



Modélisation des interactions et du transport de particules dans une phase liquide : des comportements locaux aux effets à l'échelle des procédés

Jean-Sébastien Kroll-Rabotin

► To cite this version:

Jean-Sébastien Kroll-Rabotin. Modélisation des interactions et du transport de particules dans une phase liquide : des comportements locaux aux effets à l'échelle des procédés. Génie des procédés. Université de Lorraine, 2022. tel-03980411

HAL Id: tel-03980411

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-03980411>

Submitted on 10 Feb 2023

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

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

Copyright

Habilitation à Diriger des Recherches

présentée et soutenue publiquement par

Jean-Sébastien Kroll-Rabotin

le 15 décembre 2022

Modélisation des interactions et du transport de particules dans une phase liquide : des comportements locaux aux effets à l'échelle des procédés

Rapporteurs

Hervé Duval	Professeur CentraleSupélec Université Paris Saclay
Christine Frances	Directrice de recherche Laboratoire de Génie Chimique Institut National Polytechnique de Toulouse
Pascal Gardin	Directeur des relations scientifiques ArcelorMittal Maizières – Global Research and Development

Examineurs

Jean-Pierre Bellot	Professeur Intitut Jean Lamour Université de Lorraine
Vincent Descotes	Ingénieur responsable qualité & process aciérie Aperam Alloys
Anne Tanière	Professeure Laboratoire Énergies & Mécanique Théorique et Appliquée Université de Lorraine

Invités

Hani Henein	Professeur Department of Chemical and Materials Engineering University of Alberta
R. Sean Sanders	Professeur Department of Chemical and Materials Engineering University of Alberta

Résumé

Les enjeux scientifiques et industriels liés aux inclusions non-métalliques dans les procédés impliquant du métal liquide sont au cœur des activités de recherche de l'équipe « Procédés d'Élaboration » que j'ai rejointe en 2013. Dans le cadre de ces activités de recherche, j'ai développé un logiciel pour simuler des mécanismes fondamentaux régissant le transport et les interactions entre particules dans une phase liquide afin de modéliser leurs effets à l'échelle de procédés. Ce logiciel couple une méthode de Boltzmann sur réseau (Lattice Boltzmann Method, LBM) à une méthode des éléments discrets (Discrete Element Method, DEM) via une méthode de frontière immergée (Immersed Boundary Method, IBM).

Après une description des implémentations des trois méthodes LBM, DEM et IBM, ce document présente trois travaux de recherche menés dans le cadre de thèses à l'Institut Jean Lamour (Université de Lorraine) et l'Université d'Alberta. Ces thèses ont commencé en même temps, au printemps 2016 et se sont terminées entre 2019 et 2021. Les travaux de Matthieu Gisselbrecht (2019) et Manoj Joishi (2019) ont porté sur deux sujets liés au contrôle de la propreté inclusionnaire, à savoir l'agrégation des inclusions et leur capture par dépôt aux parois du réacteur lors de l'affinage en poche. Akash Saxena (2021) a quantifié des cinétiques de restructuration et la fragmentation d'agrégats ainsi que l'effet des interactions cohésives et hydrodynamiques entre particules primaires sur l'évolution morphologique des agrégats qu'elles composent.

Les principales applications visées concernent la métallurgie, mais la physique sous-jacente et les aspects mathématiques sont transverses à de multiples domaines, tels que les colloïdes et les aérosols.

Mots-clés : agrégats, méthode de Boltzmann sur réseau (LBM), méthode de frontière immergée (IBM), méthode des éléments discrets (DEM), hydrodynamique, propreté inclusionnaire

Abstract

Scientific and industrial challenges regarding non-metallic inclusions in processes involving liquid metal are core thematics of the research team "Process Metallurgy", that I joined in 2013. To address the needs of such research activities, I have developed a software framework to simulate fundamental mechanisms ruling the transport and the interactions between particles in a liquid phase and to model their impacts at process scale. This piece of software couples a Lattice Boltzmann Method (LBM) to a Discrete Element Method (DEM) using an Immersed Boundary Method (IBM).

This document first presents a description of the implementations of the three methods (LBM, DEM and IBM), followed by three PhD theses that were conducted at Institut Jean Lamour (Université de Lorraine) and at the University of Alberta. These projects all started at the same time, in spring 2016 and ended between the years 2019 and 2021. Matthieu Gisselbrecht (2019) and Manoj Joishi (2019) focused on topics related to the control of inclusion cleanliness in metallurgical processes, more specifically investigating the aggregation kinetics of inclusions and their capture by deposition at the walls of ladle reactors. Akash Saxena (2021) quantified restructuring and breakage of aggregates transported in a flow as well as the dependence of morphological evolution of aggregates on the cohesive and hydrodynamic interactions between the primary particles of which they are made of.

Targeted applications fall in the scope of metallurgy, but the underlying physics and their mathematical modelling are transversal to multiple domains, such as colloids and aerosols.

Keywords: aggregates, Lattice Boltzmann Method (LBM), Immersed Boundary Method (IBM), Discrete Element Method (DEM), hydrodynamics, inclusion cleanliness

Références

- Gisselbrecht M. : *Simulation des interactions hydrodynamiques entre inclusions dans un métal liquide : établissement de noyaux d'agrégation dans les conditions représentatives du procédé de flottation*. Thèse de doctorat, Université de Lorraine, 2019.
- Joishi M. : *Étude numérique du dépôt de particules dans une couche limite avec un forçage turbulent dans la zone externe*. Thèse de doctorat, Université de Lorraine, 2019.
- Saxena A. : *Aggregate evolution in shear flow : numerical investigation of the role of cohesive and hydrodynamic forces*. Thèse de doctorat, Université of Alberta, 2021.

Table des matières

I	Curriculum Vitæ	1
II	Activités d'enseignement et responsabilités administratives	9
1	Enseignements	11
2	Formation par la recherche	12
3	Responsabilités	17
III	Simulation des interactions et du transport de particules dans une phase liquide	21
1	Motivation scientifique	23
1.1	Aggrégats dans les procédés polyphasiques	23
1.2	Bilans de populations	25
1.3	Effets hydrodynamiques	27
2	Simulation numérique couplée de mécanique des fluides et de dynamique de particules solides	27
2.1	Cadriciel de simulation « Flua »	27
2.2	Méthode de Boltzmann sur réseau (LBM)	29
2.3	Méthode de frontière immergée (IBM)	32
2.4	Méthode des éléments discrets (DEM)	34
3	Applications au comportement de particules transportées dans un liquide	37
3.1	Agrégation d'inclusions pendant le traitement en poche	38
3.2	Restructuration et fragmentation d'aggrégats sous cisaillement	48
3.3	Dépôt d'inclusions aux parois d'un réacteur	54
4	Conclusion	62
5	Références	63
IV	Projet scientifique	71
1	Simulation numérique pour la modélisation de procédés	73
1.1	Simulation numérique directe	73
1.2	Bilans de populations	75
1.3	Couplage avec des modèles thermochimiques	76
2	Procédés pyrométallurgiques	77
2.1	Mesures de propriétés thermophysiques des liquides à haute température	77
2.2	Approche multi-échelle pour la modélisation de procédés	79
2.3	Comportements inclusionnaires	80
3	Procédés pour les transitions écologique et énergétique	83
3.1	Séparation physique	83
3.2	Recyclage	85
4	Conclusion	87
5	Références	87

Annexes

A	Lettre de parrainage	93
B	Articles scientifiques	97
1	A. Saxena, J.-S. Kroll-Rabotin, R.S. Sanders, 2022	97
2	J.-S. Kroll-Rabotin, M. Gisselbrecht, B. Ott, R. May, J. Fröhlich, J.-P. Bellot, 2020	109
3	M. Gisselbrecht, J.-S. Kroll-Rabotin, J.-P. Bellot, 2019	127
4	Q. Dehaine, Y. Foucaud, J.-S. Kroll-Rabotin, L.O. Filippov, 2019	138
5	J.-S. Kroll-Rabotin, F. Bourgeois, É. Climent, 2013	151

Curriculum Vitæ

I

1 Coordonnées

Jean-Sébastien Kroll-Rabotin

Maître de Conférences à l'Université de Lorraine
Section CNU 62 : Énergétique et Génie des Procédés

✉ **Institut Jean Lamour** (UMR 7198)

2, allée André Guinier
Campus ARTEM - BP 50840
54000 Nancy Cedex

✉ **École des Mines de Nancy** - Bureau P229

92, rue du Sergent Blandan
Campus Artem - CS 14 234
54042 NANCY Cedex

@ jean-sebastien.kroll-rabotin@univ-lorraine.fr

🌐 <https://materiaux.cnrs.fr/jean-sebastien.kroll-rabotin/>

🌐 <https://orcid.org/0000-0002-7638-3488>

2 Parcours professionnel

2.1 Expérience

Depuis 2013 Maître de conférences

Université de Lorraine, *Nancy*

▸ **École des Mines**, département *Énergie*

▸ **Institut Jean Lamour**, département *Science et Ingénierie des Matériaux et Métallurgie* (SI2M), équipe *Procédés d'Élaboration* (301)

2013 Chargé de cours

University of Alberta, Faculty of Engineering, *Edmonton, AB, Canada*

2011—2013 Post-doctorant

University of Alberta, Dept. of Chemical and Materials Engineering (CME),
Edmonton, AB, Canada

Pipeline Transport Processes Research Group

- 2007—2010 Doctorant**
Laboratoire de Génie Chimique (LGC), *Toulouse*
dépt. Génie des Interfaces et Milieux Divisés (GIMD)
- 2007 Ingénieur d'études (stagiaire)**
Institut de Mécanique des Fluides et des Solides (IMFS), *Strasbourg*
- 2006 Ingénieur d'études (stagiaire)**
Laboratoire de Génie des Procédés Alimentaires et Biotechnologiques (GPAB), *Dijon*

2.2 Formation initiale

- 2007—2010 Doctorat en Génie des Procédés et de l'Environnement**
Institut National Polytechnique de Toulouse (INPT), *Toulouse*
Analyse physique et modélisation de la séparation centrifuge de particules ultrafines en film fluant : application au séparateur industriel Falcon.
Direction : Éric Climent (IMFT-Toulouse) et Florent Bourgeois (LGC-Toulouse)
Rapporteurs : Mohamed Souhar (LEMTA-Nancy) et Claude Bazin (Université Laval-Québec)
Président du jury : Jacques Yvon (LEM-Nancy)
Autre membre du jury : Claude Deveau (Cabot Supermetals-Lac du Bonnet, Canada)
Thèse proposée par le jury au prix Léopold Escande (prix de l'INP Toulouse des meilleures thèses soutenues chaque année).
- 2007 Master Recherche en Mécanique des Fluides et Transferts**
Institut National Polytechnique de Grenoble (Grenoble INP) , *Grenoble*
- 2004—2007 Diplôme d'Ingénieur**
École Nationale Supérieure d'Hydraulique et de Mécanique (ENSHMG, ENSE³) , *Grenoble*
spécialité : Modélisation Numérique des Fluides et des Solides
- 2002—2004 Classe Préparatoire aux Grandes Écoles**
Lycée Gustave Eiffel, *Dijon*
filière PTSI – PT
- 2002 Baccalauréat Scientifique**
Lycée Gustave Eiffel, *Dijon*
spécialité mathématiques, mention bien

2.3 Formation complémentaire

- 2014 Collective dynamics of particles : from viscous to turbulent flows**
International Centre for Mechanical Sciences (CISM), *Udine, Italie*

- 2012 **“Teaching Big” symposium : The Joy of Large Classes**
Centre for Teaching and Learning, *Edmonton, Alberta, Canada*
- 2012 **Moving Online**
Centre for Teaching and Learning, *Edmonton, Alberta, Canada*
- 2011 **Lattice Boltzmann Methods Workshop 2011**
University of Alberta, *Edmonton, Alberta, Canada*

2.4 Enseignements

- Depuis 2013 **École des Mines de Nancy, Université de Lorraine, Nancy**
 - 1A : Mécanique des Milieux Continus, Projets Scientifiques
 - 2A : Dynamique des Fluides, Turbulence, Projets, Couches Limites et Rayonnement, Modélisation et Simulation d’Instruments de Musique, Mécanique des Fluides pour l’Ingénieur
 - 3A : Marchés de l’Énergie et de l’Environnement, Projets de Recherche
- 2013 **University of Alberta, Dept. of Chemical and Materials Engineering, Edmonton, Alberta, Canada**
Mécanique des Fluides – 1er cycle universitaire
- 2009—2010 **Institut Universitaire de Technologie - Génie des Procédés et Génie Chimique (IUT GP-GC), Toulouse**
Travaux pratiques de Mécanique des Fluides
- 2009—2010 **École Nationale Supérieure d’Ingénieurs en Arts Chimiques et Technologiques (ENSIACET), Toulouse**
Travaux dirigés de rédaction de documents avec L^AT_EX
- 2007—2010 **Laboratoire de Génie Chimique (LGC), Toulouse**
Animation de formations organisées par l’association des personnels non permanents

2.5 Responsabilités

- Depuis 2019 **Labex DAMAS2, Université de Lorraine**
Axe « Multiscale Modelling and Simulations »
 - Coordinateur du sous-axe « Process simulation »
 - 🌐 <https://anr.fr/ProjetIA-11-LABX-0008>
- 2019 **European workshop on “Inclusion cleanliness”, Nancy**
 - Co-organisateur de l’événement
- Depuis 2018 **GDR MorPhéA : Morphologie et Phénomènes d’Agrégation**
 - Membre du comité de pilotage (depuis 2020)
 - Membre du comité scientifique

- Depuis 2018** **Institut Jean Lamour, département Sciences et Ingénierie des Matériaux, Métallurgie (SI2M)**
 Membre du groupe d’animation scientifique
- organisation de séminaires mensuels,
 - exposition d’images de recherche dans les couloirs
 - mise en place et administration des pages web personnelles
- Depuis 2018** **Département Énergie, Mines Nancy, Université de Lorraine**
 Webmestre du site vitrine du département
 ☞ <https://energie.mines-nancy.univ-lorraine.fr>
- 2016—2021** **Mines Nancy, Université de Lorraine**
 ▸ Représentant élu des enseignants au Conseil de l’École
- 2016—2020** **ANR PRCI FLOTINC : “Inclusion interactions during flotation in liquid metals”**
 ▸ Responsable du Work Package “Mesoscopic simulations of solid inclusion interactions in a shear flow”
 ☞ <https://anr.fr/Project-ANR-15-CE08-0040>
- 2011—2013** **Groupe « Pipeline Transport Processes », Université d’Alberta**
 ▸ Gestion des ressources de calcul
 ▸ Organisation de réunions de groupe
 ▸ Co-encadrement d’étudiants en Master Recherche
- 2008—2010** **Tuteur d’une étudiante pour la fondation la Dépêche**
- 2008—2009** **Membre du bureau de l’association des personnels non-permanents du Laboratoire de Génie Chimique à Toulouse**
 ▸ Représentant des doctorants pour le site web du LGC

3 Communications scientifiques

3.1 Revues à comité de lecture

1. **A. Saxena, J.-S. Kroll-Rabotin, R.S. Sanders, 2022**
Numerical investigation of the respective roles of cohesive and hydrodynamic forces in aggregate restructuring under shear flow.
 Journal of Colloid and Interface Science, 608(1):355–365
2. **J.-P. Bellot, J. Jourdan, J.-S. Kroll-Rabotin, T. Quatravaux, A. Jardy, 2021**
Thermal behavior of Ti-64 primary material in electron beam melting process.
 Materials, 14(11):2358
3. **J.-S. Kroll-Rabotin, M. Gisselbrecht, B. Ott, R. May, J. Fröhlich, J.-P. Bellot, 2020**
Multiscale simulation of non-metallic inclusion aggregation in a fully resolved bubble swarm in liquid steel.
 Metals, 10(4):517
4. **M. Gisselbrecht, J.-S. Kroll-Rabotin, J.-P. Bellot, 2019**
Aggregation kernel of globular inclusions in local shear flow: application to aggregation in a gas-stirred ladle.
 Metallurgical Research and Technology, 116:512

5. **Q. Dehaine, Y. Foucaud, J.-S. Kroll-Rabotin, L.O. Filippov, 2019**
Experimental investigation into the kinetics of Falcon UF concentration: implications for fluid dynamic-based modelling.
 Separation and Purification Technology, 215:590–601
6. **J.-P. Bellot, J.-S. Kroll-Rabotin, M. Gisselbrecht, M. Joishi, A. Saxena, R.S. Sanders, A. Jardy, 2018**
Toward better control of inclusion cleanliness in a gas stirred ladle using multiscale numerical modelling.
 Materials, 11(7):1179
7. **J.-S. Kroll-Rabotin, R.S. Sanders, 2014**
Implementation of a model for Falcon separation units using continuous size-density distributions.
 Minerals Engineering, 62:138–141
8. **J.-S. Kroll-Rabotin, F. Bourgeois, É. Climent, 2013**
Physical analysis and modelling of the Falcon concentrator for ultrafines beneficiation.
 International Journal of Mineral Processing, 121:39–50
9. **J.-S. Kroll-Rabotin, F. Bourgeois, É. Climent, 2012**
Experimental validation of a fluid dynamics based model of the UF Falcon concentrator in the ultrafine range.
 Separation and Purification Technology, 92:129–135
10. **J.-S. Kroll-Rabotin, F. Bourgeois, É. Climent, 2011**
Beneficiation of concentrated ultrafine suspensions with a Falcon UF concentrator.
 CIM Journal, 2(4):189–199
11. **J.-S. Kroll-Rabotin, F. Bourgeois, É. Climent, 2010**
Fluid dynamics based modelling of the Falcon concentrator for ultrafine particle beneficiation.
 Minerals Engineering, 23(4):313–320

3.2 Congrès internationaux avec actes longs

1. **International Conference on Multiphase Flow 2019**
 Rio de Janeiro, Brésil
 M. Gisselbrecht, J.-P. Bellot, J.-S. KROLL-RABOTIN : *Finite-Reynolds hydrodynamic interactions between particles in a shear flow : impact on cross section and collision efficiency.*
2. **International Mineral Processing Congress 2018**
 Moscou, Russie
 Q. DEHAINE, Y. Foucaud, C. Eswaraiah, J.-S. Kroll-Rabotin, L.O. Filippov
Experimental investigations into the kinetics of centrifugal Falcon UF separation.
3. **International Conference on Computational Fluid Dynamics In the Oil & Gas, Metallurgical and Process Industries 2017**
 Trondheim, Norvège
 A. SAXENA, J.-S. Kroll-Rabotin, R.S. Sanders
A numerical approach to model aggregate restructuring in shear flow using DEM in lattice Boltzmann simulations.

4. International Conference on Multiphase Flow 2016

Florence, Italie

J.-S. KROLL-RABOTIN, J. Ngoma

Numerical study of aggregation dynamics with a lattice Boltzmann method coupled with discrete elements through flow penalization.

5. Computational Modelling 2013

Falmouth, Royaume-Uni

J.-S. KROLL-RABOTIN, R.S. Sanders

Representation of particle size and density distributions using polynomial functions to simulate multiphase flows.

6. Physical Separation 2013

Falmouth, Royaume-Uni

J.-S. KROLL-RABOTIN, R.S. Sanders

Validation of a predictive model for industrial scale Falcon concentrators.

7. Fluid Particle Separation 2010

Lyon, France

J.-S. KROLL-RABOTIN, F. Bourgeois, É. Climent

Experimental validation of an analytical UF Falcon concentrator model for ultrafine particle beneficiation.

8. Physical Separation 2009

Falmouth, Royaume Uni

J.-S. KROLL-RABOTIN, F. Bourgeois, É. Climent

Fluid dynamics based modeling of the Falcon concentrator for ultrafine particle beneficiation.

3.3 Autres congrès internationaux

1. International Conference on Multiphase Flow 2019

Rio de Janeiro, Brésil

M. JOISHI, J.-S. Kroll-Rabotin, J.-P. Bellot : *Numerical study of inclusion deposition in a fully developed turbulent boundary layer of liquid metal on a ladle wall.*

2. International Conference on Multiphase Flow 2019

Rio de Janeiro, Brésil

A. SAXENA, J.-S. Kroll-Rabotin, R.S. Sanders : *Numerical study of aggregate restructuring and breakage at finite Reynolds number conditions.*

3. International Conference on Computational Fluid Dynamics in the Minerals and Process Industries 2012

Melbourne, Australie

J.-S. KROLL-RABOTIN, R. Sungkorn, S.A. Hashemi, J.J. Derksen, R.S. Sanders

Large eddy simulation of a solid-liquid fluidized bed using the lattice-Boltzmann method and a soft-sphere collision model.

3.4 Congrès nationaux

1. **SFGP 2022 (Société Française de Génie des Procédés)**
Toulouse, France
J.-S. KROLL-RABOTIN, M. Joishi, M. Gisselbrecht, J.-P. Bellot : *Comportements locaux d'inclusions dans les réacteurs métallurgiques : agrégation et dépôt aux parois*. Keynote.
2. **Matériaux 2018**
Strasbourg, France
M. GISELBRECHT, J.-S. Kroll-Rabotin, J.-P. Bellot : *Simulation multiéchelle de cinétiques d'agrégation d'inclusions lors du procédé de flottation d'un métal liquide*.
3. **Matériaux 2018**
Strasbourg, France
M. JOISHI, J.-S. Kroll-Rabotin, J.-P. Bellot : *Numerical study of inclusion deposition in a fully developed turbulent boundary layer of liquid metal on a ladle wall*.
4. **Canadian Chemical Engineering Conference 2012**
Vancouver, Colombie Britannique, Canada
M. SAADAT, J.-S. Kroll-Rabotin, S.I.A. Shah, R.S. Sanders
Validation of floc size measurements made with Sysmex Flow Particle Image Analyzer (FPIA)
5. **Canadian Mineral Processors 2011**
Ottawa, Ontario, Canada
J.-S. KROLL-RABOTIN, F. Bourgeois, É. Climent
Beneficiation of concentrated ultrafine suspensions with a Falcon UF concentrator.

3.5 Autres présentations orales

- ▶ **Journées scientifiques du GDR MorPhéA « Morphologie et Phénomènes d'Agrégation »**
2022 *Multivariate population balance modeling of inclusion population in liquid metal processes*.
2021 *Comportements locaux d'inclusions dans les réacteurs métallurgiques : dépôt aux parois et agrégation dans un train de bulles*.
2020 *Numerical investigation of aggregate behavior in shear flow in low and finite Reynolds number conditions*.
2019 *Finite-Reynolds hydrodynamic interactions between particles in a shear flow : impact on collision cross section and efficiency*.
2018 *Numerical investigations on aggregate restructuring in shear flow : impact of hydrodynamic interactions on their morphology*.
- ▶ **European workshop on "Inclusion cleanliness", 2019, Nancy**
Impact of local hydrodynamics on the efficiency of shear driven aggregation between inclusions during flotation.
- ▶ **Café simu, 2019, Institut Jean Lamour (IJL), Nancy**
Flua : LBM+IBM+DEM simulation framework.
- ▶ **Journées thématiques « Morphologie et Agrégation »**
2016 *Inclusion behaviours in metallurgical reactors : aggregation and capture*.

2015 *Accounting for the morphology of primary inclusions in simulations of inclusion aggregation in liquid metals : liquid solid coupling in a lattice Boltzmann method.*

2014 *Determination of interaction kernels between inclusions in metallurgical processes via simulations at mesoscopic scale.*

- ▶ **FERMaT-INPACT-GIMFUS**, 2010, *Séville, Espagne*
Rencontres des groupes de recherche en mécanique des fluides
- ▶ **Séminaires du département Génie des Interfaces et Milieux Divisés (GIMD)**, 2007—2010, Laboratoire de Génie Chimique (LGC), *Toulouse*

3.6 Poster

- ▶ **SFGP 2009 (Société Française de Génie des Procédés)**
Marseille, France
J.-S. KROLL-RABOTIN, F. Bourgeois, É. Climent

3.7 Autres productions scientifiques

- ▶ **Logiciel de simulation numérique Flua**
J.-S. Kroll-Rabotin, Y. Souhar
 - ▶ Déclaration d'invention à l'Agence pour la Protection des Programmes (APP) sous le numéro d'enregistrement IDDN.FR.001.380017.000.S.P.2020.000.10000.
 - ▶ Distribution sous licence CeCILL v2.1

Activités d'enseignement et responsabilités administratives

II

Résumé

Enseignement	Établissement	Période	Volume
Rédaction avec L ^A T _E X (TD)	ENSIACET	2009, 2010	20 hTD L3
Mécanique des Fluides (TP)	IUT GP-GC Toulouse	2009, 2010	64 hTP L2
Mécaniques des FLuides (CM+TD)	Univ. of Alberta	2013	1 semestre
Formation Ingénieur Civil des Mines	Mines Nancy	2013–auj.	≥ 192 heTD / an
▶ <i>Mécanique des Milieux Continus Solides et Fluides</i> (TD) ▶ <i>Dynamique des Fluides</i> (TD) ▶ <i>Turbulence</i> (TD) ▶ <i>Couches Limites et Rayonnement</i> (TD) ▶ <i>Modélisation et Simulation d'Instruments de Musique</i> (CM+TD) ▶ <i>Mécanique des Fluides pour l'Ingénieur</i> (CM+TD) ▶ <i>Marchés de l'Énergie et de l'Environnement</i> (CM+TD)			
Encadrement	Établissement	Période	Type
Niveau M1			
Quentin Champdoizeau	Mines Nancy	2017–2018	Parcours recherche
Gabriel Dabadie	Mines Nancy	2018–2019	Parcours recherche
Amandine Martin-De Bazelaire	Mines Nancy	2020	Stage 2A (3 mois)
Gaël Boucher	Mines Nancy	2020–2021	Parcours recherche
Thomas Zielinski	Mines Nancy	2020–2021	Parcours recherche
Niveau M2			
Petros Kasaira Mubari	Fac. Sc. Tech. Nancy	2019	Stage PFE (6 mois)
Joël Guilherme	Mines Nancy	2021	Stage PFE (6 mois)
Isibert Marcel Nkenfack	Fac. Sc. Tech. Nancy	2022	Stage PFE (6 mois)
Ricardo Andrade Rossi	Univ. of Alberta	2022	Thèse de Master
Doctorat			
Matthieu Gisselbrecht	Univ. Lorraine	2016–2019	Co-dir. J.-P. Bellot
Manoj Joishi	Univ. Lorraine	2016–2019	Co-dir. J.-P. Bellot
Akash Saxena	Univ. of Alberta	2016–2021	Co-dir. R.S. Sanders
Quentin Champdoizeau*	Univ. of Alberta	2021–2023	Co-dir. H. Henein
Widad Ayadh*	Univ. Lorraine	2021–2024	Co-dir. J.-P. Bellot
Hamid Bellache*	Univ. Lorraine	2022–2025	Co-dir. P. Chapelle
Post-doctorat			
Youssef Souhar	Institut Jean Lamour	2015	
Jeff Ngoma	Institut Jean Lamour	2015–2016	
Ashok Das	Institut Jean Lamour	2022–...	

* thèse en cours, année de soutenance estimée

Sommaire

1	Enseignements	11
1.1	Vacations	11
1.2	Chargé de cours magistraux et TD à l'Université d'Alberta . . .	11
1.3	Maître de Conférences à Mines Nancy	12
2	Formation par la recherche	12
2.1	Projets d'élèves	12
2.2	Stagiaires ingénieurs et master	14
2.3	Doctorants	15
2.4	Post-doctorants	16
3	Responsabilités	17
3.1	Conseils	17
3.2	Labex DAMAS2	17
3.3	Comité de pilotage GDR MorPhéA	18
3.4	Animation scientifique SI2M	18
3.5	Organisation du colloque "Inclusion Cleanliness"	18

1 Enseignements

1.1 Vacations

Bien que mon contrat de doctorant ne comprenait pas de charge d'enseignement, par goût pour cette activité et par volonté de poursuivre ensuite avec une carrière d'enseignant-chercheur, j'ai sollicité les enseignants dans mon environnement pour effectuer des vacations d'enseignement pendant mes années de thèse.

1.1.1 TP de Mécanique des Fluides à l'IUT GP-GC Toulouse

J'ai encadré et évalué les travaux pratiques de mécanique des fluides à l'IUT Génie des Procédés et Génie Chimique de Toulouse, deux années consécutives soit 64 heures, à raison de 32 heures par année. Par groupe de deux ou trois, les élèves devaient étudier dix installations, une par séance. Les sujets de TP couvraient les technologies de pompes, les technologies de robinets et vannes, l'étude d'une turbopompe, le couplage de pompes, les pertes de charge singulières et régulières, la transition à la turbulence dans un canal ainsi que l'étude d'un robinet, d'un tube de Pitot, d'un Venturi et d'un diaphragme.

1.1.2 TD de rédaction avec $\text{\LaTeX}$ à l'ENSIACET, INP Toulouse

Pendant deux années consécutives, j'ai encadré les travaux dirigés de composition de documents avec le logiciel $\text{\LaTeX}$ à l'École Nationale Supérieure d'Ingénieurs en Arts Chimiques Et Technologiques de Toulouse, ce qui a représenté un volume horaire de 10 heures de TD par an, soit 20 heures au total. Avant leur première séance de TD, l'outil avait été présenté aux étudiants pendant une séance de cours et les étudiants avaient ensuite pour consigne de l'utiliser pour rédiger un rapport à choisir parmi leurs autres travaux dans d'autres matières.

1.2 Chargé de cours magistraux et TD à l'Université d'Alberta

Pendant mon post-doctorat à l'Université d'Alberta, j'ai assuré la moitié des enseignements du semestre dans le cours de « Mécanique des Fluides » au niveau licence dans le département « Chemical and Materials Engineering ». Ces enseignements recouvraient à la fois des cours magistraux devant une classe de 120 élèves et des séminaires en demi-classe, soit 60 élèves. Ces séminaires sont l'équivalents de travaux dirigés en classe relativement nombreuse. L'enseignant est donc accompagné d'un assistant (en général un élève de niveau master ou doctorat). L'autre moitié des cours était assurée par mon superviseur de post-doctorat, nous avons donc construit ensemble le programme : l'ensemble des séances était organisé comme une suite logique, j'étais donc impliqué dans toutes les séances. À ce titre, j'ai aussi participé en tant qu'assistant aux séminaires que je n'animais pas personnellement.

1.3 Maître de Conférences à Mines Nancy

Depuis mon recrutement à Mines Nancy en tant que Maître de Conférences, j'assure un service d'enseignement annuel d'au moins 192 heures équivalent TD dans la Formation Ingénieur Civil des Mines (FICM). Le contenu de ce service a subi des changements assez significatifs pendant mes premières années, du fait d'évolutions pédagogiques. Depuis quelques années, il s'est stabilisé autour d'enseignements en TD en 1ère et en 2ème année de cycle ingénieur (mécanique des milieux continus, dynamiques des fluides, turbulence, transferts en couches limites et par rayonnement), et de la responsabilité d'un cours de mécanique des fluides en 2ème année dans lequel j'assure 10 séances sur 12 (soit 10 heures de cours magistraux et 20 heures de TD). Je suis aussi responsable d'un cours de 3ème année sur les marchés de l'énergie et de l'environnement et co-responsable d'un cours de 2ème année sur la simulation d'instruments de musique. Dans ces deux derniers cours, je n'assure qu'une partie des séances, les autres étant assurées par des collègues de spécialité différente (informatique notamment) et des intervenants extérieurs.

À la rentrée 2022, mon service d'enseignement va encore évoluer significativement puisque je vais reprendre le cours de Turbulence dans le département Énergie (dans lequel j'intervenais en TD auparavant) suite à une refonte des enseignements de mécanique des fluides amorcées dans le département. Je vais aussi abandonner le cours électif de Mécanique des Fluides pour l'Ingénieur et le remplacer par un cours d'Aéronautique, dans lequel je ne ferai personnellement plus que 4 séances pour laisser la place à des enseignements plus diversifiés liés à la thématiques (matériaux, informatique embarquée, enjeux économiques et environnementaux). Je resterai toutefois responsable du cours.

Je suis par ailleurs impliqué dans la vie du département Énergie auquel je suis rattaché en encadrant tous les ans des projets d'élèves (2A et 3A) et en participant aux suivis de stages, aux accompagnements de visites, aux jurys des soutenances de projets de fins d'études d'ingénieur, etc. Cette année, j'ai notamment organisé avec un collègue une semaine thématique sur l'hydrogène et la semaine de visites d'entreprise lors de laquelle nous avons emmené 24 élèves de 2A en Normandie. Je suis aussi le webmestre du site vitrine de ce département¹.

2 Formation par la recherche

Parmi mes missions en tant qu'enseignant-chercheur, la formation par la recherche est probablement celle dans laquelle je trouve le plus de plaisir. C'est pourquoi je propose tous les ans des projets d'élèves à différents niveaux, notamment via le « parcours recherche » récemment mis en place à Mines Nancy, qui offre l'opportunité à des élèves de 2ème année de cycle ingénieur de se consacrer à un projet de recherche pendant des créneaux répartis sur toute l'année.

2.1 Projets d'élèves

Je propose des projets d'élèves tous les ans, sur des sujets variés. J'en ai par exemple encadrés sur l'analyse des marchés du carbone et sur l'optimisation d'un four de cuis-

1. <https://energie.mines-nancy.univ-lorraine.fr>

son de poteries artisanales. Pour les élèves en première année à l'école, je propose aussi régulièrement des sujets plus ludiques pour mobiliser leurs connaissances scientifiques, comme la fabrication de véhicules propulsés par des tapettes à souris avec différents objectifs (plus long trajet, véhicule le plus rapide, etc). J'ai été responsable du pilotage de l'ensemble des projets scientifiques de première année pendant deux années scolaires de 2013 à 2015. Seuls sont détaillés ci-après les projets en lien avec mes activités de recherche.

2.1.1 Séparation physique avec un concentrateur Falcon

J'ai suivi deux élèves en parcours recherche, Gabriel Dabadie (2018–2019) et Gaël Boucher (2020–2021), tous deux sur un projet de modélisation de la séparation physique opérée par un concentrateur industriel Falcon dont la modélisation était au cœur de mon travail en doctorat au Laboratoire de Génie Chimique à Toulouse. J'ai encadré ces projets en collaboration avec Lev Filippov et ses doctorants au laboratoire GeoRessources. Ces parcours recherches d'élèves de 2ème année font suite à des projets d'élèves que j'ai encadrés en 3ème année FICM et en master Énergie de la faculté des Sciences et Technologies, par groupe de deux élèves, menés pendant les années scolaires 2016–2017 et 2017–2018. Ces projets et le premier parcours recherche se sont concentrés sur des campagnes expérimentales via la plateforme STEVAL², sur des minerais modèles en vue de développer un modèle phénoménologique prédictif de la séparation. Le second parcours recherche n'a pas pu réaliser de mesures expérimentales car le projet a démarré alors que les élèves étaient confinés chez eux pour cause de crise Covid19. Il a par contre permis d'avancer sur la modélisation de la séparation et sur sa résolution numérique. La crise Covid19 a aussi perturbé le déroulement du projet d'élèves de troisième année qui n'ont pas pu mener de nouvelles expériences, mais ils ont analysé les résultats d'expériences passées et ont développé une méthodologie et un outil d'analyse d'image pour traiter les données de microscopie qui servira à l'analyse des résultats d'expériences futures. En effet, je proposerai une suite à ces projets à la rentrée 2022 avec Yann Foucaud, qui a obtenu un poste à GeoRessources cette année.

