeurs habituelles en poche d'acier
Conditions opératoires			
Vitesse moyenne de l'écoulement	v_{bulk}	0,18 m.s ⁻¹	∈ [0; 0,5 m.s ⁻¹]
Fraction volumique de la phase gazeuse	ϕ_g	1,5 %	∈ [0, 5] %
Dimensions du domaine			
Épaisseur du canal	H	21 mm	
Taille du domaine complet suivant x	4,4 H	92 mm	
Taille du domaine complet suivant z	2,2 H	46 mm	
Propriétés de la phase liquide			
Masse volumique du fluide	ρ_f	7800 kg.m ⁻³	7800 kg.m ⁻³
Viscosité cinématique	ν	7,07 10 ⁻⁷ m ² .s ⁻¹	7,85 10 ⁻⁷ m ² .s ⁻¹
Tension de surface entre la phase liquide et les bulles ¹	σ_f	1,06 N.m ⁻¹	1,4 N.m ⁻¹
Propriétés des bulles			
Masse volumique	ρ_b	7,8 kg.m ⁻³	≈ 2 kg.m ⁻³
Diamètre	d_b	1,01 10 ⁻³ m	> 1 mm
Propriétés des particules			
Masse volumique	ρ_p	3949 kg.m ⁻³	3950 kg.m ⁻³
Diamètre	d_p	1,01 10 ⁻⁵ m	∈ [2, 100] 10 ⁻⁶ m
Densité numérale ²	N	2,4 10 ¹⁰ #.m ⁻³	[10 ¹⁰ ; 10 ¹²] #.m ⁻³

Conformément à la figure 5.4, le domaine complet a pour taille $92,4 \times 21 \times 46,2$ mm³. Pour les calculs de $\partial \#N_i / \partial \gamma$ et $\partial V / \partial \gamma$ et afin de s'affranchir des effets de paroi susceptibles de modifier l'écoulement des bulles, les régions en proche paroi n'ont pas été prises en compte, si bien que seule la moitié du domaine complet centré suivant la direction y a été retenue. Les variations de la vitesse moyenne débitante et des composantes du tenseur des contraintes de Reynolds ne sont pas importantes dans cette zone centrée conformément à la figure 5.5. En revanche, en proche paroi, des variations significatives de ces grandeurs peuvent être observées, ce qui prouve que la paroi peut potentiellement influencer les valeurs des distributions et donc de la fréquence de collision. D'autre part, afin d'éviter tout artefact d'ordre numérique dû à des éventuels problèmes de périodicité, les longueurs Lx et Lz ont été réduites de part et d'autre de la frontière du domaine d'une dizaine de cellules, si bien que le domaine d'étude a finalement pour taille $90,6 \times 10,5 \times 44,4$ mm³. Au vu des longueurs Lx et Lz du domaine d'origine, cette troncature n'affecte pas la taille du domaine suivant x et z outre mesure. En conséquence, les valeurs des distributions obtenues sont parfaitement représentatives de l'écoulement et du transport des inclusions solides.

Lors du lancement de la simulation DNS, le canal ne comporte pas de bulles. L'écoulement est considéré comme établi dès lors que la force volumique et la contrainte pariétale atteignent une valeur constante. Les bulles sont par la suite introduites dans l'écoulement. Elles sont espacées de façon aléatoire et leur vitesse est calculée à l'aide de la distribution lissée de Dirac sur trois nœuds fluides, de façon similaire au calcul du taux de cisaillement vu par les particules. L'introduction des bulles correspond à l'instant $t = 0$. Une fois que le régime de l'écoulement diphasique est établi, les particules sont introduites à

1. Non utilisé dans les simulations car les bulles, étant donné leur taille millimétrique, sont supposées indéformables.
2. Pour le procédé de flottation, la densité numérale est celle des inclusions de taille 10 μ m.

leur tour, ce qui correspond à un temps d'environ 2,4 s. Tout comme les bulles, leur vitesse initiale est calculée à l'aide de la même fonction d'interpolation.

5.4.2 Estimation des distributions de volume et des particules dans le spectre de cisaillement

Les résultats fournis par l'équipe de la TU de Dresde correspondent à plusieurs instants lorsque l'écoulement liquide-bulles est établi, chacun espacé d'un temps Δt_{bulk} correspondant au temps de séjour moyen du fluide dans une tranche d'épaisseur H suivant x . D'après le tableau 5.2, ce temps vaut :

$$\Delta t_{bulk} = \frac{H}{v_{bulk}} \simeq 0,12 \text{ s} \quad (5.24)$$

Au total, 11 « snapshots » du calcul DNS triphasique ont été fournis, chacun espacé d'un temps Δt_{bulk} . Le premier correspond au temps de 4,08 s et le dernier à 5,25 s.

Afin de calculer la distribution du volume dans le spectre de cisaillement, l'équipe de la TU de Dresde a fourni le champ de cisaillement. Étant donné que le maillage utilisé est régulier et uniforme, il est alors facile de tracer le volume cumulé dans le spectre de cisaillement et d'en déduire la distribution recherchée par simple dérivation. En outre, il a été relativement simple d'exclure le domaine occupé par les bulles car le champ de cisaillement, pour rappel, n'y est pas calculé.

D'autre part, la distribution du nombre de particules dans le spectre de cisaillement est calculée à partir de leurs propriétés externes que sont :

- leur position, afin de ne conserver que les particules incluses dans le domaine d'étude,
- le taux de cisaillement vu par les particules.

Une fois que les particules en dehors du domaine d'étude sont filtrées, de façon similaire à la distribution des volumes, le diagramme cumulé du nombre de particule peut être tracé. La distribution du nombre de particules est obtenue par dérivation de la cumulative.

Les distributions relatives au volume et au nombre de particules monodisperses sont tracées en échelle logarithmique sur la figure 5.6 aux temps 4,08 s et 5,25 s. Les fonctions de répartition associées y sont également représentées. Quel que soit le type de distribution ou le temps considéré, les quantités sont distribuées symétriquement de part et d'autre d'un pic dont la valeur du taux de cisaillement associé est de l'ordre de 80 s^{-1} . D'autre part, le nombre total de particules dans le domaine étudié a légèrement diminué en comparant la cumulative aux deux instants. Cette diminution est liée à la capture des inclusions par les bulles. Enfin, ces deux types de distributions s'étendent autour d'une gamme de valeurs de cisaillement comprises entre 10 et 1000 s^{-1} , avec un profil très similaire.

Cette forte similarité entre les deux distributions laisse penser que les particules sont uniformément positionnées dans la phase liquide (pas de ségrégation). Dans cette hypothèse, à partir de la relation (5.17), les deux distributions sont reliées par :

$$\frac{\partial \#N_i}{\partial \dot{\gamma}} = N_i \frac{\partial V}{\partial \dot{\gamma}} = \frac{\#N_{i,tot}}{V_{liq}} \frac{\partial V}{\partial \dot{\gamma}} \quad (5.25)$$

Pour confirmer cette hypothèse, la distribution effective du nombre de particules est comparée à la distribution homogène à l'aide de la figure 5.7 pour le premier et le dernier « snapshot ». Ces distributions

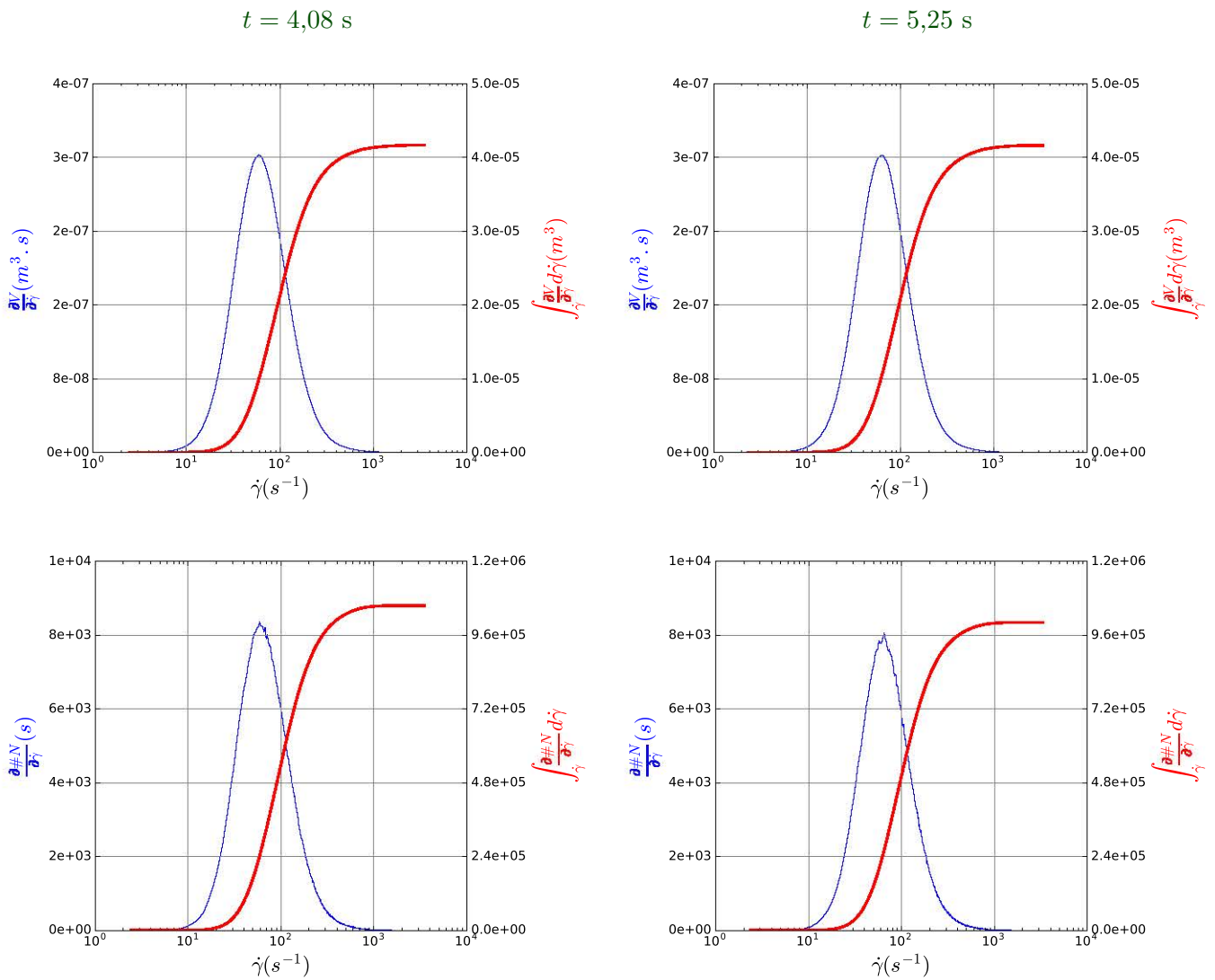


Fig. 5.6 – Distributions des volumes (en haut) et du nombre de particules (en bas) dans le spectre de cisaillement en échelle logarithmique à deux instants, $t = 4,08$ s (à gauche) et $t = 5,25$ s (à droite).

sont tracées respectivement en continu et en pointillé. Ceci permet de constater qu'elles sont effectivement proches. Néanmoins, leur rapport, également représenté en rouge sur cette figure, montre que les particules ont une concentration homogène pour une gamme de cisaillement s'étendant de 50 à 500 s^{-1} . Pour des taux de cisaillement en dehors de cet intervalle, un appauvrissement en densité numérale est observé. Au vu du diagramme des distributions $\partial V/\partial \dot{\gamma}$, cette concentration préférentielle concerne environ 80 % du volume liquide total.

5.4.3 Calcul de la fréquence de collision entre particules

Finalement, la fréquence de collision peut être déduite de ces distributions. Elle est fournie par l'équation (5.20) pour le cas général. Dans l'hypothèse d'une densité numérale homogène des particules, l'expression de la fréquence peut être simplifiée en réinjectant l'équation (5.25) dans (5.20). Ainsi, la fréquence de collision f_{ij} pour des particules uniformément espacées a pour expression :

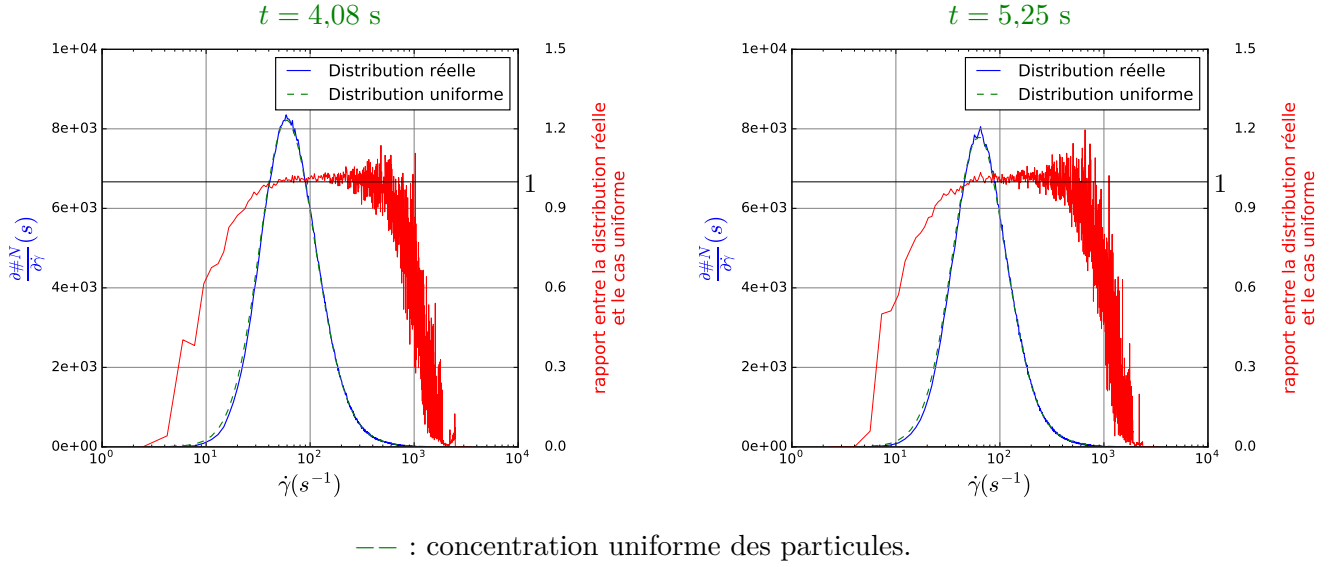


Fig. 5.7 – Distributions du cisaillement en nombre de particules et comparaison.

$$\begin{aligned}
 f_{ij} &= \int_{\dot{\gamma}} \beta_{ij}(\dot{\gamma}) \left(\frac{\#N_{i,tot}}{V_{liq}} \frac{\partial V}{\partial \dot{\gamma}} \right) \left(\frac{\#N_{j,tot}}{V_{liq}} \frac{\partial V}{\partial \dot{\gamma}} \right) \left(\frac{\partial V}{\partial \dot{\gamma}} \right)^{-1} d\dot{\gamma} \\
 &= \frac{\#N_{i,tot} \#N_{j,tot}}{V_{liq}^2} \int_{\dot{\gamma}} \beta_{ij} \frac{\partial V}{\partial \dot{\gamma}} d\dot{\gamma}
 \end{aligned} \tag{5.26}$$

Le noyau de collision utilisé ici est celui de Smoluchowski pondéré par la loi d'efficacité fournie par l'expression (5.12), soit :

$$\beta_{ij} = \max(0 ; 0,4 - 0,1 d_p^*) \frac{1}{6} \dot{\gamma} (d_{pi} + d_{pj})^3 \tag{5.27}$$

Ainsi, le noyau de collision turbulente dépend linéairement du taux de cisaillement. Il est alors possible d'exprimer analytiquement les fréquences f_{ij} . En réinjectant l'expression (5.27) dans (5.26), la fréquence de collision dans le cas d'un réacteur parfaitement homogène vérifie :

$$\begin{aligned}
 f_{ij} &= \frac{\#N_{i,tot} \#N_{j,tot}}{V_{liq}^2} \int_{\dot{\gamma}} \max(0 ; 0,4 - 0,1 d_p^*) \frac{1}{6} \dot{\gamma} (d_{pi} + d_{pj})^3 \frac{\partial V}{\partial \dot{\gamma}} d\dot{\gamma} \\
 &= \max(0 ; 0,4 - 0,1 d_p^*) \frac{1}{6} (d_{pi} + d_{pj})^3 \frac{\#N_{i,tot} \#N_{j,tot}}{V_{liq}^2} \int_{\dot{\gamma}} \dot{\gamma} \frac{\partial V}{\partial \dot{\gamma}} d\dot{\gamma}
 \end{aligned}$$

L'intégrale $\frac{1}{V_{liq}} \int_{\dot{\gamma}} \dot{\gamma} \frac{\partial V}{\partial \dot{\gamma}} d\dot{\gamma}$ désigne la valeur moyenne spatiale du taux de cisaillement, notée $\langle \dot{\gamma} \rangle$. Finalement, l'expression analytique des fréquences de collisions binaires de particules réparties uniformément dans le canal vérifie :

$$f_{ij} = \max(0 ; 0,4 - 0,1 d_p^*) \frac{1}{6} (d_{pi} + d_{pj})^3 \frac{\langle \dot{\gamma} \rangle}{V_{liq}} \#N_{i,tot} \#N_{j,tot}. \tag{5.28}$$

Le taux de cisaillement moyen est ici de l'ordre de 150 s^{-1} . D'autre part, toutes les inclusions ont la même taille, et donc la fréquence de collision se simplifie ici en :

$$f_{ii} = \frac{0,3}{6} (2d_p)^3 \frac{\langle \dot{\gamma} \rangle}{V_{liq}} (\#N_{i,tot})^2. \quad (5.29)$$

La fréquence de collision entre les particules monodisperses aux différents « snapshots » $f_{ii}(t)$ est également représentée figure 5.8, où les deux cas portant sur la répartition réelle et uniforme des particules monodisperses sont considérés. Il est important de rappeler qu'aucun mécanisme de restructuration comme l'agrégation n'est pris en compte ici et que seule la capture dans les bulles modifie le nombre de particules. Au vu de la figure 5.8, la fréquence de collision diminue globalement, ce qui est lié à la diminution du nombre de particules dû à la capture de certaines d'entre elles par les bulles. L'hypothèse de la répartition homogène des particules tend à surestimer la fréquence de collision d'environ 8 %, ce qui est dû à la surestimation du nombre de particule subissant un taux de cisaillement élevé ($> 1000 \text{ s}^{-1}$). Au total, environ 1500 particules entrent en collision par unité de temps, ce qui correspond à une fréquence volumique de $3,5 \cdot 10^7 \text{ \#.s}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$ et un temps caractéristique entre deux collisions de 700 s (taux d'agrégation), ce qui est un ordre de grandeur a priori cohérent avec les connaissances empiriques en métallurgie.

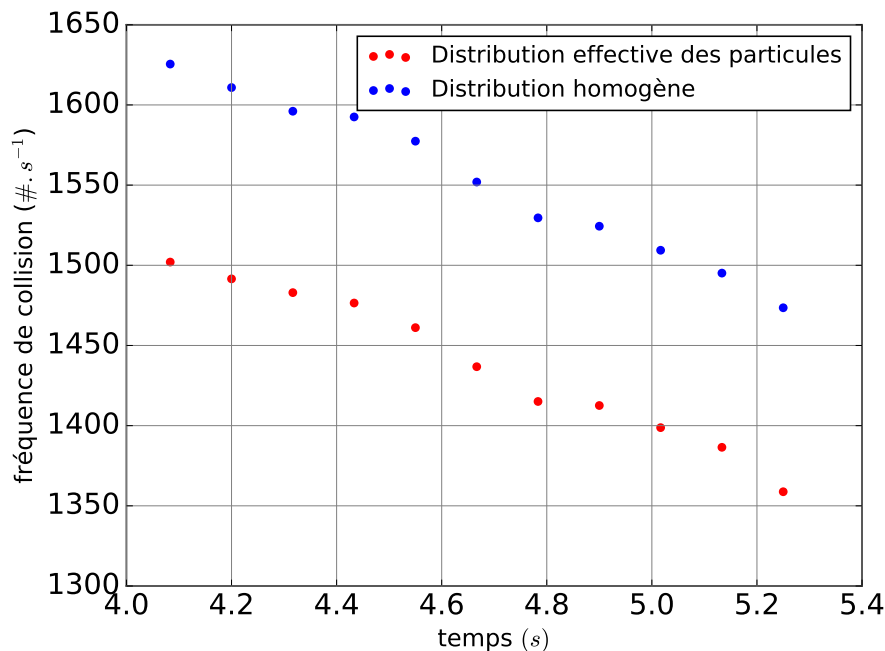


Fig. 5.8 – Évolution de la fréquence statistique de collision : densité numérale réelle (rouge) et particules uniformément distribuées (bleu).