Approche	Type de projet	Niveau	Année
Expérimentale	Projet d'élèves	3A FICM / M2	2016–2017
Expérimentale	Projet d'élèves	3A FCIM / M2	2017–2018
Expérimentale et modélisation	Parcours recherche	2A FICM	2018–2019
Modélisation et numérique	Parcours recherche	2A FICM	2020–2021
Expérimentale et modélisation	Projet d'élèves	3A FICM / M2	2021–2022

2.1.2 Perméabilité de milieux poreux

Avec mon collègue Miha Založnik de l'équipe « Solidification » à l'IJL, nous avons encadré des élèves sur des mesures de perméabilité par simulation numérique. L'idée derrière ces projets est d'exploiter la capacité des simulations LBM à représenter des géométries complexes pour simuler des écoulements autour de dendrites de solidification et de

2. <https://georessources.univ-lorraine.fr/fr/content/steval>

calibrer la perméabilité apparente de modèles moyennés de dendrites. Nous avons commencé avec un parcours recherche (Quentin Champdoizeau), puis des projets d'élèves en groupe pour quantifier l'effet du confinement sur un milieu poreux. Au départ le milieu poreux était un milieu modèle composé de sphères puis au fur et à mesure des années les projets ont commencé à travailler avec des géométries de dendrites obtenues par d'autres méthodes de simulation, telles que du champ de phase.

Projet	Niveau	Année
Parcours recherche	2A FCIM	2017–2018
Projet d'élèves	2A FICM	2018–2019
Projet d'élèves	2A FICM	2019–2020
Parcours recherche	2A FICM	2021–2022

2.1.3 Simulation numérique de solides transportés dans une phase liquide

En périphérie des sujets de recherche menés par les étudiants en master et en doctorat que j'ai encadrés, j'ai proposé des sujets de projets aux élèves de Mines Nancy utilisant les mêmes outils numériques et des approches similaires. Par exemple, alors qu'un doctorant avait simulé les interactions entre particules dans un écoulement cisaillé, les élèves ingénieurs ont mené une démarche analogue sur les interactions pilotées par la sédimentation différentielle des particules en utilisant le même code, mais pour un problème dépendant de moins de paramètres.

En parallèle des projets sur la séparation physique avec un concentrateur Falcon que je propose avec GeoRessources, j'ai aussi proposé des projets sur la modélisation de séparateurs de type « jig » par une approche numérique utilisant les mêmes outils de simulation.

Sujet	Type de projet	Niveau	Année
Collision par sédimentation différentielle	Projet d'élèves	2A FCIM	2018–2019
Collision par sédimentation différentielle	Projet d'élèves	2A FCIM	2019–2020
Séparation physique par "jigging"	Projet d'élèves	2A FICM	2019–2020
Séparation physique par "jigging"	Projet d'élèves	3A FICM	2021–2022

2.2 Stagiaires ingénieurs et master

J'ai encadré deux stagiaires à l'IJL. Amandine Martin–De Bazelaire, alors élève ingénieure en deuxième année à Mines Nancy, a effectué un stage de trois mois durant l'été 2020, sur la distribution de forces qui s'exercent sur un grain dendritique dans un écoulement pour déterminer des modèles de perméabilité à l'échelle du grain. Ce stage, co-encadré par Miha Založnik à l'IJL, faisait suite à projet d'élèves sur un sujet proche. Bien qu'Amandine Martin–De Bazelaire avait aussi effectué son projet d'élève avec moi, celui-ci était sur un autre sujet : la séparation physique par « jigging ». Sur la simulation d'écoulements autour de dendrites, Miha Založnik et moi encadrons à nouveau un stagiaire en 2022, au niveau Master cette fois.

L'étude de la séparation physique par « jigging » est une activité que j'ai commencée pour répondre à une sollicitation de la société hollandaise *Royal IHC* qui fabrique et vend des « jigs », séparateurs physiques pour l'industrie minière. Dans le cadre de la simulation du procédé pour *Royal IHC*, Petros Kasaira Mubari a effectué son projet de fin d'études de master (FST Nancy) sur ce sujet. Ayant démontré la faisabilité de telles simulations pour capturer la physique du procédé, il a mis en place une approche de simulation qui a été poursuivie ensuite via des projets d'élèves ingénieurs présentés en section 2.1.3.

Dans le cadre de mes collaborations avec le groupe de recherche sur les Procédés de Transport en Pipeline à l'Université d'Alberta, je suis aussi co-encadrant de Ricardo Andrade Rossi, avec le professeur Sanders (U of A). Ricardo travaille à l'interprétation de résultats expérimentaux d'agrégats soumis à des écoulements cisailés, en utilisant des bilans de populations dans lesquels sont injectés des modèles de restructuration et de fragmentation développés à partir des travaux de thèse d'Akash Saxena, précédent étudiant en thèse co-encadré par R.S. Sanders et moi, dont le travail est présenté plus en détail dans le chapitre III.

J'ai aussi co-encadré avec deux collègues le stage de Joël Guilherme sur la vulgarisation scientifique pour le département Sciences et Ingénierie des Matériaux et Métallurgie (SI2M) de l'IJL, dans le cadre de mes activités d'animation scientifique décrites à la section 3.4.

Stagiaire	Type de stage	Durée	Année
Amandine Martin-De Bazelaire	2A FICM	3 mois	2020
Petros Kasaira Mubari	M2 FST	6 mois	2019
Joël Guilherme	3A FICM	6 mois	2021
Ricardo Andrade Rossi	Master U of A	1 an	2021–2022
Isibert Marcel Nkenfack	M2 FST	6 mois	2022

2.3 Doctorants

À ce jour, j'ai co-encadré deux thèses avec Jean-Pierre Bellot, de la même équipe que moi à l'Institut Jean Lamour, celles de Manoj Joishi et Matthieu Gisselbrecht, toutes deux démarrées au printemps 2016 et soutenues en 2019. Ayant maintenu des interactions étroites en recherche suite à mon post-doctorat à l'Université d'Alberta avec le professeur Sean Sanders, j'ai aussi co-encadré avec lui la thèse d'Akash Saxena. D'abord inscrit comme étudiant en master à U of A, après avoir validé ses cours, Akash Saxena a commencé son projet de recherche en 2016 puis passé avec succès un examen de « candidacy » qui lui a permis de poursuivre ce travail directement en doctorat. C'est pourquoi bien qu'Akash Saxena a passé un an à Nancy, sous ma direction, à la même période où démarraient les autres thèses terminées depuis, il a soutenu la sienne plus tard, en 2021. N'étant pas habilité à diriger les recherches, ce co-encadrement effectif n'était pas reconnu administrativement à l'UL et le doctorant n'était inscrit qu'à l'Université d'Alberta. Le contenu scientifique de ces trois thèses est présenté dans la section 3 du chapitre III.

Quentin Champdoizeau, ayant confirmé son goût pour la recherche en parcours recherche à Mines Nancy, a aussi commencé en master à U of A et poursuit en doctorat. Pro-

fitant des bonnes relations entre l’UL et U of A, notamment celles entres les chercheurs de mon équipe à l’IJL avec le professeur Hani Henein, je suis co-encadrant de cette thèse. Le professeur H. Henein étant responsable des relations internationales dans le « Department of Chemical and Materials Engineering » à U of A, ce co-encadrement est aussi l’occasion pour nous de mettre en place un accord cadre entre les deux universités pour formaliser ce type de co-encadrement sous la forme de co-tutelles. Cet accord cadre a été rédigé et validé et est actuellement en cours de signature par les différentes instances impliquées dans les deux universités. Comme la signature de ces accords est une condition préalable à la mise en place d’accords de co-tutelles, la thèse de Quentin Champdoizeau, bien que témoignant des collaborations étroites entre nos université, n’est pas une co-tutelle. Ce travail de recherche porte sur la mesure des propriétés physiques (viscosité, masse volumique, tension de surface, etc) et leur dépendance à la température pour des liquides à haute température tels que des métaux liquides ou des laitiers métallurgiques.

Dans le cadre du projet ANR–PIA4 TIARE, je co-encadre aussi depuis octobre 2021 la thèse de Widad Ayadh sur l’étude du procédé de recyclage d’alliages de titane par fusion plasma (PAMCHR) pour application aéronautique. Ce projet réunit l’Institut de Recherche Technologique « Matériaux Métallurgie et Procédés » (IRT-M2P), Safran, Aubert&Duval via ÉcoTitanium et l’Institut Jean Lamour.

À partir d’octobre 2022, je co-encadrerai un nouveau doctorant, Hamid Bellache, sous la direction de Pierre Chapelle, chercheur CNRS dans mon équipe à l’IJL. Cette thèse se situera dans la continuité de celle de Manoj Joishi que j’ai co-encadrée avec Jean-Pierre Bellot, et s’intéressera plus spécifiquement au dépôt d’inclusions aux surfaces libres dans les procédés d’affinage.

Doctorant	Université	Période
Matthieu Gisselbrecht	Université de Lorraine	2016–2019
Manoj Joishi	Université de Lorraine	2016–2019
Akash Saxena	University of Alberta	2015–2021
Quentin Champdoizeau*	University of Alberta	2021–2023
Widad Ayadh*	Université de Lorraine	2021–2024
Hamid Bellache*	Université de Lorraine	2022–2025

* thèse en cours, année de soutenance estimée

2.4 Post-doctorants

Pour démarrer mon projet de recherche à mon arrivée à l’IJL, j’ai encadré deux post-doctorants. Jeff Ngoma, venait de soutenir sa thèse à l’Université d’Aix-Marseille sur la fluidisation de milieux granulaires par une méthode de Boltzmann sur réseau, appliquée aux écoulements souterrains. Il a travaillé pendant un an avec moi sur les frontières immergées. Youssef Souhar a aussi été en contrat post-doctoral pendant 3 mois avec moi pour travailler sur le code simulation *Flua*, notamment sur les modèles de couplage pour une phase dispersée représentée par des particules ponctuelles. Bien que son contrat ait été très court, ses contributions ont intégré la branche principale du code et y sont toujours utilisées.

Sur un autre sujet, Ashok Das travaille sur les bilans de populations multivariées pour représenter les populations inclusionnaires dans les réacteurs métallurgiques. En effet, les mécanismes d'agrégation, germination et croissance de ces inclusions dépendent de plusieurs propriétés distinctes des inclusions (taille, morphologie, composition chimique), nous cherchons donc à représenter des populations distribuées selon plusieurs de ces grandeurs dans les simulation de procédés d'élaboration. Actuellement en contrat pour 1 an, Ashok Das devrait rester une année de plus en post-doctorat avec moi pour appliquer des bilans de populations multivariées dans le cadre d'un projet dans le PEPR Recyclage ciblé « Métaux stratégiques ».

Contractuel post-docorat	Période
Youssef Souhar	2015
Jeff Ngoma	2015–2016
Ashok Das	2022–...

3 Responsabilités

Depuis mon recrutement à Nancy en 2013, je me suis progressivement impliqué dans de plus en plus d'instances à différents niveaux, prenant des responsabilités administratives et d'animation scientifique.

3.1 Conseils

Conseil d'École de Mines Nancy

De 2016 à 2021, j'ai siégé au Conseil d'École de Mines Nancy, où sont notamment votés les budgets, les plans stratégiques de l'école et la nomination des directeurs. J'y étais en tant que représentant élu des personnels enseignants Maître de Conférences et Professeurs Agrégés, avec quatre autres représentants pour cette même catégorie. Bien qu'à nouveau sur une liste qui s'est présentée pour les élections de 2021, j'y étais à un rang avec des chances très ténues d'être élu, afin de laisser la place à de nouveaux représentants, et je n'y siége donc plus.

Conseil d'Unité de l'Institut Jean Lamour

En 2022, j'ai été élu comme représentant au Conseil d'Unité de l'IJL, en tant que suppléant de Pierre Chapelle, collègue qui appartient à la même équipe de recherche que moi.

3.2 Labex DAMAS2

Lors de la reconduction du Labex *Design des Alliages Métalliques pour l'Allègement des Structures* (DAMAS) en 2019 jusqu'en 2024, l'organisation interne de ce Labex a été renouvelée et il est désormais divisé en quatre axes, chacun subdivisé en sous-axes. Depuis

2019, je suis responsable du sous-axe « *Process simulation* » de l'axe « *Multiscale modelling and simulations* ».

3.3 Comité de pilotage GDR MorPhéA

J'ai été impliqué dès le départ dans la création du GDR Morphologie et Phénomènes d'Agrégation (MorPhéA), qui rassemble des chercheurs en génie des procédés et en mathématiques appliquées. Je faisais déjà partie des participants à une série de séminaires informels sur ce thème et j'ai souhaité associer mon laboratoire au GDR dès que celui-ci a émergé des rencontres informelles qui avaient déjà lieu régulièrement. À ce titre, j'ai été membre du comité scientifique dès la création, et depuis 2020, je suis membre du comité de pilotage. En 2021, j'ai été chargé de l'organisation des rencontres annuelles du GDR qui se sont tenues à Nancy en octobre, avec transmission vidéo en ligne en direct.

Le GDR arrivant à sa fin cette année (2022), je suis impliqué dans sa poursuite sous la forme d'un Réseau Thématique dont je participe à la rédaction du dossier. Si notre demande de formalisation d'un Réseau Thématique MorPhéA est validée par le CNRS, je serai membre de son comité de direction avec Johan Debayle (Laboratoire Georges Friedel : Matériaux, Mécanique, Procédés – UMR 5307) et Christine Frances (Laboratoire de Génie Chimique – UMR 5503).

3.4 Animation scientifique SI2M

Plus localement, je suis aussi membre de l'équipe d'animation scientifique du département SI2M à l'IJL. Cette équipe rassemble cinq personnes en charge d'organiser la communication du département en interne comme vers l'extérieur. À ce titre, je participe à l'organisation de séminaires mensuels où sont présentées des activités de recherche d'invités ou de membres du département. Je me suis particulièrement impliqué dans la mise en place de pages web personnelles pour les personnes du département et d'une exposition de photographies grand format à partir des activités menées dans le département, affichées dans le couloir dans lequel sont regroupés nos bureaux. Parmi les projets auxquels j'ai participé comptent aussi l'installation d'une exposition permanente à l'IJL sur le thème de la métallurgie et la participation de l'IJL aux événements organisés par la mairie de Nancy pour les 250 ans de la mort de Jean Lamour, en 2021. Dans ce cadre, j'ai co-encadré avec deux collègues le stage de fin d'étude d'ingénieur de Joël Guilherme, sur le sujet de la vulgarisation scientifique pour le département SI2M de l'IJL.

3.5 Organisation du colloque "Inclusion Cleanliness"

J'ai été co-organisateur du colloque "Inclusion Cleanliness" qui a clos le projet ANR PRCI FLOTINC, en collaboration entre l'IJL, le laboratoire SPIN de Mines Saint-Étienne, la Technische Universität Dresden et le Helmholtz Zentrum Dresden-Rossendorf, sur l'agrégation d'inclusions non-métalliques pendant le traitement en poche d'alliages métalliques. Ce workshop, organisé en novembre 2019, a rassemblé une cinquantaine de participants venus de toute l'Europe (notamment Allemagne, Autriche, France,

Italie, Norvège) pour dresser l'état de l'art des connaissances sur les comportements inclusionnaires.

Jean-Pierre Bellot, en tant que coordinateur du projet ANR FLOTINC, et moi-même, en tant que responsable du Work Package impliquant l'IJL, avons co-organisé ce colloque à Nancy.

Simulation des interactions et du
transport de particules dans une
phase liquide

III

Sommaire

1	Motivation scientifique	23
1.1	Aggrégats dans les procédés polyphasiques	23
1.2	Bilans de populations	25
1.3	Effets hydrodynamiques	27
2	Simulation numérique couplée de mécanique des fluides et de dynamique de particules solides	27
2.1	Cadriciel de simulation « Flua »	27
2.2	Méthode de Boltzmann sur réseau (LBM)	29
2.3	Méthode de frontière immergée (IBM)	32
2.4	Méthode des éléments discrets (DEM)	34
3	Applications au comportement de particules transportées dans un liquide	37
3.1	Agrégation d'inclusions pendant le traitement en poche	38
3.2	Restructuration et fragmentation d'agréats sous cisaillement	48
3.3	Dépôt d'inclusions aux parois d'un réacteur	54
4	Conclusion	62
5	Références	63

Depuis mon recrutement en tant que Maître de Conférences à l’Institut Jean Lamour, dans l’équipe « Procédés d’Élaboration », mon activité de recherche a été essentiellement consacrée à l’étude numérique de problèmes d’interactions et de transports de particules solides dans un liquide, avec comme principale application industrielle visée le contrôle de la propreté inclusionnaire dans les procédés de traitement en poche d’alliages métalliques. Dans le projet de recherche que j’avais présenté et qui a abouti à mon recrutement, j’avais mis en avant mon expérience avec les méthodes de Boltzmann sur réseau (Lattice Boltzmann Method, LBM) et des éléments discrets (Discrete Element Method, DEM) et j’avais proposé de m’intéresser aux méthodes de frontières immergées (Immersed Boundary Method, IBM) pour coupler les deux de manière complètement résolue (par opposition à un couplage par des modèles de forces de type trainée, portance, etc). Cette approche a permis de compléter les compétences de l’équipe en simulations de procédés (Daoud *et al.*, 2011) avec des simulations des phénomènes locaux, comme les interactions hydrodynamiques à l’échelle d’une paire d’inclusions.

1 Motivation scientifique

1.1 Aggrégats dans les procédés polyphasiques

Les inclusions sont des particules de nature chimique différente du métal liquide qui les transporte. Elles sont généralement solides, ou pâteuses voire liquides selon l’écart entre leur point de fusion et celui du métal environnant (Zhuo *et al.*, 2022). Comme les métaux sont des matériaux très denses, elles sont en général plus légères que le liquide qui les transporte (Van Ende, 2010). Les petites inclusions, qui descendent jusqu’au micron, résultent en général de la précipitation de solutés qui réagissent entre eux dans la phase liquide, tels que des carbures, oxydes, sulfures et éventuellement des nitrures. Bien que très petites au départ, ces inclusions s’agrègent entre elles et peuvent rapidement former des agrégats assez grands pour affecter de manière drastique les performances mécaniques des matériaux élaborés, notamment leur tenue en fatigue. En effet, les inclusions aux propriétés mécaniques différentes de la matrice sont des lieux de concentration de contraintes et donc d’amorce de fissures. Pour cette raison, les exigences industrielles en matière de propreté inclusionnaire sont particulièrement stricte, et un rôle important de l’affinage en poche est de contrôler les populations d’inclusions dans le métal liquide avant sa coulée et sa solidification.

En prenant l’exemple d’une poche d’acier agitée par injection d’argon schématisée à la Figure 1, l’évolution en taille et en nombre des inclusions est essentiellement régie par quatre mécanismes physiques :

- ▶ la sédimentation, du fait de la différence de masse volumique entre les inclusions et l’alliage liquide ;
- ▶ la capture aux interfaces, par dépôt sur les parois du réacteur ou piégeage dans le laitier en surface ;
- ▶ la flottation, par interception directe par les bulles de gaz ;
- ▶ leur agrégation, promue par les cisaillements locaux et la turbulence due à l’injection de gaz.

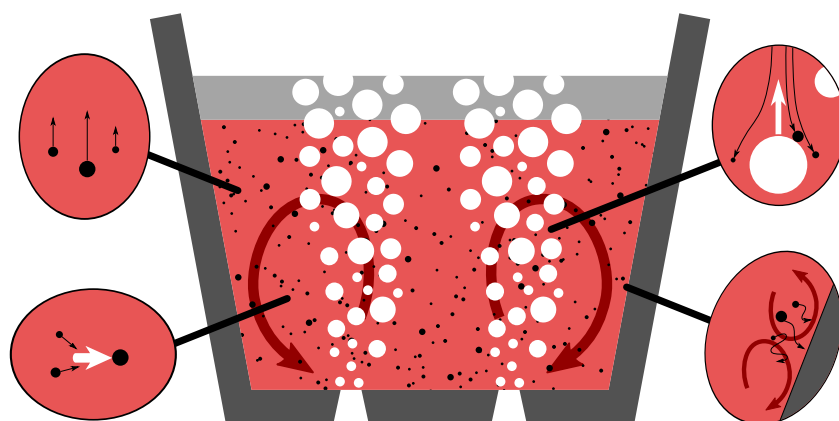


FIGURE 1 – Schéma d’une poche d’acier liquide agitée par injection d’argon via deux bouchons poreux en fond de poche mettant en évidence la sédimentation des inclusions, leur agrégation, leur dépôt aux interfaces et leur capture par flottation.

Les mécanismes de transport comme la sédimentation et de capture comme le dépôt aux parois ou l’interception par des bulles de gaz (flottation) sont d’autant plus efficaces que les inclusions sont grosses (Daoud *et al.*, 2011 ; Bellot *et al.*, 2018). Leur capacité à former des agrégats est donc mise à profit pour les extraire du métal liquide. La cinétique d’agrégation de telles inclusions est donc un paramètre clé pour contrôler la propreté inclusionnaire. Malheureusement, les études expérimentales à l’échelle de quelques inclusions sont difficiles du fait de l’opacité du milieu et de la nécessité d’opérer à haute température (Lappan *et al.*, 2021), et les études numériques ne sont devenues possibles que relativement récemment avec l’amélioration des performances des calculateurs.

Si l’agrégation entre petits agrégats se produit dans des conditions analogues à celle entre inclusions primaires, la croissance des agrégats en multiples étapes aboutit à une structure fractale des agrégats. En pratique, les conditions d’interaction varient avec la taille des objets (nombres de Reynolds et de Stokes, rapport de taille avec les échelles de turbulence) et les agrégats formés se restructurent, voire fragmentent sous l’action de la phase fluide qui les transporte. Ils atteignent donc des morphologies complexes qui résultent de nombreux paramètres (Van Ende, 2010), et leur morphologie elle même influence leur transport et leur interactions hydrodynamiques.

Dans ce contexte, les besoins en modélisation des comportements d’agrégats inclusionnaires se rapprochent beaucoup des problématiques similaires en génie chimique, procédés pharmaceutiques et traitement de l’eau qui traitent d’agrégats colloïdaux. De même, en génie minier et en génie pétrolier les suspensions polyphasiques mélanges d’argiles fines, de minerais, de gangues, de gouttes (de bitume par exemple) et de gaz ont des comportements rhéologiques fortement impactés par la structure des agrégats formés par les particules les plus fines. Les besoins communs en modèles physiques pour représenter les dynamiques locales dans les modélisations et simulations de tous ces procédés motivent des études sur les phénomènes fondamentaux qui régissent le comportement des agrégats.

Mon équipe à l’IJL a acquis une solide expertise sur le comportement inclusionnaire, à la fois expérimentale (Bellot *et al.*, 2012) et numérique. D’autres équipes en Europe,

notamment en Allemagne (TU Dresden) et en Autriche (U Johannes Kepler), sont spécialistes de la simulation numérique d'écoulements de métal liquide. Mon équipe s'en distingue par le couplage de telles simulations à des bilans de populations pour représenter les comportements inclusionnaires dans les procédés (Daoud *et al.*, 2011).

Le Christian Doppler Laboratory for Inclusion Metallurgy in Advanced Steelmaking à Leoben en Autriche dispose d'un très important parc expérimental pour étudier les inclusions, leur formation et leur évolution, ainsi que leurs impacts sur les propriétés finales des matériaux. D'autres équipes s'intéressent aux cinétiques de réactions et aux équilibres thermodynamiques entre métal et inclusions, dans le département Sustainable Materials Processing and Recycling (SeMPeR) de KU Leuven en Belgique et dans le département Materials Science and Engineering du KTH en Suède. Le Helmholtz Zentrum Dresden-Rossendorf en Allemagne dispose d'un parc expérimental très diversifié pour étudier les procédés impliquant du métal liquide en plus d'une expertise reconnue en techniques radiographiques pour l'observation de bulles et d'inclusions dans le métal liquide.

Dans ce paysage, les réactions chimiques qui gouvernent les populations d'inclusions ainsi que les aspects de mécanique des fluides liés aux écoulements polyphasiques de bulles de gaz et de métal liquide et au transport de particules dans ces écoulements, sont bien étudiés en Europe. Le manque qu'a identifié mon équipe et qui a justifié mon recrutement concerne l'étude des aspects mécaniques qui pilotent les comportements locaux des inclusions. En Europe, les spécialistes des bilans de population de Politecnico di Torino mènent en parallèle des études locales pour caractériser les comportements d'agrégats (Vanni et Baldi, 2002 ; De Bona *et al.*, 2014 ; Frungieri et Vanni, 2016 ; Frungieri *et al.*, 2020). De manière similaire, les modèles d'agrégation, de restructuration, de coalescence sont largement étudiés en France au LGC et à TBI à Toulouse et au LRGP à Nancy. Cependant, les inclusions dans les métaux liquides, de nature différente des produits pharmaceutiques ou de phases biologiques, ont des comportements spécifiques que ces recherches ne couvrent pas. Mon rôle dans ce contexte est donc d'enrichir les modèles de comportements mécaniques locaux spécifiques aux inclusions, notamment en prenant en compte leurs interactions hydrodynamiques.

1.2 Bilans de populations

La distribution en taille de particules dans une suspension évolue sous l'effet de plusieurs contributions : leur germination, leur croissance, leur agrégation, leur restructuration et leur fragmentation, et même leur éventuelle dissolution. Cette distribution devient stationnaire non quand les agrégats cessent d'évoluer mais quand les différentes contributions à leur évolution se compensent statistiquement. Par conséquent, il est souvent insuffisant de modéliser les agrégats solides dans les procédés avec des propriétés moyennes, une bonne capture des dynamiques à l'œuvre exigeant de prendre en compte la diversité des agrégats, au moins via leur distribution en taille, parfois aussi selon d'autres critères, comme leur nature chimique.

Les outils de modélisation par une approche statistique de l'évolution d'une population sont regroupés sous l'appellation « bilans de populations », une approche initiée par Smoluchowski (1918) dans laquelle l'évolution d'une distribution n est écrite comme la somme de termes sources qui modélisent les contributions à son évolution.

$$\frac{dn}{dt} = \sum S \quad (3.1)$$

Dans le cas d'une évolution couplée au transport, une représentation eulérienne de cette distribution abouti à un bilan de population exprimé en fonction du champ du vitesse des particules transportées

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} n = \sum S \quad (3.2)$$

où la vitesse $\vec{v}$ des particules est une fonction de la vitesse du liquide qui les transporte et des propriétés des particules, telles que leur masse et leur volume.

En suivant le formalisme de Smoluchowski (1918), l'agrégation peut être prise en compte avec un terme source qui préserve le volume global mais qui, pour chaque agrégat de volume $\mathcal{V}$ qu'il fait apparaître, en fait disparaître deux de volumes respectifs $\mathcal{V}'$ et $\mathcal{V} - \mathcal{V}'$.

$$S_{\text{agrégation}}(\mathcal{V}) = \underbrace{\frac{1}{2} \int_0^{\mathcal{V}} f(\mathcal{V}', \mathcal{V} - \mathcal{V}') d\mathcal{V}'}_{\text{apparition}} - \underbrace{\int_0^{\infty} f(\mathcal{V}, \mathcal{V}') d\mathcal{V}'}_{\text{disparition}} \quad (3.3)$$

où $f(\mathcal{V}_1, \mathcal{V}_2)$ est la fréquence d'agrégation par unité de volume entre deux particules de volumes respectifs $\mathcal{V}_1$ et $\mathcal{V}_2$, c'est-à-dire le nombre d'agrégations par unité de temps et de volume entre ces deux populations de particules avec

$$f(\mathcal{V}_1, \mathcal{V}_2) = \beta(\mathcal{V}_1, \mathcal{V}_2) n(\mathcal{V}_1) n(\mathcal{V}_2) \quad (3.4)$$

Dans l'équation (3.3) le terme d'apparition fait donc bien apparaître un agrégat de volume $\mathcal{V}$ pour chaque agrégation de particules de volume $\mathcal{V}'$ et $\mathcal{V} - \mathcal{V}'$ (comptée deux fois dans l'intégrale car f est symétrique, d'où le coefficient $\frac{1}{2}$). Le terme de disparition fait disparaître une particule de volume $\mathcal{V}$ pour chaque agrégation avec une autre particule de volume $\mathcal{V}'$.

Dans l'expression (3.4), la cinétique d'agrégation est pilotée par la fonction β , appelée « noyau d'agrégation », qui modélise les comportements locaux en quantifiant la probabilité d'agrégation qui en résulte. De la même manière, la restructuration et la fragmentation d'agrégats peuvent être modélisées au travers de tels noyaux. Il est même possible de représenter la capture des agrégats (aux parois ou par flottation par exemple) par des termes sources négatifs qui font disparaître des agrégats des populations transportées dans la phase liquide, ou de la germination avec des termes sources positifs. Tout comme le terme d'advection dans l'équation (3.2), chacune de ces contributions, à commencer par le noyau d'agrégation β , dépendent des propriétés locales de l'écoulement et de celles des particules, et non seulement de leur volume.

Conséquemment, les noyaux statistiques n'ont pas de valeur universelle. Malgré une littérature assez abondante proposant des noyaux de collision prêts à l'utilisation (Zaichik *et al.*, 2006, 2010; Singh *et al.*, 2011; Balakin *et al.*, 2012; Fayed et Ragab, 2013; Pumir et Wilkinson, 2016), les conditions réelles perçues par les particules dans les procédés sont tellement variées qu'il est difficile de les modéliser avec des noyaux génériques (Bellot *et al.*, 2018). Il en est de même pour les autres contributions, telles que la fragmentation et la restructuration (Saxena *et al.*, 2017). Pour le dépôt, la situation est un peu différente puisque le nombre d'études s'intéressant aux hydrosols est assez faible (Dupuy *et al.*, 2014, 2016) malgré des études plus nombreuses sur les aérosols (Tsai *et al.*, 2004; Guha, 2008; Mehel *et al.*, 2010).

1.3 Effets hydrodynamiques

Les trois principaux travaux de recherche que j’ai encadrés (Gisselbrecht, 2019; Joishi, 2019; Saxena, 2021) se sont chacun attachés à l’étude d’une contribution à l’évolution d’une population de particules avec la motivation de la modéliser sous forme d’un noyau statistique représentatif des procédés, avec comme principaux procédés visés la séparation physique des inclusions, et le transport d’argiles fines colloïdales dans les rejets d’exploitation des sables bitumineux. Dans ces procédés, les effets hydrodynamiques à l’échelle des particules sont difficiles à modéliser mais impactent significativement les cinétiques d’agrégation, de restructuration et de fragmentation des agrégats. En effet, ces travaux ont démontré que malgré la petite taille des inclusions non métalliques et des agrégats d’argiles fines, l’inertie du fluide à leur échelle n’est pas tout à fait nulle et les effets non-linéaires qu’elle induit impactent leur dynamique. Ainsi, il est important de prendre en compte ces effets hydrodynamiques pour modéliser le comportement des agrégats dans des conditions représentatives des procédés.

Les doctorants qui ont mené ces trois études ont utilisé une base commune de code de simulation, que je développe depuis mon arrivée à l’IJL. Outre les similarités entre les problèmes auxquels il se sont intéressés, l’utilisation d’un outil commun leur a permis de s’épauler les uns les autres pour se l’approprier puis de contribuer à son développement.

2 Simulation numérique couplée de mécanique des fluides et de dynamique de particules solides

Pour répondre aux besoins de simulations à l’échelle mésoscopique, dans lesquelles les dynamiques de quelques particules sont complètement résolues et couplées à la dynamique de l’écoulement, je développe le code de simulation *Flua*. C’est cet outil numérique qui a servi de base aux études pour lesquelles j’ai encadré mes trois premiers doctorants après mon recrutement en tant que Maître de Conférences à l’Université de Lorraine.

2.1 Cadriciel de simulation « Flua »

Flua est un code de calcul écrit essentiellement en Fortran. Au départ, le nom provient de la contraction du « F » de « flow » et de *Lua*, le langage de programmation développé à la *Pontificia Universidade Católica do Rio de Janeiro* (Ierusalimschy, 2016). Au départ, *Flua* devait pouvoir lire ses fichiers d’entrée et être programmable en *Lua*. L’utilisation de cet outil dans le cadre de projets de recherche menés par des doctorants l’a fait évoluer vers quelque chose de différent et, finalement, l’intégration d’un interpréteur *Lua* n’a pas dépassé le stade des essais préliminaires. En effet, ce qui a fait la force de *Flua*, c’est avant tout la facilité avec laquelle il permet d’être étoffé avec des modèles implémentés par les doctorants et avec laquelle il peut être adapté à des problèmes différents. Le surcoût en développements nécessaires pour rendre ces adaptations spécifiques accessibles depuis *Lua* aurait été un frein à sa prise en main par des étudiants dont le bagage en informatique n’est pas le premier critère de sélection. De plus, en tant que code de recherche, *Flua* est surtout exécuté sur des calculateurs scientifiques dans des conditions où les performances sont primordiales. Il est de fait recompilé et optimisé pour chacune de ses utilisations.

Puisque le code est compilé de toute façon par ses utilisateurs, il est plus simple pour eux de programmer directement en Fortran que de rajouter une couche d'interprétation dans un autre langage.

Au final, *Flua* n'est donc plus tant un logiciel qu'un cadriciel qui propose une riche bibliothèque de fonctions, de modules et d'objets qui peuvent être combinés pour résoudre un problème spécifique. Les objets utilisent la syntaxe Fortran objet définie dans le langage depuis le standard Fortran 2003 (Curcic, 2020). *Flua* fournit des fonctions de lecture/écriture de données et implémente plusieurs familles de méthodes numériques pour simuler des écoulements, des mouvements de solides et des suspensions dont les dynamiques des différentes phases sont couplées. Les algorithmes de résolution de ces méthodes sont implémentés en parallèle selon plusieurs méthodes (OpenMP; Message Passing Interface) combinables entre elles pour faire correspondre au mieux la répartition des calculs à la topologie du ordinateur sur lequel il tourne (mémoire partagée entre plusieurs cœurs ou cluster de machines). Le code est distribué sous forme de modules Fortran utilisables indépendamment ou en combinaison les uns avec les autres et est accompagné de quelques programmes d'exemple pour des cas d'usages simples et courants. Pour faciliter les collaborations avec des équipes externes à l'UL, en accord avec les services juridiques et valorisation de l'UL et de la SATT Sayens, le code est distribué sous licence CeCILL 2.1³, depuis avril 2020. Cette licence logicielle libre, compatible avec la GNU General Public Licence (versions 2 et 3) et adaptée au droit français, autorise les destinataires du code de *Flua* à le lire, l'exécuter, le modifier et le redistribuer.