5.5 Deuxième application : calcul de la fréquence et de la cinétique d'agrégation à partir d'une simulation RANS

5.5.1 Description de la poche et résultats d'une simulation « Reynolds Averaged Navier-Stokes » (RANS)

La seconde application proposée ici est celle de l'étude de l'évolution de la population inclusionnaire au sein d'une poche d'acier brassée par des bulles d'argon. Les conditions opératoires et propriétés physiques sont rassemblées dans le tableau 5.3. La poche étudiée mesure 2,6 m de diamètre pour 2,5 m de hauteur et contient 60 t d'acier liquide. Le milieu est agité par des bulles d'argon provenant de deux bouchons poreux placés à la base du réacteur. Chacun de ces bouchons débite 73 Nl de gaz par minute. Les inclusions étudiées sont supposées sphériques. En effet, cette application porte sur des inclusions globulaires d'aluminate de calcium issues d'un calmage à l'aluminium, puis d'un traitement au calcium (cf chapitre 1). Initialement, une concentration massique de $0,176 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ correspondant à une teneur massique en oxygène de 7,9 ppm est imposée. Les particules sont discrétisées en 20 classes de tailles s'étendant de $2 \mu\text{m}$ à $100 \mu\text{m}$ selon une loi log-normale. Une illustration de cette distribution initiale est proposée figure 5.9. Les différents paramètres et propriétés sont répertoriés dans le tableau 5.3.

La capture des inclusions n'a pas été prise en compte ici. En effet, pour le procédé de flottation, il a été montré que c'est le mécanisme d'agrégation qui influence le plus l'évolution du nombre d'inclusions au sein de la poche (cf Daoud *et al.*, 2011 ; Bellot *et al.*, 2014 ; Bellot *et al.*, 2018).

Pour ces simulations, seules les phases liquides et gazeuses sont résolues. Ces deux phases sont entièrement couplées selon une approche de type Euler-Euler décrite au chapitre 1 (section 1.2.4), et les équations sont résolues à l'aide de la méthode des volumes finis à l'aide du logiciel Fluent V17.1. Le modèle de turbulence $k - \varepsilon$ appliqué à l'écoulement diphasique liquide/gaz est utilisé. Le champ de dissipation turbulente $\varepsilon(\vec{x})$, exprimé dans chaque cellule du réacteur, permet d'accéder au champ de cisaillement à partir de la relation $\dot{\gamma} = \sqrt{\varepsilon/\nu}$. Le taux de rétention gazeuse ainsi que la dissipation turbulente sur une section passant par le milieu de la poche sont représentés figure 5.10. Ces illustrations mettent en évidence que les zones de turbulence sont essentiellement localisées dans les deux régions à forte teneur en gaz issues des bouchons poreux.

5.5.2 Estimation de la distribution du volume dans le spectre de cisaillement

Le brassage du bain permet, en première approximation, de considérer la poche homogène au regard des éléments chimiques qui composent l'acier ainsi que de la composition inclusionnaire. Ceci implique que l'équation d'équilibre des populations peut être utilisée sous la forme d'un bilan global donné par l'équation (5.21), et que le problème à traiter ne nécessite donc pas de résolution spatiale. Cette simplification s'appuie notamment sur l'étude menée par Bellot *et al.* (2014) qui a consisté à comparer, pour la même population inclusionnaire, le cas d'une répartition parfaitement homogène des particules (modèle 0D) à celui où le transport induit par l'écoulement est pris en compte (résolution spatiale - modèle 3D). L'hypothèse du réacteur homogène semble pertinente dans la mesure où les modèles 0D et 3D fournissent des résultats proches.

Ainsi, seule la distribution du volume de la phase liquide dans le spectre de cisaillement est nécessaire dans ce cas. Cette distribution est représentée figure 5.11, où la gamme de valeur du taux de cisaillement présente dans le mélange est essentiellement comprise entre 1 et 50 s^{-1} . Cette gamme relativement faible de cisaillement correspond au bain liquide extérieur aux deux volutes. Des valeurs plus importantes, dépassant 100 s^{-1} , sont atteintes au sein des deux phases, sont atteintes au sein des deux phases, mais

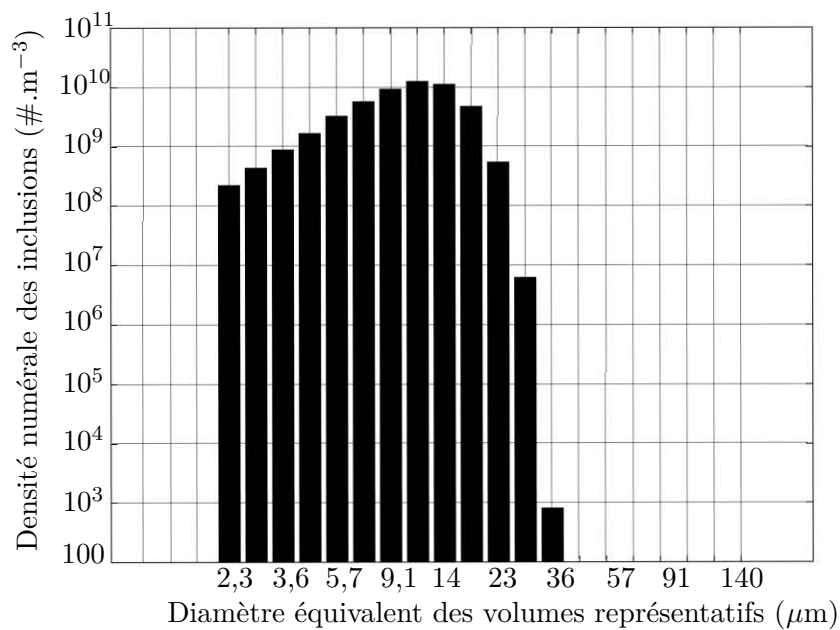
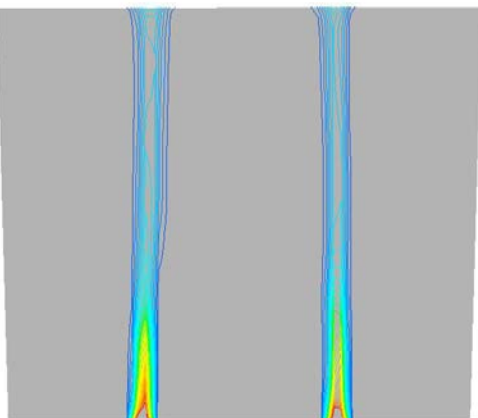
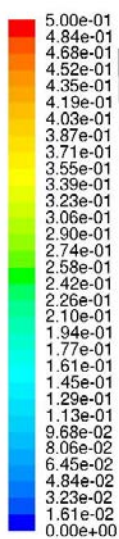


Fig. 5.9 – Distribution initiale en taille des inclusions.

Tab. 5.3 – Propriétés physiques utilisées pour la simulation RANS de l'acier liquide traité en poche.

Paramètres et propriétés	Valeurs
Conditions opératoires	
Nombre de bouchons poreux	2
Débit gazeux par bouchons	73 Nl.min^{-1}
Température moyenne de l'acier	1873 K
Durée du traitement	10 min
Dimensions de la poche	
Diamètre	2,6 m
Hauteur	2,5 m
Propriétés de l'acier liquide	
Masse volumique	7000 kg.m^{-3}
Viscosité cinématique	$7,85 \cdot 10^7 \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$
Tension de surface	$1,4 \text{ N.m}^{-1}$
Propriétés de la phase gazeuse	
Masse volumique	$\simeq 2 \text{ kg.m}^{-3}$
Taux de rétention	$\in [0, 5] \%$
Propriétés des particules	
Diamètre	$\in [2, 200] \mu\text{m}$
Densité numérale initiale	$4,8 \cdot 10^{10} \#.m^{-3}$

taux de rétention
de la phase gazeuse (-)



taux de dissipation
turbulente ($m^2.s^{-3}$)

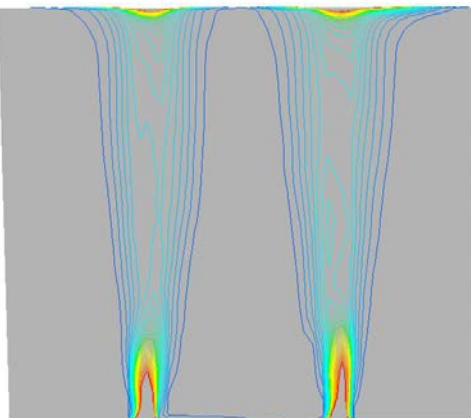
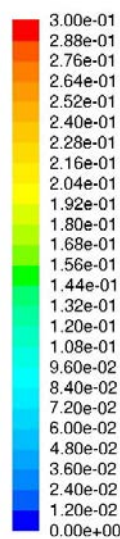


Fig. 5.10 – Isocontours de la fraction volumique gazeuse (à gauche) et du taux de dissipation turbulente (à droite) dans le réacteur, résultats issus de simulations du train de bulles d’argon dans un acier liquide à l’échelle de la poche (macroscopique).

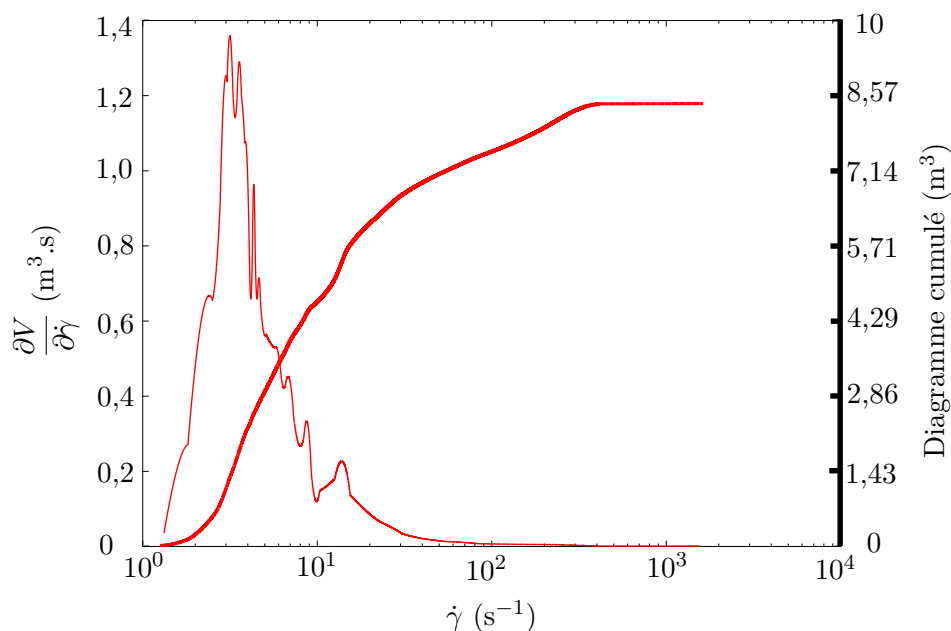


Fig. 5.11 – Distribution dans le spectre de cisaillement en échelle logarithmique du volume liquide de 60 t d’acier agité par le train de bulles d’argon.

correspondent à des volumes d'acier liquide très réduits. Le spectre de cisaillement prouve que l'échelle de Kolmogorov atteint des valeurs majoritairement supérieures à 150 μm dans le bain. Cette échelle est donc supérieure aux plus grosses inclusions présentes.

5.5.3 Bilan de population et résultats

Étant donné que cette partie traite de la collision turbulente avec des particules essentiellement en-deçà de l'échelle de Kolmogorov, le noyau de Saffman & Turner est naturellement le noyau de référence choisi. Il faut de plus rappeler que ce noyau a une expression proche de Smoluchowski et que l'écoulement turbulent est décrit par un cisaillement aux petites échelles de Kolmogorov. Ces réflexions, détaillées dans la section 4.1.2, incitent à recourir à la loi d'efficacité obtenue dans ce manuscrit. En conséquence, le noyau de collision ici a pour expression :

$$\beta_{ij} = \max(0 ; 0,4 - 0,1 d_p^*) \left(\frac{8\pi}{15}\right)^{1/2} \dot{\gamma} \left(\frac{d_{pi} + d_{pj}}{2}\right)^3 \quad (5.30)$$

La démarche pour retrouver l'expression de la fréquence de collision f_{ij} dans le cas d'une concentration uniforme des particules a déjà été détaillée dans la section précédente pour aboutir à l'équation (5.28). Il suffit alors de reprendre cette démarche afin de retrouver son expression dans le cas présent sachant que les noyaux de collision de Saffman & Turner et Smoluchowski sont proportionnels, ce qui aboutit à l'expression :

$$f_{ij} = \max(0 ; 0,4 - 0,1 d_p^*) \left(\frac{8\pi}{15}\right)^{1/2} \left(\frac{d_{pi} + d_{pj}}{2}\right)^3 \frac{\langle \dot{\gamma} \rangle}{V_{liq}} \#N_{i,tot} \#N_{j,tot}. \quad (5.31)$$

Finalement, la cinétique globale d'agrégation des inclusions de concentration homogène est modélisée par l'équation d'équilibre suivante :

$$\frac{d\#N_{i,tot}}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,k \\ j+k=i}} \kappa K_{jk} \#N_{j,tot} \#N_{k,tot} - \sum_{j=1}^{N_c} K_{ij} \#N_{i,tot} \#N_{j,tot} \quad (5.32)$$

avec

$$K_{ij} = \max(0 ; 0,4 - 0,1 d_p^*) \left(\frac{8\pi}{15}\right)^{1/2} \left(\frac{d_{pi} + d_{pj}}{2}\right)^3 \frac{\langle \dot{\gamma} \rangle}{V_{liq}}$$

Ici, le taux de cisaillement moyenné dans l'espace $\langle \dot{\gamma} \rangle$ est égal à 35 s^{-1} . Le volume total occupé par l'acier liquide est la somme de chaque cellule à laquelle est retranchée la fraction gazeuse. D'après les résultats de la simulation RANS, $V_{liq} = 8,4 \text{ m}^3$.

Connaissant la densité numérale des 20 classes de particules représentées figure 5.9, l'équation d'équilibre (5.32) peut à présent être résolue correctement, sous l'hypothèse que la durée du traitement ne permet pas d'atteindre la plus grande classe des agrégats afin de garantir la conservation de la masse totale des inclusions par la méthode discrète des classes. D'autre part, cette équation est intégrée en temps à l'aide d'un schéma de type Euler (explicite).

La distribution des inclusions après 10 minutes de bullage est représentée figure 5.12, et comparée au

cas où le noyau de Saffman & Turner est appliqué avec une efficacité égale à l'unité. Quels que soient les noyaux utilisés, les plus grosses inclusions ont bien une taille en-deçà du diamètre représentatif de la plus grande classe (180 μm ici). On note que les deux distributions en taille sont très différentes. Les petites classes de taille sont impactées par une efficacité de 0,3 pour des collisions (les plus probables) entre des inclusions de même taille. Pour les fortes tailles d'inclusion, les collisions les plus probables devraient être celles d'inclusions de petites tailles, mais la valeur d'efficacité, d'autant plus faible que le rapport de taille est important, limite fortement l'agrégation.

Une attention particulière a également été portée sur l'évolution du flux net d'agrégation ϕ_{ag} , défini par :

$$\phi_{ag} = -\frac{d\#N}{dt} \quad , \quad \#N = \sum_{i=1}^{N_{classes}} \#N_i \quad (5.33)$$

Ce flux caractérise l'évolution du nombre total d'inclusion présentes dans la poche d'acier. À cause du seul mécanisme d'agrégation, ce nombre ne peut que diminuer, d'où la présence du signe - dans l'équation (5.33) qui permet de travailler avec des valeurs positives. L'évolution temporelle de cette grandeur a été tracée figure 5.13, incluant les deux situations (efficacité unitaire et la loi d'efficacité $\eta_{ij}(d_p^*)$). Le nombre total d'inclusion décroît d'environ $5 \cdot 10^8$ de particules par unité de temps, ce qui correspond à un flux volumique d'environ $6 \cdot 10^7 \text{ \#} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$. Conformément à ce qui est attendu, ce taux diminue au cours du temps du fait du nombre toujours décroissant des inclusions présentes. D'autre part, ce graphe confirme que la loi d'efficacité limite de façon conséquente la valeur de ce flux, ainsi que son évolution.

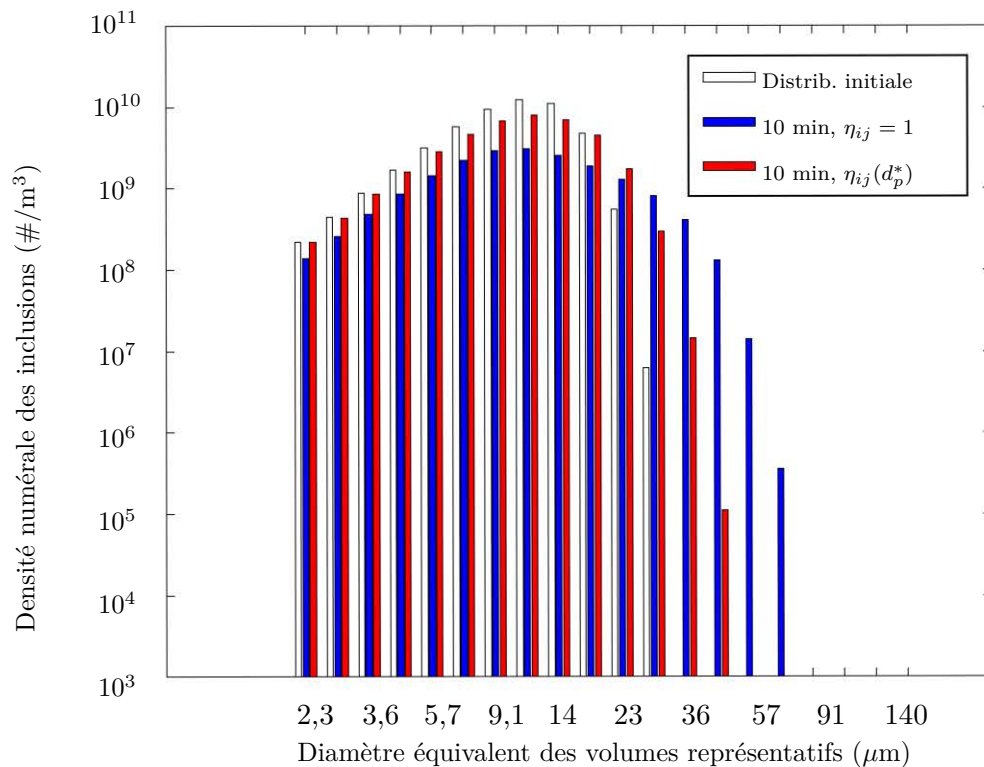


Fig. 5.12 – Répartition des inclusions après 10 minutes de mélange : comparaison entre le cas idéal de Saffman & Turner (en bleu) et le cas réel (en rouge).

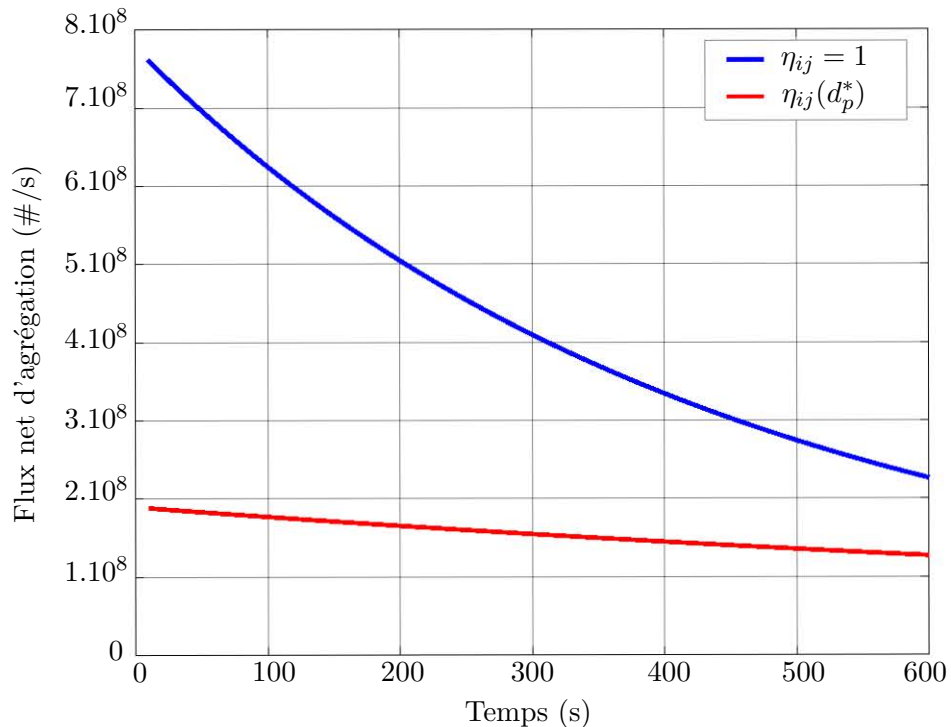


Fig. 5.13 – Évolution du flux net d'agrégation au cours du traitement de l'acier liquide : comparaison entre le cas de Saffman & Turner (en bleu) et le cas réel (en rouge).

Chapitre 6

Conclusions et perspectives

La propreté inclusionnaire reste un enjeu majeur en élaboration des matériaux métalliques par voie liquide. Dans ce contexte, le projet franco-allemand ANR-DFG Flotinc s'attache à étudier les mécanismes d'agrégation au sein du processus de flottation, utilisé en particulier en métallurgie secondaire dans les poches d'acier et d'aluminium. Ceci permet de contrôler la population inclusionnaire, avant la coulée et la solidification du métal.

Une analyse de la littérature a montré que l'essentiel des simulations des poches industrielles utilisent la notion de noyau d'agrégation. Ces noyaux permettent de rendre compte, à l'échelle macroscopique, des mécanismes ayant lieu à l'échelle mésoscopique des inclusions et qui sont moteurs de la collision et de l'attachement des particules entre elles. Ce travail de thèse contribue à une meilleure description des interactions hydrodynamiques entre deux inclusions lors du processus collisionnel, à quantifier ses effets locaux et à compléter les expressions des noyaux d'agrégation.

Un modèle 3D a été utilisé afin de décrire à l'échelle mésoscopique la dynamique des particules dans un écoulement. Ce dernier est résolu numériquement par une méthode de Boltzmann sur réseau. Un couplage complet entre la phase liquide et les solides est assuré par une méthode de frontière immergée. Elle permet alors de capturer les effets induits par l'écoulement sur une particule et inversement, et donc de quantifier les interactions hydrodynamiques. Ces interactions, une fois calculées, sont prises en compte lors de la mise à jour de la position des particules par un suivi lagrangien.

Les inclusions présentes dans le métal étant très dispersées, les simulations ont porté sur des interactions binaires entre particules de forme globulaire, comme c'est le cas pour les particules d'aluminate de chaux dans un acier liquide. Les inclusions ayant une taille moyenne en général petite devant les échelles de turbulence, l'écoulement a été décrit par un cisaillement quasi-stationnaire supposé plan. Des conditions d'adhérence ont été appliquées à la surface des particules.

Les inclusions non métalliques sont supposément des particules peu mouillées. Dans ce cas, ce travail a été l'occasion de montrer que les forces non hydrodynamiques n'interviennent qu'à petite échelle, en deçà de la résolution numérique (c'est-à-dire environ 5 % du diamètre). Dès lors que deux particules sont à proximité l'une de l'autre, la formation d'un pont gazeux est susceptible d'assurer une force de cohésion et il est peu probable que les forces hydrodynamiques déstabilisent l'agrégat ainsi formé. Aussi, seuls les effets hydrodynamiques ont été pris en compte comme source d'interaction, et les particules s'agrègent dès qu'elles entrent en contact.

Le suivi des particules pour différentes positions initiales données a permis d'estimer des sections efficaces de collision. Le choix de ces positions initiales a été optimisé à l'aide d'une méthode de tirage

développée au cours de ce travail. L'analyse des trajectoires et des surfaces obtenues révèle que les effets hydrodynamiques limitent la probabilité de collision (agrégation). Plus précisément, les particules ont tendance à se contourner lorsqu'elles passent à proximité l'une de l'autre. Cette analyse a également permis de mettre en lumière que les particules dont les positions initiales sont proches suivant la direction du cisaillement s'approchent, puis s'éloignent avant même d'être passées à hauteur l'une de l'autre. Ce phénomène d'évitement, de type « demi-tour » et dû aux effets de recirculation de l'écoulement, est observé y compris dans les conditions proches de celles de Stokes ce qui n'est pas intuitif (effets inexistantes lorsque le régime de Stokes est rigoureusement appliqué).

Les effets hydrodynamiques limitant la probabilité de collision, l'efficacité du processus d'agrégation s'en trouve également impactée. En outre, cette efficacité, qui reste finalement peu changée en fonction du régime de cisaillement, décroît d'autant plus que le rapport de taille des particules est important. Une loi d'efficacité, dépendant uniquement de ce rapport, a pu être extraite.

Une attention particulière a été portée sur la transformation de l'équation d'équilibre des populations dans le spectre du taux de cisaillement afin d'exploiter les noyaux de collision dépendant de ce dernier en calculant des fréquences de collision. Ce travail a été l'occasion par la suite d'exploiter une première fois ces résultats dans le cadre du projet Flotinc en s'appuyant sur des résultats de simulations DNS effectuées par la TU de Dresde. Il s'agit d'un écoulement agité par des bulles, comprenant des particules de taille d'environ $10 \mu\text{m}$ et faiblement couplées à la phase fluide, dont le suivi est assuré par résolution de l'équation de la dynamique. Les particules au contact de bulles sont automatiquement supprimées, ce qui induit une diminution avec le temps de la densité numérale de ces dernières. Cette approche statistique est un moyen commode d'estimer le nombre de collisions par unité de temps, là où le pas de temps des simulations DNS, trop important (d'une valeur environ 100 fois plus importante que les simulations de ce travail), rendrait ce calcul délicat par voie déterministe.

Une deuxième source d'exploitation a été possible à partir de résultats de simulations RANS d'une poche industrielle d'acier agité par des bulles d'argon. Une approche en système homogène a été effectuée afin de déterminer l'évolution de la population d'inclusions globulaires d'aluminate de chaux, ce à l'aide de la résolution discrète de l'équation de bilan global de population par la méthode des classes. Seul le mécanisme d'agrégation induit par la turbulence, qui est prépondérant devant les autres, a été pris en compte dans cet exemple. Étant donné que les effets hydrodynamiques à l'échelle des inclusions affectent l'efficacité d'agrégation, cela se traduit effectivement, à l'échelle de la poche industrielle, par une réduction sensible de la fréquence d'agrégation et donc de la dynamique d'évolution en taille de la population. En effet, les inclusions d'une taille supérieure à une cinquantaine de microns sont quasiment inexistantes alors qu'une efficacité prise égale à l'unité impliquerait une présence significative de particules de diamètre pouvant atteindre 100 microns après traitement.

Il faut souligner que la surface et l'efficacité d'agrégation ont fait l'objet d'un paramétrage géométrique, peu exploité dans ce travail, et dans le projet Flotinc en général. Pour cela, quatre coefficients ont été proposés. Ce paramétrage pourrait s'avérer pratique si des lois, fonctions du régime de cisaillement et du rapport de taille des particules, étaient établies pour chacun de ces quatre coefficients. Étant donné que la loi d'efficacité peu s'exprimer en fonction de ces paramètres géométriques, ceci permettrait ainsi d'affiner la loi d'efficacité calculée.

D'autre part, ce paramétrage décrivant la forme des surfaces, pourrait être exploité en vue de détecter les collisions entre particules pour les simulations DNS entreprises par la TU de Dresde. De ce fait, la difficulté liée au pas de temps numérique qui, on le rappelle, est trop significatif à l'échelle des particules, pourrait être levée sans alourdir les temps de calcul.

Les inclusions sont plus petites que les plus petites échelles de l'écoulement et que le maillage des simulations DNS. L'écoulement externe dans les simulations d'interactions entre inclusions a donc été linéarisé à partir du gradient du champ de vitesse issu de résultats DNS. Cependant le gradient de vitesse a neuf composantes. Une fois déduite la relation imposée par l'incompressibilité de l'écoulement, il reste huit degrés de liberté. Dans cette étude, un seul degré de liberté a été exploré en modélisant l'écoulement par un cisaillement plan. L'influence des autres composantes du gradient de vitesse n'a pas été étudiée. Pour un paramétrage plus fin de l'efficacité de collision, il est tout à fait envisageable de prendre en compte des composantes supplémentaires en imposant d'autres conditions limites dans les simulations à l'échelle mésoscopique. Cependant, le nombre de simulations nécessaires à une étude systématique comme celle présentée ici croît exponentiellement avec le nombre de degrés de liberté explorés. Le gain potentiel en qualité de modélisation est donc contrebalancé par un coût significatif en temps de calcul nécessaire.

À court terme, le mécanisme d'agrégation pourrait également être affiné davantage en prenant en compte la sédimentation différentielle en plus de l'agitation turbulente. Cette perspective n'a cependant d'intérêt que pour les inclusions les plus grosses étant donné que la vitesse de Stokes moyenne relative, insignifiante devant celle induite par le cisaillement pour les inclusions d'une dizaine de microns et un rapport de taille inférieur à 3, implique que le mécanisme de collision de telles particules est essentiellement dû à l'agitation turbulente.

La présence potentielle de nanobulles à la surface des inclusions peut induire un glissement partiel. D'autre part, même en l'absence de bulles, la mouillabilité des particules est susceptible d'influencer le profil local de l'écoulement à leur surface (Vinogradova 1995). Ces phénomènes restent difficiles à modéliser et quantifier physiquement. Ils sont également délicats à implémenter d'un point de vue numérique avec la méthode de frontière immergée employée. Ce sujet mériterait cependant d'être exploré.

Le travail présenté dans ce manuscrit suppose que les particules se comportent comme des sphères compactes une fois agrégées, ce qui est rigoureusement vrai dans le cas d'une coalescence. Or, elles peuvent également garder leur individualité, comme c'est le cas pour les inclusions solides. Face à cette hypothèse limitante, il pourrait être envisagé de calculer des surfaces de collision entre petits agrégats composés d'inclusions primaires sphériques. Bien entendu, la collision dépend non seulement de la position relative initiale des agrégats, mais aussi de la morphologie ainsi que de l'orientation de ces derniers. De telles études existent déjà dans le cas de particules en régime de Stokes (Frungieri et Vanni, 2016; Frungieri et Vanni, 2017), mais souffrent des mêmes difficultés que la multiplication des degrés de liberté pour modéliser l'écoulement, l'étude systématique est trop coûteuse.

Un travail reste également à effectuer pour étudier des inclusions primaires présentant une morphologie plus complexe. Comme pour le cas d'agrégats composés de particules sphériques, ceci implique un plus grand nombre de degrés de liberté que pour les sphères primaires. Le simple fait d'étudier le comportement d'inclusions de sphéricité légèrement inférieure à la sphère, telles que les ellipsoïdes, en vue d'extraire une surface de collision s'avère long et délicat.

Annexes

Annexe A

Noyau de collision de Saffman & Turner

En turbulence homogène isotrope, [Saffman et Turner \(1956\)](#) ont développé un modèle permettant d'établir l'expression d'un noyau de collision entre deux particules sphériques qui suivent les fluctuations du fluide sans perturber l'écoulement de ce dernier.

Pour que ce modèle soit valable, il est nécessaire que le diamètre des sphères soit petit comparé à l'échelle de Kolmogorov. Il faut également que le temps de relaxation des particules lié à leur inertie τ_p soit négligeable devant le temps caractéristique de turbulence τ_K . En conséquence :

$$\left\{ \begin{array}{l} d_p < \eta_k \\ St_k = \frac{\tau_p}{\tau_k} \rightarrow 0 \end{array} \right. \quad (\text{A.1})$$

En notant v_k la vitesse des plus petites échelles, on lie le temps τ_k à l'échelle de Kolmogorov par :

$$\tau_k = \frac{\eta_k}{v_k}$$

De plus, le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente, par conservation de cette grandeur à travers toutes les échelles de turbulence, vérifie :

$$\epsilon = \frac{v_k^3}{\eta_k}$$

On relie également la vitesse à l'échelle de Kolmogorov et la viscosité cinématique du fluide par :

$$\frac{v_k \eta_k}{\nu} = 1$$

On peut ainsi exprimer le temps caractéristique de turbulence comme suit :

$$\tau_k = \left(\frac{\nu}{\epsilon} \right)^{1/2} \quad (\text{A.2})$$

Le but est maintenant de calculer à partir de cette grandeur le noyau de collision entre deux particules sphériques β_{12} . Ce dernier est défini comme le flux volumique moyen de particules à travers la section

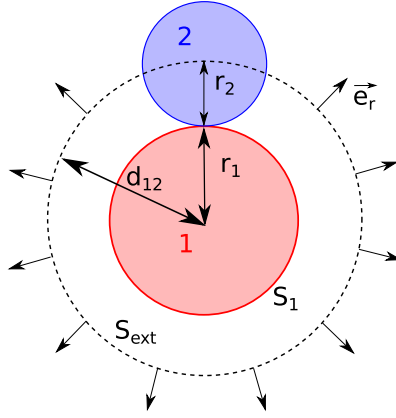


Fig. A.1 – Vue en coupe des particules 1 et 2 et de la sphère de collision S_{ext} (en pointillés).

efficace de collision. Étant donné que les particules ne perturbent pas l'écoulement, cette surface est simplement définie comme la sphère de rayon la somme des rayons des deux particules. En outre, la vitesse du fluide, égale à celle des particules, peut être utilisée dans le calcul du flux. Cette surface de collision est représentée en pointillé sur la figure A.1.

En reprenant les notations de la figure A.1, si la particule 2 placée immédiatement à proximité de la particule 1 se rapproche de cette dernière, la probabilité de collision augmente. En d'autres termes, il y a collision si la composante radiale de sa vitesse moyenne relative de la particule 2 dans le repère de la particule 1 est négative. Si l'on note β_{12} le noyau de collision, et avec les hypothèses formulées par les équations (A.1), on peut écrire :

$$\beta_{12} = - \int_{v_r < 0} \langle v_r \rangle dS \quad (\text{A.3})$$

où v_r désigne la vitesse relative de la particule 2 par rapport à la particule 1, soit :

$$v_r = (\vec{v}_{p2} - \vec{v}_{p1}) \cdot \vec{e}_r \underset{d_p < \eta_k}{=} (\vec{v}_f(S_{ext}) - \vec{v}_{p1}) \cdot \vec{e}_r < 0$$

Par ailleurs, à partir de l'équation de continuité et de la formule intégrale divergence exprimées dans le repère de la particule 1, on peut écrire :

$$\begin{aligned} \int_{S_{ext}} (\vec{v}_f - \vec{v}_{p1}) \cdot \vec{e}_r dS + \int_{S_1} \underbrace{(\vec{v}_f - \vec{v}_{p1}) \cdot (-\vec{e}_r)}_{= 0 \text{ (impermeabilité)}} dS &= 0 \\ \Rightarrow \int_{v_r > 0} v_r dS + \int_{v_r < 0} v_r dS &= 0 \end{aligned}$$

Ainsi, on peut réécrire l'expression (A.3) :

$$\beta_{12} = \frac{1}{2} \int_{S_{ext}} \langle |v_r| \rangle dS \quad (\text{A.4})$$

Or, l'expression de la surface de collision est connue d'après ce qui précède : $S_{ext} = 4\pi d_{12}^2$. De plus, la turbulence est isotrope, ce qui permet d'affirmer que $\langle v_r \rangle$ est uniforme sur cette surface. Ainsi, l'expression

(A.4) se simplifie et devient :

$$\beta_{12} = 2\pi d_{12}^2 \langle |v_r| \rangle. \quad (\text{A.5})$$

Puisque ce modèle suppose que l'inertie des particules est nulle,

$$\begin{aligned} v_r &= (\vec{\nabla}_f(S_{ext}) - \vec{\nabla}_f(S_1)) \cdot \vec{e}_r \\ &= d_{12} \frac{(\vec{\nabla}_f(S_{ext}) - \vec{\nabla}_f(S_1)) \cdot \vec{e}_r}{d_{12}}, \end{aligned}$$

soit finalement

$$\langle |v_r| \rangle = d_{12} \left\langle \left| \frac{\partial v_r}{\partial r} \right| \right\rangle \quad (\text{A.6})$$

Posons $\nabla v_r = \frac{\partial v_r}{\partial r}$. On suppose que ∇v_r suit une loi normale, dont la densité de probabilité s'exprime par :

$$f(\nabla v_r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \langle \nabla v_r^2 \rangle}} \exp\left(-\frac{(\nabla v_r - \langle \nabla v_r \rangle)^2}{2 \langle \nabla v_r^2 \rangle}\right)$$

Le moment d'ordre 1 de la densité de probabilité de ∇v_r est par définition la moyenne :

$$\begin{aligned} \left\langle \left| \frac{\partial v_r}{\partial r} \right| \right\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} |\nabla v_r| f(\nabla v_r) d(\nabla v_r) \\ &= 2 \int_0^{+\infty} \nabla v_r f(\nabla v_r) d(\nabla v_r) \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\langle \nabla v_r^2 \rangle} \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

En turbulence isotrope, Taylor (1935) exprime la variance du gradient de vitesse en fonction du taux de dissipation et de la viscosité :

$$\langle \nabla v_r^2 \rangle = \frac{\epsilon}{15\nu} \quad (\text{A.8})$$

À partir des expressions (A.5), (A.6), (A.7) et (A.8), l'expression du noyau de collision qu'ont établi Saffman et Turner en fonction du rayon de la surface de collision, du taux de dissipation et de la viscosité peut être facilement établie :

$$\begin{aligned} \beta_{12} &= \sqrt{\frac{8\pi}{15}} d_{12}^3 \left(\frac{\epsilon}{\nu}\right)^{1/2} \\ &\simeq 1.33 d_{12}^3 \left(\frac{\epsilon}{\nu}\right)^{1/2} \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Annexe B

Nature des interactions entre deux particules et comparaisons avec les forces hydrodynamiques

Cette annexe a pour but de décrire les interactions à distance entre deux particules sphériques en vue de les comparer et d'estimer leur portée. Une attention particulière est accordée aux interactions que subissent les particules sphériques dans le cas où elles sont peu mouillées comme c'est le cas pour les inclusions d'alumine en acier liquide. Des particules peu mouillées étant susceptibles d'avoir des bulles présentes à leur surface, une attention particulière est accordée aux forces qui en découlent, ce qui permettra de comparer leur influence par rapport aux interactions d'autres natures, comme Van der Waals ou la force de lubrification.

B.1 Interactions de nature physico-chimique

Les interactions décrites dans cette partie sont issues de la théorie DLVO, du nom de leurs inventeurs : Derjaguin et Landau l'ont établie en 1941, indépendamment de Verwey et Overbeek en 1948 ([Derjaguin et al., 1987](#)). Elle permet de comparer les différents potentiels électriques en jeu, qui dépendent de nombreux facteurs comme la géométrie des particules, leur composition chimique ainsi que les propriétés physico-chimiques du milieu dans lequel elles baignent. Les forces principales qui en découlent sont les forces attractives de Van der Waals et la répulsion due à une double couche électrique.