Les modules de cœur du cadriciel *Flua* fournissent trois solveurs numériques principaux, illustrés en Figure 2, qui peuvent être utilisés de manière couplée ou non : une méthode de Boltzmann sur réseau (LBM) pour résoudre l'écoulement de fluides, une méthode des éléments discrets (DEM) pour la dynamique des particules et une méthode de frontière immergée (IBM) pour coupler la dynamique des particules à celle du fluide. En plus de fonctions utilitaires, des modèles physiques variés peuvent être utilisés en complément de ces méthodes, comme des modèles de dissipation pour la simulation aux grandes échelles d'écoulements turbulents (Large Eddy Simulation, LES).

3. <https://cecill.info/licences.fr.html>

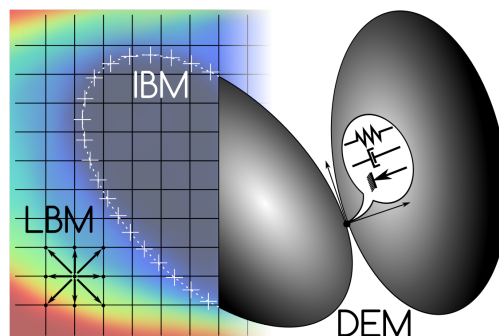


FIGURE 2 – Trois méthodes numériques forment le cœur du logiciel *Flua* : Boltzmann sur réseau (LBM: Lattice Boltzmann Method), éléments discrets (DEM: Discrete Element Method) et frontières immergées (IBM: Immersed Boundary Method).

2.2 Méthode de Boltzmann sur réseau (LBM)

Pour résoudre les écoulements de fluides, *Flua* implémente une méthode de Boltzmann sur réseau (Bhatnagar *et al.*, 1954) qui reprend celle détaillée par Eggels et Somers (1995). Cette méthode, bien qu'antérieure aux méthodes modernes regroupées sous le nom « Multiple Relaxation Time » (D'Humières *et al.*, 2002) en applique déjà les principes fondamentaux. En effet, comme toute LBM, elle approxime la redistribution de quantité de mouvement due aux collisions entre les différents éléments constitutifs d'un milieu dense par une relaxation vers une distribution à l'équilibre issue de la théorie cinétique des gaz. Cependant, à l'instar des méthodes MRT, les différents moments de la distribution sont relaxés différemment, ce qui permet de distinguer les moments qui ont un sens physique (masse, quantité de mouvement et énergie) de ceux qui apparaissent à cause de la discrétisation de l'équation de Boltzmann dans l'espace des vitesses mais sont inexistant dans Navier-Stokes. Au final, la méthode d'Eggels et Somers (1995) s'avère particulièrement stable et robuste pour de larges gammes de vitesse et de viscosité, comme les LBM-MRT, mais donne un sens plus physique aux valeurs des temps de relaxation, là où, dans les méthodes MRT, ils sont calibrés selon des critères mathématiques plus complexes (D'Humières *et al.*, 2002).

La méthode d'Eggels et Somers (1995) est reprise en détail dans l'article de Sungkorn et Derksen (2012) qui propose une extension de la méthode aux écoulements polyphasiques où la phase solide est modélisée par une fraction volumique solide représentée de manière eulérienne. Bien que cette extension n'ait pas été utile dans les travaux menés à ce jour, c'est cette implémentation qui est utilisée dans *Flua*. De la même manière, la méthode d'Eggels et Somers (1995) fait apparaître un tenseur des contraintes de sous-maille dans lequel il est aisé d'injecter un modèle de turbulence pour des simulations d'écoulements aux grandes échelles (LES). *Flua* fournit plusieurs modèles de dissipation pour la LES (Smagorinsky, 1963), mais ceux-ci ne sont pas utilisés dans les travaux détaillés par la suite. Les explications qui suivent ne présentent donc que l'implémentation monophasique sans tenseur des contraintes de sous-maille.

Le principe des méthodes de Boltzmann sur réseau est de calculer les échanges de matière entre nœuds d'un réseau, le long des liens qui forment le réseau et discrétisent l'espace des vitesses. Par exemple, dans la méthode d'Eggels et Somers (1995), le réseau tridimensionnel relie chaque nœud à 18 ses voisins tel que représenté en Figure 3. Comme

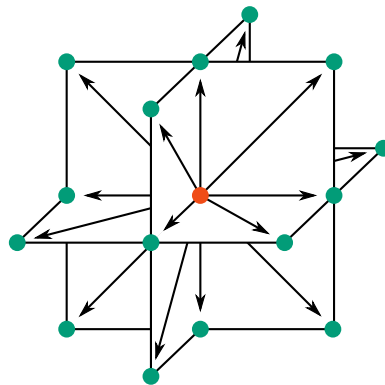


FIGURE 3 – Réseau « D3Q18 » à trois dimensions et 18 vitesses reliant chaque nœud du réseau (●) à 18 de ses voisins (●).

dans toute méthode de Boltzmann sur réseau explicite, l'équation de Boltzmann discrétisée dans l'espace des vitesses et intégrée en temps s'écrit

$$N_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = N_i(\vec{x}, t) + \Omega_i(N(\vec{x}, t)) \Delta t \quad (3.5)$$

où N est la distribution locale de masse par unité de volume discrétisée sur un ensemble fini de vitesses $\vec{c}_i$, avec ici $i \in \llbracket 1, 18 \rrbracket$, et Ω est l'opérateur de collision de la distribution N avec elle-même. Ainsi, les moments en vitesse de la distribution N correspondent aux grandeurs macroscopiques et ceux de Ω aux termes sources. Sans source ou puits de masse, les moments d'ordre 0 et 1 donnent les densités volumiques de masse et de quantité de mouvement.

$$\rho = \sum_i N_i \quad 0 = \sum_i \Omega_i \quad (3.6a)$$

$$\rho \vec{u} = \sum_i N_i \vec{c}_i \quad \frac{\vec{F}}{\mathcal{V}} = \sum_i \vec{c}_i \Omega_i \quad (3.6b)$$

Les moments d'ordre 2 sont liés à l'énergie, c'est leur évolution au cours de l'opération de collision qui va permettre de prendre en compte les effets visqueux, via une dissipation locale d'énergie.

$$\rho E = \sum_i \frac{1}{2} N_i \vec{c}_i^2 \quad \rho U = \rho E - \frac{1}{2} \rho \vec{u} \cdot \vec{u} \quad (3.6c)$$

La distribution N n'est ici discrétisée que sur 18 vitesses, il n'est donc pas possible de représenter avec précision des distributions quelconques. Heureusement, pour un milieu dense, la physique statistique indique que la distribution reste proche d'une distribution à l'équilibre. Pour simuler l'écoulement d'un milieu dense, il n'est donc nécessaire de représenter correctement que de faibles écarts à l'équilibre, ce pour quoi les 18 points de discrétisation s'avèrent suffisant. Cette hypothèse fondamentale justifie que les méthodes de Boltzmann sur réseau sont inadéquates pour résoudre l'équation de Boltzmann qui régit les écoulements à nombre de Knudsen non-infinésimal (Inamuro *et al.*, 1997). Cette discrétisation à granularité très grossière implique aussi que seul un nombre limité de moments de la distribution peuvent être capturés correctement. Du fait de cette limitation, les applications acoustiques et compressibles nécessitent des extensions à la méthode ou l'utilisation de réseaux reliant un point à davantage de ses voisins, dont des voisins indirects, pour augmenter le nombre de points de discrétisation (Guo *et al.*, 2020) et pouvoir restituer suffisamment de termes énergétiques.

Puisque la méthode est limitée au comportement de milieux denses, l'opération de collision peut être simplifiée en une simple relaxation vers l'état d'équilibre. En utilisant un temps de relaxation unique, l'opérateur de collision de Bhatnagar *et al.* (1954) est défini comme

$$\Omega_i^{\text{BGK}} = -\frac{1}{\tau} (N_i - N_i^{\text{eq}}) \quad (3.7)$$

où le taux de relaxation τ peut être relié à la viscosité par la relation $\nu = c^2(\tau - \frac{\Delta t}{2})$, et c est la vitesse du son (Buick et Cosgrove, 2006). À l'instar des méthodes à temps de

relaxation multiples, ici l'opérateur de collision ne relaxe pas directement les composantes de N vers leur état à l'équilibre, mais effectue la collision en travaillant sur un vecteur solution obtenu par projection avec une matrice de passage $\mathbb{P}$. Pour la méthode d'Eggels et Somers (1995), le vecteur solution $\mathbb{P} \cdot N$ est une projection de N dans l'espace des moments physiques qui définissent les grandeurs macroscopiques du milieu

$$\mathbb{P} \cdot N = \begin{cases} \rho \\ \rho \vec{u} \\ \mu(\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T) - \rho \vec{u} \vec{u} \\ T^3 = O(u^3, u \nabla u) \\ T^4 = O(u^4, u^2 \nabla u) \end{cases} \quad (3.8)$$

Après la masse volumique (1 composante), la quantité de mouvement (3 composantes) et les flux diffusif et convectif de quantité de mouvement (6 composantes), le vecteur solution $\mathbb{P} \cdot N$ contient des moments d'ordres plus élevés qui n'apparaissent pas dans Navier-Stokes. Ceux-ci résultent de l'erreur induite par la discrétisation de N et sont nécessaires pour que $\mathbb{P}$ soit une matrice de passage qui permette d'exprimer N (18 composantes) dans une autre base. Cependant, comme ces termes T^3 et T^4 n'ont pas de sens physique, ils sont relaxés de sorte à être amortis (voire annulés) lors des simulations. L'équation (3.5) devient alors

$$N_i \left(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \frac{\Delta t}{2} \right) = \mathbb{P}_i^{-1} \cdot \left(\mathbb{1} + \Delta t \tilde{\Omega} \right) \cdot \mathbb{P} \cdot N \left(\vec{x}, t - \frac{\Delta t}{2} \right) \quad (3.9a)$$

$$\text{avec } \Delta t \tilde{\Omega} \cdot \mathbb{P} \cdot N = \begin{cases} 0 \\ \frac{\vec{F}}{U} \Delta t \\ -\frac{2c^2 \Delta t}{3\nu} \mu(\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T) \\ -0.2T^3 \\ -T^4 \end{cases} \quad (3.9b)$$

L'amortissement des termes d'ordre élevés T^3 et T^4 lors de la collision améliore significativement la robustesse de cette méthode de Boltzmann sur réseau qui permet de travailler avec des gammes de vitesses et de viscosités beaucoup plus larges que celle de Bhatnagar *et al.* (1954). De plus, la séparation dans le vecteur solution de moments physiques et des termes d'ordre élevés permet une manipulation relativement simple des grandeurs physiques par rapport aux méthodes à temps de relaxation multiples (D'Humières *et al.*, 2002). Par exemple, l'introduction d'un tenseur des contraintes de sous-maîles pour les simulations aux grandes échelles ne nécessite de modifier que le terme correspondant au transport de quantité de mouvement dans le vecteur solution $\mathbb{P} \cdot N$, soit la troisième ligne de l'équation (3.8).

2.3 Méthode de frontière immergée (IBM)

Flua propose en fait deux méthodes de frontières immergées (Peskin, 1972) qui mettent à profit l'information disponible sur la distribution de la quantité de mouvement dans l'espace des vitesses (Bouzidi *et al.*, 2001; Niu *et al.*, 2006). Cependant, pour des raisons liées à la complexité d'implémentation et aux performances de calcul, la méthode de Bouzidi *et al.* (2001) est limitée à des frontières fixes pour le moment. Ainsi, dans les études présentées par la suite, c'est la méthode de Niu *et al.* (2006) qui est utilisée.

Cette méthode repose sur le fait que lors d'une résolution de l'écoulement par LBM, il est aisé de déterminer la valeur du terme source à appliquer en un nœud du réseau pour annuler la vitesse de l'écoulement ainsi que pour passer d'une vitesse nulle à une vitesse imposée. En combinant les deux il est donc possible d'imposer la vitesse en tout nœud du réseau LBM en y imposant une force calculée de manière appropriée (Ladd et Verberg, 2001). À partir de là, la méthode de Niu *et al.* (2006) reprend les grands principes des IBM (Peskin, 2002) où la surface des solides est discrétisée par des points lagrangiens où sont interpolées les propriétés du fluide (ici la distribution de la masse dans l'espace des vitesses fournie par la LBM). Ensuite les échanges de quantité de mouvement entre liquide et solide sont calculés et les forces correspondantes sont distribuées sur les nœuds du réseau LBM pour imposer le mouvement de la phase liquide.

Dans un premier temps, la surface des frontières immergées est discrétisée en un ensemble d'éléments de surfaces associant chacun un marqueur de position (un point, noté par la suite M) à une aire (A_M) comme illustré à la Figure 4. Pour calculer les échanges de quantité de mouvement entre phases, la méthode de frontière immergée se décompose en quatre étapes.

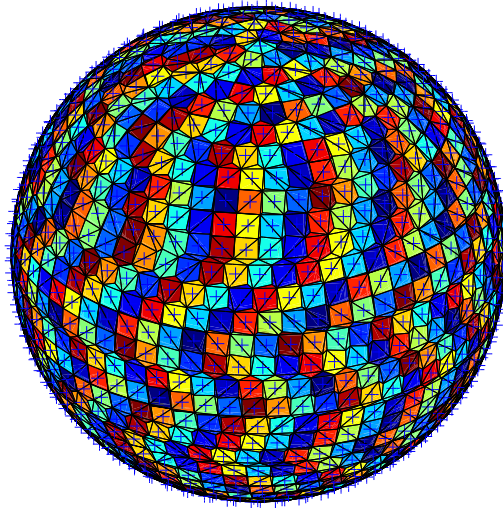


FIGURE 4 – Décomposition d'une frontière immergée sphérique en éléments de surfaces associant chacun un marqueur de position (représenté par des croix bleues) à l'aire correspondante (représentée par la surface colorée autour de chaque marqueur).

1. *Interpolation des propriétés du fluide aux positions des marqueurs de surface de la frontière immergée*

La distribution N de la masse volumique dans l'espace des vitesses introduite à l'équation (3.6) sont estimées à la position de chaque marqueur M à partir des nœuds du réseau LBM voisins de M à l'aide d'une fonction d'interpolation δ_I :

$$N_M = \sum_{\vec{x}} N(\vec{x}) \delta_I(\vec{x}_M - \vec{x}) \quad (3.10)$$

2. *Calcul de la force par unité de volume correspondant à la chaque élément de surface de la frontière immergée*

La force exercée par la frontière (solide) sur le fluide est calculée à partir l'échange de quantité de mouvement entre les phases à chaque marqueur de surface M . Afin d'imposer la vitesse de la frontière dans le fluide, cette force a deux contributions, une qui calcule le terme source à appliquer pour arrêter l'écoulement (terme d'arrêt), une autre qui calcule le terme source à appliquer pour passer d'une vitesse nulle à celle de la frontière (terme moteur).

Le terme d'arrêt repose sur le rebond (« full-way bounce-back ») des composantes de la distribution N (Ginzbourg et Adler, 1994). Cette méthode permet d'implémenter des conditions limites d'adhérence sur une surface fixe en partant du principe que les densités de flux de la distribution N ne peuvent pas traverser la surface. Ils sont donc compensés par une densité de flux opposée dans chacune des directions qui traverse la surface, comme si lors de l'étape de collision chaque composante de la distribution N rebondissait sur la surface. L'implémentation d'un tel rebond se fait en associant aux vecteurs $\vec{c}_i$ entrants depuis la surface la valeur de la distribution sortante selon $-\vec{c}_i$. Dans le cas particulier de la frontière immergée qui représente une surface, donc bidimensionnelle, dans le liquide, les directions entrantes d'un côté de la surface sont sortantes de l'autre, si bien que toutes les directions $\vec{c}_i$ sont permutées avec leur opposé $-\vec{c}_i$, pour $i \in \llbracket 1, 18 \rrbracket$ dans le cas du réseau D3Q18 d'Eggels et Somers (1995).

Le terme moteur repose sur une approche similaire et utilise le même rebond mais cette fois calculé à partir de la distribution à l'équilibre correspondant à la vitesse souhaitée en utilisant la relation (3.8). Cela revient à utiliser la distribution à l'équilibre comme estimation de la distribution réelle après collision à l'interface. S'il est évident que la distribution réelle n'est pas celle à l'équilibre, par construction les deux distributions ont les mêmes moments de masse et de quantité de mouvement, donc l'estimation à partir de la distribution à l'équilibre permet de calculer les échanges de masse (imperméabilité) et de quantité de mouvement.

Au final, en regroupant ces deux termes, la force exercée par l'élément de surface associé au marqueur M de la frontière immergée sur le liquide peut être calculée explicitement à partir de l'échange de quantité de mouvement, correspondant au moment d'ordre 1 des distributions dans l'espace des vitesses.

$$\vec{F}_M = A_M \Delta x \sum_i \left(\underbrace{N_M(-\vec{c}_i) - N_M(\vec{c}_i)}_{\text{terme d'arrêt}} + \underbrace{\mathbb{P}_{(\vec{c}_i)}^{-1} \rho \vec{u}_M - \mathbb{P}_{(-\vec{c}_i)}^{-1} \rho \vec{u}_M}_{\text{terme moteur}} \right) \vec{c}_i \quad (3.11)$$

3. Calcul du terme source pour le mouvement de la phase fluide

Le terme source de quantité de mouvement est calculé en convertissant les forces $\vec{F}_M$ en chaque points de la surface de la frontière immergée en densité volumique de force et en sommant en chaque nœud du réseau LBM les contributions de chaque marqueur M avec une fonction de distribution δ_D :

$$\frac{\vec{F}}{V}(\vec{x}) = \frac{1}{(\Delta x)^3} \sum_M \vec{F}_M \delta_D(\vec{x}_M - \vec{x}) \quad (3.12)$$

4. Calcul des efforts résultants appliqués sur la frontière immergée

L'action du fluide sur la surface est la réaction de la surface sur le fluide, les efforts (force et couple) résultants appliqués par le fluide sur la frontière immergée sont donc obtenus réciproquement en sommant les réactions des efforts exercés sur le fluide sur chaque marqueur de surface M :

$$\vec{F} = - \sum_M \vec{F}_M \quad (3.13a)$$

$$\vec{\Gamma}^O = - \sum_M (\vec{x}_M - \vec{x}_O) \times \vec{F}_M \quad (3.13b)$$

Flua fournit plusieurs fonctions d'interpolation δ_I et de distribution δ_D selon une interface commune (de sorte que l'interpolation trilinéaire, par exemple, peut aussi être utilisée pour une distribution trilinéaire). Pour la distribution, un choix judicieux doit être une bonne approximation de la distribution de Dirac dans un espace discret, *Flua* propose notamment le Dirac régularisé de Roma *et al.* (1999).

2.4 Méthode des éléments discrets (DEM)

La méthode de frontière immergée permet de calculer la force nécessaire à appliquer au fluide pour lui imposer le mouvement des solides à l'interface entre les deux phases. En application du principe de réaction, la force exercée par le fluide sur chaque solide est directement l'opposé de la somme des forces exercées sur le fluide en chaque point de discrétisation de la surface de ce solide. Il en est de même pour les couples, qui doivent être en plus multipliés par le bras de levier entre le point où est exercé la force et le centre de masse du solide. À partir de ces forces et couples, la dynamique des solides se résout à partir des équations du mouvement (linéaire et angulaire) de Newton.

Une difficulté supplémentaire vient des interactions entre solides d'origine non-hydrodynamique. Les forces de contact où à distance telles que décrites par la théorie DLVO pour les colloïdes (Derjaguin *et al.*, 1987) ou par le modèle de Bjerknes-Ruckenstein pour des inclusions (Ruckenstein, 1997 ; Cournil *et al.*, 2006) doivent être calculées pour chaque paire de particules. Le coût de calcul augmente donc avec le nombre de particules au carré et peut donc vite rendre impossible la simulation. C'est pourquoi bien que la méthode des éléments discrets (Cundall et Strack, 1979) n'a rien de compliqué sur le principe, son implémentation n'est jamais triviale pour des simulations où le nombre de particules peut être important. Dans *Flua*, une distance maximale peut être définie

à partir de laquelle les interactions entre particules n'ont plus besoin d'être calculées. L'algorithme de détection des interactions regroupe les solides par lots en fonction de leur position dans l'espace et évite une grande partie des calculs d'interactions si celles-ci n'ont pas une portée trop grande.

Pour des particules résolues avec des frontières immergées, leurs interactions pèsent beaucoup moins dans le coût de calcul que le calcul de leur couplage avec le fluide. Pour des simulations avec de nombreuses particules, le module DEM peut donc s'utiliser sans celui de frontière immergée. Pour assurer le couplage entre les phases fluide et solide, *Flua* fournit alors des implémentations de nombreux modèles de forces, telles que traînée, portance et autres (Sommerfeld, 2000) qui peuvent se substituer au calcul de la force hydrodynamique par IBM. Ces forces peuvent aussi être distribuées en retour sur la phase liquide pour assurer un couplage dans les deux sens. Cette approche convient par exemple pour la simulation de lits fluidisés liquide-solide (Kroll-Rabotin *et al.*, 2012). Cette implémentation de DEM fonctionne bien jusqu'à plusieurs dizaines de milliers de particules. Au delà, il existe des méthodes plus performantes qui servent notamment dans des simulations d'écoulements granulaires ou de frittage mais qui s'éloignent alors beaucoup des applications envisagées pour *Flua*.

Enfin, pour des simulations avec de nombreuses particules qui n'interagissent pas entre elles, la détection des interactions peut être complètement court-circuitée et la méthode se résume alors à un suivi lagrangien, couplé ou non avec le fluide. C'est par exemple le cas du dépôt d'inclusions sur une paroi où la fraction volumique d'inclusions est extrêmement faible donc les calculs peuvent ignorer les interactions entre les inclusions et le couplage réciproque de la phase dispersée vers le fluide (Joishi, 2019).

Quelle que soit l'utilisation qui est faite de la DEM et les couplages avec les autres méthodes, il sert toujours à résoudre les équations du mouvement d'objets solides.

$$m_p \frac{d\vec{v}_p}{dt} = \sum_{q \in [1, n_p] \setminus \{p\}} \vec{F}_{q/p} + \sum_{i \in [1, n_F]} \vec{F}_{i/p} \quad (3.14a)$$

$$\frac{d}{dt} (\mathbb{J}_p^O \cdot \vec{\omega}_p) = \sum_{q \in [1, n_p] \setminus \{p\}} \vec{\Gamma}_{q/p}^O + \sum_{i \in [1, n_F]} \vec{\Gamma}_{i/p}^O \quad (3.14b)$$

Dans les équations (3.14), n_p désigne le nombre total de particules et n_F et n_I le nombre de forces et de couples externes qui s'appliquent sur chaque particule individuelle.

Les efforts $\vec{F}_{q/p}$ et $\vec{\Gamma}_{q/p}$, où la notation q/p désigne les efforts exercés par q sur p , doivent donc être calculés pour chaque paire de particules (p, q) . Parmi les interactions entre particules possibles, *Flua* fournit une implémentation de collision de sphères déformables avec un modèle simple de ressort linéaire et amortisseur (Stevens et Hrenya, 2005). C'est aussi dans ces termes que sont implémentées les interactions à distance DLVO (Saxena, 2021) ou d'autre nature (Gisselbrecht, 2019).

Les efforts $\vec{F}_{i/p}$ et $\vec{\Gamma}_{i/p}$ contiennent toutes les forces externes qui s'appliquent sur les particules, telles que leur poids et leur interaction avec la phase fluide, en utilisant soit la frontière immergée avec les équations (3.13), soit des modèles (Sommerfeld, 2000).

Chacun des efforts est exprimé comme une fonction affine de l'accélération et de la vitesse de la particule sur laquelle il s'applique. Les expressions mathématiques pour les

couples sont plus lourdes mais n'apportent pas d'information supplémentaire, c'est pourquoi dans la suite seule l'implémentation pour les forces est détaillée. Cependant, la même méthode de résolution est utilisée pour l'équation du mouvement en rotation (3.14b) que pour celle du mouvement en translation (3.14a) détaillée ci-après.

$$\vec{F}_{i/p} = \alpha_{pi} \frac{d\vec{v}_p}{dt} + \beta_{pi} \vec{v}_p + \vec{\gamma}_{pi} \quad (3.15)$$

L'accélération des particules est évaluée à partir de la variation de vitesse au cours d'un pas de temps.

$$\frac{d\vec{v}_p}{dt}(t) \approx \frac{\vec{v}_p(t) - \vec{v}_p(t - \Delta t)}{\Delta t} \quad (3.16)$$

L'équation différentielle (3.14a) peut alors être réécrite sous la forme d'une équation linéaire en vitesse.

$$m_p \frac{\vec{v}_p(t) - \vec{v}_p(t - \Delta t)}{\Delta t} = \underbrace{\sum_i \alpha_{pi}}_{\alpha_p} \frac{\vec{v}_p(t) - \vec{v}_p(t - \Delta t)}{\Delta t} + \underbrace{\sum_i \beta_{pi}}_{\beta_p} \vec{v}_p(t) + \underbrace{\sum_i \vec{\gamma}_{pi}}_{\vec{\gamma}_p} \quad (3.17)$$

Dans l'équation (3.17), les sommes sur i comprennent toutes les forces externes et les interactions entre paires de particules. Au final, l'équation du mouvement pour chaque particule prend la forme d'une équation linéaire en vitesse dans laquelle les contributions de toutes les forces agissant sur la particule sont prises en compte dans trois paramètres α_p , β_p et $\vec{\gamma}_p$. Le calcul de la vitesse d'une particule se fait donc directement par résolution de l'équation (3.17).

$$\vec{v}_p(t) = \frac{\left(\frac{m_p - \alpha_p}{\Delta t} \right) \vec{v}_p(t - \Delta t) + \vec{\gamma}_p}{\frac{m_p - \alpha_p}{\Delta t} - \beta_p} \quad (3.18)$$

L'expression des forces comme des fonctions affines de la vitesse permet de calculer correctement la vitesse des particules quel que soit leur nombre de Stokes. Les modèles de forces (et de couples) agissant sur une particules implémentés dans *Flua* exploitent ce mécanisme ce qui résulte en un schéma semi-implicite pour la plupart des contributions (le paramètre β_p étant scalaire, la portance ne peut être exprimée que de manière explicite par exemple). Le couplage avec les frontières immergée en équation (3.13) est forcément explicite, mais la force calculée en équation (3.13a) contient l'action du fluide de part et d'autres de la surface de la frontière immergée. Pour des particules, solides, l'action du fluide sur l'intérieur de la surface doit être soustraite. À nombre de Reynolds assez faible, cette contribution à la force de couplage est égale à l'inertie du fluide dans la particule, et peut donc être annulée en ajoutant une force corrective telle que $\alpha_{p \text{ ibm}} = \rho \mathcal{V}_p$, avec ρ la masse volumique du fluide et $\mathcal{V}_p$ le volume de la particule.

Pour mettre à jour la position des particules, plusieurs schéma numériques sont disponibles dans *Flua*, le plus utile étant celui d'Adams-Bashforth d'ordre 2 (Zhao et Zhang, 2011).

$$\vec{x}_p(t + \Delta t) = \vec{x}_p(t) + \frac{\Delta t}{2} (3\vec{v}_p(t) - \vec{v}_p(t - \Delta t)) \quad (3.19)$$

Dans le cas particulier où toutes les forces sont exprimées de manière complètement explicite ($\alpha_p = 0$ et $\beta_p = 0$), l'équation (3.19) devient

$$\vec{x}(t + \Delta t) = 2\vec{x}(t) - \vec{x}(t - \Delta t) + \frac{\Delta t^2}{2m_p} (3\vec{\gamma}_p(t) - \vec{\gamma}_p(t - \Delta t)) \quad (3.20)$$

L'équation (3.20) ressemble alors à un schéma de Verlet dans lequel l'accélération des particules est estimée à partir de $(\frac{3}{2}\vec{\gamma}_p(t) - \frac{1}{2}\vec{\gamma}_p(t - \Delta t))/m_p$. Cette prédiction est judicieuse quand les forces qui s'appliquent aux particules sont des fonctions continues en temps, ce qui est le cas dans les applications présentées par la suite, où elles résultent des actions du fluide sur la particule et de forces d'interactions qui dérivent de potentiels.

3 Applications au comportement de particules transportées dans un liquide

En combinant entre elles plusieurs méthodes fournies par le cadriciel *Flua*, trois étudiants en thèse ont pu, sous mon encadrement, étudier trois problèmes physiques différents. J'ai co-encadré les deux doctorants Matthieu Gisselbrecht (2019) et Manoj Joishi (2019) avec Jean-Pierre Bellot, de la même équipe que moi à l'IJL, « Procédés d'élaboration », sur deux sujets liés au contrôle de la propreté inclusionnaire, à savoir l'agrégation des inclusion et leur capture par dépôt aux parois du réacteur lors du traitement en poche. Akash Saxena (2021) a effectué sa thèse à University of Alberta sur la restructuration et la fragmentation d'agrégats sous la direction du professeur R.S. Sanders. En l'absence d'accord cadre entre l'UL et U of A pour les co-tutelles et comme je n'étais pas habilité à diriger des recherches, mon implication dans l'encadrement de ce doctorant n'a pas été reconnue administrativement à l'UL. Il s'agit toutefois bien d'un co-encadrement en pratique puisque cet étudiant a réalisé un travail essentiellement numérique avec *Flua* et qu'il a passé un an dans mon équipe pour démarrer son travail de recherche, se former à la simulation et prendre en main les outils numériques. Je suis resté impliqué dans son suivi avec des réunions en visioconférence au rythme d'au moins une toutes les deux semaines et je l'ai guidé pour la rédaction de son manuscrit de thèse.

Les travaux présentés ici ont commencé en même temps, au printemps 2016. Bien que le démarrage de plusieurs thèses en simultané ne soit pas recommandé par l'école doctorale EMMA (devenue C2MP) où j'ai fait les demandes d'autorisation à co-diriger ces travaux, ceci participait en partie d'un choix délibéré de ma part pour favoriser le travail en commun entre les trois doctorants et amorcer une dynamique de groupe entre eux. Dès le départ, je leur ai fait utiliser le logiciel de suivi de versions Git (Chacon et Straub, 2014) pour que les développements de chacun soient isolés dans des branches autonomes tout en étant partagés avec tous. C'est aussi via cet outil que je fais évoluer les branches de développement principales dans lesquelles ils pouvaient récupérer les évolutions dont ils avaient besoin. Au delà des bénéfices en terme de traçabilité, ce fonctionnement facilite l'intégration des développements de chaque doctorant dans le code partagé, et favorise le partage et la réutilisation de solutions entre eux. De même, à la fin de leur thèse, l'essentiel des développements spécifiques dont ils ont eu besoin pour leur travail se retrouve intégré au cadriciel *Flua*, ce qui minimise l'effort à faire pour réutiliser leur travail dans d'autres projets.

Les simulations de collisions entre particules dans un écoulement cisailé de Matthieu Gisselbrecht ont utilisé la LBM couplée au suivi lagrangien de solides par IBM. Akash Saxena a utilisé une approche très similaire en utilisant davantage la DEM pour prendre en compte les forces entre particules qui régissent le comportement mécanique des agrégats. Enfin, Manoj Joishi a utilisé essentiellement le module LBM et les facilités de parallélisation, ainsi que le suivi lagrangien de particules ponctuelles pour simuler l'écoulement et le transport de particules dans une couche limite turbulente à la paroi d'un réacteur. Une vue synthétique de ces différents travaux est présentée en Figure 5 et met en lumière leur lien plus ou moins direct avec le comportement d'inclusions dans un réacteur en poche et les collaborations internationales dans le cadre desquelles ces recherches se sont déroulées.

3.1 Agrégation d'inclusions pendant le traitement en poche

La thèse de Matthieu Gisselbrecht (2019), que j'ai co-encadrée avec Jean-Pierre Bellot dans le cadre du projet franco-allemand ANR PRCI FLOTINC, portait sur la détermination de noyaux d'agrégation entre inclusions lors de la flottation pendant l'affinage d'alliages métalliques. Le projet FLOTINC s'intéressait à la flottation dans son ensemble et rassemblait quatre partenaires :

- le laboratoire SPIN des Mines de Saint-Étienne,
- Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR),
- Technische Universität Dresden (TUD) et

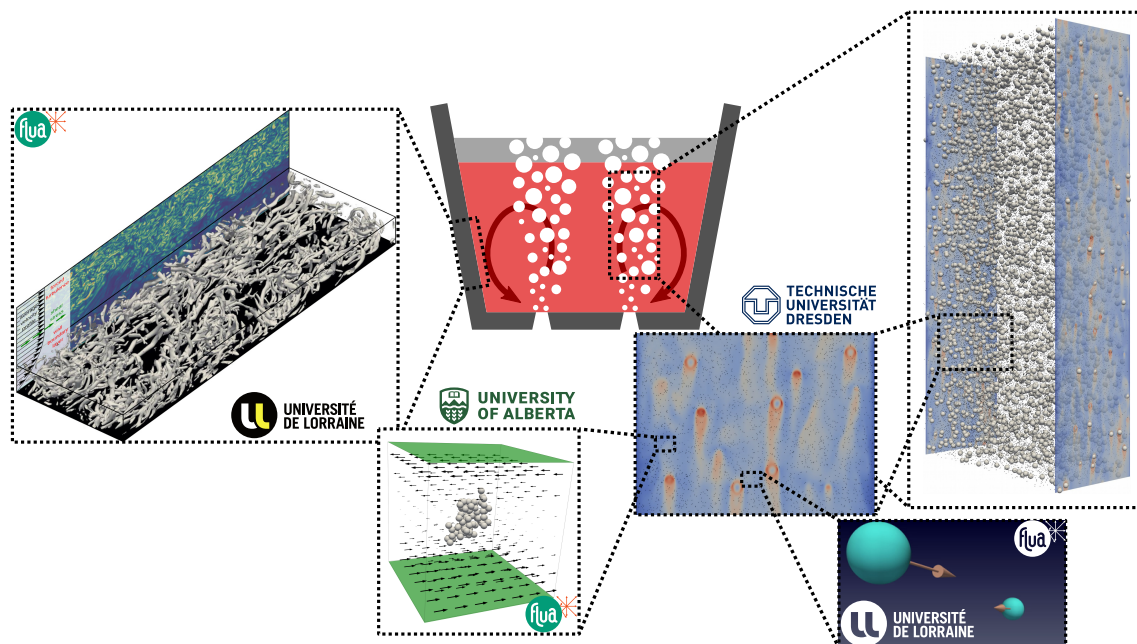


FIGURE 5 – Présentation schématique des études numériques sur le comportement de particules transportées dans un liquide (Gisselbrecht, 2019; Joishi, 2019; Saxena, 2021), leurs liens scientifiques et les partenaires académiques impliqués dans ces études.

- l’Institut Jean Lamour (IJL) de l’Université de Lorraine.