B.1.1 Forces de Van der Waals

Les forces de Van der Waals dérivent de trois potentiels liés à la polarité des molécules : London (2 dipôles induits), Debye (1 dipôle induit, 1 dipôle permanent) et Keesom (2 dipôles permanents). Les particules étudiées ici ne sont pas constituées de moments dipolaires permanents. Étant donné que la distribution spatiale électronique pour chaque molécule varie rapidement dans le temps, il se crée pour chacune des molécules un moment dipolaire induit. Une description beaucoup plus quantitative de ce phénomène est disponible dans la thèse de [Gerber \(2005\)](#).

Par conséquent, seul le potentiel de London sera pris en compte ici, ce qui est d'ailleurs fréquent (c'est pourquoi le terme « force de London-Van der Waals » est parfois employé). Le potentiel de London

exprime les interactions de deux molécules en fonction de leur polarisabilité et leur énergie de première ionisation. Hamaker (1937) a calculé le potentiel résultant pour deux sphères identiques. Il en résulte une constante A_h , homogène à une énergie et qui porte son nom. Pour deux particules d'aluminés baignant dans de l'acier liquide à une température de l'ordre de 2000 K, Cournil *et al.* (2006) ont suivi la théorie développée par Lifshitz (1956) et donnent pour ordre de grandeur de A_h une valeur d'environ $1 \cdot 10^{-19} J$. De leur côté, Taniguchi *et al.* (1996), à partir de données expérimentales, ont également calculé la constante de Hamaker et trouvent une valeur d'un ordre de grandeur similaire : $A_h = 2,3 \cdot 10^{-20} J$.

Le potentiel résultant des interactions de Van der Waals de chaque molécules calculée en premier par Hamaker (1937), noté $E_{VDW,sphères}$, est une fonction ne dépendant que de la distance de séparation h et des paramètres géométriques de particules sphériques :

$$E_{VDW,sphères} = -\frac{A_h d_p}{12h} \left[\frac{d_p}{h + 2d_p} + \frac{d_p}{h + d_p} - \frac{d_p^2}{(h + d_p)^2} + \frac{2h}{d_p} \ln \left(\frac{h(h + 2d_p)}{(h + d_p)^2} \right) \right] \quad (B.1)$$

La constante de Hamaker A_h dépend des propriétés physico-chimiques du matériau constituant les sphères ainsi que de celles du milieu dans lequel elles sont immergées. On déduit du potentiel exprimé en (B.1) la force qui en dérive :

$$F_{VDW} = -\frac{d}{dh} E_{VDW,sphères} = \frac{A_h}{3d_p} f \left(2 + \frac{2h}{d_p} \right) \quad (B.2)$$

avec $f(u) = -\frac{4u}{(u^2 - 4)^2} - \frac{4}{u^3} + \frac{2u}{u^2 - 4} - \frac{2}{u}$

À faible distance ($h \ll d_p$), l'expression (B.2) peut être approximée par la formule :

$$F_{VDW} = -A_h \frac{d_p}{24h^2}$$

Lorsque deux particules sont trop éloignées l'une de l'autre (quelques centaines de rayons atomiques), il faut ajuster l'expression (B.2) en prenant en compte le temps de propagation des ondes électromagnétiques, décrit de manière exhaustive par Casimir et Polder (1948) (potentiel retardé). Schenkel et Kitchener (1960) établissent l'expression suivante :

$$F_{VDW} = \begin{cases} \frac{A_h d_p}{24h^2} \frac{1 + 3,54p}{(1 + 1,77p)^2} & \text{si } p = \frac{2\pi h}{\lambda} < 0,57, \\ \frac{A_h d_p}{24h^2} \left[\frac{0,98}{p} + \frac{0,434}{p^2} + \frac{0,067429}{p^3} \right] & \text{si } p = \frac{2\pi h}{\lambda} > 0,57 \end{cases} \quad (B.3)$$

Pour l'étude de l'aggrégation de colloïdes, Vanni et Baldi (2002) tiennent également compte de la répulsion électrique, détaillée dans le paragraphe suivant.

B.1.2 Forces de répulsion électrique

La double couche électrique trouve son origine dans l'existence d'un potentiel électrique ψ dû aux électrons de valence des particules. On considère que ce potentiel est constant à la surface des particules.

Une telle force est à prendre en compte lorsque le milieu dans lequel les particules sont immergées est ionisant, ce qui génère à la surface des particules alors ionisées un nuage électronique de charge opposée.

Cette ionisation des particules peut être due à celle d'espèce chimique de surface (comme les hydroxydes) ou bien à l'adsorption d'ions du milieu.

Sader *et al.* (1995) proposent l'expression analytique suivante, pour $\psi < 25\text{mV}$:

$$F_{elec} = \pi\epsilon_0\epsilon_m\psi^2 \frac{d_p^2}{d_p + h} \left[\frac{\ln(1 + \exp(-\kappa h))}{d_p + h} + \frac{\kappa(1 - \exp(-\kappa h))}{\exp(\kappa h) + \exp(-\kappa h)} \right] \quad (\text{B.4})$$

Dans l'expression (B.4), $\epsilon_0\epsilon_m$ désigne la permittivité diélectrique du milieu, exprimée en F.m^{-1} . La grandeur κ correspond à l'inverse de l'épaisseur de la double couche, aussi appelée longueur de Debye. La théorie de Debye-Hückel (Debye et Hückel, 1923) permet d'estimer cette longueur, de l'ordre de 10^{-9} m pour des particules de polystyrène dans de l'eau à température ambiante. Au vu de l'équation (B.4), dans le cas où la longueur de Debye devient infiniment petite (épaisseur nulle), la force de répulsion double couche devient nulle. C'est effectivement le cas pour des milieux non ionisant tels que l'acier liquide (Cournil *et al.*, 2006).

B.2 Interactions hydrodynamiques pour des particules à très faible distance : forces de lubrification

La lubrification est la force qui modélise les interactions hydrodynamiques entre des solides immergés proches les uns des autres. Elle caractérise la force due aux effets visqueux qui s'oppose au drainage du fluide entre les surfaces des solides. Dans leur papier, Serayssol et Davis (1986) établissent l'expression de la force de lubrification entre deux particules sphériques comme suit :

$$F_{lub} = -3\pi\mu d_p^2 \frac{v_r}{8h}, \quad h \ll d_p \quad (\text{B.5})$$

avec v_r la vitesse relative des particules et h la distance de séparation entre leurs surfaces.

Par construction, la force de lubrification prend des valeurs infinies lorsque la distance de séparation devient très petite, ce qui physiquement est cohérent avec les effets visqueux qui deviennent prépondérants pour une mince couche de fluide, tant que le modèle continu n'est pas remis en question.

Il peut être délicat de prendre en compte cette force lors de simulations numériques. Dans le cas de l'étude du comportement de particules en suspension à l'aide de la dynamique stokesienne, la solution analytique du champ fluide est obtenue par la superposition de modes. Avec cette méthode, il faudrait prendre un nombre important de modes pour que les calculs ne divergent pas lorsque les particules sont sur le point d'entrer en collision. Une alternative serait de calculer la force de lubrification à une distance de séparation et une vitesse relative données et d'adapter les modes pour que la force de traînée coïncide avec la lubrification. Cette méthode, qui s'avère efficace, est décrite de façon exhaustive dans l'étude de Cichocki *et al.* (1994).

Dans le cas où l'écoulement est résolu numériquement, la force de lubrification n'est correctement résolue que si les particules considérées ont une résolution infinie. Autrement, les interactions hydrodynamiques sont susceptibles d'être mal résolues pour des particules d'une distance inférieure à l'épaisseur de la maille de la phase fluide. L'étude de Nguyen et Ladd (2002) est particulièrement intéressante dans la mesure où les auteurs utilisent une méthode de Boltzmann sur réseau couplée à une méthode de frontière immergée. Dans cette étude, ils ont quantifié la distance de séparation de particules sphériques en dessous de laquelle il est nécessaire d'ajouter une contribution pour que les effets de lubrification soient correctement pris en compte. Pour cela, ils introduisent une distance de coupure h_N en dessous de laquelle un terme correcteur

$F_{lub,N}$ est appliqué et dont l'expression est similaire à l'expression (B.5) :

$$F_{lub,N} = \begin{cases} -3\pi\mu d_p^2 \frac{v_r}{8} \left(\frac{1}{h} - \frac{1}{h_N} \right) & \text{si } h < h_N \\ 0 & \text{si } h > h_N \end{cases} \quad (\text{B.6})$$

Toujours d'après l'étude de [Nguyen et Ladd \(2002\)](#), la distance de coupure h_N dépend essentiellement de la résolution des particules, mais aussi de la valeur numérique de la viscosité cinématique LBM. Dans ce travail, la viscosité LBM choisie est de l'ordre de 0,2 pour une résolution du maillage de $1/13^{\text{ème}}$ de diamètre. [Nguyen et Ladd \(2002\)](#) ont établi que la distance de coupure maximale h_N était de l'ordre de la demi-maille (soit environ 5 % du diamètre ici).

B.3 Interactions générées par la présence de gaz

B.3.1 Forces à distance de Bjerknæs

La démarche proposée par [Cournil *et al.* \(2006\)](#) est reprise ici. Dans leur article, ils démontrent que des bulles de gaz se forment spontanément dans les pores des particules d'alumine. En raison des fluctuations thermiques du milieu, ces bulles vont osciller, générer des ondes de pression susceptible de fluctuer. Il en résulte une moyenne temporelle non nulle de la résultante de ces ondes de pression fluctuante à la position de ces bulles. Il s'agit précisément de la force de Bjerknæs. Ces interactions sont décrites par [Ruckenstein \(1997\)](#). Pour deux bulles identiques oscillant à une même phase et séparées d'une distance h , l'expression de cette force est donnée par :

$$f_b = \frac{2\pi\rho_l\omega^2 r_b^4 \delta^2}{h^2} \exp(-\beta h) \quad (\text{B.7})$$

où ρ_l désigne la masse volumique du fluide environnant, h la distance de séparation des bulles, r_b leur rayon, δ l'amplitude de leurs oscillations, ω leur pulsation. En raison des effets visqueux qui amortissent les ondes acoustiques, un terme correcteur $\exp(-\beta h)$ est appliqué, où la grandeur $1/\beta$ désigne une longueur caractéristique d'amortissement (profondeur de pénétration de l'onde), dépendant de la viscosité. D'après [Cournil *et al.* \(2006\)](#), la profondeur de pénétration vérifie :

$$\frac{1}{\beta} = \sqrt{\frac{2\mu}{\rho_l\omega}} \quad (\text{B.8})$$

Les paramètres connus sont la masse volumique de la phase liquide et la distance de séparation de bulles. Il s'agit donc d'estimer les valeurs des autres paramètres.

La pulsation qui sera utilisée ici est la pulsation propre d'oscillation des bulles. Toujours d'après [Cournil *et al.* \(2006\)](#), son expression est :

$$\omega = \sqrt{\frac{\sigma_{LG}}{\rho_l r_b^3}} \quad (\text{B.9})$$

Dans l'expression (B.9), σ_{LG} désigne la tension de surface entre la phase liquide et le gaz. Ainsi, en injectant l'expression (B.9) dans (B.7), la force de Bjerknæs entre deux bulles oscillant en phase en

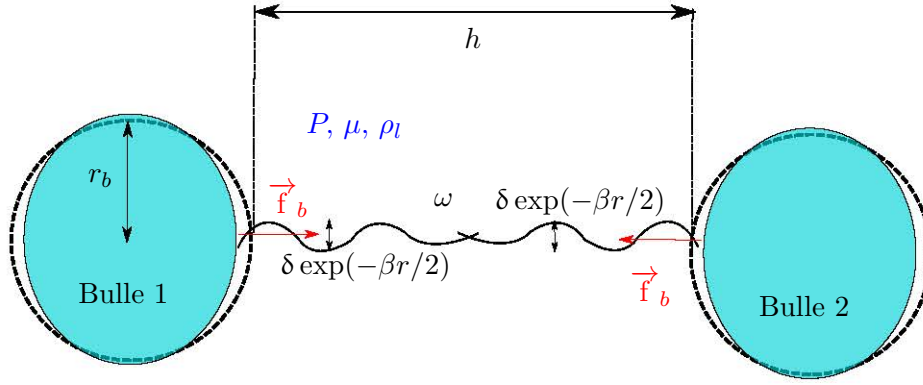


Fig. B.1 – Forces de Bjerknes pour deux bulles isolées.

pulsation propre vérifie :

$$f_b = \frac{2\pi}{h^2} \sigma_{LG} r_b^3 \left(\frac{\delta}{r_b} \right)^2 \exp \left(-\sqrt{\frac{\rho\omega}{2\mu}} r \right) \quad (\text{B.10})$$

À présent, le calcul de la résultante de cette force va être développé pour des pores uniformément répartis à la surface de particules sphériques d'alumine. Pour cela, le nombre de cavités gazeuses par unité de surface n_c est introduit et défini naturellement comme suit :

$$n_c = \frac{n_{pores}}{\pi d_p^2} \quad \text{avec } n_{pores} \text{ le nombre total de pores remplis sur une sphère.}$$

En notant ϵ_p le rapport de la surface totale des pores sur la surface des particules alumines et ϵ' le ratio nombre de pores remplis de gaz / nombre de pores totaux, l'expression ci-dessus peut se réécrire :

$$n_c = \frac{\epsilon_p \epsilon'}{\pi r_b^2} \quad (\text{B.11})$$

ϵ_p peut être fixé « arbitrairement », [Cournil et al. \(2006\)](#) choisissent $\epsilon = 20\%$. Ils font varier l'amplitude des oscillations δ entre $0,01r_b$ et $0,1r_b$. D'autre part, ils fixent une taille des pores qui impose le rayon des bulles, $r_b \in \{10^{-8}; 10^{-7}\}$ m.

Les bulles présentes dans les cavités de deux particules d'alumines sont représentées figure [B.2](#). Étant donné que les bulles d'une particule d'alumine 1 ne voient pas la moitié des bulles situées sur la « face cachée » de la particule 2, seule la moitié de chaque bulle est affectée par l'interaction. Ainsi, il ne faut pas prendre en compte le facteur 2 dans l'équation [\(B.7\)](#). En se servant de cette équation ainsi que de [\(B.11\)](#), la force de Bjerknes qu'exerce la surface élémentaire 2 sur la surface élémentaire 1, notée $d\vec{F}_B$, vérifie alors :

$$d\vec{F}_B = \frac{1}{2} f_b \left(\frac{\vec{r}_{12} \cdot \vec{n}_1}{r_{12}} \right) \left(\frac{-\vec{r}_{12} \cdot \vec{n}_2}{r_{12}} \right) \left(\frac{\epsilon_p^2 \epsilon'^2}{\pi^2 r_b^4} dS_1 dS_2 \right) \frac{\vec{r}_{12}}{r_{12}} \quad (\text{B.12})$$

avec \vec{n}_1, \vec{n}_2 les normales des surfaces élémentaires dS_1 et dS_2 respectivement. Le grandeur \vec{r}_{12} désigne la distance de séparation entre les deux éléments de surface 1 et 2, orientée de 1 vers 2.

Il s'agit à présent d'intégrer la force de Bjerknes élémentaire définie par l'équation [\(B.12\)](#) sur la surface des demi-sphères. En supposant que toutes les bulles oscillent en phase et sont uniformément réparties sur la surface de la particule d'alumine, la résultante est orientée selon la droite reliant les centres de

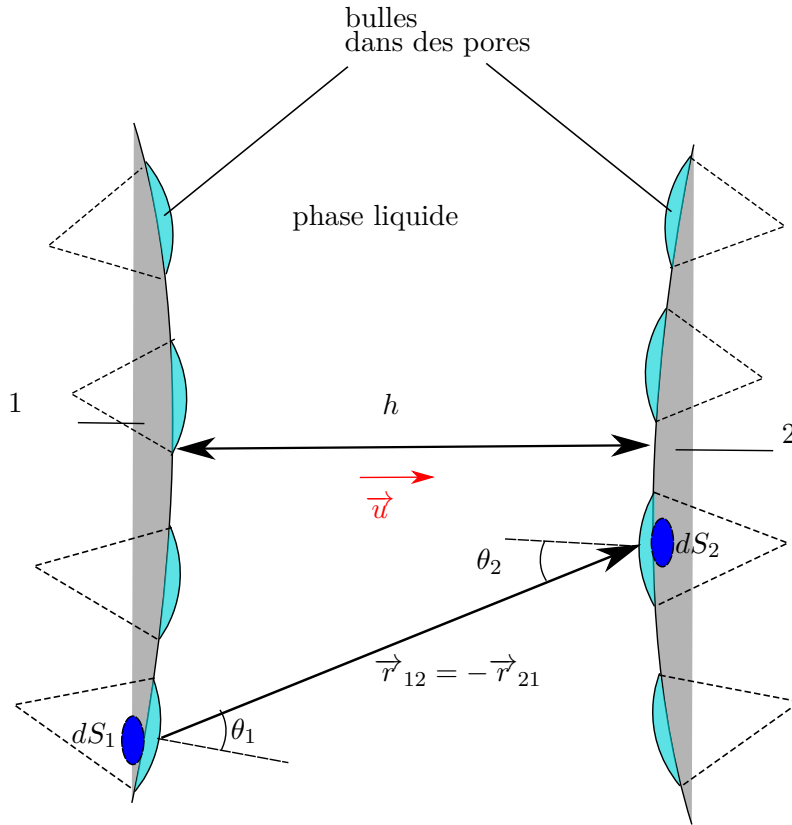


Fig. B.2 – Position relative de deux surfaces en interaction.

masse des deux sphères :

$$\vec{F}_{B,2 \rightarrow 1} = F_B \vec{u} \quad , \quad \vec{u} = \frac{\vec{x}_{p2} - \vec{x}_{p1}}{\|\vec{x}_{p2} - \vec{x}_{p1}\|} \quad . \quad (\text{B.13})$$

En projetant l'équation (B.12) selon le vecteur unitaire \vec{u} et en l'intégrant sur les surfaces des solides, la résultante des forces F_B devient :

$$\begin{aligned} F_B &= \frac{1}{2} \iint \frac{2}{\pi r_{12}^2} \epsilon_p^2 \epsilon_l^2 \delta^2 \rho_l \omega^2 \cos(\theta_1) \cos(\theta_2) \frac{\vec{r}_{12} \cdot \vec{u}}{r_{12}} \exp(-\beta r_{12}) dS_1 dS_2 \\ &= \frac{1}{\pi} \epsilon_p^2 \epsilon_l^2 \delta^2 \rho_l \omega^2 \iint \cos(\theta_1) \cos(\theta_2) \frac{\vec{r}_{12} \cdot \vec{u}}{r_{12}^3} \exp(-\beta r_{12}) dS_1 dS_2 \\ &= \frac{1}{\pi} \epsilon_p^2 \epsilon_l^2 \beta^2 \frac{\sigma_{LG}}{r_b} \iint \cos(\theta_1) \cos(\theta_2) \frac{\vec{r}_{12} \cdot \vec{u}}{r_{12}^3} \exp(-\beta r_{12}) dS_1 dS_2 \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

θ_1 et θ_2 désignent respectivement l'angle que forme la normale des surfaces 1 et 2 avec \vec{r}_{12} et $-\vec{r}_{12}$ (cf figure B.2). L'intégrale précédente, qui dépend de h et β , est difficile à calculer. Si toutes les longueurs

comprises dans l'intégrale sont adimensionnées à l'aide du rayon des particules d'alumine, on obtient :

$$F_B = \frac{1}{4\pi} \epsilon^2 \epsilon'^2 \sigma_{LG} \frac{d_p^2}{r_b} \left(\frac{\delta}{r_b} \right)^2 I^*(h^*, \beta^*)$$

avec
$$I^*(h^*, \beta^*) = \iint \cos(\theta_1) \cos(\theta_2) \frac{\vec{r}_{12}^* \cdot \vec{u}}{r_{12}^{*3}} \exp(-\beta^* r_{12}^*) dS_1^* dS_2^* \quad (\text{B.15})$$

$$h^* = 2h/d_p, \quad \beta^* = \beta d_p/2, \quad r_{12}^* = 2r_{12}/d_p, \quad S_{1,2}^* = 4S_{1,2}/d_p^2$$

Une méthode de calcul pour $I^*(h^*, \beta^*)$ a été détaillée et développée par une équipe du laboratoire des Sciences des Processus Industriels et Naturels (SPIN) dont Frédéric Gruy fait partie. Cette méthode, qui s'inspire des calculs déjà effectués pour des facteurs de forme utilisés pour l'étude de transferts thermiques par rayonnement, ne sera pas détaillée ici. Le script fourni par F. Gruy, initialement écrit en langage Pascal, a été traduit en Python et a permis d'estimer $I(h, \beta)$ et donc la force de Bjerknæs.