La partie numérique du projet reposait sur TUD et l’IJL. Comme illustré en Figure 5, TUD a fait tourner des simulations de trains de bulles dans un métal liquide chargé en inclusions (May *et al.*, 2018). La partie du travail spécifiquement menée à l’IJL concernait la simulation de collisions entre particules dans un écoulement modèle. En effet, pendant la flottation, la phase gazeuse agite la phase liquide qui transporte les inclusions et ces dernières s’agrègent donc en fonction des gradients de vitesse dans l’écoulement qui donnent à deux particules voisines des vitesses différentes. L’objectif de cette étude était de quantifier les cinétiques d’agrégation d’inclusions, en passant notamment par la détermination de noyaux de collisions, définis à l’équation (3.3), et leur utilisation dans des bilans de populations pour simuler le comportement d’inclusions pendant l’étape d’affinage en poche.

3.1.1 Collision de sphères dans un cisaillement plan

Les inclusions étudiées ici étant plus petites que les plus petits tourbillons dans l’écoulement de métal liquide, l’effet de la turbulence sur l’écoulement local autour d’une paire de particules susceptibles d’entrer en collision a été modélisé par un cisaillement plan.

L’approximation du transport par la turbulence par un cisaillement plan repose sur la comparaison de deux noyaux de collisions usuels utilisés pour des particules transportées dans un fluide, le noyau de Smoluchowski (1918) et celui de Saffman et Turner (1956). Le noyau de Smoluchowski quantifie les collisions entre particules sphériques dans un cisaillement plan en négligeant leurs interactions hydrodynamiques. Celui de Saffman et Turner quantifie les collisions entre particules sphériques dans une turbulence homogène isotrope en négligeant leurs interactions hydrodynamiques. Qualitativement, ces deux noyaux sont donc très similaires et ne diffèrent que par la façon dont ils quantifient les gradients de vitesses locaux. Les particules étant supposées être transportées à la vitesse du fluide dans les deux modèles, ces gradients de vitesse locaux pilotent leur vitesse relative et donc collision. Quantitativement, leurs expressions s’avèrent elles aussi très similaires.

$$\beta_{ij}^{\text{Smoluchowski}} = \frac{1}{6} \dot{\gamma} (d_{pi} + d_{pj})^3 \quad (3.21a)$$

$$\beta_{ij}^{\text{Saffman et Turner}} = \sqrt{\frac{\pi}{120}} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\nu}} (d_{pi} + d_{pj})^3 \quad (3.21b)$$

où i et j sont des indices qui permettent d’identifier les deux particules en interaction et d_{pi} et d_{pj} sont leurs diamètres respectifs.

En considérant la valeur du taux de cisaillement caractéristique pour un écoulement turbulent $\dot{\gamma} = \sqrt{\varepsilon/\nu}$ dans le noyau de Saffman et Turner, les deux expressions (3.21a) et (3.21b) ne diffèrent que de 3% d’écart relatif. Constatant que ces noyaux sont équivalents tant qualitativement que quantitativement, nous avons supposé que l’impact de la prise en compte des interactions hydrodynamiques entre particules sur l’efficacité de collision est similaire dans les deux situations et qu’ainsi les corrections que nous pourrions proposer pour étendre le noyau de Smoluchowski seraient transposables aux écoulements turbulents.

Les cisaillements locaux induits par la turbulence ne sont pas forcément plans : l'approximation de l'écoulement réel par un cisaillement plan revient ainsi à approximer le profil de vitesse par le profil de vitesse plan tangent au profil réel. Cette approximation est a priori valide si les particules transportées sont de taille inférieure aux plus petits tourbillons dans l'écoulement, ce qui, pour des inclusions de petite taille, confirme l'hypothèse d'équivalence des noyaux de collision ci-dessus. Cette approche a ainsi permis de quantifier l'efficacité d'agrégation d'inclusions dans des conditions comparables aux forces motrices de la collision réellement rencontrées dans les réacteurs métallurgiques.

3.1.2 Détermination d'un noyau de collision paramétré

Pour quantifier l'agrégation dans un écoulement cisailé, les sections efficaces de collisions entre deux particules (Bellot *et al.*, 2018) ont été calculées par simulation numérique. La quantification de la collision entre des populations de particules au travers de section efficaces de collision remonte à l'introduction des bilans de populations par Smoluchowski (1918) et a été beaucoup utilisée dans la littérature scientifique pour des applications à des suspensions colloïdales par des approches théoriques ou par de la dynamique stokesienne (Stokesian Dynamics, SD) pour calculer les trajectoires de particules (Adler, 1981 ; Vanni et Baldi, 2002 ; Frungieri *et al.*, 2020).

La Figure 6 illustre la méthode itérative que nous avons développée pour déterminer ces sections : le plan des positions relatives des deux particules en amont de leur interaction est subdivisé en triangles. Chaque triangle dont les coins sont de nature différente, certains conduisant à une collision et d'autres à un évitement, peut être subdivisé à son tour jusqu'à obtenir une précision suffisante sur la section de collision. Chaque point (collision ou évitement) correspond à une simulation d'interaction entre deux particules.

Pour quantifier les collisions avec suffisamment de précision, chaque section doit être discrétisée suffisamment finement, impliquant plusieurs centaines de simulations pour déterminer chacune des sections. L'étude paramétrique de la variation de ces sections en

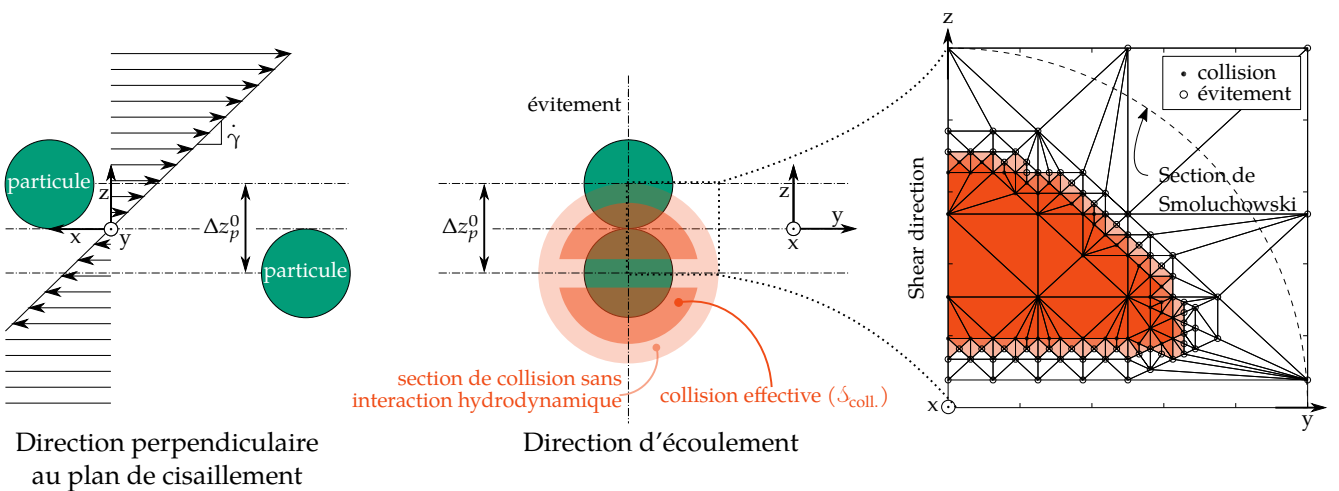


FIGURE 6 – Détermination de la section efficace de collision entre deux particules sphériques dans un écoulement de cisaillement plan par une méthode itérative.

fonction du taux de cisaillement dans l'écoulement et de la taille des particules a donc nécessité plusieurs milliers de simulations.

Les simulations n'impliquant que deux particules à la fois, elles ont été faiblement parallélisée pour tourner sur ~ 16 cœurs de calcul, utilisant seulement la parallélisation OpenMP (mémoire partagée). Cependant, un logiciel de pilotage de ces simulations a été développé pour les lancer en parallèle les unes des autres tout en optimisant le nombre de points nécessaires à la détermination des sections de collision. Ce logiciel utilise la méthode de subdivision en triangles décrite précédemment et utilise les valeurs des points déjà calculés pour déterminer les nouveaux points à calculer afin d'affiner efficacement la résolution des sections efficaces de collision. La capacité de ce logiciel à lancer les calculs en parallèle a permis de mettre à profit les ressources d'Explor⁴ pour conduire l'ensemble de la campagne de simulation, malgré un faible niveau de parallélisation de chacune des simulations.

Dans ces simulations, l'écoulement autour des particules est complètement résolu par LBM et couplé à la dynamique des particules par IBM. Les interactions hydrodynamiques entre les particules sont donc complètement résolues, tant que la distance entre les particules est supérieure à une maille du réseau. En dessous de cette distance, une force de lubrification corrective doit être ajoutée pour des particules sphériques lisses (Nguyen et Ladd, 2002). Comme les particules simulées ici représentent des inclusions qui exercent les unes sur les autres des forces à courte distance de nature différente (Cournil *et al.*, 2006) et sont susceptibles de former des ponts gazeux entre elles, la lubrification n'a pas été prise en compte. La justification détaillée de ce choix de modélisation est donnée dans l'Annexe B de (Gisselbrecht, 2019). Une autre conséquence de la formation de ponts gazeux entre les inclusions est que deux particules qui entrent en collision forment des liens forts par rapports aux efforts hydrodynamiques qu'elles subissent. Ainsi toute collision aboutit à la formation d'un agrégat, c'est pourquoi dans cette étude les noyaux d'agrégation et de collision sont confondus.

Le noyau d'agrégation β , tel que défini à l'équation (3.3), peut donc être calculé à partir de la section de collision.

$$\beta_{ij} = \int_{\Delta_{\text{coll}}} \dot{\gamma} \Delta z_p^0 d\Delta \quad (3.22)$$

où Δ_{coll} et Δz_p^0 sont la section efficace de collision et la hauteur relative des particules, toutes deux représentées sur la Figure 6. Il est alors possible de définir une efficacité de collision η_{ij} représentant l'impact des interactions hydrodynamiques en normalisant le noyau (3.22) par celui de Smoluchowski, défini à l'équation (3.21a), qui correspond à des conditions d'écoulement similaires mais néglige les interactions entre particules.

$$\eta_{ij} = \frac{\beta_{ij}}{\beta_{ij}^{\text{Smoluchowski}}} = \frac{\int_{\Delta_{\text{coll}}(\dot{\gamma}, d_{pi}, d_{pj})} \dot{\gamma} \Delta z_p^0 d\Delta}{\frac{1}{6} \dot{\gamma} (d_{pi} + d_{pj})^3} \quad (3.23)$$

La discussion à propos des similarités des expression dans l'équation (3.21) permet de supposer que l'efficacité η_{ij} est aussi applicable au noyau de Saffman et Turner et donc

4. <https://explor.univ-lorraine.fr/>

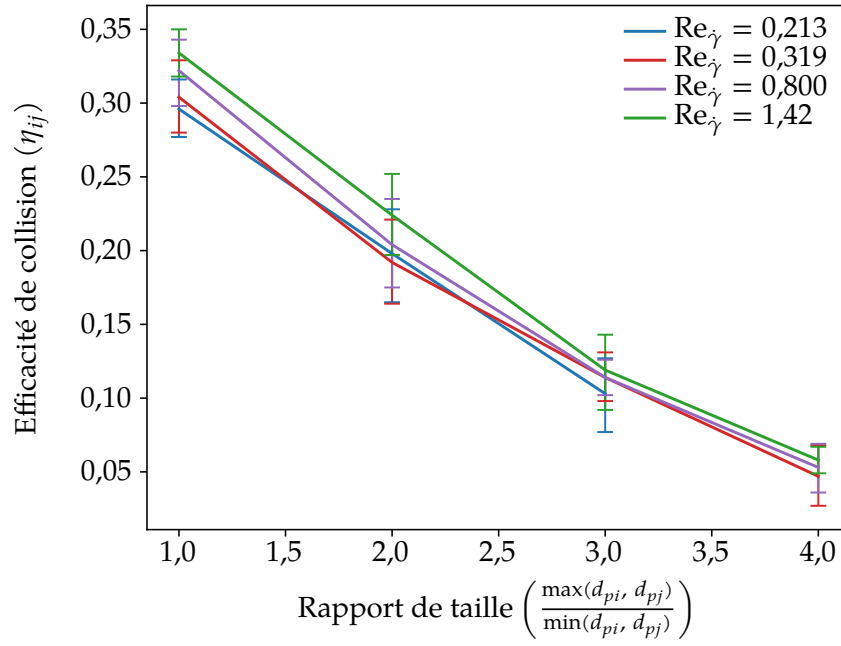


FIGURE 7 – Variation de l'efficacité d'agrégation en fonction du rapport de taille entre deux inclusions.

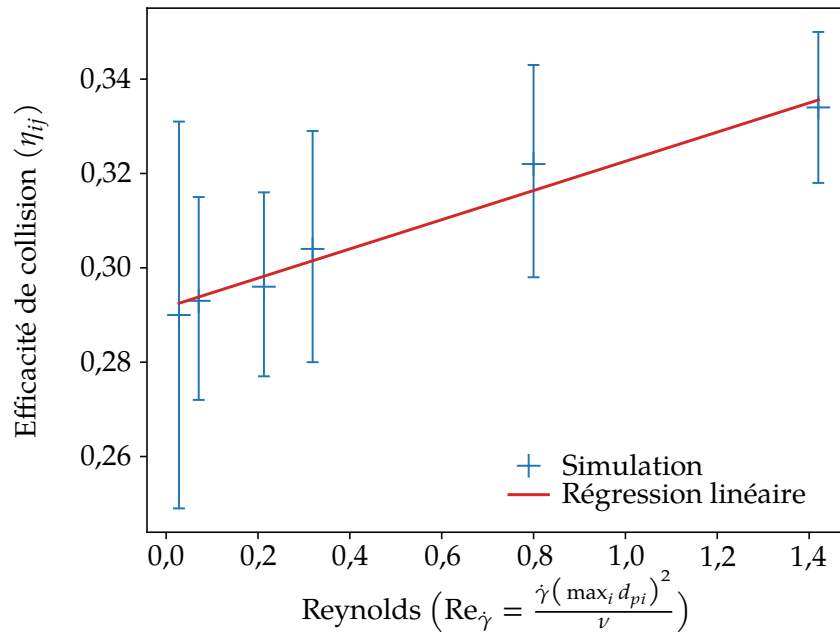


FIGURE 8 – Variation de l'efficacité d'agrégation entre inclusions en fonction du nombre de Reynolds.

aux écoulements turbulents. Les Figures 7 et 8 présentent les résultats de cette campagne de simulation.

3.1.3 Mécanismes physiques en jeu

La Figure 7 montre que le rapport de taille entre les particules joue un rôle prépondérant sur l'efficacité d'agrégation, ce qui est en bonne adéquation avec la littérature scientifique existante (Selomulya *et al.*, 2003).

À l'inverse, et de manière contre-intuitive, l'efficacité de collision se révèle très peu sensible au nombre de Reynolds, comme illustré en Figure 8. Ceci s'explique par deux effets qui apparaissent à Reynolds fini et qui ont un effet opposé sur l'efficacité de collision (Gisselbrecht *et al.*, 2019; Kroll-Rabotin *et al.*, 2020a) :

- ▶ l'augmentation du nombre Reynolds diminue la longueur de diffusion de la quantité de mouvement autour des particules et réduit ainsi la région de l'écoulement cisailé perturbé par la présence d'une particule, ainsi les particules dévient moins les trajectoires les unes des autres et le rayon de la section de collision augmente pour s'approcher de celui de Smoluchowski (1918) pour lequel les interactions sont négligées et les trajectoires des particules ne sont donc pas déviées du tout ;
- ▶ à l'inverse, à Reynolds fini, un second mécanisme d'évitement apparaît, illustré à la Figure 9, qui réduit la surface de collision effective pour les faibles décalages Δz_p^0 , d'où sa forme résultante en demi-lunes sur la Figure 6.

La Figure 9 représente la perturbation de l'écoulement par les particules (champ de vecteurs colorés en fonction de leur norme) dans un cisaillement plan (illustré par les flèches bleues en traits gras). Le champ de vitesse de perturbation peut être défini ainsi :

$$\vec{v}_{\text{perturbation}} = \vec{v} - \dot{\gamma} z \vec{e}_x \quad (3.24)$$

où $\dot{\gamma} z \vec{e}_x$ est le cisaillement plan en conservant les axes définis à la Figure 6 et $\vec{v}$ est le champ de vitesse dans le fluide en présence des particules. Ce champ de vitesse de perturbation

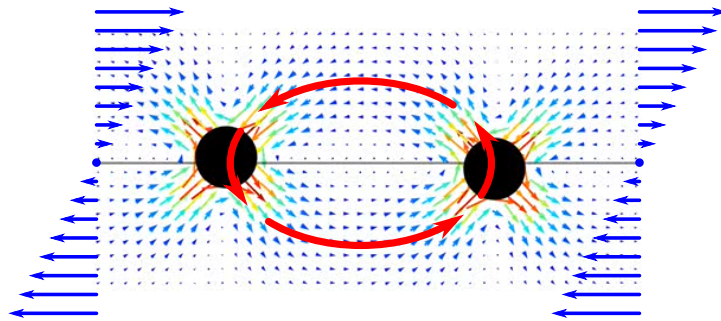


FIGURE 9 – Interactions entre particules et recirculations à Reynolds fini induites par la perturbation de l'écoulement par les particules : le cisaillement est représenté par les flèches bleues sur les côtés, le champ de vecteur coloré représente la vitesse de perturbation définie à l'équation (3.24) et les flèches rouges au centre illustrent les composantes de vitesses verticales induites sur les particules par cette perturbations..

est induit par la non-déformation des particules solides qui s'oppose à la composante déformante du cisaillement. Les particules tournent librement, ainsi (à Reynolds faible) la composante tournante du cisaillement ne contribue pas à la perturbation. À nombre de Reynolds non-nul, ce champ de vitesse de perturbation induit des recirculations dans l'écoulement à une distance finie des particules. Ces recirculations sont schématisées en Figure 9 qui illustre que la perturbation de l'écoulement par la particule de gauche induit une composante de vitesse vers le haut sur la particule de droite et réciproquement, la perturbation due à la particule de droite induit une vitesse vers le bas sur celle de gauche. Si ces vitesses verticales sont d'amplitude suffisante pour faire traverser le plan de vitesse neutre ($\Delta z = 0$) aux deux particules, celles-ci se retrouvent alors dans des régions où l'écoulement de base, le cisaillement plan, les éloigne au lieu de les rapprocher, et elles font ainsi demi-tour avant de s'être approchées (Haddadi et Morris, 2015) ce qui réduit la section de collision pour les faibles valeurs de décalage Δz_p^0 (Gisselbrecht, 2019).

La solution théorique pour des particules parfaitement sphériques sans interactions à distance est l'évitement systématique des deux particules, soit $\beta = 0$. En effet, la répulsion d'origine hydrodynamique entre les deux particules via la force de lubrification tend vers l'infini quand la distance de séparation entre les particules tend vers zéro, et a un profil très raide (Nguyen et Ladd, 2002). Comme la décroissance de la force de lubrification est très raide, deux sphères en interaction qui s'évitent peuvent rester longtemps à très courte distance l'une de l'autre (Haddadi et Morris, 2015; Gisselbrecht, 2019), leur distance de séparation minimale au cours de leur interaction étant d'ordre de grandeur très inférieur à celui de leur distance de séparation dans la plan amont (Δz_p^0 sur la Figure 6).

Par conséquent, dès que l'une des hypothèses n'est pas respectée, dans le cas où les particules ne sont pas exactement des sphères à surface lisse, ou en présence de forces d'attraction à courte distance (Adler, 1981; Vanni et Baldi, 2002), une part importante des évitements théoriques pour des sphères se traduisent par des collisions effectives pour des particules réelles telles que des agrégats colloïdaux ou des inclusions non-métalliques. Ceci explique que les résultats que nous avons obtenus et présentés dans la thèse de Matthieu Gisselbrecht (2019) en négligeant la répulsion à très courte distance due à la lubrification ont finalement une portée très générale et s'appliquent à des particules de natures très diverses. Par exemple, Frungieri et Vanni (2016) présentent des valeurs d'efficacité de collision calculées par simulation (SD) pour des agrégats de sphères avec un écart d'approximativement 20% par rapport à celles de la Figure 7. Les différences sont un peu plus significatives avec les données tabulées de Kusters *et al.* (1997) établies à partir d'expérience sur des agglomérats floculés à la structure beaucoup plus fractale, mais les tendances restent parfaitement similaires.

Les effets à Reynolds finis, notamment à l'origine des recirculations dans l'écoulement qui entraînent les évitements pour les faibles valeurs de Δz_p^0 , jouent un rôle important dans les interactions hydrodynamiques entre particules. Cependant, comme ces recirculations compensent l'impact de la variation du rayon de collision efficace, l'efficacité de collision varie très peu avec le nombre de Reynolds. L'évitement dû aux recirculations est lié à des interactions hydrodynamiques à longue distance entre les particules, dont la portée est de l'ordre de leur diamètre (voir Figure 9), et n'est donc pas non plus sensible aux interactions à courte distance telles que celles induites par les charges de surface (DLVO), ce qui permet de supposer que les efficacités de collision sont peu sensibles au nombre de Reynolds, quelle que soit la nature des particules étudiées. Les efficacités de collision

que nous avons obtenues peuvent donc bien être approchées par les modèles empiriques disponibles dans la littérature scientifique pour des floes (Kusters, 1991 ; Selomulya *et al.*, 2003 ; Vlieghe *et al.*, 2016).

3.1.4 Passage à l'échelle procédé et applications

L'expression de la fréquence d'agrégation par unité de volume de deux populations d'inclusion i et j peut se déduire de sa définition (3.4) et des équations (3.21) et (3.23).

$$f_{ij} = \eta_{ij} \sqrt{\frac{\pi}{120}} (d_{pi} + d_{pj})^3 n_i n_j \dot{\gamma} \quad (3.25)$$

Étant donnée la faible inertie des inclusions considérées dans ces études, les inclusions les plus petites tendent à conserver une répartition uniforme dans le volume de métal liquide. Leur concentration varie alors dans le temps du fait de leur capture à la surface des bulles, mais quasiment pas en espace (Kroll-Rabotin *et al.*, 2020a). De plus, la variation de l'efficacité de collision η_{ij} en fonction du nombre de Reynolds est négligeable, voir Figure 8, ce qui permet de considérer que dans l'équation (3.25), tous les termes sont invariants en espace sauf le taux de cisaillement $\dot{\gamma}$. La fréquence totale d'agrégation entre les populations i et j dans un réacteur contenant un volume de métal liquide $\mathcal{V}_{liq}$ peut alors s'écrire en fonction du taux de cisaillement moyen dans le volume $\langle \dot{\gamma} \rangle$.

$$F_{ij} = \int_{\mathcal{V}_{liq}} f_{ij} d\mathcal{V} = \sqrt{\frac{\pi}{120}} (d_{pi} + d_{pj})^3 n_i n_j \eta_{ij} \underbrace{\int_{\mathcal{V}_{liq}} \dot{\gamma} d\mathcal{V}}_{\langle \dot{\gamma} \rangle \mathcal{V}_{liq}} \quad (3.26)$$

Dans cette équation, tous les termes autres que $\dot{\gamma}$ sont donc supposés constants, mais Gisselbrecht *et al.* (2019) et Kroll-Rabotin *et al.* (2020a) présentent les développements complets, sans les simplifications induites par ces hypothèses.

La Figure 10 montre une distribution volumique des taux de cisaillement extraite des résultats de simulation RANS de traitement d'acier liquide dans une poche de 8,42 m³. Les simulations dont sont extraites ces distributions sont présentées plus en détail dans Daoud *et al.* (2011). Dans les simulations, le modèle de turbulence calcule un taux de dissipation ε dont est déduit le taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ par la relation $\dot{\gamma} = \sqrt{\varepsilon/\nu}$ comme à l'équation (3.21). La distribution montre que la très grande majorité du volume du réacteur est très faiblement agitée, avec un taux de cisaillement médian de 7,5 s⁻¹. Des taux de cisaillements bien supérieurs sont présents dans l'écoulement, jusque presque 1000 s⁻¹ au sein des panaches de bulles, mais ces régions très fortement cisailées ne représentent qu'un très faible volume de liquide dans le réacteur.

Pour comparer les contributions des différentes régions de l'écoulement, un changement de variable dans l'expression de la fréquence de collision (3.26) permet de faire apparaître la contribution de chaque taux de cisaillement à l'agrégation des inclusions.

$$\langle \dot{\gamma} \rangle \mathcal{V}_{liq} = \int_{\mathcal{V}_{liq}} \dot{\gamma} d\mathcal{V} = \int_0^\infty \dot{\gamma} \frac{\partial \mathcal{V}}{\partial \dot{\gamma}} d\dot{\gamma} \quad (3.27)$$

La distribution des contributions de chaque taux de cisaillement dans l'équation (3.27) est tracée en Figure 11, pour la même poche d'acier liquide qu'utilisée en Figure 10. Le

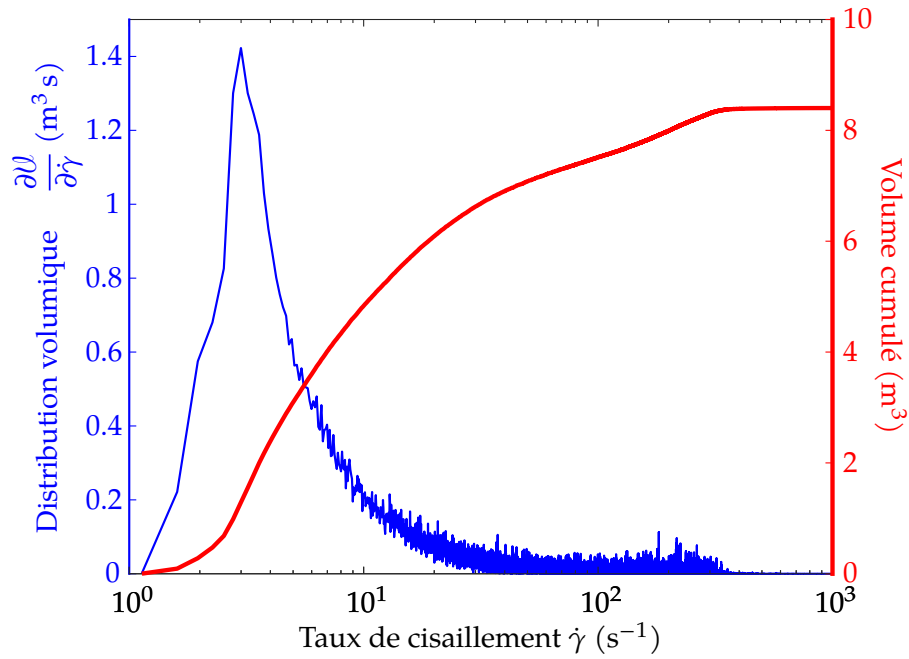


FIGURE 10 – Exemple de distribution volumique des taux de cisaillement dans une poche d’acier liquide de 60 t (Daoud *et al.*, 2011).

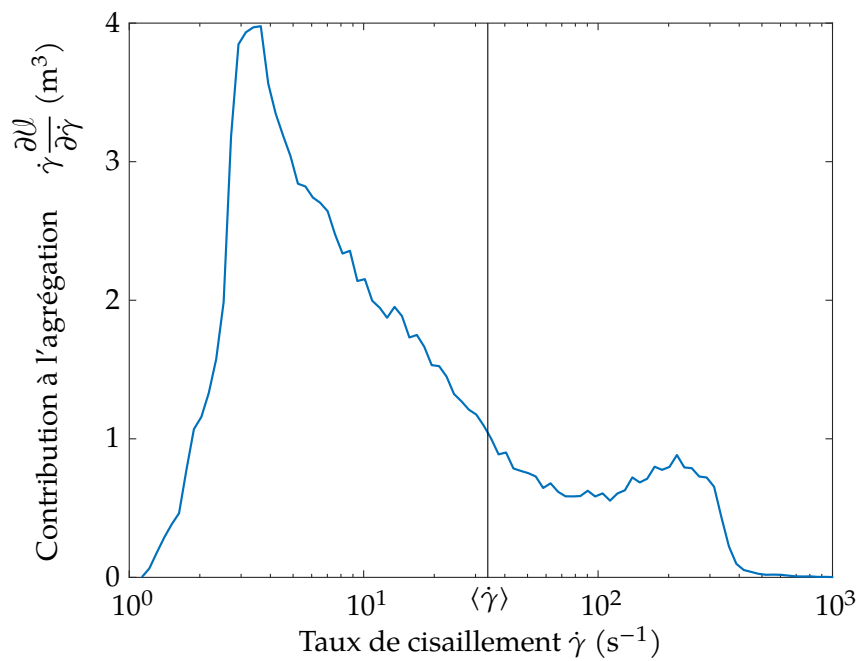


FIGURE 11 – Distribution des contributions à l’aggrégation dans l’exemple de réacteur de en poche de 60 t.

taux de cisaillement moyen est de $\langle \dot{\gamma} \rangle = 33,9 \text{ s}^{-1}$ et est donc très supérieur au taux de cisaillement médian. En effet, comme illustré en Figure 10, bien que représentant une fraction volumique très faible, les régions à cisaillement élevé comme le panache de bulles contribuent de manière significative à l'agrégation des inclusions dans la poche puisque la fréquence d'agrégation est proportionnelle au taux de cisaillement et que les taux de cisaillements dans le panache sont de plusieurs ordres de grandeur supérieurs aux valeurs dans les autres régions : 60% du volume dans la poche est cisailé à moins de 11 s^{-1} alors que le taux de cisaillement maximal approche les 1000 s^{-1} .

3.1.5 Prise en compte de la morphologie

Les noyaux de collision déterminés dans cette étude l'ont été pour des particules sphériques. Pourtant les inclusions peuvent avoir des morphologies très diverses et parfois très complexes, voir Figure 12, selon la nature des précipités qui les composent et de la structure des agrégats qu'elles forment (Van Ende, 2010). L'extension de la quantification de l'agrégation à des particules non sphériques a été entamée dans cette étude en considérant des particules ellipsoïdales. Cette extension soulève toutefois deux difficultés importantes :

- l'augmentation de l'espace paramétrique à explorer pour établir un critère de collision,
- la nécessité de disposer d'information sur la morphologie des particules dans les bilans de populations pour tirer profit des noyaux de collisions la prenant en compte.

Le premier point peut être réglé en basculant sur une approche statistique du problème dès le choix du critère de collision (jusqu'ici les sections de collisions ont été établies de manière déterministe). L'espace des paramètres étant beaucoup plus vaste, cette étude serait plus coûteuse en calcul que celle de sphères, mais une approche statistique (type Monte-Carlo) permet de réduire ce surcoût (Frungeri *et al.*, 2020).

Le second point est plus problématique car il implique d'ajouter de la complexité au niveau des bilans de populations. C'est de fait une étape nécessaire préalable à la détermi-

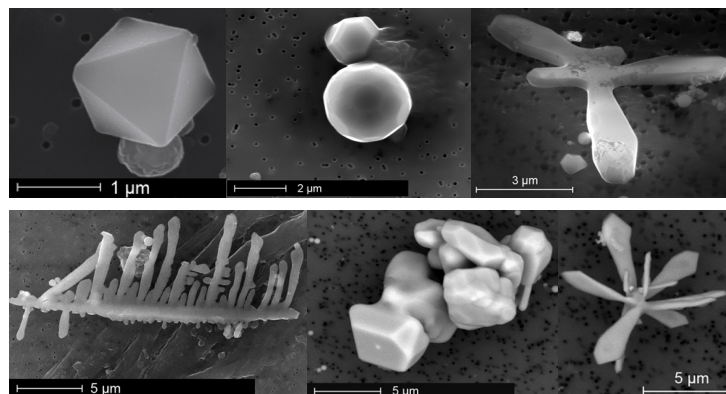


FIGURE 12 – Inclusions d'alumines (Al_2O_3) dans de l'acier calmé à l'aluminium illustrant la variété de leurs morphologies (Van Ende, 2010).

nation de noyaux de collision plus fins, sinon ceux-ci ne pourraient de toute façon pas être utilisés dans les simulations de procédés. C’est une perspective importante pour améliorer la modélisation des inclusions dans les simulations de procédés, elle occupe d’ailleurs une place centrale dans le projet scientifique que je présente au chapitre IV.

3.2 Restructuration et fragmentation d’agrégats sous cisaillement

Akash Saxena (2021) a effectué sa thèse sous la direction du professeur R. Sean Sanders à l’Université d’Alberta sur le comportement d’agrégats soumis à un cisaillement. Ce travail est complémentaire à celui de Matthieu Gisselbrecht (2019) présenté précédemment puisqu’il s’intéresse à l’effet du cisaillement sur les agrégats existants et notamment sur leur fragmentation. Dans le cadre de son travail de thèse, Akash Saxena a passé un an à l’IJL pour prendre en main le code de calcul que je développe et j’ai été impliqué dans son encadrement du début à la fin de sa thèse. Cette collaboration avec Pr. R.S. Sanders, à la tête du groupe de recherche sur les procédés de transport en pipeline (Pipeline Transport Processes, PTP), résulte de notre constat que la fragmentation d’agrégats pouvait être étudiée par une approche commune pour s’appliquer aussi bien aux agrégats inclusionnaires qu’à ceux d’argiles floculées telles que celles présentes dans les rejets d’exploitation des sables bitumineux. Comme dans le cas de l’étude numérique de l’agrégation, l’écoulement est modélisé par un cisaillement plan à l’échelle d’un agrégat, comme illustré à la Figure 5, sous le logo de l’Université d’Alberta.

De manière similaire au cas de l’agrégation, les simulations de l’évolution d’un agrégat sont faiblement parallélisées avec OpenMP. Les ressources de calcul pour cette étude ont majoritairement été fournies par Compute Canada⁵ et Westgrid⁶. Le coût de calcul important de telles simulations provient de la quantité de simulations nécessaires pour extraire des comportements statistiques. En effet, toutes les combinaisons de paramètres (conditions d’écoulement et propriétés des agrégats) doivent être répétées pour un jeu d’agrégats modèles assez variés pour que leur comportement moyen soit représentatif d’une population. Chaque campagne a donc été répétée pour 10 ou 20 agrégats générés algorithmiquement en positionnant des particules primaires sphériques les unes par rapport aux autres de sorte que les agrégats partagent les mêmes propriétés de taille et de dimension fractale (Saxena *et al.*, 2017, 2022). Pour des agrégats composés d’un même nombre de particules primaires toutes identiques, la taille, le rayon de giration et la dimension fractale sont complètement liés (Gmachowski, 2002), de sorte que par la suite les agrégats seront entièrement caractérisés par le nombre N de particules qui les composent et leur rayon de giration adimensionnel R_g^* .

$$R_g^* = \frac{2}{d_p} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_i^N \|\vec{x}_{pi} - \langle \vec{x}_p \rangle\|^2} \quad \text{avec } \langle \vec{x}_p \rangle = \frac{1}{N} \sum_i^N \vec{x}_{pi} \quad (3.28)$$

La Figure 13 présente par exemple 10 agrégats composés de 50 particules primaires et de rayon de giration adimensionnel de $4,55 \pm 0,02$, ce qui correspond à une dimension

5. <https://www.computecanada.ca>

6. <https://www.westgrid.ca/>

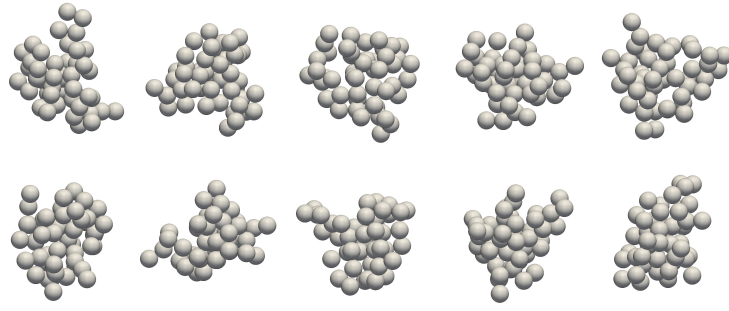


FIGURE 13 – Agrégats générés algorithmiquement pour $N = 50$ et $R_g^* = 4,55$ (Saxena *et al.*, 2022).

fractale de 2,3 couramment rencontrée dans la littérature scientifique (Sonntag et Russel, 1986 ; Serra et Casamitjana, 1998 ; Conchuir *et al.*, 2014 ; Guérin *et al.*, 2019). Le nombre de particules qui composent les agrégats a été fixé de telle sorte que les agrégats aient une nature fractale et puissent ainsi être caractérisés à partir d’une dimensions fractale. Harshe et Lattuada (2012, 2016) ont montré que les agrégats composés de seulement 32 particules conservent leur nature fractale. Lorsque nous nous sommes intéressés à la fragmentation, pour pouvoir caractériser les fragments de manière similaire, nous avons démarré les simulations avec des agrégats composés de 70 particules.

3.2.1 Rôle respectif des forces entre particules et de l’hydrodynamique

En plus de leur caractérisation morphologique, les agrégats sont aussi caractérisés d’un point de vue mécanique par les forces d’interactions entre les particules primaires qui les composent. Pour caractériser la résistance mécanique des liens entre particules primaires, les paramètres caractéristiques retenus sont les valeurs maximales des forces pouvant être exercées au travers de ces liens, quantifiées avec deux paramètres, l’un pour la composante normale (le long de l’axe passant par les centres des particules sphériques) et l’autre pour la composante tangentielle (dans le plan tangent aux deux sphères). Ces valeurs de forces sont les efforts critiques que les actions hydrodynamiques sur les particules doivent dépasser pour séparer une paire de particules dans l’agrégat.

Dans de nombreuses applications, les forces à distance entre particules primaires ont une portée beaucoup moins longue les effets hydrodynamique. Dans ces conditions l’évolution de ces forces avec la distance de séparation entre particules n’impacte pas le comportement hydrodynamique des particules. Le comportement de l’agrégat ne dépend alors que des valeurs maximales de forces (Kroupa *et al.*, 2015 ; Saxena *et al.*, 2022). En ne caractérisant les forces à distance qu’avec leurs valeurs maximales, des interactions de nature très différentes peuvent être étudiées de manière similaire, qu’elles soient colloïdales (Becker et Briesen, 2008), induites par des flocculants polymères (Besra *et al.*, 2002) ou résultant de ponts gazeux entre inclusions dans un métal liquide (Cournil *et al.*, 2006).

L’écoulement est modélisé par un cisaillement plan caractérisé par son taux de cisaillement $\dot{\gamma}$. L’adimensionalisation du problème fait apparaître un nombre de Reynolds (basé sur le taux de cisaillement) et des rapports de forces entre les forces cohésives au sein des

agrégats et la traînée hydrodynamique (Saxena *et al.*, 2017). Bien que les inclusions et les argiles fines sont de nature et de taille très différentes, comme elles subissent des gammes de cisaillement très larges dans les procédés qui les concernent, les conditions auxquelles elles sont soumises se recoupent largement une fois le problème mis sous forme adimensionnelle. Les paramètres adimensionnels du problème sont le rayon de giration initial adimensionnel, qui caractérise la morphologie initiale des agrégats, le nombre de Reynolds qui caractérise l'écoulement, et les rapports de forces qui caractérisent les propriétés mécaniques de l'agrégat par rapport aux efforts qu'il subit de l'écoulement.

$$R_g^* \equiv \text{Equation (3.28)} \quad (3.29a)$$

$$\text{Re}_{\dot{\gamma}} = (R_g^*)^2 \frac{\dot{\gamma} d_p^2}{\nu} \quad (3.29b)$$

$$F_n^* = \frac{\max F_n}{F_h^0} \quad (3.29c)$$

$$F_t^* = \frac{\max F_t}{F_h^0} \quad (3.29d)$$

Dans un premier temps, l'effet des rapports entre les composantes tangentielle et radiale des liens entre les particules et les forces hydrodynamiques a été étudié à faible nombre de Reynolds (Saxena, 2021). À faible Reynolds, les effets inertiels sont complètement négligeables, de sorte que tant qu'il demeure assez faible le nombre de Reynolds n'est pas un paramètre du problème. Pour un agrégat donné, la variation du taux de cisaillement dans l'écoulement est donc complètement caractérisée par la variation correspondante des rapports de forces avec les relations (3.29) et $F_h^0 \propto \dot{\gamma}$.

Augmenter le taux de cisaillement revient donc à diminuer les rapports F_n^* et F_t^* . En suivant l'évolution morphologique des agrégats au cours du temps, pour différentes valeurs de rapports de forces (voir Figure 14) nous avons pu déterminer la morphologie finale, atteinte après plusieurs rotations complètes des agrégats dans l'écoulement et moyennée sur la dernière rotation, et la relier aux propriétés de l'écoulement et des agrégats. Les agrégats n'atteignent pas toujours une forme stable, pour les taux de cisaillement important (ou pour des liaisons très peu résistantes entre particules), certains agrégats fragmentent. La fragmentation est illustrée par une croix (×) sur la Figure 14.

Cette première étude à faible Reynolds (Saxena *et al.*, 2017, 2022) a permis de valider l'approche numérique et de quantifier l'effet des différentes composantes des forces cohésives sur la restructuration des agrégats. Par exemple, la Figure 15 montre l'évolution du rayon de giration après restructuration en fonction de la composante tangentielle des forces et met en lumière le rôle des interactions hydrodynamiques entre particules. Des forces cohésives tangentielles plus élevées impliquent que les agrégats se restructurent moins et se densifient moins sous l'effet du cisaillement, aboutissant à une morphologie finale plus proche de leur condition initiale. Les agrégats qui se restructurent moins sont ainsi plus fragiles, c'est pourquoi une augmentation de la composante de force tangentielle augmente aussi la probabilité de fragmentation des agrégats.

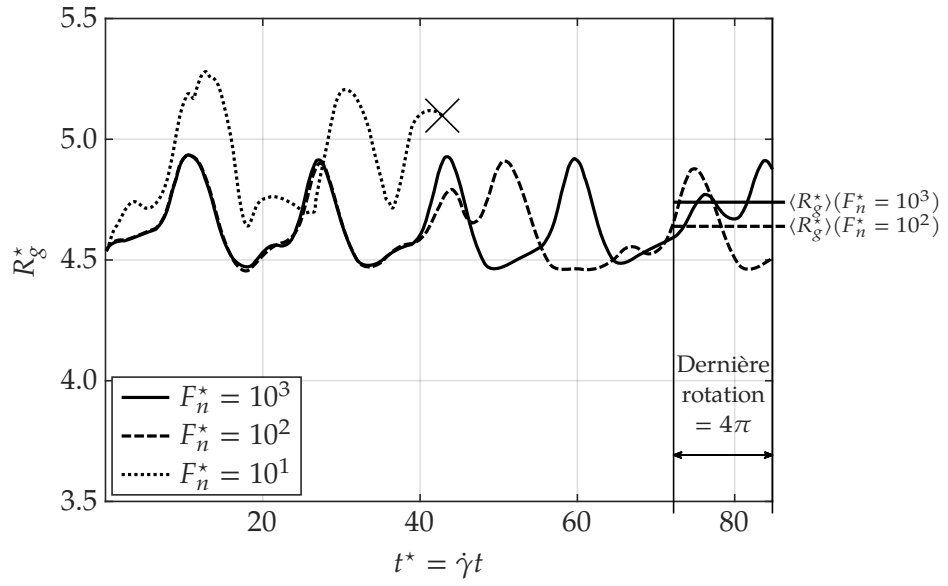


FIGURE 14 – Exemple d'évolution temporelle d'un agrégat pour trois valeurs différentes du taux de cisaillement dans l'écoulement.

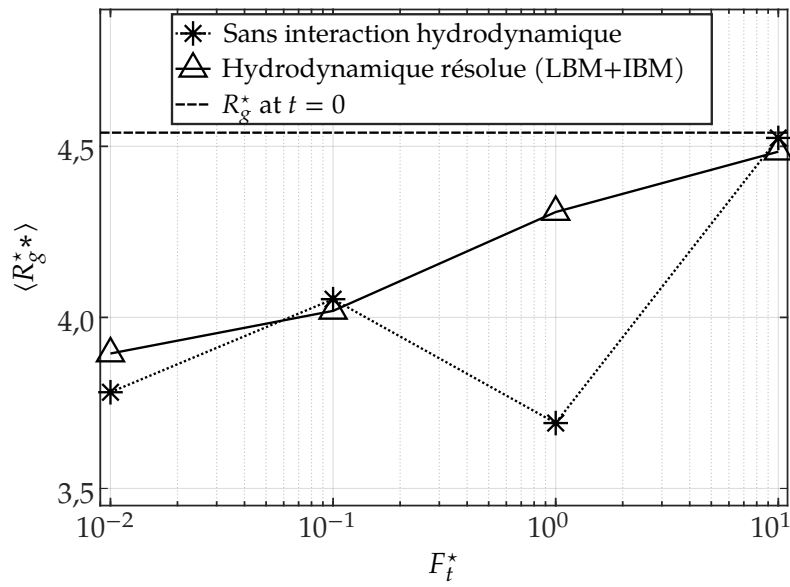


FIGURE 15 – Évolution du rayon de giration d'agrégats après restructuration en fonction des forces cohésives tangentielles entre les particules primaires qui les composent.

3.2.2 Effets à nombre de Reynolds fini et dynamique de la restructuration et de la fragmentation

Les études à faible Reynolds ont mis en lumière que les effets hydrodynamiques à l'échelle des agrégats pilotent leur restructuration, plutôt que les effets à l'échelle des particules primaires qui les composent (Saxena *et al.*, 2022). Or, si le nombre de Reynolds reste faible à l'échelle des particules primaires dans tous les procédés d'intérêt dans cette étude, il peut atteindre des valeurs supérieures à 1 à l'échelle de l'agrégat. Des effets à Reynolds fini (non nul) jouent un rôle significatif sur l'agrégation, pour des valeurs aussi petites que $Re = 0.02$ (Gisselbrecht, 2019).

À Reynolds fini, le taux de cisaillement apparaît dans trois des quatre paramètres adimensionnels du problème présentés aux équations (3.29). Afin de mettre en lumière les mécanismes physiques qui impactent la restructuration et la fragmentation d'agrégats à Reynolds finis, et pour les distinguer des propriétés mécaniques des agrégats, une autre campagne de simulation a été menée à Reynolds plus élevé, dans laquelle les paramètres des équations (3.29) ont été variés indépendamment les uns des autres, sauf le rayon de giration initial qui a été fixé de telle sorte que la dimension fractale des agrégats soit toujours de 2.3. Pour des agrégats de 70 particules, cela donne un rayon de giration adimensionnel de $R_g^* = 5,27$.

L'impact des effets à Reynolds fini a donc aussi été étudié sur la restructuration et la fragmentation et il s'est avéré très important ici aussi. La Figure 16 présente les évolutions morphologiques au cours du temps d'agrégats qui ont tous le même nombre de particules (70) et les mêmes forces normales par rapport aux efforts hydrodynamiques. Les choix de ces valeurs sont discutés plus en détail dans la thèse d'Akash Saxena (2021).

$$F_n^* = \frac{F_n R_g^*}{3\pi\rho\nu^2 Re_\gamma} \quad \text{pour} \quad \begin{cases} Re_\gamma = 0,4 \\ R_g^* = 5,27 \text{ soit } N = 70 \text{ et } D_f = 2,3 \end{cases} \quad (3.30)$$

La Figure 16 suit la même convention de représentation que la Figure 14 pour les agrégats qui fragmentent. Les simulations sont répétées pour 10 agrégats de morphologie similaire et les comportements moyens (moyenne du rayon de giration et erreur type de cette moyenne) sont représentés pour l'ensemble des agrégats qui n'ont pas fragmenté pour chaque jeu de conditions (F_t^*, Re_γ) . Il ressort de ces investigations numériques que l'évolution asymptotique des agrégats vers une structure morphologique stable dépend surtout des forces tangentielles entre les particules qui composent l'agrégat. Les forces normales et le nombre de Reynolds, dans les gammes investiguées inférieures à 40, n'ont qu'un effet très limité sur la morphologie mais les trois paramètres impactent la fragmentation. L'effet des forces tangentielles et du nombre de Reynolds sur la probabilité de fragmentation est présenté en Figure 17. L'augmentation du nombre de Reynolds, bien qu'augmentant significativement la probabilité de fragmentation des agrégats, joue finalement peu sur la cinétique de fragmentation un fois le problème exprimé sous forme adimensionnelle (Saxena, 2021).

L'importance des effets à Reynolds fini nous a conduit à étudier la restructuration des agrégats soumis à des sollicitations dynamiques (contrainte de cisaillement variant dans le temps) pour quantifier leur capacité à résister ou fragmenter dans des écoulements turbulents. Cette étude a mis en lumière un retard à la fragmentation, induit par la dynamique de l'écoulement autour des agrégats à Reynolds fini, susceptible de jouer un rôle

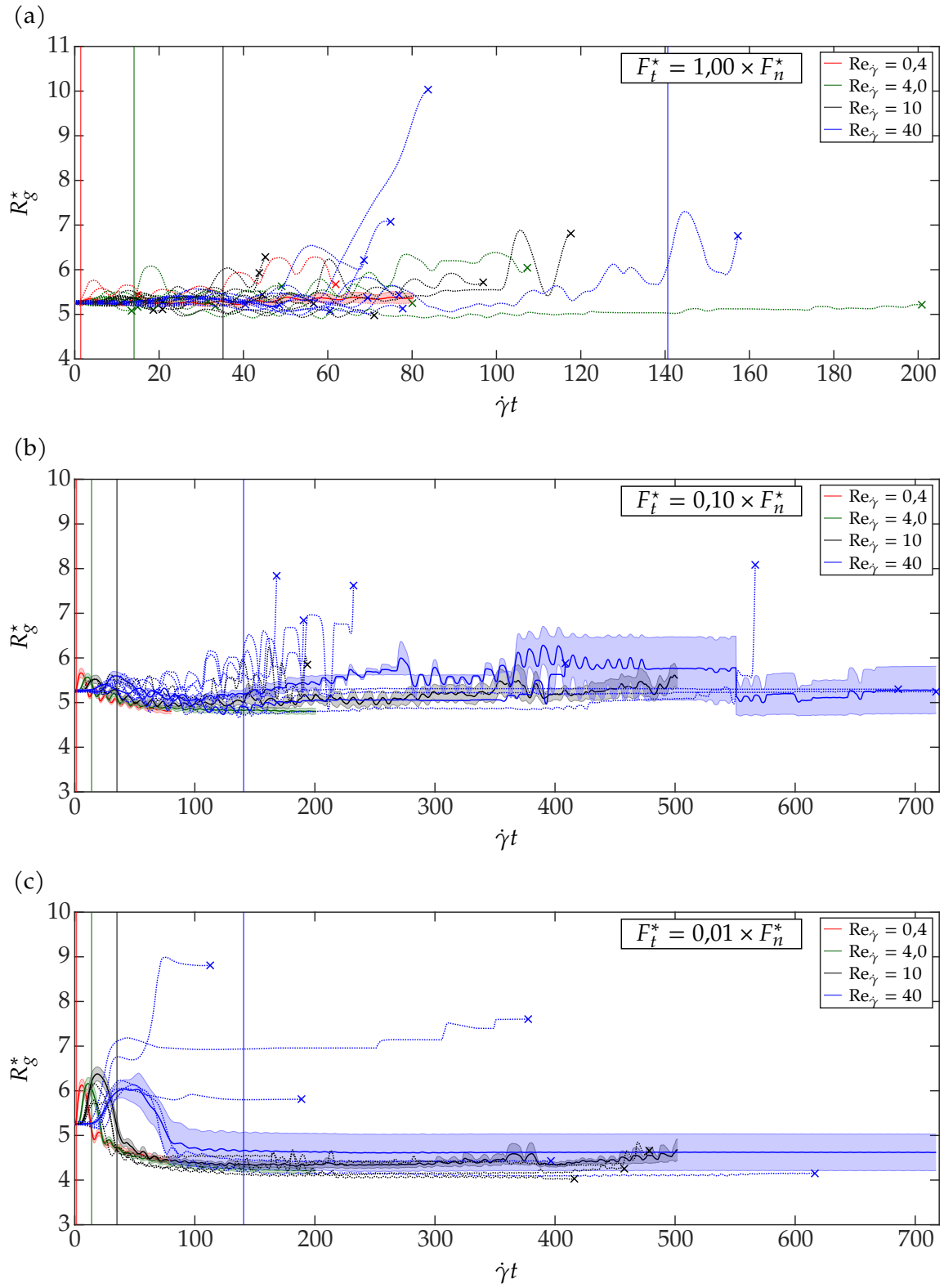


FIGURE 16 – Évolution temporelle d'agrégats pour différents rapports de forces tangentielles (a) $F_t^* = 1,00 \times F_n^*$, (b) $F_t^* = 0,10 \times F_n^*$ et (c) $F_t^* = 0,01 \times F_n^*$ à différents nombres de Reynolds.

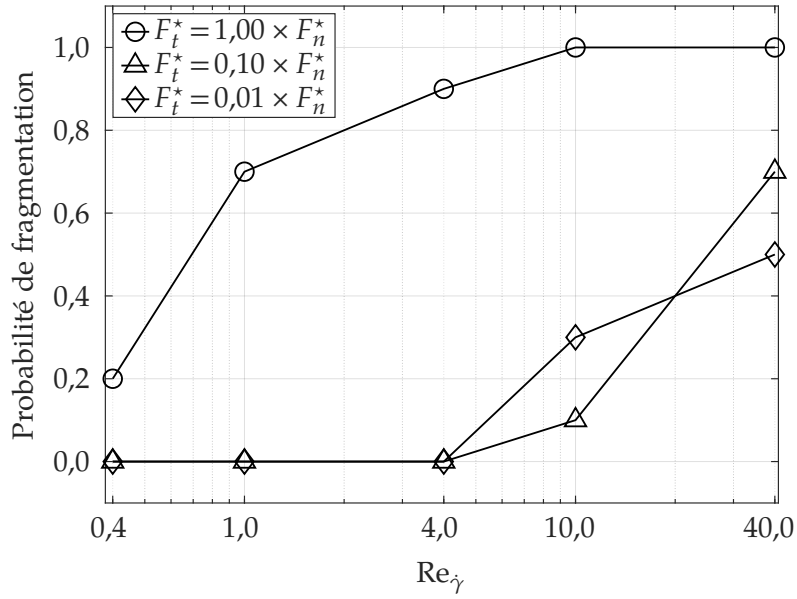


FIGURE 17 – Impact des forces cohésives tangentielles et du nombre de Reynolds sur la probabilité de fragmentation d’agrégats.

majeur dans des écoulements turbulents, puisque les agrégats ne perçoivent alors jamais complètement les pics de cisaillement de la turbulence car ceux-ci ont une durée trop courte. Ainsi, bien que les agrégats fragmentent davantage à nombre de Reynolds élevé, cet effet est compensé dans le cas de la turbulence par une réponse dynamique qui induit un comportement inverse dans des écoulements instationnaires. Ces travaux ne sont pas encore publiés mais ils ont déjà été présentés dans le cadre des journées scientifiques du GDR MorPhéA (Kroll-Rabotin *et al.*, 2020b) et la thèse d’Akash Saxena est déjà divisée en chapitres qui ont vocations à être publiés séparément dans des revues scientifiques. Deux autres publications dans des journaux scientifiques avec revue par des pairs sont donc prévues suite à ce travail et sont déjà très avancées dans leur rédaction puisque la thèse, elle, est publiée (Saxena, 2021).

3.3 Dépôt d’inclusions aux parois d’un réacteur

Enfin la thèse de Manoj Joishi (2019), financée par le Labex DAMAS et co-encadrée par Jean-Pierre Bellot et moi, a utilisé le code de simulation *Flua* pour calculer l’écoulement de couche limite turbulente à la paroi d’un réacteur en poche par simulation numérique directe (Direct Numerical Simulation, DNS) et y étudier le dépôt d’inclusions. Ce travail se distingue fortement des deux précédents sur les aspects numériques puisque pour simuler une turbulence aux bonnes propriétés, le nombre de points de calculs est beaucoup plus élevé. Les simulations ont tourné sur ~ 192 cœurs en combinant les parallélisation OpenMP et Message Passing Interface (~ 16 fils d’exécution OpenMP $\times \sim 12$ processus MPI). Les simulations les plus consommatrices sont même allées jusqu’à 384 cœurs mobilisés (32×12) pour calculer les régimes transitoires longs avant de parvenir à une turbulence complètement développée et un régime statistiquement établi.

3.3.1 Modélisation d'un l'écoulement représentatif

Dans un réacteur en poche, l'écoulement dans le réacteur est provoqué par injection de gaz. Les panaches de bulles qui remontent à la surface apportent une quantité de mouvement ascendante qui entraîne des recirculations dans la poche et mettent en mouvement l'ensemble du liquide, notamment à proximité des parois. De plus, le nombre de Reynolds relativement élevé des bulles et leurs interactions de sillage provoquent de la turbulence (ou pseudo-turbulence) dans le panache, elle même transportée dans l'écoulement. À la paroi du réacteur, la turbulence peut donc provenir de deux origines : les cisaillements pariétaux induits par l'écoulement, et la turbulence produite par les bulles qui diffuse depuis la région externe de la couche limite. Ce phénomène peut jouer un rôle très important sur le transport et le dépôt des inclusions. Sur une surface libre, l'absence de cisaillement pariétal implique même que toute la turbulence provient de la zone externe.

Dans cette étude, une couche limite turbulente représentative de l'écoulement à la paroi d'un réacteur en poche a été simulée en imposant à la fois une contrainte de cisaillement dans l'écoulement, et une production de turbulence à l'extérieure de la couche limite. Le principe de ces simulations est schématisé à la Figure 18. L'écoulement est alors caractérisé par deux paramètres, le nombre de Reynolds de couche limite et l'intensité de la turbulence dans la zone externe. Trois intensités différentes ont été simulées : 0%, 10% et 20%.

Pour simuler une couche limite avec production de turbulence à la paroi et apport depuis la zone externe, le domaine de simulation est découpé en deux zones. La zone au contact de la paroi, bloc en pointillés rouges du bas sur la Figure 18, contient l'écoulement modèle de la couche limite à la paroi d'un réacteur. À la paroi, la condition d'adhérence impose une vitesse nulle et l'écoulement dans cette zone est contrôlé par une contrainte de cisaillement constante imposée à l'opposé de la paroi sous force d'une force surfacique, représentée par des flèches vertes sur la Figure 18. La contrainte de cisaillement moyenne est donc constante dans toute cette zone de l'écoulement, et égale à la valeur imposée sur

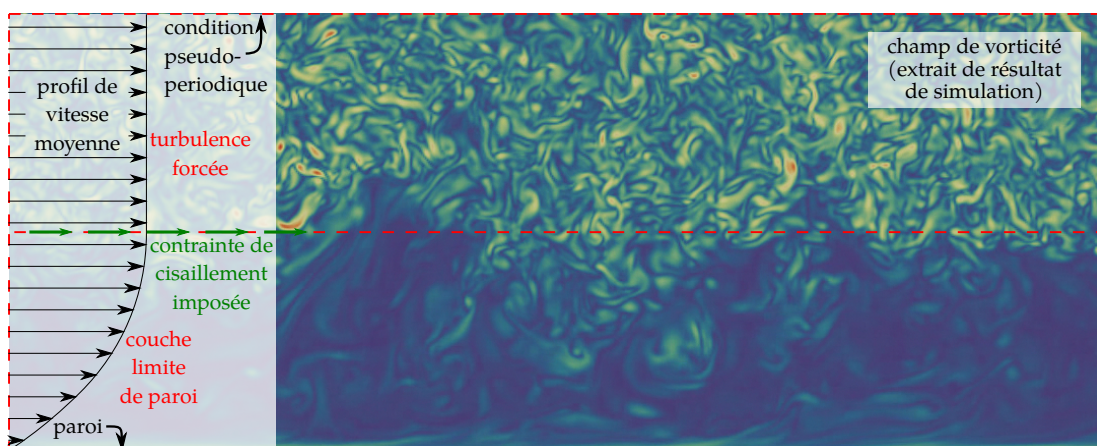


FIGURE 18 – Principe de simulation d'une couche limite turbulente avec forçage dans la zone externe.

la surface. Au dessus de cette surface, une zone non-cisaillée est ajoutée dans laquelle un forçage est ajouté pour simuler la turbulence apportée à la couche limite par l'écoulement externe (bulles dans le réacteur). Pour assurer une contrainte et un taux de cisaillement moyens nuls dans cette région, une condition « glissante » doit être imposée à l'opposé du plan de cisaillement. Cependant, une condition limite de glissement ne conviendrait pas car elle forcerait une turbulence très atténuée et anisotrope à sa proximité en imposant une composante normale de vitesse nulle. C'est donc une condition limite « pseudo-périodique » qui a été imposée.

La Figure 19 représente les conditions de périodicité par des flèches doubles. La paroi est représentée par le plan gris et le plan de cisaillement y est indiqué en vert. Le domaine simulé est divisé en 24 sous-domaines, 12 pour la couche limite et 12 pour la zone de forçage de la turbulence, de part et d'autre du plan de cisaillement. Les flèches doubles pointent des faces qui sont mises au contact l'une de l'autre via l'imposition de conditions limites. Les flèches rouges représentent ainsi la périodicité dans la direction transverse. Le domaine de simulation est aussi périodique dans la direction d'écoulement. Les surfaces mises au contact les unes des autres via les doubles flèches bleues sont de même normale sortante. Une condition de « pseudo-périodicité » y est imposée, qui fonctionne comme une condition périodique mais qui en plus change le signe de la composante normale de la vitesse au passage du fluide au travers de la surface (Joishi, 2019). Ceci permet aux petites structures turbulentes de traverser la condition limite pour ne pas perturber le forçage de la turbulence, tout en imposant un flux moyen nul à travers la surface via cette pseudo-périodicité entre la partie amont et la partie aval du domaine.

La turbulence dans la zone externe est contrôlée par un forçage linéaire (Lundgren,

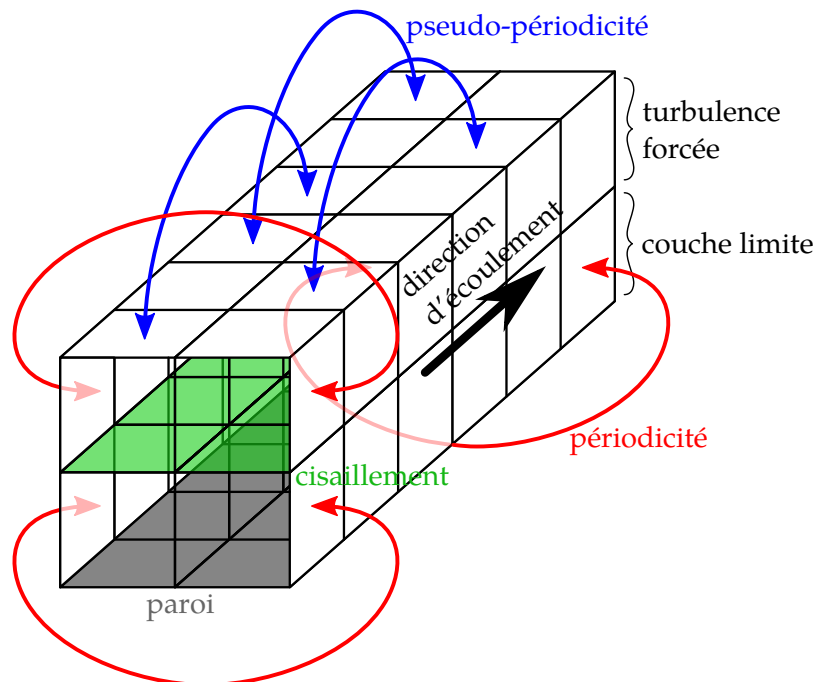


FIGURE 19 – Décomposition du domaine de simulation.

2003 ; Valiño *et al.*, 2009). Dans la zone forcée, un terme source volumique de quantité de mouvement est ajouté (Carroll et Blanquart, 2013), de la forme

$$\frac{\vec{F}}{V} = \frac{\varepsilon}{\langle (\vec{u} - \langle \vec{u} \rangle)^2 \rangle} (\vec{u} - \langle \vec{u} \rangle) \quad (3.31)$$

où le taux de dissipation ε est le paramètre de simulation qui contrôle l'intensité de la turbulence dans la zone forcée et l'opérateur $\langle . \rangle$ est une moyenne qui sépare les contributions de la vitesse $\vec{u}$ à l'écoulement de base et aux fluctuations turbulentes. Ce terme source est ajouté pour la résolution de l'écoulement par LBM dans l'opérateur de collision décrit dans les équations (3.9).

Pour la thèse de Manoj Joishi (2019), l'opérateur de moyenne utilisé était une moyenne glissante temporelle avec diffusion spatiale qui a l'avantage d'avoir une valeur calculée en chaque point du domaine tout en assurant une bonne uniformité de cette valeur et une variation temporelle faible afin de tendre assez rapidement vers une constante quand le régime s'établit, puisque la solution analytique dans la zone de forçage (non-cisaillée) est une valeur constante et uniforme de cette moyenne.

En notant $\vec{e}_x$ le vecteur unitaire orienté selon la direction principale d'écoulement et z la direction normale à la paroi, les vitesses adimensionnelles (indiquées par un exposant +) se calculent à partir de la contrainte de cisaillement pariétale τ (imposée) et des propriétés des fluides (masse volumique ρ et viscosité cinématique ν).

$$z^+ = \frac{1}{\nu} \sqrt{\frac{\tau}{\rho}} z \quad (3.32a)$$

$$u^+ = \sqrt{\frac{\rho}{\tau}} \vec{e}_x \cdot \langle \vec{u} \rangle \quad (3.32b)$$

$$u'^+ = \sqrt{\frac{\rho}{\tau}} \sqrt{\langle (\vec{e}_x \cdot (\vec{u} - \langle \vec{u} \rangle))^2 \rangle} \quad (3.32c)$$

Avec les notations des équations (3.32), l'intensité de la turbulence dans la zone externe est définie comme

$$I = \frac{u'^+}{u_{\text{externe}}^+} \quad (3.33)$$

où u_{externe}^+ est la valeur de la vitesse moyenne adimensionnelle à l'extérieur de la couche externe, dans la zone de forçage. Pour des raisons liées à l'opérateur de moyenne utilisé détaillées dans Joishi (2019), les intensités turbulentes effectives sont légèrement supérieures à celles imposées au travers des paramètres du forçage turbulent, et dans les résultats présentés ici sont respectivement de 23,2% et 13,3% au lieu des 20% et 10% ciblés. J'ai réglé ce problème en changeant d'opérateur de moyenne lors de mon travail préparatoire à l'arrivée de Hamid Bellache pour octobre 2022, dont le sujet de thèse portera sur la poursuite de ces simulations.

La Figure 20 trace les profils de vitesse moyenne et fluctuante en fonction de la distance à la paroi pour deux valeurs différentes d'intensité turbulente imposée dans la zone externe. Les profils de vitesse moyenne sont en excellente cohérence avec la loi logarithmique de paroi dans la zone inertielle $30 \leq z^+ \leq 200$ (Hoyas et Jiménez, 2006). La sous-couche visqueuse correspond bien à un profil linéaire pour $z^+ \leq 5$ et la zone tampon

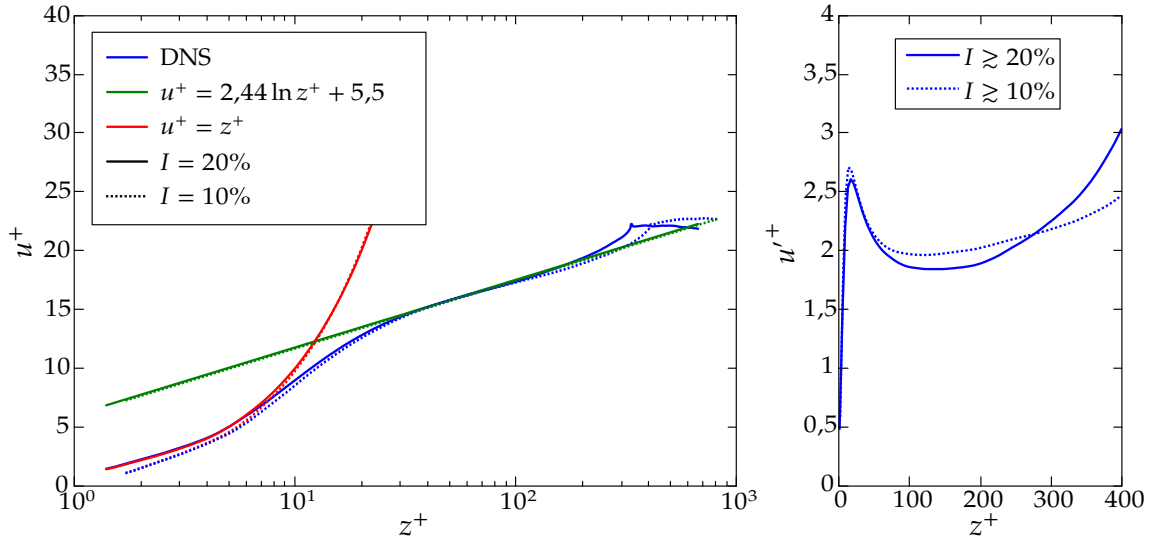


FIGURE 20 – Profils adimensionnels de vitesse moyenne et fluctuante en fonction de la distance à la paroi.

apparaît bien pour $5 \leq z^+ \leq 30$ entre les profils linéaire et logarithmique. Pour $z^+ \gtrsim 200$ le profil simulé se distingue du profil logarithmique : on atteint la zone externe de la couche limite et les vitesses d'écoulement sont supérieures à la loi logarithmique avant d'atteindre un plateau qui correspond à la zone de forçage dans laquelle le profil de vitesse moyenne est plat. Dans la zone de forçage, l'écoulement moyen est uniforme et la turbulence est contrôlée par le forçage décrit à l'équation (3.31). Les profils des fluctuations de vitesse, Figure 20, montrent que l'amplitude des fluctuations de vitesse dans la couche limite est impactée par la turbulence qui diffuse depuis la zone externe, mais que le pic à la paroi est très peu changé car il est piloté par les cisaillements pariétaux, imposés via la contrainte de cisaillement indépendamment de l'intensité turbulente dans la zone externe.