B.3.2 Pont gazeux entre particules non mouillées

Lorsque deux particules peu mouillées sont suffisamment proches, un pont gazeux reliant leur surface en proche contact est susceptible de se former. Une illustration de ce phénomène est proposée figure B.3. Une fois la cavité gazeuse établie, les particules sont liées par une force de cohésion suffisamment importante pour qu'il n'y ait pas de rupture de l'agrégat ainsi formé.

La force de cohésion due à ce pont gazeux, notée F_G , peut être divisée en deux contributions (Cournil *et al.*, 2006 ; Sasai, 2016). D'une part, la force F_1 désigne la tension de surface σ_{LG} du pont entre la phase fluide et le gaz. L'autre force contributrice est due à la différence de pression entre les deux phases liquide et gaz et qui peut être reliée à la tension σ_{LG} par l'équation de Laplace-Young. En reprenant les

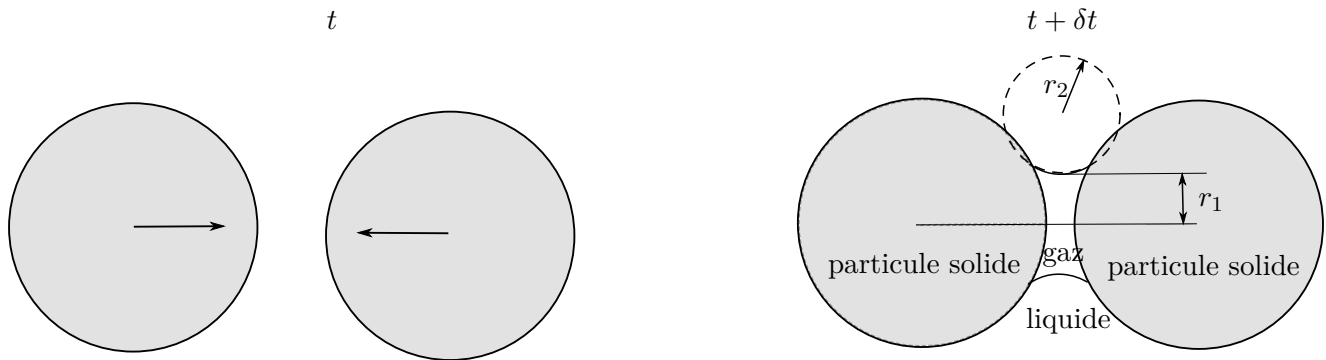


Fig. B.3 – Formation d'un pont gazeux entre deux particules peu mouillées par le liquide environnant.

notations de la figure B.3 :

$$F_G = F_1 + F_2$$

avec

$$\begin{cases} F_1 = 2\pi r_1 \sigma_{LG} \\ F_2 = \pi r_1^2 \sigma_{LG} \left(\frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_1} \right) \end{cases} \quad (\text{B.16})$$

Plus récemment, [Sasai \(2016\)](#) a établi que le pont gazeux est créé dès lors que la distance de séparation atteint $0,07 d_p$ pour des cylindres d'alumines en acier liquide. Plus précisément, il a calculé expérimentalement l'effort nécessaire pour séparer deux cylindres d'alumines dans un acier, ainsi que la distance seuil en-dessous de laquelle il y a formation de pont gazeux. Quantitativement, la force de cohésion due à la formation du pont gazeux est de l'ordre de $1,5\sigma_{LG}d_p$. Il a pu en déduire par des calculs théoriques les efforts à appliquer pour le cas de sphères d'alumines. Cette extrapolation entre les cylindres et les sphères suscitent quelques interrogations, notamment en ce qui concerne la distance seuil de $0,07 d_p$, susceptible de diminuer avec la géométrie sphérique (zone d'interaction réduite par rapport aux cylindres).

B.4 Comparaison des différentes interactions dans le cas de particules d'alumines non mouillées dans un acier liquide

Étant donné que l'acier liquide n'est pas un milieu ionisant, étudier la répulsion électrique n'a pas de sens. De ce fait, l'interaction double couche électrique est inexistante ici.

D'autre part, le métal mouille peu les particules d'alumine, ce qui implique que des microbulles se forment spontanément dans les pores en contact avec la phase liquide (cf [Cournil et al., 2006](#)), générant des forces de Bjercknes précédemment décrites. Les forces intervenant ici sont donc uniquement Van der Waals, Bjercknes, la force générée par la formation de cavités gazeuses ainsi que les effets hydrodynamiques (dont la lubrification pour des particules à très faible distance).

Les paramètres suivants sont fixés pour approcher des conditions représentatives du procédé de flottation d'inclusions solides dans un métal liquide où les inclusions solides de taille micrométrique sont soumises à un taux de cisaillement local $\dot{\gamma}$:

- $d_p = 10 \mu\text{m}$,
- $\rho_l = 7800 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$,
- $\rho_{\text{Al}} = 3970 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$,
- $\nu = 7,05 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2\cdot\text{s}^{-1}$,
- $A_h = 1,0 \cdot 10^{-19} \text{ J}$,
- taux d'occupation des microbulles = 20 % ,
- $\sigma_{LG} = 1,7 \text{ N}\cdot\text{m}^{-1}$,
- $r_b = 1,5 \cdot 10^{-7} \text{ m}$.

Par ailleurs, la portée de la force de Van der Waals est étudiée graphiquement à partir de la figure B.4. Elle est comparée à une force hydrodynamique de type traînée F_0 telle que :

$$F_0 = 3\pi\mu\dot{\gamma}d_p^2 \quad (\text{B.17})$$

Il est évident que la force de Van der Waals a une portée très limitée, qui n'excède pas $1/100^{\text{ème}}$ de

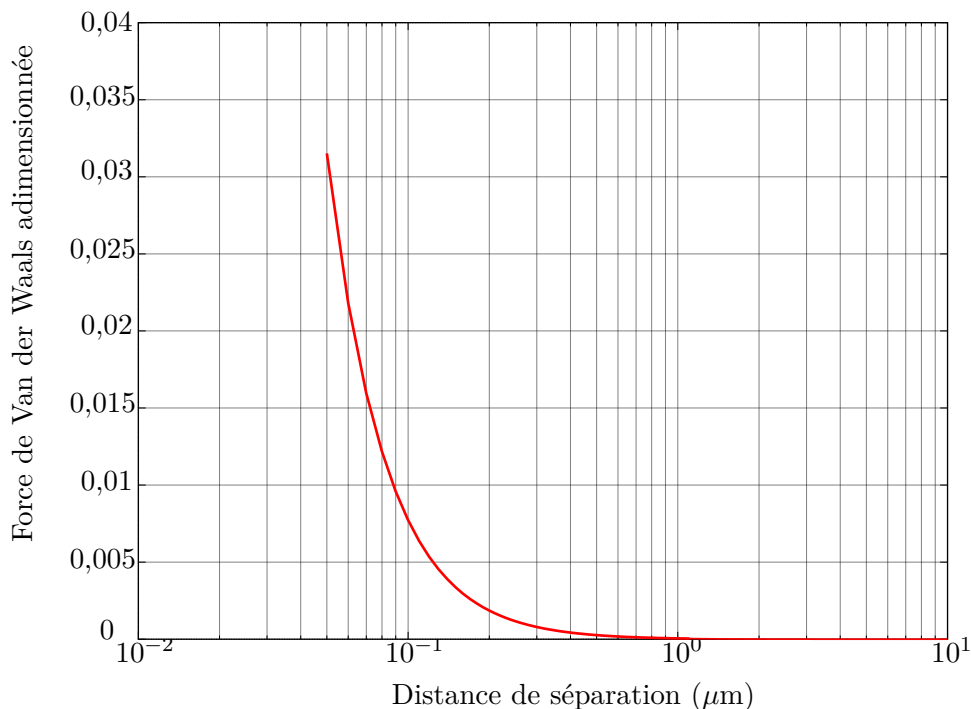


Fig. B.4 – Évolution de la force de Van der Waals normalisée par une force de type traînée en fonction de la distance de séparation de deux particules d'alumine.

diamètre ici.

La comparaison entre les forces de Bjerknes et de Van der Waals est illustrée figure B.5, où trois différentes profondeurs de pénétration ont été sélectionnées de sorte à balayer au plus large la gamme de variation de cette grandeur : $1/\beta \in [0,05, 0,15, 0,5] \mu\text{m}$. Il apparaît que le rapport entre Bjerknes et Van der Waals atteint une valeur maximale lorsque la distance de séparation égale le double de la profondeur de pénétration considérée. Ce rapport est d'autant plus important que la profondeur de pénétration l'est pour atteindre une valeur de l'ordre de 10^4 pour $1/\beta = 0,5 \mu\text{m}$.

Il faut néanmoins souligner que choisir une valeur de $0,5 \mu\text{m}$ pour la profondeur de pénétration est discutable physiquement. En effet, [Cournil et al. \(2006\)](#) ont montré que si l'on prend la pulsation propre des microbulles, alors :

$$\frac{1}{\beta} = \sqrt{\frac{2\nu}{\omega}} = \sqrt{2\nu \sqrt{\frac{\rho_l r_b^3}{\sigma_{LG}}}}. \tag{B.18}$$

Ainsi, la profondeur de pénétration est indépendante de la taille des inclusions, si l'on considère que le rayon des microbulles ne l'est pas non plus. Avec les paramètres fixés ci-dessus et d'après (B.18) :

$$1/\beta = 0,074 \mu\text{m} .$$

La profondeur de pénétration est nettement inférieure à la borne supérieure des valeurs choisies ($0,5 \mu\text{m}$). Parmi les trois valeurs de profondeurs de pénétration utilisées, $1/\beta = 0,05 \mu\text{m}$ semble donc la plus raisonnable ici, ce qui correspond à un rapport maximum de l'ordre de 10. La force de Bjerknes est alors comparable à la force de Van der Waals pour une portée s'étendant jusqu'à environ $0,4 \mu\text{m}$. La portée des forces de Van der Waals n'excédant pas $0,1 \mu\text{m}$ par rapport aux effets hydrodynamiques (cf figure B.4), il en est de même pour Bjerknes. La figure B.6 permet de confirmer cette tendance. De façon similaire à

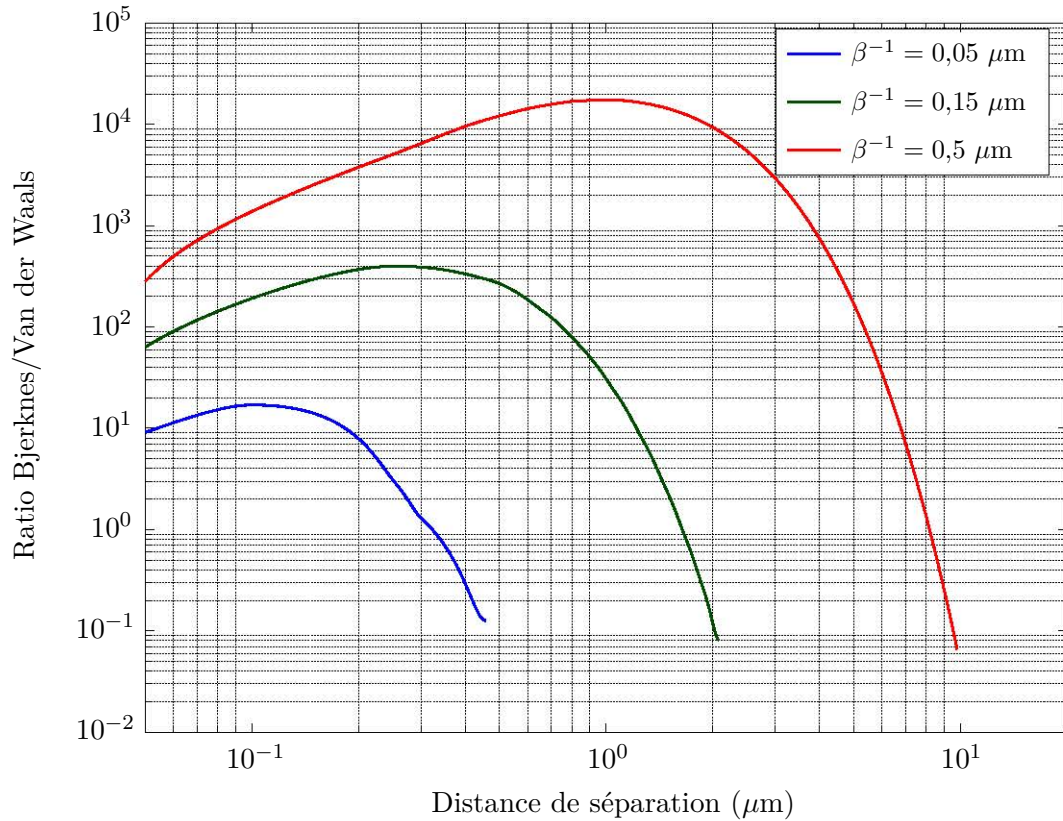


Fig. B.5 – Évolution du rapport de la force de Bjercknes sur celle de Van der Waals en fonction de la distance entre deux inclusions d'alumines.

la figure B.4, la force de Bjercknes a été adimensionnée par la force hydrodynamique F_0 (équation B.17) et tracée en fonction de la distance de séparation des particules. Cette figure illustre bien le fait que la force de Bjercknes a une portée limitée n'excédant pas $0,2 \mu\text{m}$ ($1/50^{\text{ème}}$ de diamètre) pour une profondeur de pénétration $1/\beta = 0,05 \mu\text{m}$.

Il faut toutefois souligner qu'il s'agit d'une estimation « haute » de la force de Bjercknes dans les réflexions précédentes. En effet, les calculs dans ce travail ont été développés pour des bulles oscillant en phase.

À une distance inférieure à $0,7 \mu\text{m}$, l'apparition spontanée de microbulles est susceptible de provoquer l'apparition de ponts gazeux, dont les forces de cohésions associées sont bien plus importantes que Bjercknes ou Van der Waals. En se servant de l'expression (B.2) pour la force de Van der Waals et de l'ordre de grandeur $1,5\sigma_{LG}d_p$ établi par Sasai (2016) pour la cohésion par le pont gazeux, le ratio entre ces deux forces vaut :

$$\frac{F_{VdW}}{F_G}(h = 0,07 d_p) \simeq \frac{19,44 A_h}{3d_p} \frac{1}{1,5 \sigma_{LG}d_p} \quad . \quad (\text{B.19})$$

En effectuant l'application numérique avec les valeurs des paramètres introduites en début de section, ce ratio est de l'ordre de $10^{-8} \ll 1$. De plus, en étudiant le rapport de la force de cohésion du pont gazeux par la force de type traînée F_0 , on obtient :

$$\frac{F_G}{F_0} = \frac{1,5\sigma_{LG}d_p}{3\pi\mu\dot{\gamma}d_p^2} \quad (\text{B.20})$$

Numériquement, la force de cohésion adimensionnée par la traînée est de l'ordre de 10^4 . Il est donc peu

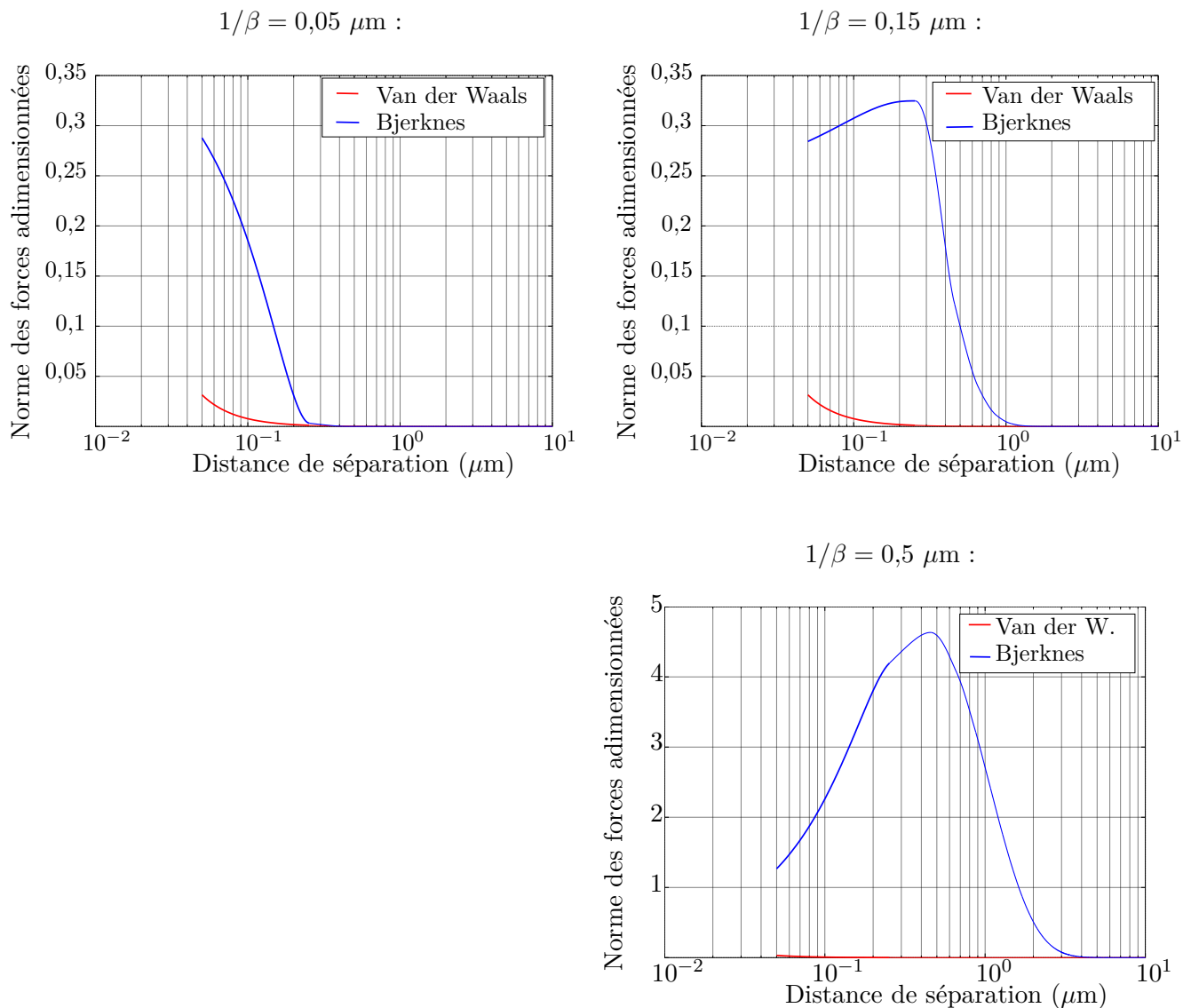


Fig. B.6 – Évolution de l'intensité des forces d'interaction interparticules normalisées par $F_0 = 3\pi\mu\dot{\gamma}d_p^2$, avec $\dot{\gamma} = 100 \text{ s}^{-1}$.

probable que les effets hydrodynamiques brisent le pont gazeux entre les deux sphères, et la collision peut être alors assimilée à l'agrégation. Cela justifie l'arrêt des calculs dès que la collision est détectée dans le chapitre 4.