3.3.2 Transport et dépôt de particules

Une fois les simulations de couche limite turbulente validées, notamment dans le cas où l'intensité turbulente dans la zone externe est nulle, largement traité dans la littérature scientifique (Moser *et al.*, 1999 ; Schlatter *et al.*, 2009), le dépôt de particules a pu être étudié avec, dans un premier temps, des traceurs pour valider l'implémentation du suivi lagrangien, puis des aérosols pour valider quantitativement les vitesses de dépôt avec celles disponibles dans la littérature (Wood, 1981 ; Parker *et al.*, 2008 ; Tang *et al.*, 2015).

Par définition, les aérosols sont des particules de très petite taille beaucoup plus denses que le fluide qui les transporte. Du fait de leur petite taille, l'écoulement autour de ces particules est à faible nombre de Reynolds et la force de traînée qui s'applique sur eux peut être estimée à partir de la solution analytique de Stokes. Comme leur rapport de masse volumique avec le fluide est très élevé, la traînée est la force prédominante qui s'exerce sur eux. Leur équation du mouvement peut donc être résumée à l'équilibre de

leur inertie avec la force de traînée :

$$\frac{\pi}{6}\rho_p d_p^3 \frac{d}{dt} \vec{v}_p = 3\pi\mu d_p (\vec{u} - \vec{v}_p) \quad (3.34)$$

Si l'on suppose un changement brusque de la vitesse d'écoulement $\vec{u}$ de $\vec{U}$ à $\vec{0}$, pour une particule initialement à l'équilibre dans l'écoulement, soit $\vec{v}_p = \vec{U}$ à $t = 0$, l'équation (3.34) a pour solution

$$\vec{v}_p = \vec{U} \exp\left(-\frac{t}{t_p}\right) \text{ avec } t_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu} \quad (3.35)$$

Le comportement d'aérosols transportés dans un écoulement peut donc être caractérisé par le rapport de leur temps de réponse à une variation de l'écoulement (t_p) avec un temps caractéristique de l'écoulement (t_f), ce rapport étant le nombre de Stokes

$$St = \frac{t_p}{t_f} \quad (3.36)$$

En prenant comme temps caractéristique pour l'écoulement celui de la turbulence en proche paroi $t_f = \mu/\tau$, pilotée par la contrainte de cisaillement τ , le nombre de Stokes devient alors

$$St = \frac{\rho_p d_p^2 \tau}{18\mu^2} \quad (3.37)$$

Après avoir validé le comportement de traceurs ($3\pi\mu d_p (\vec{u} - \vec{v}_p) = \vec{0}$, soit $\vec{v}_p = \vec{u}$), une équation similaire à l'équation (3.34) a été implémentée dans les simulations du transport d'aérosols, y ajoutant le terme correctif de Faxén (1922) pour la traînée, susceptible de jouer un rôle significatif en proche paroi (Maxey et Riley, 1983).

$$\frac{\pi}{6}\rho_p d_p^3 \frac{d}{dt} \vec{v}_p = 3\pi\mu d_p (\vec{u} - \vec{v}_p) + \frac{\pi}{8}\mu d_p^3 \nabla^2 \vec{u} \quad (3.38)$$

La Figure 21 présente des profils de concentration d'aérosols dans la couche limite turbulente à proximité de la paroi. Sur cette figure, les aérosols à faible nombre de Stokes

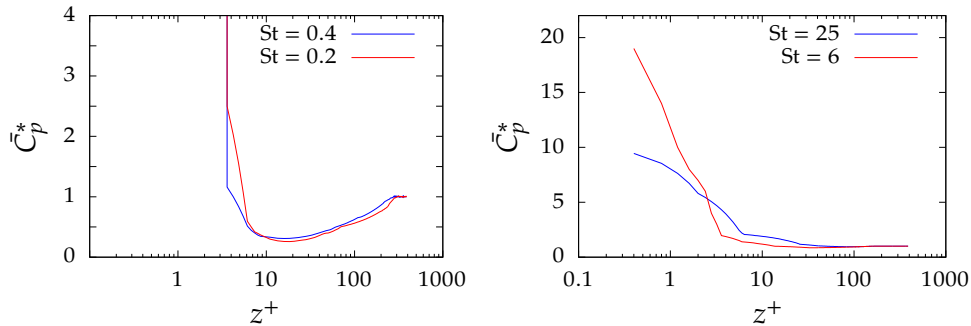


FIGURE 21 – Profils de concentration d'aérosols dans une couche limite turbulente.

($St = 0.2$ et 0.4) sont tracés sur un graphique différent des nombres de Stokes élevés ($St = 6$ et 25) car les valeurs des concentrations diffèrent trop pour être représentées sur un même axe. Les concentrations $\bar{C}_p^*$ dont sont tracés les profils sont adimensionnées par la concentration en particules dans la zone de forçage, c'est-à-dire par la concentration en dehors de la couche limite. Par construction, toutes les courbes de la Figure 21 doivent donc terminer par un plateau de valeur $\bar{C}_p^* = 1$ pour les valeurs de z^+ supérieures à ≈ 300 .

Toutes les courbes montrent une concentration plus élevée des aérosols à proximité de la paroi. En effet, dans toute la couche limite les aérosols sont transportés vers la paroi par turbophorèse, c'est-à-dire par éjection des zones de turbulence intense vers les zones de turbulence moindre, jusqu'à atteindre la paroi où la turbulence s'éteint complètement par adhérence du fluide à la paroi. Les profils de concentration diffèrent toutefois significativement entre les Stokes faibles ($St < 1$) qui présentent un minimum de concentration à l'intérieur de la couche limite et les Stokes élevés ($St > 1$) qui présentent des profils de concentration à l'allure monotone. Dans tous les cas, le maximum est toujours à la paroi, avec même des valeurs énormes (qui ne rentrent pas dans les axes de la Figure 21) pour les faibles Stokes

$$\max \bar{C}_p^*(St = 0.2) \approx 470 \quad (3.39a)$$

$$\max \bar{C}_p^*(St = 0.4) \approx 150 \quad (3.39b)$$

Le maximum de concentration confirme que le choix du temps caractéristique pour l'écoulement à partir de la turbulence de paroi est justifié physiquement. En effet, une concentration très élevée dans cette région traduit que les particules y arrivent plus facilement qu'elles n'en sortent et que c'est donc la turbulence locale en proche paroi qui limite (et donc pilote) le dépôt des particules à la paroi. Dans ces conditions, la vitesse de dépôt des particules à la paroi n'est pas sensible à l'intensité turbulente dans la zone externe. La Figure 22 représente la vitesse de dépôt adimensionnée, la compare à différentes données disponibles dans la littérature sur les aérosols (Wells et Chamberlain, 1967; Wood, 1981; Liu et Agarwal, 1974; Sharma et Phares, 2006; Phares et Sharma, 2006; Tang *et al.*, 2015) et montre que la vitesse obtenue par nos simulations est en parfait accord avec la littérature qui ne prend pas en compte de forçage dans la zone externe. La vitesse de dépôt adimensionnelle a pour expression

$$u_d^+ = \frac{\varphi_d}{\bar{C}_p} \sqrt{\frac{\rho}{\tau}} \quad (3.40)$$

où φ_d est la densité de flux par unité de surface et de temps du volume de particules qui touchent la paroi et y sont capturées.

Néanmoins, la très faible vitesse de dépôt associée à une concentration très élevée au voisinage de la paroi soulève une question importante pour la capture des inclusions à la paroi d'une poche d'affinage. En effet, les particules peu inertielles qui arrivent dans la zone en proche paroi où la turbulence est quasiment nulle ne se déposent pas mais ne sortent pas non plus de cette région faute de force motrice (turbophorèse); bien que n'atteignant pas la paroi, elles sont en pratique extraites du réacteur et se concentrent dans une peau fine en proche paroi. La vitesse de dépôt définie précédemment n'est donc pas forcément un bon critère pour quantifier la capture aux parois dans un procédé métallurgique. De plus, la paroi réelle d'un réacteur n'est pas parfaitement lisse et le dépôt réel des

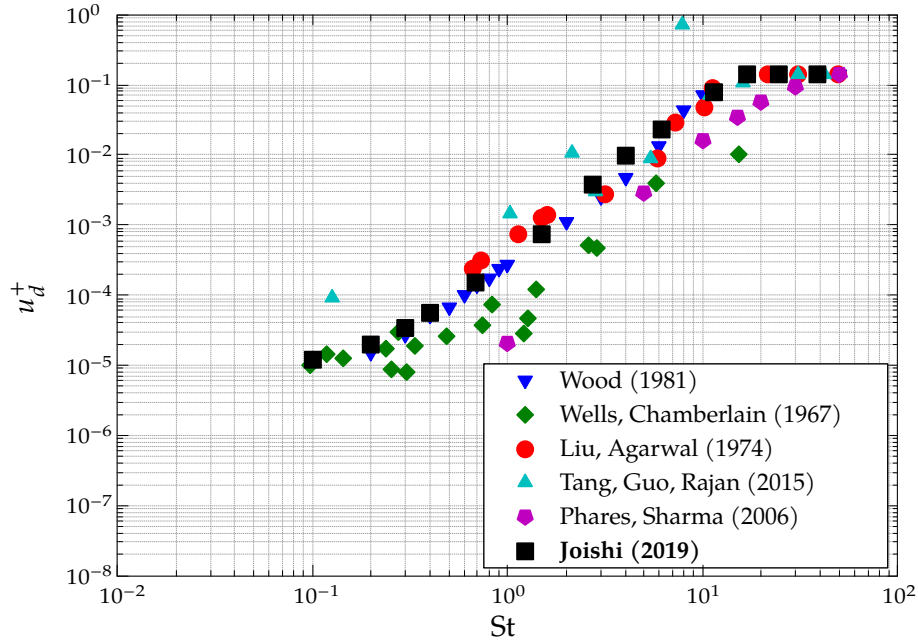


FIGURE 22 – Vitesse adimensionnelle de dépôt d’aérosols dans un couche limite turbulente en fonction du nombre de Stokes : comparaison des résultats de DNS avec la littérature.

particules inclusionnaires peut être favorisé par les rugosités de surface qui promeuvent la turbulence en très proche paroi.

Cependant, l’étude des aérosols n’est pas directement transposable aux inclusions. En effet, l’équation (3.38) est beaucoup trop simplifiée pour des particules dont la masse volumique est du même ordre de grandeur que celle du fluide qui les transporte (hydrosols). Les forces de flottabilité, du gradient de pression dynamique et de masse ajoutée, voire même d’histoire peuvent jouer des rôles significatifs (Maxey et Riley, 1983 ; Sommerfeld, 2000).

Après la validation de l’approche dans le cas des aérosols, l’application aux hydrosols (cas des inclusions) a été amorcée dans le travail de thèse de Manoj Joishi (2019) et a permis d’identifier des difficultés numériques spécifiques. Le travail de Manoj Joishi (2019) a résolu un certain nombre de ces difficultés, notamment en augmentant l’ordre de la fonction d’interpolation des propriétés l’écoulement à la position des particules, mais il n’a pas été possible de lancer une campagne de simulation du dépôt d’hydrosols dans le temps imparti pour ce doctorat. Les résultats quantitatifs tels que la modélisation et la paramétrisation de la vitesse de dépôt en fonction des propriétés de la turbulence restent à produire, mais son travail a mis en place une méthode de calcul par DNS des vitesses de dépôt sur une paroi, inspirée par les études menées au laboratoire Lumière, Matière et Interfaces de CentraleSupélec (Xayasenh *et al.*, 2013 ; Dupuy *et al.*, 2014, 2016) mais reposant sur une résolution par LBM. Cette méthodologie sera reprise à partir d’octobre 2022 dans le cadre d’un autre doctorat, celui d’Hamid Bellache, que je co-encadrerai avec mon collègue Pierre Chapelle, pour reprendre ces simulations et les étendre au dépôt de particules sur des surfaces libres. En effet, les inclusions non métalliques sont souvent

moins denses que le métal liquide et se déposent de manière privilégiée à l'interface avec le laitier en surface du bain, plutôt qu'aux parois, et cette interface est plus proche d'une surface libre glissante que d'une paroi adhérente (Xayasenh *et al.*, 2013). Le problème ressemble donc à celui étudié par Manoj Joishi (2019) mais cette fois toute la turbulence, et donc une part importante de la force motrice du dépôt, provient de la zone externe car sans cisaillement pariétal il n'y a pas de turbulence produite par l'interface assimilable à une condition de glissement.

4 Conclusion

En couplant une méthode de Boltzmann sur réseau à une méthodes des éléments discrets avec une méthode de frontière immergée, j'ai développé un outil de simulation numérique qui permet de résoudre de manière couplée la dynamique d'un fluide à celle des particules qu'il transporte. Cet outil a été utilisé dans le cadre de trois thèses, menées en parallèle sous ma co-direction, pour modéliser des mécanismes fondamentaux du transport et de l'interaction entre particules dans une phase liquide afin de prendre en compte leurs impacts sur les comportements globaux de populations de particules à l'échelle de procédés. Ces travaux de recherche étant inscrits dans les thématiques de l'équipe « Procédés d'Élaboration », ils s'appliquent directement aux procédés métallurgiques et au contrôle de la propreté inclusionnaire dans ces procédés. Cependant, en s'intéressant aux mécanismes fondamentaux, les résultats obtenus sont finalement applicables à de large gammes de particules solides dans des procédés variés, des agrégats colloïdaux aux aérosols.

Les trois études présentées précédemment s'inscrivent dans une démarche de long terme de compréhension et de modélisation des comportements de populations de particules dans les procédés. En effet, de ces études découlent de nouveaux travaux déjà engagés. Les noyaux de fragmentation déterminés via le travail d'Akash Saxena (2021) sont utilisés par un étudiant en master à University of Alberta que je co-encadre avec R.S. Sanders pour ajuster des bilans de population sur les données expérimentales d'un doctorant dans la même équipe. Les travaux de Matthieu Gisselbrecht (2019) sur les noyaux d'agrégations sont au cœur des problématiques du post-doc d'Ashok Das qui travaille avec Thibault Quatravaux et moi sur les bilans de populations multivariées pour suivre les évolutions en taille, en composition chimique et en morphologie des inclusions au cours des étapes d'agrégation dans un réacteur en poche. La méthodologie mise en place dans le cadre de la thèse de Manoj Joishi (2019) servira de base au travail de Hamid Bellache, qui rejoindra l'équipe « Procédés d'Élaboration » pour un doctorat à partir d'octobre 2022. Finalement, tous ces travaux convergent vers un objectif commun de progresser à la fois sur la compréhension des mécanismes physiques en jeu et des outils mathématiques pour les représenter afin de mieux appréhender et prédire les comportements de particules dans les procédés. Si les applications en vue sont essentiellement métallurgiques, la physique sous-jacente et les aspects mathématiques s'avèrent transverses à de multiples domaines, ce qui permet aux études motivées par les domaines d'intérêt de mon équipe « Procédés d'Élaboration » de répondre à des enjeux scientifiques généraux.

Au delà de l'intérêt scientifique d'une telle démarche généralisable, cela permet aussi de manière plus pragmatique de maintenir des relations de collaboration scientifique dans

le domaine du génie des procédés avec des collègues intéressés par des applications différentes. C'est à ce titre que je suis impliqué depuis son ébauche dans le GDR Morphologie et Phénomènes d'Agrégation et que je participe à ce jour à son renouvellement sous la forme d'un réseau thématique.

5 Références

- Adler P. : Heterocoagulation in shear flow. *Journal of Colloid and Interface Science*, 83(1) : 106–115, 1981.
- Balakin B., Hoffmann A. C. et Kosinski P. : The collision efficiency in a shear flow. *Chemical Engineering Science*, 68(1) : 305–312, 2012.
- Becker V. et Briesen H. : Tangential-force model for interactions between bonded colloidal particles. *Physical Review E*, 78(6) : 061404, 2008.
- Bellot J. P., Defay B., Jourdan J., Chapelle P. et Jardy A. : Inclusion behavior during the electron beam button melting test. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 21(10) : 2140–2146, 2012.
- Bellot J.-P., Kroll-Rabotin J.-S., Gisselbrecht M., Joishi M., Saxena A., Sanders R. S. et Jardy A. : Toward better control of inclusion cleanliness in a gas stirred ladle using multiscale numerical modeling. *Materials*, 11(7) : 1179, 2018.
- Besra L., Sengupta D. K., Roy S. K. et Ay P. : Studies on flocculation and dewatering of kaolin suspensions by anionic polyacrylamide flocculant in the presence of some surfactants. *International Journal of Mineral Processing*, 66(1) : 1–28, 2002.
- Bhatnagar P. L., Gross E. P. et Krook M. : A model for collision processes in gases. I. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Physical Review*, 94(3) : 511–525, 1954.
- Bouzidi M., Firdaouss M. et Lallemand P. : Momentum transfer of a Boltzmann-lattice fluid with boundaries. *Physics of Fluids*, 13(11) : 3452–3459, 2001.
- Buick J. M. et Cosgrove J. A. : Investigation of a lattice Boltzmann model with a variable speed of sound. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 39(44) : 13807–13815, 2006.
- Carroll P. L. et Blanquart G. : A proposed modification to Lundgren's physical space velocity forcing method for isotropic turbulence. *Physics of Fluids*, 25(10) : 105114, 2013.
- Chacon S. et Straub B. : *Pro Git (Second Edition)*. Apress, 2014. ISBN 978-1-4842-0077-3.
- Conchuir B. O., Harshe Y. M., Lattuada M. et Zaccone A. : Analytical model of fractal aggregate stability and restructuring in shear flows. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 53(22) : 9109–9119, 2014.

- Cournil M., Gruy F., Gardin P. et Saint-Raymond H. : Modelling of solid particle aggregation dynamics in non-wetting liquid medium. *Chemical Engineering and Processing : Process Intensification*, 46(12) : 586–597, 2006.
- Cundall P. A. et Strack O. D. : A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 29(1) : 47–65, 1979.
- Curcic M. : *Modern Fortran : Building efficient parallel applications*. Manning Publications Co., 2020. ISBN 978-1-6172-9528-7.
- Daoud I. L. A., Rimbert N., Jardy A., Oesterlé B., Hans S. et Bellot J.-P. : 3D modeling of the aggregation of oxide inclusions in a liquid steel ladle : two numerical approaches. *Advanced Engineering Materials*, 13(7) : 543–549, 2011.
- Derjaguin B. V., Churaev N. V. et Muller V. M. : The Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeek (DLVO) theory of stability of lyophobic colloids. In *Surface Forces*, p. 293–310. Springer US, Boston, MA, 1987. ISBN 978-1-4757-6639-4.
- De Bona J., Lanotte A. S. et Vanni M. : Internal stresses and breakup of rigid isostatic aggregates in homogeneous and isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 755 : 365–396, 2014.
- D’Humières D., Ginzburg I., Krafczyk M., Lallemand P. et Luo L.-S. : 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, 2002.
- Dupuy M., Xayasenh A., Duval H. et Waz E. : Analysis of non-Brownian particle deposition from turbulent liquid-flow. *AIChE Journal*, 62(3) : 891–904, 2016.
- Dupuy M., Xayasenh A., Waz E., Le Brun P. et Duval H. : Analysis of particle deposition from turbulent liquid-flow onto smooth channel walls. In *10th International Conference on CFD in Oil & Gas, Metallurgical and Process Industries*, Trondheim, Norway, 2014.
- Eggels J. G. M. et Somers J. A. : Numerical simulation of free convective flow using the lattice-Boltzmann scheme. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 16(5) : 357–364, 1995.
- Faxén H. : Der Widerstand gegen die Bewegung einer starren Kugel in einer zähen Flüssigkeit, die zwischen zwei parallelen ebenen Wänden eingeschlossen ist. *Annalen der Physik*, 373(10) : 89–119, 1922.
- Fayed H. E. et Ragab S. A. : Direct numerical simulation of particles-bubbles collisions kernel in homogeneous isotropic turbulence. *The Journal of Computational Multiphase Flows*, 5(3) : 167–188, 2013.
- Frungieri G., Bäbler M. U. et Vanni M. : Shear-induced heteroaggregation of oppositely charged colloidal particles. *Langmuir*, 36 : 10739–10749, 2020.

- Frungieri G. et Vanni M. : Dynamics of a shear-induced aggregation process by a combined Monte Carlo-Stokesian Dynamics approach. *In Proceedings of the 9th International Conference on Multiphase Flow*, 2016.
- Ginzbourg I. et Adler P. M. : Boundary flow condition analysis for the three-dimensional lattice Boltzmann model. *Journal de Physique II*, 4(2) : 191–214, 1994. Publisher : EDP Sciences.
- Gisselbrecht M. : *Simulation des interactions hydrodynamiques entre inclusions dans un métal liquide : établissement de noyaux d'agrégation dans les conditions représentatives du procédé de flottation*. Thèse de doctorat, Université de Lorraine, 2019. URL <http://theses.fr/2019LORR0073>.
- Gisselbrecht M., Kroll-Rabotin J.-S. et Bellot J.-P. : Aggregation kernel of globular inclusions in local shear flow : application to aggregation in a gas-stirred ladle. *Metallurgical Research & Technology*, 116(5) : 512, 2019.
- Gmachowski L. : Calculation of the fractal dimension of aggregates. *Colloids and Surfaces A : Physicochemical and Engineering Aspects*, 211(2) : 197–203, 2002.
- Guha A. : Transport and deposition of particles in turbulent and laminar flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 40 : 311–341, 2008.
- Guo S., Feng Y., Jacob J., Renard F. et Sagaut P. : An efficient lattice Boltzmann method for compressible aerodynamics on D3Q19 lattice. *Journal of Computational Physics*, 418 : 109570, 2020.
- Guérin L., Frances C., Liné A. et Coufort-Saudejaud C. : Fractal dimensions and morphological characteristics of aggregates formed in different physico-chemical and mechanical flocculation environments. *Colloids and Surfaces A : Physicochemical and Engineering Aspects*, 560 : 213–222, 2019.
- Haddadi H. et Morris J. F. : Topology of pair-sphere trajectories in finite inertia suspension shear flow and its effects on microstructure and rheology. *Physics of Fluids*, 27(4) : 043302, 2015.
- Harshe Y. M. et Lattuada M. : Breakage rate of colloidal aggregates in shear flow through stokesian dynamics. *Langmuir*, 28(1) : 283–292, 2012.
- Harshe Y. M. et Lattuada M. : Universal breakup of colloidal clusters in simple shear flow. *The Journal of Physical Chemistry B*, 120(29) : 7244–7252, 2016.
- Hoyas S. et Jiménez J. : Scaling of the velocity fluctuations in turbulent channels up to $Re_\tau=2003$. *Physics of Fluids*, 18(1) : 011702, 2006.
- Ierusalimsky R. : *Programming in Lua, 4th edition*. Lua.org, 2016. ISBN 978-8-5903-7986-7.

- Inamuro T., Yoshino M. et Ogino F. : Accuracy of the lattice Boltzmann method for small Knudsen number with finite Reynolds number. *Physics of Fluids*, 9(11) : 3535–3542, 1997.
- Joishi M. : *Étude numérique du dépôt de particules dans une couche limite avec un forçage turbulent dans la zone externe*. Thèse de doctorat, Université de Lorraine, 2019. URL <http://theses.fr/2019LORR0251>.
- Kroll-Rabotin J.-S., Hashemi S. A., Sungkorn R., Derksen J. J. et Sanders R. S. : Large Eddy Simulation of a solid-liquid fluidized bed using the lattice-Boltzmann method and a soft-sphere collision model. In *Ninth International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries*, Melbourne, Australia, 2012. CSIRO.
- Kroll-Rabotin J.-S., Gisselbrecht M., Ott B., May R., Fröhlich J. et Bellot J.-P. : Multiscale simulation of non-metallic inclusion aggregation in a fully resolved bubble swarm in liquid steel. *Metals*, 10 : 517, 2020a.
- Kroll-Rabotin J.-S., Saxena A. et Sanders R. S. : Numerical investigation of aggregate behavior under shear flow in low and finite Reynolds number conditions. In *Journées Scientifiques du GDR MorPhéA*, Aubervilliers, 2020b. GDR 2021 Morphologie et Phénomènes d'Agrégation.
- Kroupa M., Vonka M., Soos M. et Kosek J. : Size and structure of clusters formed by shear induced coagulation : Modeling by Discrete Element Method. *Langmuir*, 31(28) : 7727–7737, 2015.
- Kusters K. : *The influence of turbulence on aggregation of small particles in agitated vessels*. Phd Thesis 1 (Research TU/e / Graduation TU/e), Technische Universiteit Eindhoven, Eindhoven, 1991.
- Kusters K. A., Wijers J. G. et Thoenes D. : Aggregation kinetics of small particles in agitated vessels. *Chemical Engineering Science*, 52(1) : 107–121, 1997.
- Ladd A. J. C. et Verberg R. : Lattice-Boltzmann simulations of particle-fluid suspensions. *Journal of Statistical Physics*, 104(5) : 1191–1251, 2001.
- Lappan T., Sarma M., Heitkam S., Mannes D., Trtik P., Shevchenko N., Eckert K. et Eckert S. : X-ray and neutron radiographic experiments on particle-laden molten metal flows. In *Materials Processing Fundamentals 2021*, p. 13–29. Springer International Publishing, 2021.
- Liu B. Y. H. et Agarwal J. K. : Experimental observation of aerosol deposition in turbulent flow. *Journal of Aerosol Science*, 5(2) : 145–155, 1974.
- Lundgren T. S. : Linearly forced isotropic turbulence. Rap. tech. Defense Technical Information Center Compilation Part Notice ADP014826, Center for Turbulence Research, 2003.

- Maxey M. R. et Riley J. J. : Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow. *The Physics of Fluids*, 26(4) : 883–889, 1983.
- May R., Gruy F. et Fröhlich J. : Impact of particle boundary conditions on the collision rates of inclusions around a single bubble rising in liquid metal. *PAMM*, 18(1) : e201800029, 2018.
- Mehel A., Tanière A., Oesterlé B. et Fontaine J.-R. : The influence of an anisotropic langevin dispersion model on the prediction of micro-and nanoparticle deposition in wall-bounded turbulent flows. *Journal of Aerosol Science*, 41(8) : 729–744, 2010.
- Message Passing Interface Forum : *MPI : A Message-Passing Interface Standard*. URL <https://www.mpi-forum.org/docs/>.
- Moser R. D., Kim J. et Mansour N. N. : Direct numerical simulation of turbulent channel flow up to $Re_\tau=590$. *Physics of Fluids*, 11(4) : 943–945, 1999.
- Nguyen N.-Q. et Ladd A. J. C. : Lubrication corrections for lattice-Boltzmann simulations of particle suspensions. *Physical Review E*, 66(4) : 046708, 2002.
- Niu X. D., Shu C., Chew Y. T. et Peng Y. : A momentum exchange-based immersed boundary-lattice Boltzmann method for simulating incompressible viscous flows. *Physics Letters A*, 354(3) : 173–182, 2006.
- OpenMP Architecture Review Board : *OpenMP Application Programming Interface*. URL <https://www.openmp.org/specifications/>.
- Parker S., Foat T. et Preston S. : Towards quantitative prediction of aerosol deposition from turbulent flows. *Journal of Aerosol Science*, 39(2) : 99–112, 2008.
- Peskin C. S. : Flow patterns around heart valves : a numerical method. *Journal of Computational Physics*, 10(2) : 252–271, 1972.
- Peskin C. S. : The immersed boundary method. *Acta Numerica*, 11 : 479–517, 2002.
- Phares D. J. et Sharma G. : A DNS Study of Aerosol Deposition in a Turbulent Square Duct Flow. *Aerosol Science and Technology*, 40(11) : 1016–1024, 2006.
- Pumir A. et Wilkinson M. : Collisional aggregation due to turbulence. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 7(1) : 141–170, 2016.
- Roma A. M., Peskin C. S. et Berger M. J. : An Adaptive Version of the Immersed Boundary Method. *Journal of Computational Physics*, 153(2) : 509–534, 1999.
- Ruckenstein E. : The Instability of the Solid–Liquid Interface and the Hydrophobic Force. *Journal of Colloid and Interface Science*, 83(1) : 218–223, 1997.

- Saffman P. G. F. et Turner J. S. : On the collision of drops in turbulent clouds. *Journal of Fluid Mechanics*, 1(1) : 16–30, 1956.
- Saxena A. : *Aggregate evolution in shear flow : numerical investigation of the role of cohesive and hydrodynamic forces*. Thèse de doctorat, Université of Alberta, 2021. URL <https://era.library.ualberta.ca/items/755080fb-73f4-4094-804f-3f17c9962e1d>.
- Saxena A., Kroll-Rabotin J.-S. et Sanders R. S. : Numerical investigation of the respective role of cohesive and hydrodynamic forces in aggregate restructuring under shear flow. *Journal of Colloid and Interface Science*, 608(1) : 355–365, 2022.
- Saxena A., Kroll-Rabotin J.-S. et Sanders R. S. : A numerical approach to model aggregate restructuring in shear flow using DEM in lattice-Boltzmann simulations. In *Progress in Applied CFD – CFD 2017*, p. 761–772, Trondheim, Norway, 2017. SINTEF.
- Schlatter P., Örlü R., Li Q., Brethouwer G., Fransson J. H. M., Johansson A. V., Alfredsson P. H. et Henningson D. S. : Turbulent boundary layers up to $Re_\theta=2500$ studied through simulation and experiment. *Physics of Fluids*, 21(5) : 051702, 2009.
- Selomulya C., Bushell G., Amal R. et Waite T. D. : Understanding the role of restructuring in flocculation : The application of a population balance model. *Chemical Engineering Science*, 58(2) : 327–338, 2003.
- Serra T. et Casamitjana X. : Structure of the aggregates during the process of aggregation and breakup under a shear flow. *Journal of Colloid and Interface Science*, 206(2) : 505–511, 1998.
- Sharma G. et Phares D. J. : Turbulent transport of particles in a straight square duct. *International Journal of Multiphase Flow*, 32(7) : 823–837, 2006.
- Singh V., Koch D. L. et Stroock A. D. : Ideal rate of collision of cylinders in simple shear flow. *Langmuir*, 27(19) : 11813–11823, 2011.
- Smagorinsky J. : General circulation experiments with the primitive equations : I. the basic experiment. *Monthly Weather Review*, 91(3), 1963.
- Smoluchowski M. V. : Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider Lösungen. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, 92U(1) : 129–168, 1918.
- Sommerfeld M. : Theoretical and experimental modeling of particulate flows. Lecture Series 2000–06. von Karman Institute for Fluid Dynamics, Belgium, 2000.
- Sonntag R. C. et Russel W. B. : Structure and breakup of flocs subjected to fluid stresses : I. Shear experiments. *Journal of Colloid and Interface Science*, 113(2) : 399–413, 1986.
- Stevens A. B. et Hrenya C. M. : Comparison of soft-sphere models to measurements of collision properties during normal impacts. *Powder Technology*, 154(2) : 99–109, 2005.

- Sungkorn R. et Derksen J. J. : Simulations of dilute sedimenting suspensions at finite-particle Reynolds numbers. *Physics of Fluids*, 24(12) : 123303, 2012.
- Tang Y., Guo B. et Ranjan D. : Numerical simulation of aerosol deposition from turbulent flows using three-dimensional RANS and LES turbulence models. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, 9(1) : 174–186, 2015.
- Tsai C.-J., Lin J.-S., Aggarwal S. G. et Chen D.-R. : Thermophoretic deposition of particles in laminar and turbulent tube flows. *Aerosol Science and Technology*, 38 : 131–139, 2004.
- Valiño L., Martín J. et Hází G. : Dynamics of isotropic homogeneous turbulence with linear forcing using a Lattice Boltzmann Method. *Flow, Turbulence and Combustion*, 84(2) : 219–237, 2009.
- Van Ende M.-A. : *Formation and morphology of non-metallic inclusions in aluminium killed steels*. Thèse de doctorat, UCL - Université Catholique de Louvain, 2010.
- Vanni M. et Baldi G. : Coagulation efficiency of colloidal particles in shear flow. *Advances in Colloid and Interface Science*, 97(1) : 151–177, 2002.
- Vlieghe M., Coufort-Saudejaud C., Liné A. et Frances C. : QMOM-based population balance model involving a fractal dimension for the flocculation of latex particles. *Chemical Engineering Science*, 155 : 65–82, 2016.
- Wells A. C. et Chamberlain A. C. : Transport of small particles to vertical surfaces. *British Journal of Applied Physics*, 18(12) : 1793–1799, 1967.
- Wood N. B. : A simple method for the calculation of turbulent deposition to smooth and rough surfaces. *Journal of Aerosol Science*, 12(3) : 275–290, 1981.
- Xayasenh A., Dupuy M., Joly L. et Duval H. : Direct numerical simulation of oxide inclusion turbulent deposition at liquid steel/slag interface. In *8th International Conference on Multiphase Flow*, Jeju, South Korea, 2013.
- Zaichik L. I., Simonin O. et Alipchenkov V. M. : Collision rates of bidisperse inertial particles in isotropic turbulence. *Physics of Fluids*, 14(8) : 035110, 2006.
- Zaichik L. I., Simonin O. et Alipchenkov V. M. : Turbulent collision rates of arbitrary-density particles. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53(9) : 1613–1620, 2010.
- Zhao B. et Zhang B. : Comparison of different order Adams-Bashforth methods in an atmospheric general circulation model. *Acta Meteorologica Sinica*, 25(6) : 754–764, 2011.
- Zhuo C., Liu R., Zhao Z., Zhang Y., Hao X., Wu H. et Sun Y. : Effect of rare Earth cerium content on manganese sulfide in U75V heavy rail steel. *Metals*, 12(6) : 1012, 2022.

Projet scientifique

IV



Sommaire

1	Simulation numérique pour la modélisation de procédés	73
1.1	Simulation numérique directe	73
1.2	Bilans de populations	75
1.3	Couplage avec des modèles thermochimiques	76
2	Procédés pyrométallurgiques	77
2.1	Mesures de propriétés thermophysiques des liquides à haute température	77
2.2	Approche multi-échelle pour la modélisation de procédés . . .	79
2.3	Comportements inclusionnaires	80
3	Procédés pour les transitions écologique et énergétique	83
3.1	Séparation physique	83
3.2	Recyclage	85
4	Conclusion	87
5	Références	87

Très tôt dans ma formation, je me suis intéressé à la modélisation de procédés. En préparation au TIPE en première année de classe préparatoire, j'avais choisi de développer un modèle simple d'un procédé d'émulsion alimentaire par jet, dont était équipé le laboratoire de Génie des Procédés Alimentaires et Biotechnologiques (GPAB) à Dijon. Cet exercice a aussi été l'occasion de m'auto-former sur des problématiques de mécanique des fluides. Ces premiers contacts avec le génie des procédés et la mécanique des fluides ont ensuite orienté mon parcours de formation, des stages jusqu'à ma thèse au Laboratoire de Génie Chimique à Toulouse puis en post-doctorat dans le groupe de recherche sur les Procédés de Transport en Pipeline à Edmonton, Canada. À chaque étape, je me concentrais un peu plus précisément sur les procédés polyphasiques et la modélisation du transport et des interactions mécaniques entre phases liquides et solides.

Depuis 2013, j'ai intégré l'équipe « Procédés d'Élaboration » de l'IJL où j'applique ma recherche aux procédés métallurgiques. Encore un fois, c'est en mettant à profit mes compétences de mécanicien des fluides et en simulation numérique que je m'atèle à la modélisation des procédés de traitement du métal liquide.

Le projet que je propose ici s'inscrit dans la continuité de cette démarche pour mieux comprendre et modéliser les comportements locaux d'agrégats solides transportés dans une phase liquide et prendre en compte leurs effets à l'échelle des procédés, notamment des procédés métallurgiques responsables du contrôle de la propreté inclusionnaire. Dans ce projet, je souhaite poursuivre mes études sur des procédés industriels et continuer à m'inscrire dans une démarche de réponse à des problématiques industrielles. Cependant, la compréhension et la modélisation des procédés polyphasiques se heurte rapidement aux limites des connaissances actuelles sur les phénomènes locaux, à l'échelle de particules individuelles ou de quelques agrégats. Les applications aux procédés constituent donc aussi une motivation pour m'intéresser aux mécanismes fondamentaux des comportements d'agrégats et de maintenir une activité de recherche sur des aspects plus fondamentaux.

1 Simulation numérique pour la modélisation de procédés

Mes travaux en modélisation de procédés ont parfois reposé partiellement sur des approches expérimentales, mais ma spécialité est avant tout la simulation numérique. Je compte donc mettre à profit mes compétences en la matière pour développer des outils de simulations spécifiques aux écoulements polyphasiques, et plus particulièrement le comportement de phases dispersées dans un liquide. Grâce à ces outils numériques dédiés, j'étudierai les mécanismes fondamentaux qui régissent le comportement de particules transportées dans un liquide et la prise en compte de leurs effets à l'échelle de l'écoulement de suspensions dans les procédés.

1.1 Simulation numérique directe

Le cadre de simulation numérique en Fortran que je développe depuis 2014, *Flua*, constitue un atout majeur pour la simulation numérique directe de comportements de phases solides dispersées, voir Figure 23, grâce à la simplicité qu'il offre pour y implé-

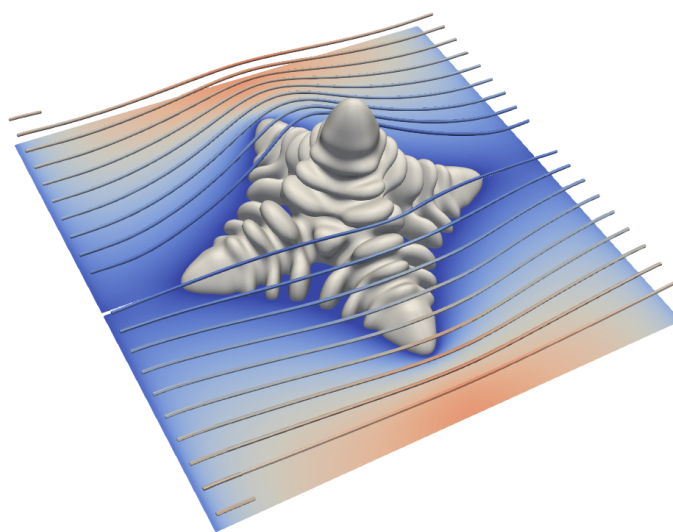


FIGURE 23 – Exemple de simulation d’écoulement autour de géométries complexes avec *Flua* : ici un grain de solidification dendritique dans le cadre du parcours recherche de Thomas Zielinski à l’École des Mines de Nancy, que j’ai co-encadré avec Miha Založnik de l’équipe « Solidification » à l’IJL. La géométrie du grain provient de simulations par champ de phase (Tourret *et al.*, 2020).

menter et tester de nouveaux modèles, et ses relativement bonnes performances en calcul parallèle. Parmi les améliorations importantes que je compte implémenter, une méthode alternative de frontière immergée mobile reposant sur la méthode publiée par Bouzidi *et al.* (2001) en plus de l’actuelle d’après Niu *et al.* (2006) permettra de simuler des particules moins denses que le liquide qui les transporte, afin de prendre en compte les effets d’inertie (nombre de Stokes) dans le cas des inclusions. Une autre évolution des frontières immergées que je compte implémenter est la possibilité d’y imposer des conditions limites plus variées que le seul non-glissement. Le glissement partiel entre les inclusions et le métal liquide environnant dû à la présence de nano-bulles sur la surface est un paramètre dont l’impact potentiel sur l’agrégation d’inclusions a été identifié pendant la thèse de Matthieu Gisselbrecht (2019) mais n’a pas encore pu être étudié quantitativement.

Les frontières immergées mobiles sont à l’heure actuelle toujours inexistantes ou à l’état de prototypes difficiles à utiliser dans les principaux logiciels de simulation numérique des fluides tels qu’*ANSYS Fluent* et *OpenFOAM*. Un code adapté à des utilisations en recherche et implémentant des modèles complexes d’interface, tel que *Flua*, restera encore pour au moins une dizaine d’années un outil de prédilection pour simuler les comportements de particules et d’agrégats à l’échelle locale et alimenter les simulations à plus grande échelle en modèles de comportements locaux. C’est d’ailleurs grâce à ce code de simulation que j’entretiens des relations scientifiques étroites avec le groupe de recherche sur les procédés de transport en pipeline du Pr Sanders à l’Université d’Alberta avec qui j’ai encadré la thèse d’Akash Saxena (Saxena *et al.*, 2017, 2022) et je co-encadre actuellement un étudiant en master, Ricardo Andrade Rossi.

Les modèles de restructuration (évolution morphologique) et de fragmentation d’agrégats soumis à un écoulement cisailé que j’ai contribué à établir à partir de simu-

lations numériques directes répondent aux besoins de recherches en génie chimique à l'Université d'Alberta, ainsi qu'à ceux des membres du GDR 2021 Morphologie et Phénomènes d'Agrégation, notamment au Laboratoire de Génie Chimique à Toulouse et au Toulouse Biotechnology Institute. Les modèles de dépôt et d'agrégation quant à eux s'appliquent directement aux comportements inclusionnaires dans les procédés d'affinage d'alliages métalliques, qui sont la spécialité de mon équipe de recherche à l'IJL.

1.2 Bilans de populations

À l'opposé de la simulation numérique directe sur l'échelle des volumes simulés, la simulation de procédé nécessite des outils numériques dans lesquelles les comportements locaux sont modélisés. Des modèles de comportements locaux doivent donc être déterminés pour tous les phénomènes qui impactent l'évolution collective de populations de particules. Par exemple, la thèse de Manoj Joishi (2019) a permis d'avancer vers la détermination de modèles de capture des inclusions par dépôt aux parois d'une poche d'affinage d'acier. Celle de Matthieu Gisselbrecht (2019) a permis de déterminer des noyaux d'agrégation et de les utiliser dans des bilans de populations pour simuler le comportement d'inclusions dans une poche d'acier (Gisselbrecht *et al.*, 2019) et à l'échelle plus locale d'un panache de bulles (Kroll-Rabotin *et al.*, 2020). Cette dernière a aussi permis de commencer à quantifier les impacts de la morphologie des particules sur leur cinétique d'agrégation, mais cette étude se heurte à deux difficultés importantes : d'une part elle multiplie les paramètres et alourdit la détermination des noyaux via une approche locale, et d'autre part elle nécessite de décrire la morphologie dans la représentation macroscopique de la population de particules. C'est pourquoi je souhaite développer des bilans de populations multivariées, dans lesquels les populations d'inclusions sont distribuées à la fois en taille et selon un paramètre morphologique. À cette fin, ma participation au GDR MorPhéA me permet de bénéficier de l'expertise de collègues tant sur les méthodes de résolution de bilans de populations appropriées pour de telles distributions (Liné et Frances, 2016; Auger *et al.*, 2020), que sur des quantificateurs morphologiques pertinents (Lagarrigue *et al.*, 2010; Gruy, 2015).

L'approche par bilans de populations est applicable à tout procédé dans lequel on s'intéresse au transport et à l'évolution des individus qui composent une population, et dont l'évolution dépend à la fois de paramètres propres à l'individu et de son environnement local, par exemple des bactéries dans les procédés biotechnologiques (Olmos *et al.*, 2013) ou des grains dendritiques qui se forment lors des processus de solidification (Olmedilla *et al.*, 2019). Ainsi, au delà des besoins de développer de tels outils pour l'étude des comportements inclusionnaires, l'utilisation de bilans de populations multivariées comme suivi Eulérien d'une phase transportée distribuée selon plusieurs propriétés constitue aussi une opportunité de collaborations avec d'autres équipes proches de l'IJL, d'autres laboratoires nancéiens comme le LRGP et d'autres laboratoires français comme le LGC et TBI à Toulouse.

Cependant, c'est bien dans le cas de cinétiques pilotées par les interactions entre les populations (agrégation, fragmentation) que cette approche constitue à la fois un outil puissant et un objet de recherche à part entière. En permettant de suivre le transport de populations distribuées selon plusieurs paramètres, les bilans de populations multiva-

riées répondent à la nécessité de prendre en compte la morphologie des inclusions et son impact sur les cinétiques d'agrégation et de capture des inclusions qui limite les modélisations actuelles des procédés d'affinage du métal liquide. Pour ce faire, je compte continuer à développer des noyaux d'interactions spécifiques pour les objets étudiés, à savoir ici des inclusions non-métalliques aux géométries et aux couplages avec la phase liquide complexes (morphologies variées, glissement partiel) et les utiliser pour alimenter les simulations aux plus grandes échelles au travers de bilans de populations. De manière générale, la modélisation des phénomènes d'agrégation, de fragmentation et de restructuration d'agrégats et la quantification de leurs cinétiques resteront au cœur de ma recherche, tant dans le cas d'inclusions que pour des applications plus générales transposables aux colloïdes, à la floculation par polymères ou aux bio-réacteurs, qui alimentent notamment mes collaborations avec l'Université d'Alberta au Canada, mon implication dans le GDR MorPhéA et mes interactions avec le LRGP à Nancy (par exemple dans le projet de PEPR Recyclage présenté en section 3.2).

1.3 Couplage avec des modèles thermochimiques

Parmi les couplages que je n'ai pas abordés mais qui sont fondamentaux dans les procédés, notamment métallurgiques, reste celui avec des modèles thermochimiques. La thermodynamique complexe de populations d'inclusions chimiquement hétérogènes devient représentable avec des bilans de populations multivariées dont une variable est la composition chimique. La Figure 24 illustre schématiquement l'évolution en taille, en morphologie et en composition chimique d'agrégats inclusionnaires lors de leur agrégation. Les cinétiques de germination et de croissance des inclusions est l'une des activités sur laquelle mon équipe souhaite se positionner dans son projet pour le prochain quinquennal et les bilans de populations multivariées sont l'outil que je pousse pour développer un modèle multi-échelle et multi-physique couplant les comportements mécaniques des inclusions (agrégation, fragmentation, transport et capture) à leur cinétiques de germination et de croissance. Je suis engagé sur cette thématique depuis début 2022 avec l'embauche d'un chercheur contractuel en post-doctorat, Ashok Das, que je co-encadre avec Thibault Quatravaux, titulaire de la chaire « Métal Liquide » à l'Institut Jean Lamour.

Le développement d'un outil commun incluant les modèles de thermodynamiques et mécaniques est une étape importante pour être capable de simuler à plus long terme des

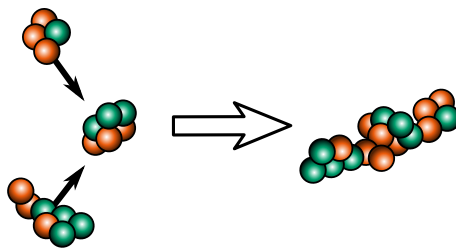


FIGURE 24 – Agrégation et évolution de plusieurs propriétés des inclusions (taille, morphologie et composition chimique, représentée par les couleurs) nécessitant une discrétisation selon plusieurs variables des populations d'inclusions dans les bilans de populations.

évolutions complexes des inclusions dans le métal liquide, impliquant des réactions chimiques et des changements de phase qui se produisent lors de certains traitements usuels tels que le calmage au calcium de l'acier (Castro-Cedeno *et al.*, 2019). Le calcium réagit avec les inclusions sous forme d'oxydes, telles que les alumines, et forme des inclusions qui ne sont plus tout à fait solides, mais se comportent comme une phase très visqueuse (Xi *et al.*, 2021). Un tel changement de composition chimique et de phase implique un changement de morphologie (d'agrégats à des gouttes), et un couplage différent avec l'acier liquide environnant, de solide-liquide à liquide-liquide. Pour être correctement simulée, l'évolution de telles inclusions doit donc prendre en compte le changement de nature physique et chimique des inclusions et des modèles d'interactions mécaniques et de transport qui évoluent en conséquence. Le développement de modèles d'interactions (agrégation et coalescence), pour alimenter des bilans de populations multivariées couplés à des modèles thermodynamiques est donc une voie toute indiquée pour y parvenir, à l'intersection entre mes activités et celles portées par la chaire « métal liquide ». Je compte donc développer ces trois aspects en mettant à profit nos compétences complémentaires pour repousser les limites des simulations de comportements inclusionnaires et améliorer le contrôle des procédés industriels qui l'exploitent, avec une modélisation à la fois multi-échelle et multi-physique de ces comportements.

2 Procédés pyrométallurgiques

Les procédés pyrométallurgiques constituent domaine d'application principal des recherches de mon équipe « Procédés d'Élaboration » à l'Institut Jean Lamour. L'unicité en France des activités de cette équipe, son expertise reconnue internationalement et ses collaborations étroites avec les industriels de la métallurgie en France en font un terrain propice à l'exploitation de mes outils numériques pour répondre à une forte demande industrielle. Mon approche essentiellement numérique complète l'important parc expérimental de cette équipe et l'expertise technique de ses ingénieurs sur les aspects expérimentaux.

Qu'il s'agisse de procédés de traitement et d'affinage du métal liquide, de coulée et de solidification des métaux ou de refusion d'électrode consommable, l'hydrodynamique du métal liquide est centrale pour leur compréhension, leur modélisation et leur optimisation. La dynamique de l'écoulement régit notamment les transports convectifs et diffusifs de solutés, de chaleur et de populations inclusionnaires qui sont trois paramètres essentiels pour contrôler les propriétés mécaniques des métaux et alliages après solidification.

2.1 Mesures de propriétés thermophysiques des liquides à haute température

Aux delà de la complexité des écoulements eux-mêmes (phases multiples de natures variées, turbulence, effets de surface, etc) une difficulté inhérente aux applications métallurgiques est le manque de données sur les propriétés physiques des métaux, alliages et laitiers liquides, et la dépendance de ces propriétés à la température. En effet, ces liquides étant à haute température dans les procédés, il est très difficile de reproduire ces conditions et de les contrôler dans des appareils de mesures. Avec la température, leur réactivité devient aussi problématique ce qui limite les matériaux utilisables pour les contenir et

impose de réaliser les mesures sous des atmosphères très contrôlées (pour éviter l'oxydation notamment). Enfin, ces milieux étant opaques, voire rayonnants, de nombreuses techniques optiques deviennent difficiles à utiliser.

Pourtant, la connaissance des propriétés thermophysiques des métaux, alliages et laitiers est nécessaire à une bonne compréhension des procédés métallurgiques. En effet, qu'il s'agisse d'atomisation, de traitement en poche ou de refusion à l'arc sous vide ou sous laitier conducteur, tous ces procédés sont régis par des gradients thermiques importants, et donc des variations spatiales et temporelles des propriétés physiques des liquides telles que leur viscosité, leur masse volumique et leur tension de surface qui pilotent la dynamique de l'écoulement (turbulence, convection naturelle et effet Marangoni), et donc son mélange, et par conséquent ses hétérogénéités thermique et chimique. Des variations relativement faibles des propriétés physiques peuvent ainsi induire des comportements très différents dans les procédés, et affecter les changements de phase et le transport de solutés et de particules. Les phénomènes aux interfaces (parois, surfaces libres, fronts de solidification), où sont observés les gradients thermiques les plus importants, sont aussi responsables de fonctions clés dans les procédés (capture, agitation, réactions physico-chimiques hétérogènes).

Le laboratoire « Advanced Materials and Processing » à l'Université d'Alberta développe une nouvelle technique de mesure simple, robuste et rentable, présentée en Figure 25. Cette méthode, appelée la « Discharge Crucible Method » (DC) ou « méthode par vidange de creuset », est unique car elle permet de mesurer simultanément la masse volu-

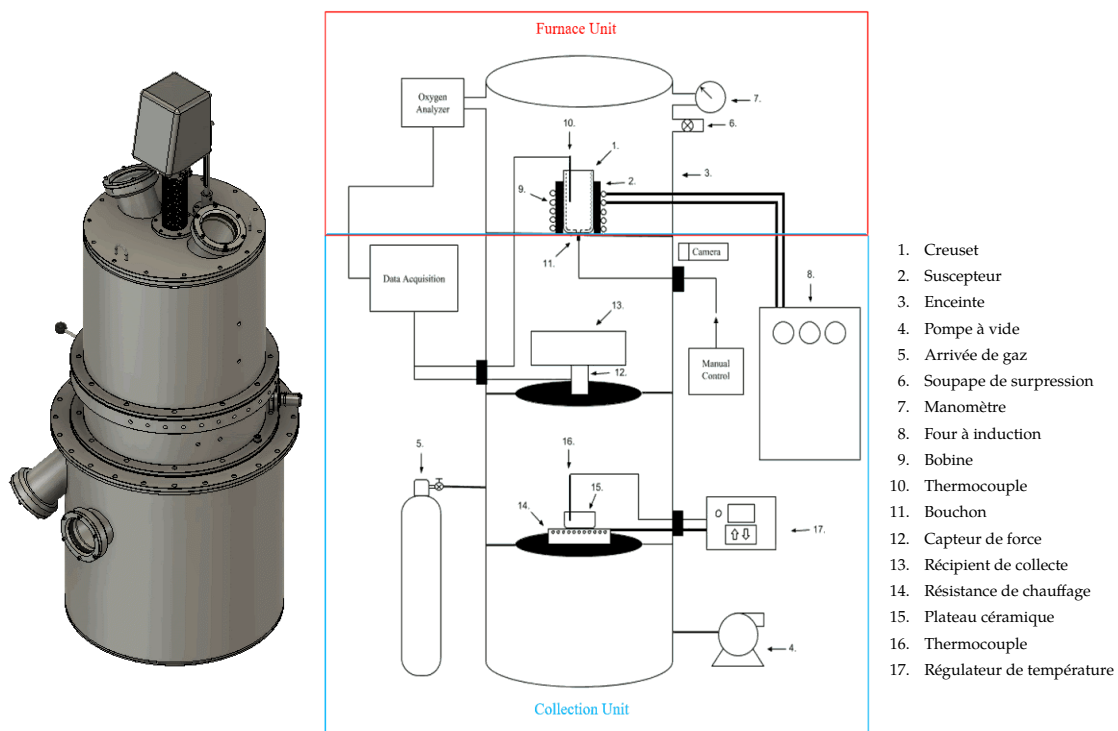


FIGURE 25 – Dispositif expérimental pour la mesure de propriétés thermophysiques par vidange de creuset (Flood, 2020).

mique, la viscosité et la tension de surface en une seule expérience. Elle repose sur un modèle physique prédisant la vitesse d'écoulement par gravité à travers un orifice. L'utilisation d'algorithmes de régression non-linéaire permet de déduire les propriétés du liquide par une méthode inverse d'ajustement du modèle aux données expérimentales. Bien que la méthode a déjà été utilisée avec succès pour un certain nombre de liquides, la qualité des mesures dépend directement de la validité des hypothèses sur lesquels est construit le modèle de vidange et de la sensibilité de ses prédictions aux variables mesurées. Ces deux points sont difficiles à garantir sur des gammes variées de liquides aux propriétés très différentes. Je co-encadre une thèse avec l'Université d'Alberta sur l'amélioration du modèle physique et du traitement des données de la méthode DC pour la rendre plus fiable, plus précise et mieux prédire les conditions optimales de mesures (telles que la géométrie du creuset) en fonction des gammes de valeur des propriétés mesurées. Quentin Champdoizeau effectue sa thèse sur ce sujet sous la direction à l'Université d'Alberta du Pr Henein (Champdoizeau et Henein, 2022).

Ce travail est issu d'une collaboration de longue date entre mon équipe à l'IJL et celle du Pr Henein. Julien Jourdan, ingénieur de recherche dans mon équipe, avait déjà effectué un séjour de 6 mois à l'Université d'Alberta en 2013 (avant que je sois recruté à Nancy) pour développer le dispositif expérimental (Gancarz *et al.*, 2018). Cette collaboration durable est à la base de la signature d'accords cadres entre l'Université d'Alberta et l'IJL, puis avec l'École des Mines de Nancy, et nous portons en ce moment un projet d'accords cadres avec toute l'Université de Lorraine. Nous avons envisagé que la thèse de Quentin Champdoizeau soit la première co-tutelle entre University of Alberta et l'Université de Lorraine mais la signature des accords cadres prenant du temps, cette thèse prend finalement la forme d'une thèse à U of A en co-encadrement entre H. Henein et moi sans reconnaissance administrative à l'UL, à l'image de celle que j'ai déjà co-encadrée avec R.S. Sanders, discutée à la Section 1.1.

Nos besoins communs dans des domaines aussi variés que la compréhension des mécanismes fondamentaux de suspensions polyphasiques, et la mesure des propriétés thermophysiques des métaux liquides me permettent d'entretenir des relations privilégiées avec plusieurs équipes de recherche à l'Université d'Alberta et de mener ensemble des projets en collaboration dans la durée. Je compte entretenir ces collaborations qui associent mes compétences en modélisation aux compétences et aux installations expérimentales à l'Université d'Alberta.

2.2 Approche multi-échelle pour la modélisation de procédés

L'équipe « Procédés d'élaboration » développe depuis une quinzaine d'années des modèles numériques de procédés de traitement du métal liquide couplant l'hydrodynamique polyphasique et les comportements inclusionnaires (Mirgaux *et al.*, 2008; Daoud *et al.*, 2011; Bellot *et al.*, 2014; Waz *et al.*, 2016). Ces modèles permettent de simuler des processus à l'échelle macroscopique des procédés métallurgiques, de l'ordre d'un à quelques mètres. Suite à mon recrutement, j'ai développé des outils et une méthodologie de simulation à l'échelle mésoscopique des inclusions solides (Gisselbrecht, 2019) et des écoulement locaux (Joishi, 2019), de l'ordre du micron au centimètre. Depuis quelques années, notamment avec le démarrage de la chaire « métal liquide », des simulations ont été amorcées

à l'échelle microscopique des petites inclusions, inférieures à la centaine de nanomètres, pour étudier leur germination et leur croissance.

En parallèle de ces études des mécanismes en jeu à différentes échelles, l'équipe a aussi développé des modèles systémiques dans lesquels les procédés d'intérêts sont modélisés sous la forme d'étapes unitaires et intégrés à des filières industrielles entières (Hamadeh *et al.*, 2018 ; Béchara *et al.*, 2018). Au final, l'équipe a acquis une compétence multi-échelle, abordant la modélisation de procédés aux échelles micro-, meso- et macroscopiques jusqu'à la filière industrielle. Cette compétence multi-échelle me semble primordiale à entretenir. Pour ce faire, sans cloisonner les différentes études, il est important que différents membres de l'équipe s'approprient chaque sous partie du problème. Dans ce contexte, il me semble évident que mon positionnement à l'échelle mésoscopique me place à l'interface entre les études aux autres échelles et que mon implication peut être déterminante pour assurer le développement d'une approche multiéchelle cohérente et concertée dans l'équipe.

Une telle approche offre un potentiel important pour développer ou adapter des procédés spécifiques répondant à des enjeux sociétaux prégnants tels que le recyclage. En effet, si l'usage grandissant de matières premières secondaires lève des défis scientifiques et technologiques à différentes étapes et différentes échelles dans les procédés de traitement, l'évaluation de la pertinence technico-économique des solutions n'a de sens qu'à l'échelle de la filière. Il est donc important de renforcer les travaux de recherche impliquant plusieurs membres de l'équipe pour assurer que nos études des processus fondamentaux aux procédés jusqu'à la filière complète s'inscrivent dans une démarche pertinente de réponse aux défis industriels et sociétaux. Mon équipe a un historique important de collaboration étroite entre ses membres, et les recrues plus récentes dont je fais partie ont bien hérité de cette dynamique commune. C'est un fonctionnement déjà bien engagé et que je compte maintenir en continuant à m'impliquer dans des travaux de recherche avec mes autres collègues, au minimum en binôme.

2.3 Comportements inclusionnaires

L'étude des comportements inclusionnaires dans les procédés de traitement et de solidification du métal liquide est à l'intersection entre les procédés pyrométallurgiques et les procédés de séparation physique, et a pour objet une phase solide dispersée dans une phase liquide. Elle mobilise donc l'ensemble de connaissances et compétences détaillées précédemment, des propriétés physiques du métal liquide et de son écoulement, aux comportements des inclusions individuelles et des populations qu'elles composent. C'est aussi un domaine d'étude à fort enjeu industriel. Non seulement le contrôle de la propreté inclusionnaire est un paramètre clé à maîtriser pour améliorer les performances mécaniques des alliages métalliques, mais les inclusions sont aussi la cause de problèmes coûteux au niveau des procédés d'élaboration et de solidification (formation de bouchons lors de la coulée continue par exemple).

L'étude et la modélisation des comportements inclusionnaires est un sujet sur lequel je me suis déjà beaucoup investi, notamment au travers de l'encadrement des thèses de Matthieu Gisselbrecht (2019) et de Manoj Joishi (2019). Je poursuivrai ces études en co-encodrant une thèse avec mon collègue Pierre Chapelle à partir d'octobre 2022, sur le

dépôt de particules transportées dans un écoulement turbulent et son application aux inclusions non-métalliques à proximité de parois et de surfaces libres. Cette étude fait suite à mes travaux sur le transport des inclusions et à ceux de Pierre Chapelle sur les comportements des interfaces (Bansal *et al.*, 2015, 2016) et des inclusions à proximité (Waz *et al.*, 2016).

2.3.1 Environnement et opportunités à l'échelle nationale et européenne

Motivée notamment par les besoins des industriels de la métallurgie en France, l'équipe « Procédés d'Élaboration » a acquis une expertise sur les comportements inclusionnaires reconnue internationalement. Malgré les enjeux industriels importants, elle est la seule équipe académique en France à maintenir une activité de recherche en continu sur cette thématique. J'aimerais donc développer l'intégration de nos recherches à l'échelle européenne et renforcer les interactions scientifiques avec les partenaires académiques en Allemagne (Helmholtz Zentrum Dresden-Rossendorf et TU Dresden), Belgique (KU Leuven), Autriche (U Johannes Kepler et Montanuniversität Leoben) et Suède (KTH). Le colloque « Inclusion Cleanliness » que j'ai co-organisé à Nancy avec Jean-Pierre Bellot (voir Figure 26) a regroupé tous ces acteurs juste avant la crise sanitaire et a marqué une première étape vers une approche concertée sur la problématique inclusionnaire. Cette première étape encourageante n'a pas encore donné de suite, en partie à cause de la crise Covid, mais j'aimerais rétablir les liens avec ces acteurs pour mettre en place une dynamique européenne, à l'image de ce que sont les GDR à l'échelle nationale. Maintenir les interactions scientifiques permettrait d'aboutir à l'élaboration de projets de recherche européens. L'ANR PRCI FLOTINC avec la TU Dresden et le Helmholtz Zentrum Dresden-Rossendorf a été un succès qui pourrait trouver une suite sous la forme d'un projet européen. J'ai aussi maintenu des contacts avec l'équipe de

	Program of the day 8:30 - 9:00 Reception 9:00 Welcome to Institut Jean Lamour 1 Thierry Belmonts 9:10 Introduction to Flatinc project and workshop 1 Jean-Pierre Bellot (J.L. Nancy) 9:20 Micromechanics of solid-liquid suspensions: effects on the dynamics of aggregation and breakup in complex flows 2 Marco Vanni (Politecnico di Torino) 10:00 DNS of bubbles and inclusions in liquid metal 4 Jochen Fröhlich (TU Dresden) 10:30 Poster presentations 7 10:40 - 11:10 Coffee break and poster session 11:10 Impact of local hydrodynamics on the efficiency of shear driven aggregation between inclusions during flotation 8 Jean-Sébastien Kröll-Rabotin (J.L. Nancy) 11:40 Applied numerical simulation of multiphase liquid metal flows 10 Hans-Jürgen Odenthal (SMS group) 12:20 Poster presentations 13 12:30 - 14:00 Lunch 14:00 Items for studying the aggregation of metal oxides in a molten metal 14 Frédéric Gruy (Mines, Saint-Etienne) Sylvain Martin 14:30 Bubble-particle dynamics in liquid metal: Experimental investigations by X-ray radiography and neutron radiography 16 Sven Eckert (HZDR, Dresden-Rossendorf) 15:00 Investigations of non-metallic inclusions and their behavior in the liquid steels and alloys 18 Andrey Karasev (KTH, Stockholm) Björn Glaser	15:40 - 16:10 Coffee break and poster session 16:10 Thermodynamic and kinetic modeling of inclusion precipitation in steel: ArcelorMittal approach 20 Jean Lehmann (ArcelorMittal) 16:50 Simulation of inclusion modification by Ca treatment with coupled CFD-thermodynamic calculations 22 Edgar Castro Cedeño (Aftival) 17:30 - 18:30 Poster session 19:15 - 20:15 Cocktail (at the Guest House of Myon) 20:15 Dinner (at the Guest House of Myon) Informations Addresses 24 Maps 25
---	--	--

FIGURE 26 – Couverture et programme extraits du livret que j'ai réalisé pour le colloque *Inclusion Cleanliness* en 2019 à Nancy.

Politecnico di Torino qui avait participé au colloque « Inclusion Cleanliness » et qui peut apporter son expertise sur les phénomènes d'agrégation entre particules solides dans une phase liquide.

Si le réseau européen existe mais doit davantage s'organiser pour faire émerger une dynamique commune sur les comportements inclusionnaires, les interactions avec les industriels, notamment français, sont déjà un point fort de mon équipe actuelle qu'il faut que je maintienne. En effet, anticipant des renouvellement dans mon équipe, je dois devenir un interlocuteur identifié par les industriels sur les problématiques inclusionnaires, non seulement pour assurer la continuité des interactions actuelles avec mon équipe, mais aussi pour soutenir les échanges scientifiques au niveau européen que je souhaite développer. Grâce aux partenariats passés, l'équipe « Procédés d'Élaboration » a de nombreux contacts, dont de nombreux anciens doctorants, chez ArcelorMittal, Aperam, Affival, Eramet-Aubert & Duval et Vallourec. Les expériences de partenariats fructueux avec ces industriels ont porté sur la thématique inclusionnaire (ANR CIREM par exemple) ou sur des procédés dans lesquels cette problématique joue un rôle important (refusion notamment). Un club d'industriels est déjà structuré pour soutenir les activités de l'équipe sur la modélisation des procédés de refusion (club SOLAR) et la chaire « métal liquide » est soutenue par une partie de ces mêmes industriels pour renforcer l'activité de recherche de l'équipe. Les attentes des ces industriels sont importantes aussi sur la thématique du contrôle de la propreté inclusionnaire et, en y répondant, les collaborations académiques européennes que je compte développer peuvent donc bénéficier de leur soutien.

Dans ce contexte, l'approche par simulation numérique que j'ai détaillée en section 1 de ce projet, notamment aux échelles mésoscopiques et sur la modélisation de l'hydrodynamique, complète très bien les approches expérimentales des potentiels partenaires académiques européens listés plus tôt.

2.3.2 Approche expérimentale ciblée sur les comportements inclusionnaires

Mes spécialités étant les modèles numériques et les simulations plutôt que les approches expérimentales, dans ce projet de recherche j'ai privilégié les collaborations (notamment internationales avec l'Université d'Alberta) pour bénéficier de leurs dispositifs expérimentaux comme indiqué dans les sections 1.1 et 2.1. Cependant, mon équipe de recherche a une expertise expérimentale très riche et ce serait une grave erreur que de ne pas la mettre à profit sur les thématiques que je compte porter. L'ingénieur de recherche de mon équipe, Julien Jourdan, met actuellement sur pied une plateforme expérimentale commune « Élaboration » sur laquelle nous pourrions aussi nous appuyer.

La très faible mouillabilité des inclusions non-métalliques dans les métaux liquides est à l'origine d'interactions très spécifiques qui conditionnent leur agrégation : ponts gazeux, forces de Bjerknes (Cournil *et al.*, 2006 ; Gisselbrecht, 2019). C'est aussi un point crucial pour la compréhension des phénomènes, car les observations dans le métal liquide sont difficiles et donc rares (Lappan *et al.*, 2021), ce qui laisse les simulations numériques presque seules sources d'information, avec peu de moyens de les valider. Heureusement, des collègues de Mines Saint-Étienne ont développé un réacteur de Couette pour agréger des inclusions non métalliques dans un métal liquide à bas point de fusion, dans des conditions de cisaillement contrôlées (Auger *et al.*, 2019). L'équipe qui a développé ce ré-

acteur a cessé cette activité suite à un départ en retraite, et nous avons déménagé leur installation à l'IJL pour que je reprenne cette activité expérimentale prometteuse mais encore peu exploitée. Mon collègue Olivier Mirgaux s'engage avec moi sur cette thématique sur laquelle il a déjà travaillé par le passé (Mirgaux *et al.*, 2008). Cette activité expérimentale sur des phénomènes d'agrégation et de comportements d'agrégats sera aussi un complément utile aux essais réalisés à l'Université d'Alberta sur des systèmes colloïdaux, et mettra à profit, tout en l'entretenant, l'expertise expérimentale de mon équipe à l'IJL avec des métaux liquides.

3 Procédés pour les transitions écologique et énergétique

Sans m'éloigner trop des comportements inclusionnaires et du métal liquide, la métallurgie fait face à de nouveaux enjeux sur lesquels mon équipe de recherche a décidé de mobiliser ses compétences. La demande en matériaux métalliques, croissante à la fois en quantité et en diversité, nécessite des évolutions de la métallurgie extractive, et notamment de développer l'exploitation de nouveaux gisements.

3.1 Séparation physique

Les procédés métallurgiques responsables du contrôle de la propreté inclusionnaire ne sont qu'une forme de procédé de séparation physique d'une phase solide dispersée dans une phase liquide. Aussi les outils que je développe pour l'étude des comportements inclusionnaires et ma compréhension des phénomènes qui les régissent peuvent s'appliquer à des procédés très variés. Le sujet de ma thèse, bien avant que je m'intéresse à la métallurgie, traitait de la dépollution de sédiments de dragage par séparation physique à l'aide d'un concentrateur initialement conçu pour l'exploitation minière. J'ai conservé ce lien avec la séparation physique pour le génie minier en affinant la modélisation du concentrateur *Falcon* avec des collaborateurs de GéoRessources (Dehaine *et al.*, 2019b), voir Figure 27, et en travaillant à la modélisation de *Jig* pour la société hollandaise *Royal IHC* qui a financé le stage de master de Petros Kasaira Mubari.