En guise de bilan, la portée des différentes forces analysées est représentée dans le chapitre 4, figure 4.7. Ces portées sont très petites devant le diamètre des particules considérées, quelle que soit la force considérée.

Pour conclure, la portée des forces de nature physico-chimique est très limitée pour des particules inclusionnaires de $10 \mu\text{m}$ dans un acier liquide, puisqu'elles interviennent pour des distances de séparation en-dessous du dixième de diamètre des objets, ce qui correspond à l'échelle de résolution numérique dans ce travail. De plus, il est parfois difficile de quantifier la portée de ces forces, en particulier celle de la formation du pont gazeux, où subsiste une incertitude quant à sa portée pour les sphères. Il faut rappeler que les réflexions précédentes portent également sur des objets parfaitement lisses et sphériques, ce qui est rarement le cas pour des inclusions réelles. La forme potentiellement irrégulière des surfaces induisent

des perturbations très locales de l'écoulement, difficilement quantifiables et donc difficiles à modéliser. En conséquence, seuls les effets hydrodynamiques à longue portée, qui jouent un rôle important au vu des résultats obtenus tout au long de ce travail ont été étudiés. Ce travail a été l'occasion de montrer que ces effets sont significatifs et que l'utilisation du noyau de Smoluchowski telle quelle pour des études d'évolution statistiques de la population inclusionnaire est contestable (cf chapitre 5). Il faut enfin préciser que l'étude de Sasai (2016) est récente et n'a pas permis de prendre en compte une éventuelle distance seuil en dessous de laquelle se forme le pont gazeux. De plus, au regard de la considération complexe des mécanismes potentiellement en jeu pour des distances de séparation inférieures à $0,5 \mu\text{m}$, aucun modèle de lubrification n'a été ajouté. De plus, si les bulles à la surface des particules autorisent un glissement partiel entre le liquide et le solide, le drainage du film conduit à des efforts résultants moindres et l'expression (B.5) surestime la lubrification dans un tel cas.

En conséquence, seule la détection de collision par interpénétration a été utilisée.

Annexe C

De l'utilité des quaternions pour la résolution du mouvement des solides

Cette annexe a pour but de mettre en valeur l'utilité des quaternions pour représenter des transformations orthonormales telles que des rotations, que l'on peut représenter par des matrices orthogonales.

C.1 Quaternions : définition et propriétés

Un quaternion q est un nombre complexe étendu, pratique pour l'écriture condensée de certaines transformations telles que les rotations. Il peut se noter :

$$q = a + bi + cj + dk \quad , \quad (a, b, c, d) \in \mathbb{R}^4 \quad . \quad (\text{C.1})$$

L'espace des quaternions est engendré par les 3 éléments i, j et k qui satisfont la relation suivante :

$$i^2 = j^2 = k^2 = ijk = -1 \quad (\text{C.2})$$

On note a la partie réelle et $bi + cj + dk$ la partie imaginaire. Le conjugué de q , noté q^* , est un quaternion dont la partie réelle est égale à celle de q mais dont la partie imaginaire est de signe opposé, soit $q^* = a - (bi + cj + dk)$. La norme de q , notée $|q|$, vérifie $|q|^2 = a^2 + b^2 + c^2 + d^2$. L'inverse de q , noté q^{-1} , est le quaternion $q^* / |q|^2$. On appelle quaternion unitaire un quaternion dont la norme vaut l'unité, $|q| = 1$.

L'équation (C.2) permet d'effectuer, entre autres, le **produit de Hamilton** entre 2 quaternions noté \times . Les quaternions possèdent les mêmes propriétés que les nombres complexes, à l'exception de la commutativité. De plus, on établit facilement que :

$$\begin{cases} q \times q^* & = a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = |q|^2 \\ (q_1 \times q_2)^{-1} & = q_2^{-1} \times q_1^{-1} \end{cases} \quad (\text{C.3})$$

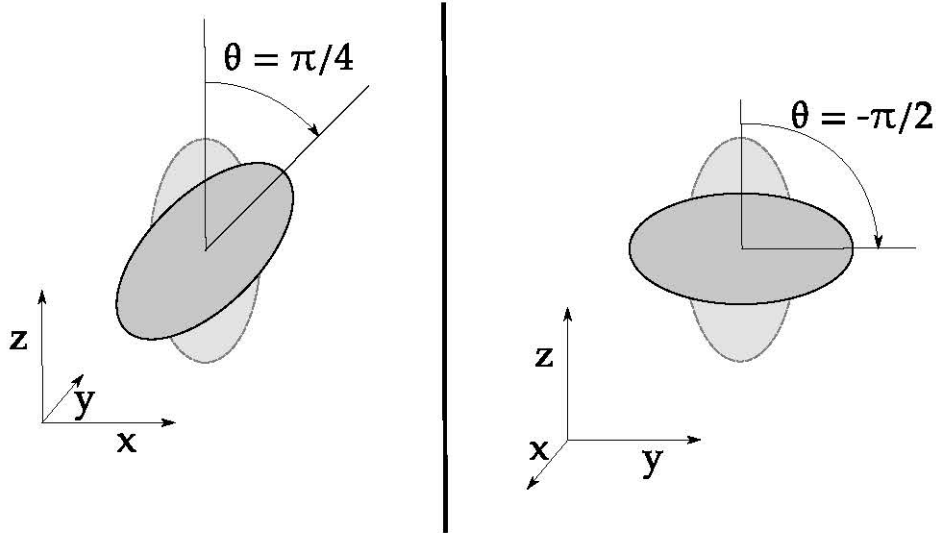


Fig. C.1 – Exemples d'orientations pour une ellipsoïde de révolution par rapport à une configuration de référence (en pointillés.)

C.2 Application aux rotations

Dans cette section, nous nous intéressons à la matrice de la rotation d'angle θ autour de l'axe dirigé par le vecteur unitaire \vec{u} . Utilisons une base orthonormée telle que l'on puisse écrire $\vec{u} = (u_x, u_y, u_z)$. En notant $[R]$ la matrice représentative de la rotation dans cette base,

$$[R] = \begin{pmatrix} 1 - 2(c^2 + d^2) & 2bc - 2ad & 2bd + 2ac \\ 2bc + 2ad & 1 - 2(b^2 + d^2) & 2cd - 2ab \\ 2bd - 2ac & 2cd - 2ab & 1 - 2(b^2 + c^2) \end{pmatrix} \quad (\text{C.4})$$

$$a = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right), b = \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)u_x, c = \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)u_y, d = \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)u_z.$$

On peut voir dans (C.4) que l'utilisation d'un quaternion unitaire suffit à elle-seule à caractériser la rotation :

$$q = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)(u_x i + u_y j + u_z k) \quad (\text{C.5})$$

Dans les simulations, un tel quaternion est utilisé pour représenter l'orientation des solides immergés, sous la forme de leur transformation par rapport à un état de référence. Par la suite, ce quaternion est noté $q_p(t)$. Un exemple de d'objet orienté par rapport à une configuration initiale est donné figure C.1. Si l'on prend le premier cas (inclinaison de $\pi/4$ suivant l'axe y), le quaternion associé est

$$q_p = \cos\left(\frac{\pi}{8}\right) + \sin\left(\frac{\pi}{8}\right)j$$

Dans le second cas, le quaternion vaut cette fois

$$q_p = \cos\left(-\frac{\pi}{4}\right) + \sin\left(-\frac{\pi}{4}\right)i = \frac{\sqrt{2}}{2}(1 - i)$$

Remarquons que le quaternion associé à la rotation inverse n'est autre que le conjugué q^* , ce qui permet de retrouver rapidement la matrice de rotation inverse à partir de la seule orientation du solide. Notons aussi que la transformation du vecteur $\vec{\mathbf{p}}$ par la rotation décrite par (C.5) peut être obtenue par la formule :

$$\vec{\mathbf{p}}' = q \times \vec{\mathbf{p}} \times q^{-1} \quad , \quad \vec{\mathbf{p}} = p_x i + p_y j + p_z k . \quad (\text{C.6})$$

Pour la composition de 2 rotations représentées par les quaternions q_1 et q_2 , en utilisant (C.6) et (C.3) il vient directement

$$\vec{\mathbf{p}}' = q_2 \times (q_1 \times \vec{\mathbf{p}} \times q_1^{-1}) \times q_2^{-1} = (q_2 \times q_1) \times \vec{\mathbf{p}} \times (q_2 \times q_1)^{-1} . \quad (\text{C.7})$$

Soulignons enfin que la formule (C.7) permet immédiatement de mettre à jour l'orientation de la particule, par multiplication de son orientation par le quaternion q' représentant la rotation d'angle $\theta = \|\vec{\omega}_p(t)\delta t\|$ et d'axe dirigé par $\vec{\omega}_p(t)$, soit le quaternion

$$q' = \cos\left(\frac{\|\vec{\omega}_p\delta t\|}{2}\right) + \sin\left(\frac{\|\vec{\omega}_p\delta t\|}{2}\right) \left[\frac{\omega_{px}}{\|\vec{\omega}_p\|} i + \frac{\omega_{py}}{\|\vec{\omega}_p\|} j + \frac{\omega_{pz}}{\|\vec{\omega}_p\|} k \right] \quad (\text{C.8})$$

Dans le cas d'un schéma d'intégration de type Euler, l'expression du quaternion mis à jour est donc la suivante :

$$\begin{aligned} q_p(t) &= q' \times q_p(t - \delta t) \\ &= q' \times (q_{p1} + q_{p2}i + q_{p3}j + q_{p4}k)|_{t-\delta t} \\ &= \\ &= \begin{pmatrix} q_{p1}(t - \delta t) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - q_{p2}(t - \delta t) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)u_x - q_{p3}(t - \delta t) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)u_y - q_{p4}(t - \delta t) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)u_z \\ q_{p1}(t - \delta t) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)u_x + q_{p2}(t - \delta t) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + q_{p3}(t - \delta t) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)u_z - q_{p4}(t - \delta t) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)u_y \\ q_{p1}(t - \delta t) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)u_y - q_{p2}(t - \delta t) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)u_z + q_{p3}(t - \delta t) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + q_{p4}(t - \delta t) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)u_x \\ q_{p1}(t - \delta t) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)u_z + q_{p2}(t - \delta t) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)u_y - q_{p3}(t - \delta t) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)u_x + q_{p4}(t - \delta t) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} , \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

en notant $u_x = \omega_{px}/\|\vec{\omega}_p\|$, $u_y = \omega_{py}/\|\vec{\omega}_p\|$ et $u_z = \omega_{pz}/\|\vec{\omega}_p\|$. Pour un schéma de type Adams-Bashforth à pas de temps constant (ce qui est le cas dans ce travail pour les trajectoires des ellipsoïdes), la mise à jour du quaternion s'effectue grâce à la formule :

$$q_p(t) = q'_1 \times q_p(t - \delta t) \quad , \quad (\text{C.10})$$

avec q'_1 le quaternion correspondant à la rotation d'angle

$$\theta = \left\| \left(\frac{3}{2} \vec{\omega}_p(t) - \frac{1}{2} \vec{\omega}_p(t - \delta t) \right) \right\| \delta t$$

et d'axe dirigé par $\left(\frac{3}{2} \vec{\omega}_p(t) - \frac{1}{2} \vec{\omega}_p(t - \delta t) \right)$.

Une fois ce quaternion calculé selon l'équation (C.9) ou (C.10), la mise à jour de la position d'un point $\vec{\mathbf{x}}_M(t)$ appartenant à un solide dont on connaît la position du centre de masse $\vec{\mathbf{x}}_p$ s'effectue grâce à la formule :

$$\vec{\mathbf{x}}_M(t) = \vec{\mathbf{x}}_p(t) + q_p(t) \times \vec{\mathbf{x}}_M^0 \times q_p^{-1}(t)$$

Dans les simulations, les objets solides sont caractérisés par une liste de marqueurs de surface $\vec{\mathbf{x}}_M^0$ qui décrit leur morphologie, et les variables $\vec{\mathbf{x}}_p$ et q_p sont calculées par le suivi lagrangien (voir section 2.1).

Annexe D

Compléments de calculs sur la méthode de Boltzmann sur réseau

Cette annexe a pour but d'apporter des éléments complémentaires concernant la méthode de Boltzmann (Eggels et Somers, 1995) sur réseau utilisée tout le long de ce travail et présentée dans le chapitre 2. Plus particulièrement, la matrice de passage de l'espace des distributions à l'espace des champs physiques est totalement explicitée. L'expression complète du vecteur solution est également fournie, avant et après l'opération de collision.

D.1 Matrice de passage - rappel

Pour rappel, l'expression de la matrice de passage, notée $[E]$, déjà fournie au chapitre 2 (équation 2.39), vérifie :

$$[E_i]^T = [1, c_{ix}^*, c_{iy}^*, c_{iz}^*, 2c_{ix}^{*2} + c_{iy}^{*2} + c_{iz}^* - 2, c_{ix}^*c_{iy}^*, 2c_{iy}^{*2} + c_{ix}^* + c_{iz}^{*2} - 2, c_{ix}^*c_{iz}^*, c_{iy}^*c_{iz}^*, 2c_{iz}^{*2} + c_{ix}^* + c_{iy}^{*2} - 2, c_{ix}^*(3c_{iy}^{*2} - 1), c_{iy}^*(3c_{ix}^{*2} - 1), 3c_{ix}^*(2c_{iz}^{*2} + c_{iy}^{*2} - 1), 3c_{iy}^*(2c_{iz}^{*2} + c_{ix}^{*2} - 1), c_{iz}^*(3c_{ix}^{*2} + c_{iy}^{*2} - 2), 3c_{iz}^*(c_{iy}^{*2} - c_{ix}^{*2}), 3(c_{ix}^{*2} - c_{iy}^{*2})^2 - 2, (c_{ix}^{*2} - c_{iy}^{*2})(1 - 2c_{iz}^{*2})]$$

En respectant l'ordre des indices des directions fournies figure 2.3, les composantes x, y, z des 18 directions vérifient :

$$\begin{cases} [c_x^*]^T = [1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0] \\ [c_y^*]^T = [0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1] \\ [c_z^*]^T = [0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1] \end{cases} \quad (D.1)$$

D.2 Expression

En se référant aux expressions (2.39) et (D.1), la matrice de passage est :

$$E_{ik} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 2 & -2 & -2 & 2 & -1 & 1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 2 & 2 & -2 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ -3 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & -3 & -3 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -3 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & -3 & -3 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -3 & -3 & 3 & 3 & 3 & 3 & -3 & -3 \\ 1 & 0 & -2 & -2 & -2 & 0 & 1 & 0 & 6 & 1 & 0 & 1 & 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 2 & -2 & -2 & 0 & 1 & 0 & -6 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Son inversion conduit à l'expression suivante :

$$[E_{ik}]^{-1} = \frac{1}{24} \begin{bmatrix} 2 & 4 & 0 & 0 & 3 & 0 & -3 & 0 & 0 & -3 & -2 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 3 \\ 2 & 0 & 4 & 0 & -3 & 0 & 3 & 0 & 0 & -3 & 0 & -2 & 0 & -2 & 0 & 0 & 1 & -3 \\ 2 & -4 & 0 & 0 & 3 & 0 & -3 & 0 & 0 & -3 & 2 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 3 \\ 2 & 0 & -4 & 0 & -3 & 0 & 3 & 0 & 0 & -3 & 0 & 2 & 0 & 2 & 0 & 0 & 1 & -3 \\ 2 & 0 & 0 & 4 & -3 & 0 & -3 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & -4 & 0 & -2 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & -4 & -3 & 0 & -3 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & -2 & 0 \\ 1 & 2 & 2 & 0 & 1.5 & 6 & 1.5 & 0 & 0 & -1.5 & 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 1 & -2 & 2 & 0 & 1.5 & -6 & 1.5 & 0 & 0 & -1.5 & -2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 1 & -2 & -2 & 0 & 1.5 & 6 & 1.5 & 0 & 0 & -1.5 & -2 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 1 & 2 & -2 & 0 & 1.5 & -6 & 1.5 & 0 & 0 & -1.5 & 2 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 2 & 1.5 & 0 & -1.5 & 6 & 0 & 1.5 & -1 & 0 & 1 & 0 & 1 & -1 & 1 & -2 \\ 1 & -2 & 0 & 2 & 1.5 & 0 & -1.5 & -6 & 0 & 1.5 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & 1 & -2 \\ 1 & -2 & 0 & -2 & 1.5 & 0 & -1.5 & 6 & 0 & 1.5 & 1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -2 \\ 1 & 2 & 0 & -2 & 1.5 & 0 & -1.5 & -6 & 0 & 1.5 & -1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -2 \\ 1 & 0 & 2 & 2 & -1.5 & 0 & 1.5 & 0 & 6 & 1.5 & 0 & -1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & -2 & 2 & -1.5 & 0 & 1.5 & 0 & -6 & 1.5 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & -2 & -2 & -1.5 & 0 & 1.5 & 0 & 6 & 1.5 & 0 & 1 & 0 & -1 & -1 & -1 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 2 & -2 & -1.5 & 0 & 1.5 & 0 & -6 & 1.5 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

En réalité, les 2 derniers termes non physiques du vecteur solution α exprimé en (D.4) sont annulés (cf chapitre 2, équation 2.41). En conséquence, les 2 dernières lignes de $[E]$ sont prises égales à 0. De même, les termes des 2 dernières colonnes de $[E]^{-1}$ sont tous nuls. En conséquence, l'expression finale de la

matrice de passage et son inverse vérifient respectivement :

$$E_{ik} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 2 & -2 & -2 & 2 & -1 & 1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 2 & 2 & -2 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ -3 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & -3 & -3 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -3 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & -3 & -3 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -3 & -3 & 3 & 3 & 3 & 3 & -3 & -3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (D.2)$$

$$[E_{ik}]^{-1} = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 0 & 0 & 3 & 0 & -3 & 0 & 0 & -3 & -2 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 4 & 0 & -3 & 0 & 3 & 0 & 0 & -3 & 0 & -2 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & -4 & 0 & 0 & 3 & 0 & -3 & 0 & 0 & -3 & 2 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & -4 & 0 & -3 & 0 & 3 & 0 & 0 & -3 & 0 & 2 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 4 & -3 & 0 & -3 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & -4 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & -4 & -3 & 0 & -3 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 2 & 0 & 1.5 & 6 & 1.5 & 0 & 0 & -1.5 & 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 2 & 0 & 1.5 & -6 & 1.5 & 0 & 0 & -1.5 & -2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{24} & 1 & -2 & -2 & 0 & 1.5 & 6 & 1.5 & 0 & 0 & -1.5 & -2 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & -2 & 0 & 1.5 & -6 & 1.5 & 0 & 0 & -1.5 & 2 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 2 & 1.5 & 0 & -1.5 & 6 & 0 & 1.5 & -1 & 0 & 1 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 0 & 2 & 1.5 & 0 & -1.5 & -6 & 0 & 1.5 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 0 & -2 & 1.5 & 0 & -1.5 & 6 & 0 & 1.5 & 1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & -2 & 1.5 & 0 & -1.5 & -6 & 0 & 1.5 & -1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 2 & 2 & -1.5 & 0 & 1.5 & 0 & 6 & 1.5 & 0 & -1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -2 & 2 & -1.5 & 0 & 1.5 & 0 & -6 & 1.5 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -2 & -2 & -1.5 & 0 & 1.5 & 0 & 6 & 1.5 & 0 & 1 & 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 2 & -2 & -1.5 & 0 & 1.5 & 0 & -6 & 1.5 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (D.3)$$

L'expression du vecteur solution à l'équilibre est fournie équation (2.38). L'expression ci-dessous permet de totalement expliciter ce vecteur avant et après application de la collision :

$$\alpha^- = \left(\begin{array}{c} \rho^* \\ \rho^* v_x^* - \frac{F_{mx}^*}{2} \\ \rho^* v_y^* - \frac{F_{my}^*}{2} \\ \rho^* v_z^* - \frac{F_{mz}^*}{2} \\ \rho^* v_x^* v_x^* + \rho^* \left(\frac{-1-6\nu^*}{6} \right) \left(2 \frac{\partial v_x^*}{\partial x^*} \right) \\ \rho^* v_x^* v_y^* + \rho^* \left(\frac{-1-6\nu^*}{6} \right) \left(\frac{\partial v_x^*}{\partial y^*} + \frac{\partial v_y^*}{\partial x^*} \right) \\ \rho^* v_y^* v_y^* + \rho^* \left(\frac{-1-6\nu^*}{6} \right) \left(2 \frac{\partial v_y^*}{\partial y^*} \right) \\ \rho^* v_x^* v_z^* + \rho^* \left(\frac{-1-6\nu^*}{6} \right) \left(\frac{\partial v_x^*}{\partial z^*} + \frac{\partial v_z^*}{\partial x^*} \right) \\ \rho^* v_y^* v_z^* + \rho^* \left(\frac{-1-6\nu^*}{6} \right) \left(\frac{\partial v_y^*}{\partial z^*} + \frac{\partial v_z^*}{\partial y^*} \right) \\ \rho^* v_z^* v_z^* + \rho^* \left(\frac{-1-6\nu^*}{6} \right) \left(2 \frac{\partial v_z^*}{\partial z^*} \right) \\ T_1^-, \dots, T_6^- \\ U_1^-, U_2^- \end{array} \right) \xrightarrow{\text{coll.}} \alpha^+ = \left(\begin{array}{c} \rho^* \\ \rho^* v_x^* + \frac{F_{mx}^*}{2} \\ \rho^* v_y^* + \frac{F_{my}^*}{2} \\ \rho^* v_z^* + \frac{F_{mz}^*}{2} \\ \rho^* v_x^* v_x^* + \rho^* \left(\frac{1-6\nu^*}{6} \right) \left(2 \frac{\partial v_x^*}{\partial x^*} \right) \\ \rho^* v_x^* v_y^* + \rho^* \left(\frac{1-6\nu^*}{6} \right) \left(\frac{\partial v_x^*}{\partial y^*} + \frac{\partial v_y^*}{\partial x^*} \right) \\ \rho^* v_y^* v_y^* + \rho^* \left(\frac{1-6\nu^*}{6} \right) \left(2 \frac{\partial v_y^*}{\partial y^*} \right) \\ \rho^* v_x^* v_z^* + \rho^* \left(\frac{1-6\nu^*}{6} \right) \left(\frac{\partial v_x^*}{\partial z^*} + \frac{\partial v_z^*}{\partial x^*} \right) \\ \rho^* v_y^* v_z^* + \rho^* \left(\frac{1-6\nu^*}{6} \right) \left(\frac{\partial v_y^*}{\partial z^*} + \frac{\partial v_z^*}{\partial y^*} \right) \\ \rho^* v_z^* v_z^* + \rho^* \left(\frac{1-6\nu^*}{6} \right) \left(2 \frac{\partial v_z^*}{\partial z^*} \right) \\ T_1^+, \dots, T_6^+ \\ U_1^+, U_2^+ \end{array} \right) \quad (\text{D.4})$$

En pratique, les deux dernières composantes sont annulées : $U_1 = U_2 = 0$.

Nomenclature

Note : certains symboles apparaissant sporadiquement dans le rapport sont définis au moment de leur introduction et ne sont pas répertoriés ici.

Lettres latines

a	demi-axe d'une ellipse/un ellipsoïde	m
A, B, \vec{C}	coefficients LPT	
\mathcal{A}	aire	m^2
\vec{c}, c	vitesse, utilisé dans le chapitre 2	$m.s^{-1}$
c	grand axe d'un ellipsoïde, utilisé dans les chapitres 3 et 4	m
d	diamètre de la particule	m
f	fonction de distribution	
g	accélération de la pesanteur	$m.s^{-2}$
h	distance de séparation	m
I	moment d'inertie	$kg.m^2$
\bar{I}	tenseur d'inertie	$kg.m^2$
k	constante de Boltzmann	$J.K^{-1}$
L	longueur de domaine	m
n	densité numérale continue	$\#.m^{-6}$
\vec{n}	vecteur normal unitaire	(-)
N	densité numérale discrétisée	$\#.m^{-3}$
$\#N$	nombre total	(-)
N	fonction de distribution massique LBM	$kg.m^{-3}$
P	pression	Pa
q	quaternion	(-)
r	distance entre les centres de masse	m
S	surface	m^2
t	temps	s
T	triangle	
\vec{v}, v	vitesse	$m.s^{-1}$
V	volume	m^3
w	élément de surface d'un objet	m^2
\vec{x}	position	m
x, y, z	coordonnées cartésiennes	m

Lettres grecques

α	vecteur solution LBM	
β	noyau statistique	$\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$
$\dot{\gamma}$	taux de cisaillement	s^{-1}
Γ	couple	N.m
δ	pas numérique	
δ	amplitude des oscillations	m
Δ	fonction d'interpolation	
Δ	différence	
ε	taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-3}$
ϵ	différence relative entre deux valeurs/deux champs	(-)
η	efficacité d'agrégation	(-)
η	échelle de turbulence	m
μ	viscosité dynamique	Pa.s
ν	viscosité cinématique	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
ρ	masse volumique	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$
σ	tension de surface	$\text{N} \cdot \text{m}^{-1}$
τ	temps caractéristique	s
$\vec{\tau}$	contrainte tangentielle	Pa
φ	angle	°
ϕ	fraction volumique	(-)
ψ	sphéricité	(-)
Ω	opérateur de collision	
$\overline{\overline{\Omega}}$	tenseur de rotation	s^{-1}

Indices

Al	alumine
B	Boltzmann
<i>coll</i>	collision
<i>g</i>	gaz
<i>i, j, 1, 2</i>	indice des particules
<i>K</i>	Kolmogorov
<i>l</i>	liquide
<i>M</i>	relatif aux marqueurs
<i>St</i>	Stokes
<i>surf</i>	surface
<i>v</i>	relatif à la vitesse linéaire
0	initial
ω	relatif à la vitesse angulaire

Exposants

*	grandeur adimensionnée
<i>turb</i>	turbulent

Abréviations

BBO	Basset-Boussinesq-Oseen
BGK	Bhatnagar Gross Krook
CFD	mécanique des fluides numérique (« Computational Fluid Dynamics »)
div	opérateur divergence
IBM	méthode de frontière immergée
IJL	Institut Jean Lamour
LBM	méthode de Boltzmann sur réseau
LPT	suivi lagrangien des particules
MPI	bibliothèque pour la communication de message inter-processeurs (« Message Passing Interface »)
PBE	équation d'équilibre des populations (« Population Balance Equation »)
SPIN	Sciences des Processus Industriels et Naturel (laboratoire de recherche à Saint-Étienne)
TU	Université Technique (« Technische Universität »)

Bibliographie

- J. ABRAHAMSON : Collision rates of small particles in a vigorously turbulent fluid. *Chemical Engineering Science*, 30(11):1371–1379, novembre 1975. ISSN 0009-2509. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0009250975850676>.
- P. M ADLER : Heterocoagulation in shear flow. *Journal of Colloid and Interface Science*, 83(1):106–115, septembre 1981. ISSN 0021-9797. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021979781900151>.
- N. M. M. AMMAR, C. S. N. AZWADI et M. S. IDRIS : Particle movement in shear cavity flow for different Stokes number using lattice Boltzmann method. *AIP Conference Proceedings*, 1440(1):1018–1024, juin 2012. ISSN 0094-243X. URL <https://aip-scitation-org.bases-doc.univ-lorraine.fr/doi/abs/10.1063/1.4704317>.
- G. K. BATCHELOR et J. T. GREEN : The hydrodynamic interaction of two small freely-moving spheres in a linear flow field. *Journal of Fluid Mechanics*, 56(2):375–400, novembre 1972. ISSN 1469-7645, 0022-1120. URL <https://www-cambridge-org.bases-doc.univ-lorraine.fr/core/journals/journal-of-fluid-mechanics/article/hydrodynamic-interaction-of-two-small-freelymoving-spheres-in-a-linear-flow-field/25B7F6ECD46646266BE78A92906B656B>.
- J-P BELLOT, V. DE FELICE, B. DUSSOUBS, A. JARDY et S. HANS : Coupling of CFD and PBE Calculations to Simulate the Behavior of an Inclusion Population in a Gas-Stirring Ladle. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 45(1):13–21, février 2014. ISSN 1543-1916. URL <https://doi.org/10.1007/s11663-013-9940-7>.
- J-P BELLOT, J-S KROLL-RABOTIN, M. GISSELBRECHT, M. JOISHI, A. SAXENA, S. SANDERS et A. JARDY : Toward Better Control of Inclusion Cleanliness in a Gas Stirred Ladle Using Multiscale Numerical Modeling. *Materials*, 11(7):1179, juillet 2018. URL <http://www.mdpi.com/1996-1944/11/7/1179>.
- P. L. BHATNAGAR, E. P. GROSS et M. KROOK : A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems. *Physical Review*, 94(3):511–525, mai 1954. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.94.511>.
- J F BRADY et G BOSSIS : Stokesian Dynamics. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 20(1):111–157, 1988. URL <https://doi.org/10.1146/annurev.fl.20.010188.000551>.
- T. B. BRAUN, J. F. ELLIOTT et M. C. FLEMINGS : The clustering of alumina inclusions. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 45(1):171–184, juin 1979. ISSN 1543-1916. URL <https://doi.org/10.1007/BF02652461>.

- F. BÜLOW, H. NIRSCHL et W. DÖRFLER : Simulating orthokinetic heterocoagulation and cluster growth in destabilizing suspensions. *Particuology*, 31:117–128, avril 2017. ISSN 1674-2001. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1674200116301262>.
- H. B. G. CASIMIR et D. POLDER : The Influence of Retardation on the London-van der Waals Forces. *Physical Review*, 73(4):360–372, février 1948. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.73.360>.
- C. CHANG et R. L. POWELL : Effect of particle size distributions on the rheology of concentrated bimodal suspensions. *Journal of Rheology*, 38(1):85–98, janvier 1994. ISSN 0148-6055. URL <https://sor-scitation-org.bases-doc.univ-lorraine.fr/doi/abs/10.1122/1.550497>.
- S. CHAPMAN : VI. On the law of distribution of molecular velocities, and on the theory of viscosity and thermal conduction, in a non-uniform simple monatomic gas. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical or Physical Character*, 216(538-548):279–348, janvier 1916. URL <https://royalsocietypublishing-org.bases-doc.univ-lorraine.fr/doi/abs/10.1098/rsta.1916.0006>.
- S. CHEN et Gary D. DOOLEN : Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30(1):329–364, 1998. URL <https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.30.1.329>.
- B. CICHOCKI, B. U. FELDERHOF, K. HINSEN, E. WAJNRYB et J. BL/AWZDZIEWICZ : Friction and mobility of many spheres in Stokes flow. *The Journal of Chemical Physics*, 100(5):3780–3790, mars 1994. ISSN 0021-9606. URL <https://aip-scitation-org.bases-doc.univ-lorraine.fr/doi/abs/10.1063/1.466366>.
- L. CLAUDOTTE : *Prédiction de la taille et de la composition des inclusions dans une poche d'acier liquide : étude numérique*. Thèse de doctorat, Université de Nancy I, France, 2010.
- M. COUNIL, F. GRUY, P. GARDIN et H. SAINT-RAYMOND : Modelling of solid particle aggregation dynamics in non-wetting liquid medium. *Chemical Engineering and Processing : Process Intensification*, 46(12):586–597, juillet 2006. ISSN 0255-2701. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0255270106000067>.
- A. S. G. CURTIS et L. M. HOCKING : Collision efficiency of equal spherical particles in a shear flow. The influence of London-van der Waals forces. *Transactions of the Faraday Society*, 66:1381, 1970. ISSN 0014-7672. URL <http://xlink.rsc.org/?DOI=tf9706601381>.
- I. L. A. DAOUD, A. JARDY, B. DUSSOUBS et J-P BELLOT : Rapport interne à 3 ans du projet CIREM. Rapport interne, juin 2010.
- I. L. A. DAOUD, N. RIMBERT, A. JARDY, B. OESTERLÉ, S. HANS et J-P BELLOT : 3d Modeling of the Aggregation of Oxide Inclusions in a Liquid Steel Ladle : Two Numerical Approaches. *Advanced Engineering Materials*, 13(7):543–549, 2011. ISSN 1527-2648. URL <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/adem.201000355/abstract>.
- V. DE FELICE, I. L. A. DAOUD, B. DUSSOUBS, A. JARDY et J-P BELLOT : Numerical Modelling of Inclusion Behaviour in a Gas-Stirred Ladle. *ISIJ International*, 52(7):1274 – 1281, 2012.
- P. DEBYE et E. HÜCKEL : The theory of electrolytes. I. Lowering of freezing point and related phenomena. *Physikalische Zeitschrift*, 24:185–206, 1923.
- I. V. DEREVICH : Coagulation kernel of particles in a turbulent gas flow. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 50(7):1368–1387, avril 2007. ISSN 0017-9310. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931006005175>.

- B. V. DERJAGUIN, N. V. CHURAEV et V. M. MULLER : The Derjaguin—Landau—Verwey—Overbeek (DLVO) Theory of Stability of Lyophobic Colloids. In B. V. DERJAGUIN, N. V. CHURAEV et V. M. MULLER, éditeurs : *Surface Forces*, pages 293–310. Springer US, Boston, MA, 1987. ISBN 978-1-4757-6639-4. URL https://doi.org/10.1007/978-1-4757-6639-4_8.
- D. D'HUMIÈRES, I. GINZBURG, M. KRAFCZYK, P. LALLEMAND et L-S LUO : Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three dimensions. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 360(1792):437–451, mars 2002. URL <https://royalsocietypublishing-org.bases-doc.univ-lorraine.fr/doi/abs/10.1098/rsta.2001.0955>.
- J. G. M. EGGELS et J. A. SOMERS : Numerical simulation of free convective flow using the lattice-Boltzmann scheme. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 16(5):357–364, octobre 1995. ISSN 0142-727X. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0142727X9500052R>.
- A. EINSTEIN : Eine neue Bestimmung der Moleküldimensionen. *Annalen der Physik*, 324(2):289–306, janvier 1906. ISSN 1521-3889. URL <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/andp.19063240204>.
- A. EINSTEIN : Berichtigung zu meiner Arbeit : Eine neue Bestimmung der Moleküldimensionen. *Annalen der Physik*, 339(3):591–592, janvier 1911. ISSN 1521-3889. URL <http://www.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/andp.19113390313>.
- D. ENSKOG : Kinetische Theorie der Vorgänge in mässig verdünnten Gasen. 1917. URL <http://lup.lub.lu.se/record/4247178>.
- M. ERNST, M. DIETZEL et M. SOMMERFELD : A lattice Boltzmann method for simulating transport and agglomeration of resolved particles. *Acta Mechanica*, 224:2425–2449, août 2013.
- M. ERNST et M. SOMMERFELD : On the Volume Fraction Effects of Inertial Colliding Particles in Homogeneous Isotropic Turbulence. *Journal of Fluids Engineering*, 134(3):031302–031302–16, mars 2012. ISSN 0098-2202. URL <http://dx.doi.org/10.1115/1.4005681>.
- Z-G FENG et E. E. MICHAELIDES : The immersed boundary-lattice Boltzmann method for solving fluid-particle interaction problems. *Journal of Computational Physics*, 184(2):602–628, avril 2004. ISSN 0021-9991. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999103005758>.
- B. FREEMAN : The motion of rigid ellipsoidal particles in slow flows. *Tectonophysics*, 113(1):163–183, mars 1985. ISSN 0040-1951. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0040195185901155>.
- U. FRISCH, D. D'HUMIERES, B. HASSLACHER, P. LALLEMAND, Y. POMEAU et J. P. RIVET : Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions. Rapport technique, Los Alamos National Lab., NM (USA); Observatoire de Nice, 06 (France); Ecole Normale Supérieure, 75 - Paris (France), janvier 1986. URL <https://www.osti.gov/biblio/6063731>.
- G. FRUNGIERI et M. VANNI : Dynamics of a shear-induced aggregation process by a combined Monte Carlo-Stokesian Dynamics approach. In *ICMF2016 - Proceedings*, Firenze, 2016. URL <http://porto.polito.it/2643608/>.
- G. FRUNGIERI et M. VANNI : Shear-induced aggregation of colloidal particles : A comparison between two different approaches to the modelling of colloidal interactions. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 95(9):1768–1780, 2017. ISSN 1939-019X. URL <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cjce.22843>.

- Iann GERBER : *Description des forces de Van der Waals dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité par un traitement explicite des interactions de longue portée*. Thèse de doctorat, Université Henri Poincaré - Nancy I, novembre 2005. URL <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00011397/document>.
- H. HADDADI et J. F. MORRIS : Topology of pair-sphere trajectories in finite inertia suspension shear flow and its effects on microstructure and rheology. *Physics of Fluids*, 14(8):043302, avril 2015. ISSN 1070-6631. URL <https://aip-scitation-org.bases-doc.univ-lorraine.fr/doi/abs/10.1063/1.4917030>.
- H. C. HAMAKER : The London—van der Waals attraction between spherical particles. *Physica*, 4(10):1058–1072, octobre 1937. ISSN 0031-8914. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0031891437802037>.
- K. HIGASHITANI, R. OGAWA, G. HOSOKAWA et Y. MATSUNO : Kinetic theory of shear coagulation for particles in a viscous fluid. *JOURNAL OF CHEMICAL ENGINEERING OF JAPAN*, 15(4):299–304, août 1982. ISSN 0021-9592. URL https://www.jstage.jst.go.jp/article/jcej1968/15/4/15_4_299/_article/-char/ja/.
- K. HIGASHITANI, K. YAMAUCHI, Y. MATSUNO et G. HOSOKAWA : Turbulent coagulation of particles dispersed in a viscous fluid. *JOURNAL OF CHEMICAL ENGINEERING OF JAPAN*, 15(4):299–304, août 1983. ISSN 0021-9592. URL https://www.jstage.jst.go.jp/article/jcej1968/16/4/16_4_299/_article/-char/ja/.
- R. L. HOFFMAN : Discontinuous and Dilatant Viscosity Behavior in Concentrated Suspensions. I. Observation of a Flow Instability. *Transactions of the Society of Rheology*, 16(1):155–173, mars 1972. ISSN 0038-0032. URL <https://sor-scitation-org.bases-doc.univ-lorraine.fr/doi/abs/10.1122/1.549250>.
- H. M. HULBURT et S. KATZ : Some problems in particle technology : A statistical mechanical formulation. *Chemical Engineering Science*, 30(11):555–574, août 1964. ISSN 0009-2509. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0009250964850478>.
- G. B. JEFFERY : The motion of ellipsoidal particles immersed in a viscous fluid. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 102(715):161–179, novembre 1922. ISSN 0950-1207, 2053-9150. URL <http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/102/715/161>.
- J. JEŽEK, S. SAIC, K. SEGETH et K. SCHULMANN : Three-dimensional hydrodynamical modeling of viscous flow around a rotating ellipsoidal inclusion. *Computers & Geosciences*, 25(5):547–558, juin 1999. ISSN 0098-3004. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098300498001654>.
- T. KEMPE et J. FRÖHLICH : An improved immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particle laden flows. *Journal of Computational Physics*, 231(9):3663–3684, mai 2012. ISSN 0021-9991. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999112000423>.
- M. S. KLAMKIN : Elementary Approximations to the Area of N-Dimensional Ellipsoids. *The American Mathematical Monthly*, 78(3):280–283, mars 1971. ISSN 0002-9890. URL <https://doi.org/10.1080/00029890.1971.11992746>.
- I. M. KRIEGER : Rheology of monodisperse latices. *Advances in Colloid and Interface Science*, 3(2):111–136, janvier 1972. ISSN 0001-8686. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0001868672800010>.

- F. E. KRUIS et K. A. KUSTERS : The Collision Rate of Particles in Turbulent Flow. *Chemical Engineering Communications*, 158(1):201–230, avril 1997. ISSN 0098-6445. URL <https://doi.org/10.1080/00986449708936589>.
- S. KUMAR et D. RAMKRISHNA : On the solution of population balance equations by discretization—I. A fixed pivot technique. *Chemical Engineering Science*, 30(11):1311–1332, avril 1996. ISSN 0009-2509. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0009250996884892>.
- P. LALLEMAND et L-S LUO : Theory of the lattice Boltzmann method : Dispersion, dissipation, isotropy, Galilean invariance, and stability. *Physical Review E*, 61(6):6546–6562, juin 2000. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.61.6546>.
- L. LI, Z. LIU, B. LI, H. MATSUURA et F. TSUKIHASHI : Water Model and CFD-PBM Coupled Model of Gas-Liquid-Slag Three-Phase Flow in Ladle Metallurgy. *ISIJ International*, 55(7):1337–1346, juillet 2015. ISSN 0915-1559, 1347-5460. URL https://www.jstage.jst.go.jp/article/isijinternational/55/7/55_1337/_article/-char/ja/.
- E. M. LIFSHITZ : The theory of molecular attractive forces between solids. *Sov.Phys.JETP*, 2:73–83, 1956. URL <https://inspirehep.net/record/47897>.
- C-J LIN, J. H. PEERY et W. R. SCHOWALTER : Simple shear flow round a rigid sphere : inertial effects and suspension rheology. *Journal of Fluid Mechanics*, 56(2):1–17, octobre 1970. ISSN 1469-7645, 0022-1120. URL <http://www.cambridge.org/core/journals/journal-of-fluid-mechanics/article/simple-shear-flow-round-a-rigid-sphere-inertial-effects-and-suspension-rheology/D8EAB057F8A8F0D0AEA2F3958B4A8DD1>.
- S. LOMHOLT et M. R. MAXEY : Force-coupling method for particulate two-phase flow : Stokes flow. *Journal of Computational Physics*, 184(2):381–405, janvier 2003. ISSN 0021-9991. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999102000219>.
- W. LOU et M. ZHU : Numerical Simulations of Inclusion Behavior in Gas-Stirred Ladles. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 45(1):762–782, juin 2013. ISSN 1543-1916. URL <https://doi.org/10.1007/s11663-013-9802-3>.
- T. MA, C. SANTARELLI, T. ZIEGENHEIN, D. LUCAS et J. FRÖHLICH : Direct numerical simulation-based Reynolds-averaged closure for bubble-induced turbulence. *Physical Review Fluids*, 2(3):034301, mars 2017. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevFluids.2.034301>.
- D. L. MARCHISIO et R. O. FOX : Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments. *Journal of Aerosol Science*, 36(1):43–73, janvier 2005. ISSN 0021-8502. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021850204003052>.
- D. L. MARCHISIO, J. T. PIKTURNA, R. O. FOX, R. D. VIGIL et A. A. BARRESI : Quadrature method of moments for population-balance equations. *AIChE Journal*, 49(5):1266–1276, mai 2003. ISSN 1547-5905. URL <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/aic.690490517>.
- D. R. MIKULENCAK et J. F. MORRIS : Stationary shear flow around fixed and free bodies at finite Reynolds number. *Journal of Fluid Mechanics*, 56(2):215–242, décembre 2004. ISSN 1469-7645, 0022-1120. URL <http://www.cambridge.org/core/journals/journal-of-fluid-mechanics/article/stationary-shear-flow-around-fixed-and-free-bodies-at-finite-reynolds-number/B7A804CF6DAA45F250880455CF980F59>.
- O. MIRGAUX : *Modélisation de la purification de l'aluminium liquide par procédé de flottation en cuve agitée*. Thèse de doctorat, INPL, Nancy, décembre 2007. URL <http://www.theses.fr/2007INPL105N>.

- O. MIRGAUX, D. ABLITZER, E. WAZ et J. P. BELLOT : Mathematical Modeling and Computer Simulation of Molten Aluminum Purification by Flotation in Stirred Reactor. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 40(3):363–375, juin 2009. ISSN 1073-5615, 1543-1916. URL <https://link-springer-com.bases-doc.univ-lorraine.fr/article/10.1007/s11663-009-9233-3>.
- N.-Q. NGUYEN et A. J. C. LADD : Lubrication corrections for lattice-Boltzmann simulations of particle suspensions. *Physical Review E*, 66(4), octobre 2002. ISSN 1063-651X, 1095-3787. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.66.046708>.
- H. NIRSCHL, H. A. DWYER et V. DENK : Three-dimensional calculations of the simple shear flow around a single particle between two moving walls. *Journal of Fluid Mechanics*, 56(2):273–285, janvier 1995. ISSN 1469-7645, 0022-1120. URL <http://www.cambridge.org/core/journals/journal-of-fluid-mechanics/article/threedimensional-calculations-of-the-simple-shear-flow-around-a-single-particle-between-two-BA0D0C43B94E80CFF090839E636177F2>.
- X. D. NIU, C. SHU, Y. T. CHEW et Y. PENG : A momentum exchange-based immersed boundary-lattice Boltzmann method for simulating incompressible viscous flows. *Physics Letters A*, 354(3):173–182, mai 2006. ISSN 0375-9601. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960106001472>.
- P-O PERSSON et G. STRANG : A Simple Mesh Generator in MATLAB. *SIAM Review*, 46(2):329–345, janvier 2004. ISSN 0036-1445, 1095-7200. URL <http://persson.berkeley.edu/distmesh/>.
- C. S. PESKIN : Numerical analysis of blood flow in the heart. *Journal of Computational Physics*, 184(2):220–252, novembre 1977. ISSN 0021-9991. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999177901000>.
- C. S. PESKIN : The immersed boundary method. *Acta Numerica*, 11:479–517, janvier 2002. ISSN 1474-0508, 0962-4929. URL <https://www-cambridge-org.bases-doc.univ-lorraine.fr/core/journals/acta-numerica/article/immersed-boundary-method/95ECDAC5D1824285563270D6DD70DA9A>.
- G. G. POE et A. ACRIVOS : Closed-streamline flows past rotating single cylinders and spheres : inertia effects. *Journal of Fluid Mechanics*, 56(2):605–623, décembre 1975. ISSN 1469-7645, 0022-1120. URL <http://www.cambridge.org/core/journals/journal-of-fluid-mechanics/article/closedstreamline-flows-past-rotating-single-cylinders-and-spheres-inertia-effects/DA2BB96386017CB55F5DC5ABD499C5D8>.
- Y. H. QIAN, D. D'HUMIÈRES et P. LALLEMAND : Lattice BGK Models for Navier-Stokes Equation. *Europhysics Letters (EPL)*, 17(6):479–484, février 1992. ISSN 0295-5075. URL <https://doi.org/10.1209%2F0295-5075%2F17%2F6%2F001>.
- Y. ROCARD : L'hydrodynamique et la théorie cinétique des gaz. *Annales de Physique*, 10(8):5–120, 1927. ISSN 0003-4169, 1286-4838. URL <https://www-annphys-org.bases-doc.univ-lorraine.fr/articles/anphys/abs/1927/08/anphys19271008p5/anphys19271008p5.html>.
- E. RUCKENSTEIN : The Instability of the Solid–Liquid Interface and the Hydrophobic Force. *Journal of Colloid and Interface Science*, 83(1):218–223, avril 1997. ISSN 0021-9797. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021979797947706>.
- J. E. SADER, S. L. CARNIE et D. Y. C. CHAN : Accurate Analytic Formulas for the Double-Layer Interaction between Spheres. *Journal of Colloid and Interface Science*, 83(1):46–54, avril 1995. ISSN 0021-9797. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021979785711496>.

- P. G. SAFFMAN et J. S. TURNER : On the collision of drops in turbulent clouds. *Journal of Fluid Mechanics*, 1(1):16–30, mai 1956. ISSN 1469-7645, 0022-1120. URL <https://www-cambridge-org.bases-doc.univ-lorraine.fr/core/journals/journal-of-fluid-mechanics/article/on-the-collision-of-drops-in-turbulent-clouds/AF8E2769ACC937E577BB49A016BAE89E>.
- C. SANTARELLI et J. FRÖHLICH : Direct Numerical Simulations of spherical bubbles in vertical turbulent channel flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 75:174–193, octobre 2015. ISSN 0301-9322. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030193221500124X>.
- K. SASAI : Interaction between Alumina Inclusions in Molten Steel Due to Cavity Bridge Force. *ISIJ International*, 56(6):1013–1022, 2016.
- J. H. SCHENKEL et J. A. KITCHENER : A Test of the Serjaguin-Verwey-Overbeek Theory with a Colloidal Suspension. *Transactions of the Faraday Society*, 56:161–173, 1960.
- J-M SERAYSSOL et R. H. DAVIS : The influence of surface interactions on the elastohydrodynamic collision of two spheres. *Journal of Colloid and Interface Science*, 114(1):54–66, novembre 1986. ISSN 0021-9797. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021979786902407>.
- D-Y SHENG, M. SÖDER, P. JÖNSSON et L. JONSSON : Modeling micro-inclusion growth and separation ingas-stirred ladles. *Scandinavian Journal of Metallurgy*, 31(2):134–147, avril 2002. ISSN 1600-0692. URL <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1034/j.1600-0692.2002.310208.x>.
- M. V. SMOLUCHOWSKI : Drei Vorträge über Diffusion, Brownsche Molekularbewegung und Koagulation von Kolloidteilchen. *Zeitschrift für Physik*, 17:557–585, 1916. URL <http://adsabs.harvard.edu/abs/1916ZPhy...17..557S>.
- M. V. SMOLUCHOWSKI : Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider Lösungen. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, 92U(1):129–168, 1918. ISSN 0942-9352. URL <http://www.degruyter.com/view/j/zpch.1918.92.issue-1/zpch-1918-9209/zpch-1918-9209.xml>.
- J. A. SOMERS : Direct simulation of fluid flow with cellular automata and the lattice-Boltzmann equation. *Applied Scientific Research*, 51(1-2):127–133, juin 1993. ISSN 0003-6994, 1573-1987. URL <https://link-springer-com.bases-doc.univ-lorraine.fr/article/10.1007/BF01082526>.
- J. J. STICKEL et R. L. POWELL : Fluid Mechanics and Rheology of Dense Suspensions. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 37(1):129–149, 2005. URL <https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.36.050802.122132>.
- R. SUNGKORN et J. J. DERKSEN : Simulations of dilute sedimenting suspensions at finite-particle Reynolds numbers. *Physics of Fluids*, 14(8):123303, décembre 2012. ISSN 1070-6631. URL <https://aip-scitation-org.bases-doc.univ-lorraine.fr/doi/abs/10.1063/1.4770310>.
- M. SÖDER, P. JÖNSSON et L. JONSSON : Inclusion Growth and Removal in Gas-Stirred Ladles. *Steel Research International*, 82(4):128–138, février 2004. ISSN 1869-344X. URL <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/srin.200405938>.
- Mats SÖDER, Pär JÖNSSON et Jonas ALEXIS : Most relevant mechanisms of inclusion growth in an induction-stirred ladle. *Scandinavian Journal of Metallurgy*, 31(2):210–220, juin 2002. ISSN 1600-0692. URL <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1034/j.1600-0692.2002.310308.x>.
- S. TANIGUCHI, A. KIKUCHI, T. ISE et N. SHOJI : Model Experiment on the Coagulation of Inclusion Particles in Liquid Steel. *ISIJ International*, 36:117–120, 1996.

- K TANIZAWA, F YAMAGUCHI, K INAOKA et K TANAKA : Influence of the steelmaking conditions on nonmetallic inclusions and product defects. volume 1, page 1, 1991.
- G. I. TAYLOR : Statistical Theory of Turbulence. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 151(873):421–444, 1935. ISSN 0080-4630. URL <http://www.jstor.org/stable/96557>.
- B. G. THOMAS et Hua BAI : Tundish Nozzle Clogging – Application Of Computational Models. volume 18, Baltimore, MD (US), 2001. Iron and Steel Society. URL http://ccc.illinois.edu/PDF%20Files/Reports00/d.reports00/ISS_01_castab.pdf.
- S. TSCHISGALE, T. KEMPE et J. FRÖHLICH : A general implicit direct forcing immersed boundary method for rigid particles. *Computers & Fluids*, 170:285–298, juillet 2018. ISSN 0045-7930. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793018301968>.
- T. G. M. Van de VEN et S. G. MASON : The microrheology of colloidal dispersions VII. Orthokinetic doublet formation of spheres. *Colloid and Polymer Science*, 255(5):468–479, mai 1977. ISSN 0303-402X, 1435-1536. URL <http://link.springer.com/10.1007/BF01536463>.
- M-A VAN ENDE : *Formation and morphology of non-metallic inclusions in aluminium killed steels*. Thèse de doctorat, Université catholique de Louvain, Louvain, Belgique, janvier 2010.
- M. VANNI et G. BALDI : Coagulation efficiency of colloidal particles in shear flow. *Advances in Colloid and Interface Science*, 3(2):151–177, mars 2002. ISSN 0001-8686. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0001868601000501>.
- O. I. VINOGRADOVA : Coagulation of Hydrophobic and Hydrophilic Solids under Dynamic Conditions. *Journal of Colloid and Interface Science*, 169(2):306–312, février 1995. ISSN 0021-9797. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021979785710387>.
- L-P WANG, A. S. WEXLER et Y. ZHOU : Statistical mechanical description and modelling of turbulent collision of inertial particles. *Journal of Fluid Mechanics*, 415:117–153, juillet 2000. ISSN 1469-7645, 0022-1120. URL <http://www.cambridge.org/core/journals/journal-of-fluid-mechanics/article/statistical-mechanical-description-and-modelling-of-turbulent-collision-of-inertial-particles/D9AA056398BBAD210FD655F38E56314>.
- L. T. WANG, Q. Y. ZHANG, S. H. PENG et Z. B. LI : Mathematical Model for Growth and Removal of Inclusion in a Multi-tuyere Ladle during Gas-stirring. *ISIJ International*, 45(3):331–337, 2005. ISSN 0915-1559, 1347-5460. URL https://www.jstage.jst.go.jp/article/isijinternational/45/3/45_3_331/_article/-char/ja/.
- E. WILD : On Boltzmann’s equation in the kinetic theory of gases. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 47(3):602–609, juillet 1951. ISSN 1469-8064, 0305-0041. URL <http://www.cambridge.org/core/journals/mathematical-proceedings-of-the-cambridge-philosophical-society/article/on-boltzmanns-equation-in-the-kinetic-theory-of-gases/4A4EDCE29962B548F5B808103F598320>.
- J. J. E. WILLIAMS et R. I. CRANE : Particle collision rate in turbulent flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 46(4):421–435, août 1983. ISSN 0301-9322. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932283900988>.
- WORLD STEEL ASSOCIATION : Steel Statistical Yearbook, décembre 2018. URL <http://www.worldsteel.org/steel-by-topic/statistics/steel-statistical-yearbook-.html>.

- H. YIN, H. SHIBATA, T. EMI et M. SUZUKI : "In-situ" Observation of Collision, Agglomeration and Cluster Formation of Alumina Inclusion Particles on Steel Melts. *ISIJ International*, 55(7):936–945, octobre 1997. ISSN 0915-1559, 1347-5460. URL https://www.jstage.jst.go.jp/article/isijinternational1989/37/10/37_10_936/_article/-char/en.
- A. YOUNSI : *Simulations des effets des écoulements sur la croissance cristalline d'un mélange binaire. Approche par méthode de Boltzmann sur réseau*. Thèse de doctorat, Palaiseau, Ecole polytechnique, janvier 2015. URL <http://www.theses.fr/2015EPXX0050>.
- L. I. ZAICHIK, O. SIMONIN et V. M. ALIPCHENKOV : Collision rates of bidisperse inertial particles in isotropic turbulence. *Physics of Fluids*, 14(8):035110, mars 2006. ISSN 1070-6631. URL <https://aip-scitation-org.bases-doc.univ-lorraine.fr/doi/abs/10.1063/1.2187548>.
- L. I. ZAICHIK, O. SIMONIN et V. M. ALIPCHENKOV : Turbulent collision rates of arbitrary-density particles. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53(9):1613–1620, avril 2010. ISSN 0017-9310. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931010000475>.
- L. ZHANG et B. G. THOMAS : State of the Art in Evaluation and Control of Steel Cleanliness. *ISIJ International*, 55(7):271–291, mars 2003. ISSN 0915-1559, 1347-5460. URL https://www.jstage.jst.go.jp/article/isijinternational1989/43/3/43_3_271/_article/-char/ja/.
- X. ZHANG, L. ZHANG, W. YANG, Y. ZHANG, Y. REN et Y. DONG : Comparison of 2d and 3d morphology of non-metallic inclusions in steel using different methods. *Metallurgical Research & Technology*, 114(1):113, 2017. ISSN 2271-3646, 2271-3654. URL <https://www-metallurgical-research-org.bases-doc.univ-lorraine.fr/articles/metal/abs/2017/01/metal160025/metal160025.html>.

Résumé

La propreté inclusionnaire reste un enjeu majeur en élaboration des métaux par voie liquide. La flottation, principal procédé retenu en métallurgie secondaire pour éliminer les particules d'inclusions, consiste à injecter des bulles de gaz au sein du réacteur. Lors de leur ascension, les bulles vont capter les plus grosses inclusions et favoriser la collision et l'agrégation des particules.

Dans le but de quantifier les phénomènes influents à l'échelle des inclusions sur la dynamique d'agrégation entre deux inclusions à proximité des bulles, un modèle numérique 3D a été développé. L'écoulement local est modélisé par un cisaillement plan permanent et résolu par une méthode de Boltzmann sur réseau. Le couplage entre les particules et le fluide a été assuré par une méthode de frontière immergée permettant de calculer la perturbation hydrodynamique engendrée par la présence des particules et de mettre à jour les interactions entre particules pour leur suivi lagrangien.

Les simulations numériques réalisées ont mis en évidence que les effets hydrodynamiques ont une influence non négligeable sur le comportement des inclusions. Des sections efficaces de collision ont pu être extraites, à partir desquelles ont été calculés des noyaux d'agrégation, données macroscopiques rendant compte des effets à petite échelle.

Une première application de ce travail a été menée avec le calcul des fréquences d'agrégation d'un train de bulle dans un réacteur canal à partir de résultats de simulations DNS. Les noyaux d'agrégation ont également été exploités en vue de déterminer, à partir de résultats RANS de l'hydrodynamique d'une poche d'acier, l'évolution de la concentration d'inclusions par un bilan de population global.

Mots-clés : propreté inclusionnaire, flottation, agrégation, méthode de Boltzmann sur réseau, méthode de frontière immergée, interactions hydrodynamiques, section de collision, noyaux d'agrégation

Abstract

Inclusion cleanliness remains a major challenge faced in process metallurgy in liquid phase. Flotation, the main process used in secondary metallurgy to remove inclusions, consists in injecting gas bubbles into the reactor. Rising gas bubbles entrap the biggest inclusions at their surface or in their wake, and promote collision and aggregation among particles.

A 3D numerical model has been developed to quantify the roles of the prevailing phenomena on aggregation dynamics between inclusions in the vicinity of bubbles. At inclusion scale, the turbulent flow is locally modeled by a steady plane shear flow, solved using a lattice-Boltzmann method. The coupling between both liquid and solid phases is ensured using an immersed boundary method. This resolves the hydrodynamic perturbation induced by particles, and hence their interactions that are, in turn, used to update their Lagrangian tracking.

The conducted numerical simulations bring out the influence of hydrodynamic effects on inclusion behavior. Collision cross sections have been determined from which ensuing aggregation kernels have been calculated, providing macroscopic models to represent local particle dynamics.

A first application of these results is presented to calculate aggregation frequencies in bubble swarms in a channel flow reactor that was simulated using DNS. Additionally, evolution of inclusion populations in molten steel has been determined from RANS simulation of a liquid steel ladle by means of a global population balance implementing the aggregation kernels determined in the present work.

Keywords : inclusion cleanliness, flotation, aggregation, lattice-Boltzmann method, immersed boundary method, hydrodynamic interactions, collision surface, aggregation kernel