Je compte maintenir une activité annexe sur les procédés de séparation physique en général pour mettre à profit mes outils numériques et mes modèles pour répondre à des problématiques sociétales plus variées. En effet, afin d'améliorer et de contrôler au plus finement les fonctions et performances mécaniques, le nombre d'éléments chimiques utilisés pour élaborer des matériaux n'a cessé d'augmenter, avec une très forte accélération depuis la révolution industrielle. La Figure 28, extraite d'un kakémono réalisé par Joël Guilherme lors de son stage que j'ai co-encadré sur la vulgarisation scientifique pour le département SI2M de l'IJL, illustre ces évolutions technologiques.

Une conséquence de l'augmentation de la diversité des éléments d'alliages utilisés est une augmentation des besoins en métaux dits rares. Ces métaux ne sont pas si rares que ça en matière de ressources naturelles disponibles, mais leur exploitation actuelle ne permet pas de répondre à la croissance de leur demande. C'est le cas par exemple de coproduits miniers, qui sont produits lors de l'exploitation d'un autre minerai. Leur teneur dans le

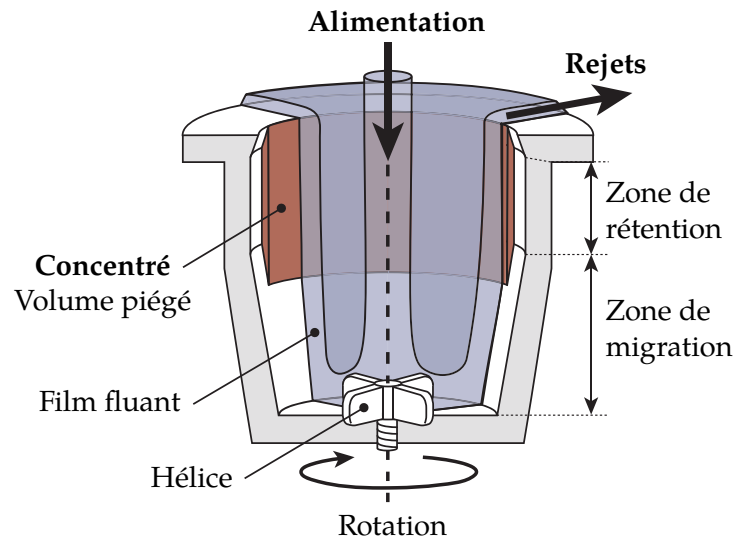


FIGURE 27 – Schéma de fonctionnement d'un concentrateur gravimétrique *Falcon* d'après Kroll-Rabotin *et al.* (2012) et Dehaine *et al.* (2019b).

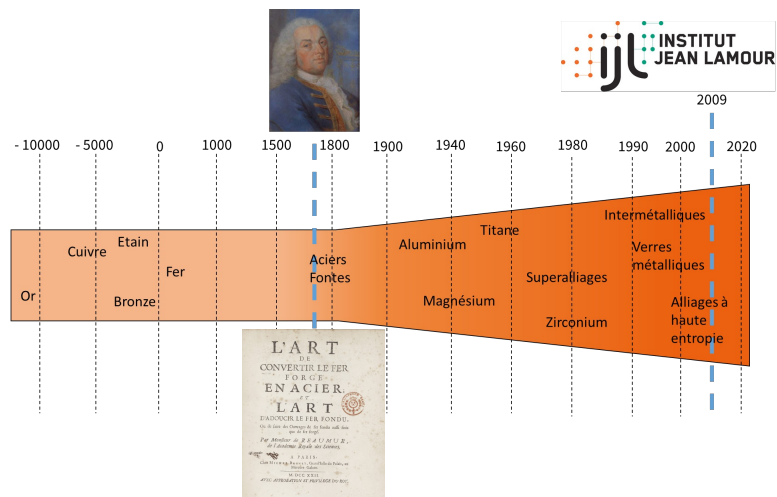


FIGURE 28 – Frise chronologique de l'utilisation des différents alliages métalliques par les humains, y situant la date de création de l'Institut Jean Lamour ainsi que la période d'activité du ferronnier d'art qui lui a donné son nom.

minerais extraits est trop faible pour être économiquement viable à elle seule mais leur tension sur le marché est bien supérieure à celle du produit principal. Ceci conduit à une augmentation rapide de leur prix et par conséquent à une réévaluation de la valeur financière des gisements existants, et éventuellement au besoin de développer des filières d'extraction spécifiques (Yang *et al.*, 2016). Ainsi par exemple, les rejets d'exploitation du passé peuvent s'avérer des ressources économiquement viables dans les conditions actuelles du marché. Dans un contexte industriel différent, c'est par exemple le cas des ultrafines de charbon (Ramudzwagi *et al.*, 2020) sur la séparation desquelles j'ai déjà travaillé (Kroll-Rabotin *et al.*, 2013). Des régions dont l'activité minière a disparu peuvent aussi retrouver un intérêt économique. Par exemple, en France, l'exploitation de kaolin à Beauvoir pourrait bien se révéler intéressante pour un certain nombre de terres rares (Cuney *et al.*, 1992; Dehaine *et al.*, 2019a). Sur ce dernier exemple, j'ai encadré des projets d'élèves sur la pré-concentration par séparation physique avec des collègues de GeoRessources qui étudient l'intégration de concentrateurs *Falcon*, illustré en Figure 27, dans les étapes amont de la filière de traitement de ce minerai (Filippov *et al.*, 2016; Dehaine *et al.*, 2017).

3.2 Recyclage

Le recyclage répond aussi au besoin croissant en matières premières mais constitue un défi scientifique majeur : pour répondre à des contraintes de performances mécaniques de plus en plus strictes, les alliages métalliques ont évolué vers des compositions chimiques de plus en plus complexes, voire vers des composites, qui sont désormais très difficiles à séparer. Les filières de recyclage de métaux dits stratégiques doivent donc reposer sur des traitements chimiques coûteux et aux impacts environnementaux lourds pour exploiter ces gisements. Pour être en mesure d'exploiter ces gisements aux propriétés variées et teneurs complexes telles que les « mines urbaines », il faut développer de nouvelles filières. La voie hydrométallurgique et chimique est nécessaire, mais pour maîtriser les impacts environnementaux, il peut être avantageux d'y substituer en partie des traitements pyrométallurgiques ou simplement mécaniques (Foucaud *et al.*, 2019) où mes compétences en séparation physique s'appliquent très bien. Le développement de filières combinant pyro- et hydrométallurgie pour le recyclage d'aimants néodymes est déjà un sujet d'étude qui a amorcé une collaboration entre mon équipe de recherche, la chaire « métal liquide » de l'IJL et le laboratoire GeoRessources, et je compte m'impliquer dans ces travaux et leurs suites. Je suis aussi partie prenante dans un projet sur le recyclage de cartes électroniques par bioloxydation en collaboration avec le LRGP à Nancy et le BRGM à Orléans : ce projet a initialement été soumis à l'ANR sans succès, nous l'avons donc adapté pour répondre à l'appel à projet « PEPR – Recyclage ciblé Métaux stratégiques » (Hubau *et al.*, 2020) pour lequel nous attendons les résultats de la sélection.

Pour la grande catégorie des métaux de base (aluminium, acier, ...) les procédés de recyclage pyrométallurgiques sont utilisés depuis longtemps. Grâce à leur coût économique, énergétique et environnemental avantageux, ils devancent même largement la production par l'extraction : par exemple, en 2012, le recyclage de 285 000 t de cannettes en aluminium au Japon (soit 94,7%) a représenté une économie d'énergie de 6 TWh (International Aluminium Institute, 2018). Bien que pour ces métaux les procédés existent, les quantités produites par recyclage sont telles que toute optimisation a un potentiel si-

gnificatif, motivant une activité de recherche continue sur le sujet. Mon implication sur la thématique du recyclage a ainsi déjà commencé avec la thèse de Widad Ayadh que je co-encadre avec J.-P. Bellot, démarrée en 2021, sur la modélisation et la simulation du procédé de refusion PAMCHR, illustrée en Figure 29, pour le recyclage de titane aéronautique. Ce projet, intitulé « TIARE », financé dans le cadre de l'ANR-PIA4 et porté par l'Institut de Recherche Technologique « Matériaux Métallurgie et Procédés » (IRT-M2P) réunit Safran, Aubert&Duval pour ÉcoTitanium et l'Institut Jean Lamour. Cette application industrielle à un procédé de recyclage est en lien direct avec le reste de mes activités puisque une part importante du travail mené à l'IJL consiste à modéliser et simuler le transport et la dissolution de défauts solides lors du recyclage du titane. S'ancrant pleinement dans ma thématique de recherche sur les inclusions, ce projet me permet de mettre à profit mes compétences pour répondre à des enjeux économiques et sociétaux de première importance. En effet, l'un des objectifs industriels de cette étude est de qualifier le four d'Écotitanium pour le recyclage de titane de qualité aéronautique, ce qui est une étape fondamentale pour les partenaires industriels pour produire du titane à forte valeur ajoutée. L'enjeu surpasse toutefois les attentes des industriels partenaires du projet puisqu'il s'agit en pratique de mettre en place la première filière en France de recyclage de titane, métal stratégique pour l'avenir de l'industrie européenne (Louvigné, 2018). Bien que les copeaux d'usinage sont déjà recyclés, il n'existe pas encore en France de filière pour le recyclage de pièces en fin de vie, et les filières de recyclage actuelles passent par les États-Unis. Les enjeux scientifiques de ce projet répondent donc ici à des enjeux industriels et sociétaux majeurs.

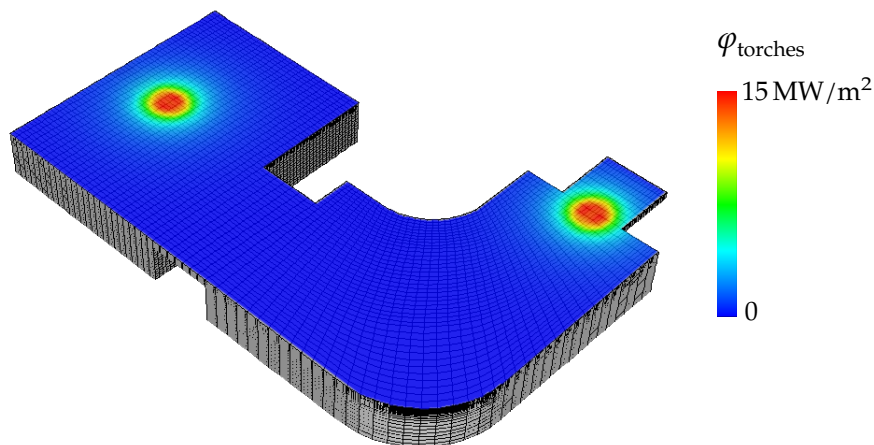


FIGURE 29 – Simulation du procédé de refusion de titane PAMCHR avec ANSYS Fluent 2021R1, représentation du maillage et d'un instantané de la densité de flux de chaleur apportée par les torches à plasma, implémentée via des fonctions utilisateur (User Defined Functions, UDF).

4 Conclusion

L'ensemble de ce projet de recherche s'articule autour des comportements de phases solides dispersées, de leur agrégation et du comportement des agrégats, avec comme applications premières les procédés de séparation physique et les procédés métallurgiques, notamment ceux responsables du contrôle de la propreté inclusionnaire. Sur ce sujet, je compte démarrer une activité expérimentale pour compléter mes simulations numériques et étudier certains phénomènes qui relèvent de la mécanique des fluides dans des conditions spécifiques représentatives des inclusions en réacteur métallurgique. L'étude des comportements inclusionnaires est un sujet riche scientifiquement autant qu'une opportunité de développer un réseau européen sur le sujet pour donner de l'ampleur à cette thématique sur laquelle l'expertise de mon équipe bénéficie d'une excellente reconnaissance auprès des industriels français. Le développement de collaborations internationales sur le sujet est donc une étape importante de mon projet et viendra renforcer mes deux collaborations existantes avec l'Université d'Alberta. L'ancrage local de mes activités est aussi amené à se consolider, notamment via des collaborations avec le LRGP, GéoRessources et l'IRT-M2P et en maintenant une dynamique collective au sein de mon équipe pour nous positionner sur les problématiques de recyclage et d'exploitation de nouveaux gisements, par exemple par combinaison d'approches pyro- et hydro-métallurgiques.

Je suis déjà engagé vers ces objectifs par mon implication à court terme dans le co-encadrement de plusieurs thèses. Celle de Widad Ayadh sur le recyclage de titane se terminera en 2024 et celle de Quentin Champdoizeau à University of Alberta se terminera en 2023. Avant la fin de ces travaux, Hamid Bellache aura aussi démarré sa thèse sur la capture d'inclusions aux interfaces et Ashok Das, actuellement en post-doc, aura développé un outil de résolution de bilans de populations multivariées applicable à de multiples procédés, des comportement d'inclusions en métallurgie au recyclage de déchets électroniques par biolixiviation. Une autre thèse devrait démarrer en collaboration avec University of Alberta pour poursuivre la modélisation du comportement d'agrégats actuellement portée par Ricardo Andrade Rossi dont je co-encadre le travail de master à U of A. De plus, je renouvelle cette année encore les encadrements de projets d'élèves avec GeoRessources et cette collaboration est amenée à se développer avec le recrutement à la rentrée d'un maître de conférences dont le projet de recherche porte sur la simulation des procédés de séparation.

5 Références

- Auger J.-M., Martin S. et Gruy F. : Preparation of alumina particle suspension in liquid tin using a pre-coating process. *Metallurgical Research & Technology*, 116(5) : 510, 2019.
- Auger J.-M., Martin S. et Gruy F. : Inverse population balance problems : heuristics for aggregation/breakage of solid clusters in liquid metals. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 59(22) : 10373–10388, 2020.
- Bansal A., Chapelle P., Delannoy Y., Waz E., Le Brun P. et Bellot J.-P. : Experimental and numerical analysis of the deformation of a liquid aluminum free surface covered by

- an oxide layer during induction melting. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 46 : 2096–2109, 2015.
- Bansal A., Chapelle P., Delannoy Y., Waz E., Le Brun P. et Bellot J.-P. : Deformation of the aluminum bath surface in an induction melting furnace. *In Light Metals*, p. 999–1004, 2016.
- Bellot J.-P., De Felice V., Dussoubs B., Jardy A. et Hans S. : 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, 2014.
- Bouzidi M., Firdaouss M. et Lallemand P. : Momentum transfer of a Boltzmann-lattice fluid with boundaries. *Physics of Fluids*, 13(11) : 3452–3459, 2001.
- Béchara R., Hamadeh H., Mirgaux O. et Patisson F. : Optimization of the Iron Ore Direct Reduction Process through Multiscale Process Modeling. *Materials*, 11(7) : 1094, 2018.
- Castro-Cedeno E. I., Jardy A., Boissiere B., Lehmann J., Gardin P., Carré A., Gerardin S. et Bellot J.-P. : Numerical simulation of modification of non-metallic inclusions by calcium treatment in the argon-stirred ladle. *Metallurgical Research & Technology*, 116(5) : 515, 2019.
- Champdoizeau Q. et Henein H. : The Measurement of Density, Surface Tension, and Viscosity of Metallic Liquids by the Discharge Crucible Method. *In* Fecht H.-J. et Mohr M., édés : *Metallurgy in Space : Recent Results from ISS*, The Minerals, Metals & Materials Series, p. 201–221. Springer International Publishing, 2022.
- Cournil M., Gruy F., Gardin P. et Saint-Raymond H. : Modelling of solid particle aggregation dynamics in non-wetting liquid medium. *Chemical Engineering and Processing : Process Intensification*, 46(12) : 586–597, 2006.
- Cuney M., Marignac C. et Weisbrod A. : The beauvoir topaz-lepidolite albite granite (massif central, france) ; the disseminated magmatic sn-li-ta-nb-be mineralization. *Economic Geology*, 87(7) : 1766–1794, 1992.
- Daoud I. L. A., Rimbert N., Jardy A., Oesterlé B., Hans S. et Bellot J.-P. : 3D modeling of the aggregation of oxide inclusions in a liquid steel ladle : two numerical approaches. *Advanced Engineering Materials*, 13(7) : 543–549, 2011.
- Dehaine Q., Filippov L. O. et Joussemet R. : Rare earths (La, Ce, Nd) and rare metals (Sn, Nb, W) as by-products of kaolin production – Part 2 : Gravity processing of micaceous residues. *Minerals Engineering*, 100 : 200–210, 2017.
- Dehaine Q., Filippov L. O., Glass H. J. et Rollinson G. : Rare-metal granites as a potential source of critical metals : a geometallurgical case study. *Ore Geology Reviews*, 104 : 384–402, 2019a.

- Dehaine Q., Foucaud Y., Kroll-Rabotin J.-S. et Filippov L. O. : Experimental investigation into the kinetics of Falcon UF concentration : implications for fluid dynamic-based modelling. *Separation and Purification Technology*, 215 : 590–601, 2019b.
- Filippov L. O., Dehaine Q. et Filippova I. V. : Rare earths (La, Ce, Nd) and rare metals (Sn, Nb, W) as by-products of kaolin production – Part 3 : Processing of fines using gravity and flotation. *Minerals Engineering*, 95 : 96–106, 2016.
- Flood R. : Thermophysical properties measurement of liquid al and al-cu by the discharge crucible method. Thèse de Master, University of Alberta, 2020.
- Foucaud Y., Dehaine Q., Filippov L. O. et Filippova I. V. : Application of falcon centrifuge as a cleaner alternative for complex tungsten ore processing. *Minerals*, 9(7) : 448, 2019.
- Gancarz T., Jourdan J., Gasior W. et Henein H. : Physicochemical properties of Al, Al-Mg and Al-Mg-Zn alloys. *Journal of Molecular Liquids*, 249 : 470–476, 2018.
- Gisselbrecht M. : *Simulation des interactions hydrodynamiques entre inclusions dans un métal liquide : établissement de noyaux d'agrégation dans les conditions représentatives du procédé de flottation*. Thèse de doctorat, Université de Lorraine, 2019. URL <http://theses.fr/2019LORR0073>.
- Gisselbrecht M., Kroll-Rabotin J.-S. et Bellot J.-P. : Aggregation kernel of globular inclusions in local shear flow : application to aggregation in a gas-stirred ladle. *Metallurgical Research & Technology*, 116(5) : 512, 2019.
- Gruy F. : Inertia tensor as morphological descriptor for aggregation dynamics. *Colloids and Surfaces A : Physicochemical and Engineering Aspects*, 482 : 154–164, 2015.
- Hamadeh H., Mirgaux O. et Patisson F. : Detailed Modeling of the Direct Reduction of Iron Ore in a Shaft Furnace. *Materials*, 11(10) : 1865, 2018.
- Hubau A., Minier M., Chagnes A., Joulain C., Silvente C. et Guezennec A.-G. : Recovery of metals in a double-stage continuous bioreactor for acidic bioleaching of printed circuit boards (PCBs). *Separation and Purification Technology*, 238 : 116481, 2020.
- International Aluminium Institute : Aluminium recycling & Japan. <https://recycling.world-aluminium.org/regional-reports/japan/>, 2018.
- Joishi M. : *Étude numérique du dépôt de particules dans une couche limite avec un forçage turbulent dans la zone externe*. Thèse de doctorat, Université de Lorraine, 2019. URL <http://theses.fr/2019LORR0251>.
- Kroll-Rabotin J.-S., Bourgeois F. et Climent E. : Experimental validation of a fluid dynamics based model of the UF Falcon concentrator in the ultrafine range. *Separation and Purification Technology*, 92 : 129–135, 2012.

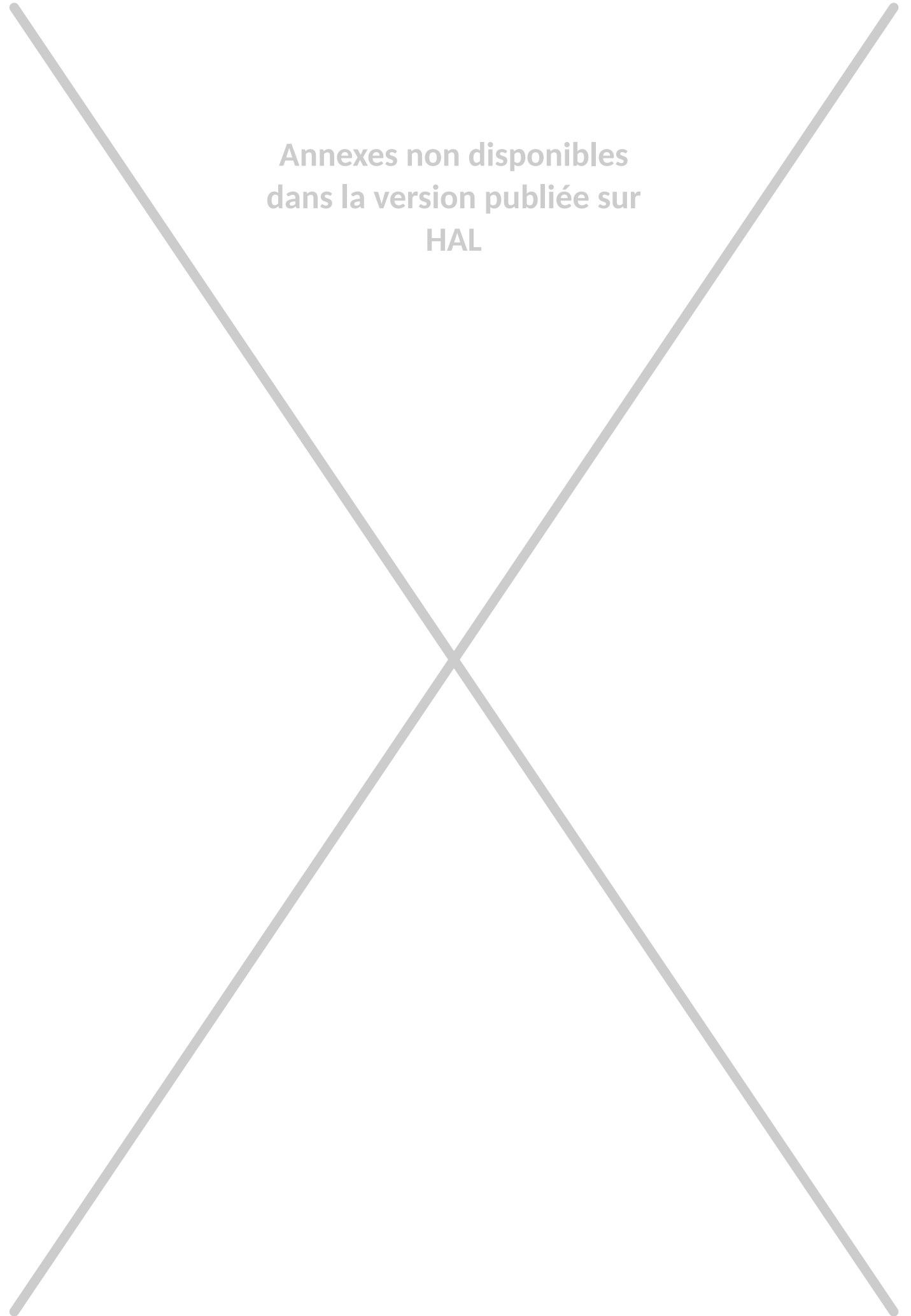
- Kroll-Rabotin J.-S., Bourgeois F. et Climent E. : Physical analysis and modeling of the Falcon concentrator for beneficiation of ultrafine particles. *International Journal of Mineral Processing*, 121 : 39–50, 2013.
- Kroll-Rabotin J.-S., Gisselbrecht M., Ott B., May R., Fröhlich J. et Bellot J.-P. : Multiscale simulation of non-metallic inclusion aggregation in a fully resolved bubble swarm in liquid steel. *Metals*, 10 : 517, 2020.
- Lagarigue M., Jacquier S., Debayle J., Pinoli J.-C. et Gruy F. : Caractérisation géométrique et optique de plusieurs types d'agrégats. In *Cristal 6 - Cristallisation et Précipitation Industrielle*, p. 324–330, 2010.
- Lappan T., Sarma M., Heitkam S., Mannes D., Trtik P., Shevchenko N., Eckert K. et Eckert S. : X-ray and neutron radiographic experiments on particle-laden molten metal flows. In *Materials Processing Fundamentals 2021*, p. 13–29. Springer International Publishing, 2021.
- Liné A. et Frances C. : Discussion on DQMOM to solve a bivariate population balance equation applied to a grinding process. *Powder Technology*, 295 : 234–244, 2016.
- Louvigné P.-F. : Etude de veille sur le marché du titane 2018–2020. Rap. tech., Ministère de la Transition Écologique et Solidaire, 2018. Bureau de la politique des ressources minérales non énergétiques.
- Mirgaux O., Ablitzer D., Waz E. et Bellot J.-P. : Removal of inclusions from molten aluminium by flotation in a stirred reactor : a mathematical model and a computer simulation. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 6(1), 2008.
- Niu X. D., Shu C., Chew Y. T. et Peng Y. : A momentum exchange-based immersed boundary-lattice Boltzmann method for simulating incompressible viscous flows. *Physics Letters A*, 354(3) : 173–182, 2006.
- Olmedilla A., Založnik M. et Combeau H. : Quantitative 3D mesoscopic modeling of grain interactions during equiaxed dendritic solidification in a thin sample. *Acta Materialia*, 173 : 249–261, 2019.
- Olmos E., Mehmood N., Haj Husein L., Goergen J.-L., Fick M. et Delaunay S. : Effects of bioreactor hydrodynamics on the physiology of *Streptomyces*. *Bioprocess and Biosystems Engineering*, 36(3) : 259–272, 2013.
- Ramudzwagi M., Tshiongo-Makgwe N. et Nheta W. : Recent developments in beneficiation of fine and ultra-fine coal-review paper. *Journal of Cleaner Production*, p. 122693, 2020.
- Saxena A., Kroll-Rabotin J.-S. et Sanders R. S. : Numerical investigation of the respective role of cohesive and hydrodynamic forces in aggregate restructuring under shear flow. *Journal of Colloid and Interface Science*, 608(1) : 355–365, 2022.

- Saxena A., Kroll-Rabotin J.-S. et Sanders R. S. : A numerical approach to model aggregate restructuring in shear flow using DEM in lattice-Boltzmann simulations. *In Progress in Applied CFD – CFD 2017*, p. 761–772, Trondheim, Norway, 2017. SINTEF.
- Tourret D., Sturz L., Viardin A. et Založnik M. : Comparing mesoscopic models for dendritic growth. vol. 861, 2020.
- Waz E., Bansal A., Chapelle P., Delannoy Y., Bellot J. P. et Brun P. L. : Modeling of inclusion behavior in an aluminum induction furnace. *In Light Metals*, 2016.
- Xi Z., Li C. et Wang L. : A kinetic model for the modification of Al_2O_3 inclusions during calcium treatment in high-carbon hard wire steel. *Materials*, 14(5) : 1305, 2021.
- Yang J., Bourgeois F., Bru K., Kurylak W., Andreiadis E., Meyer D., Willersinn S., Viro-lainen S., Laatikainen M., Hu X., Sundqvist Ökvist L., Ye G. et Yang Y. : Innovation potential in the recovery of refractory metals from primary resources. Rap. tech., Pro-metia, MSP-REFRAM, 2016.

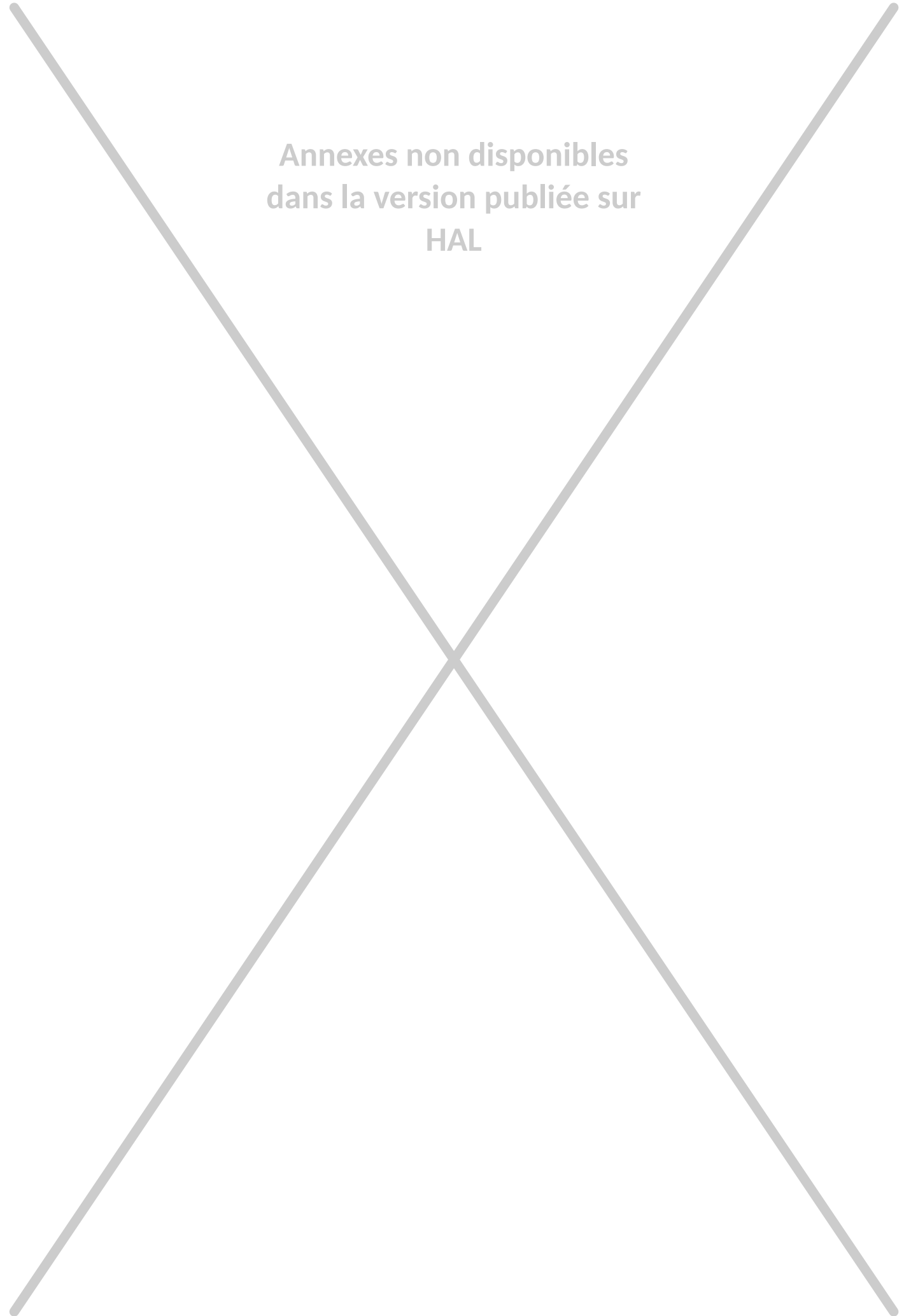
Lettre de parrainage

A





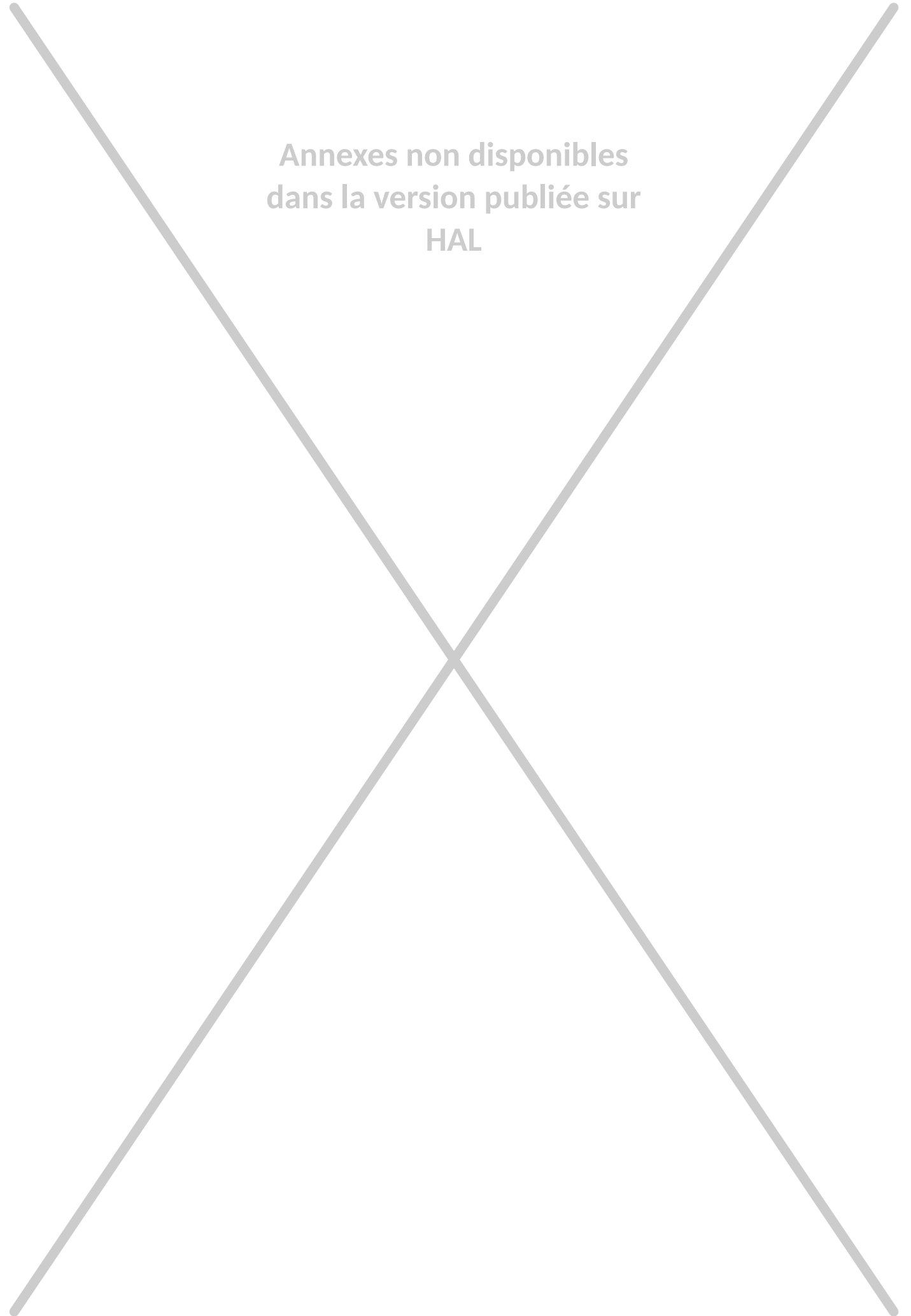
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



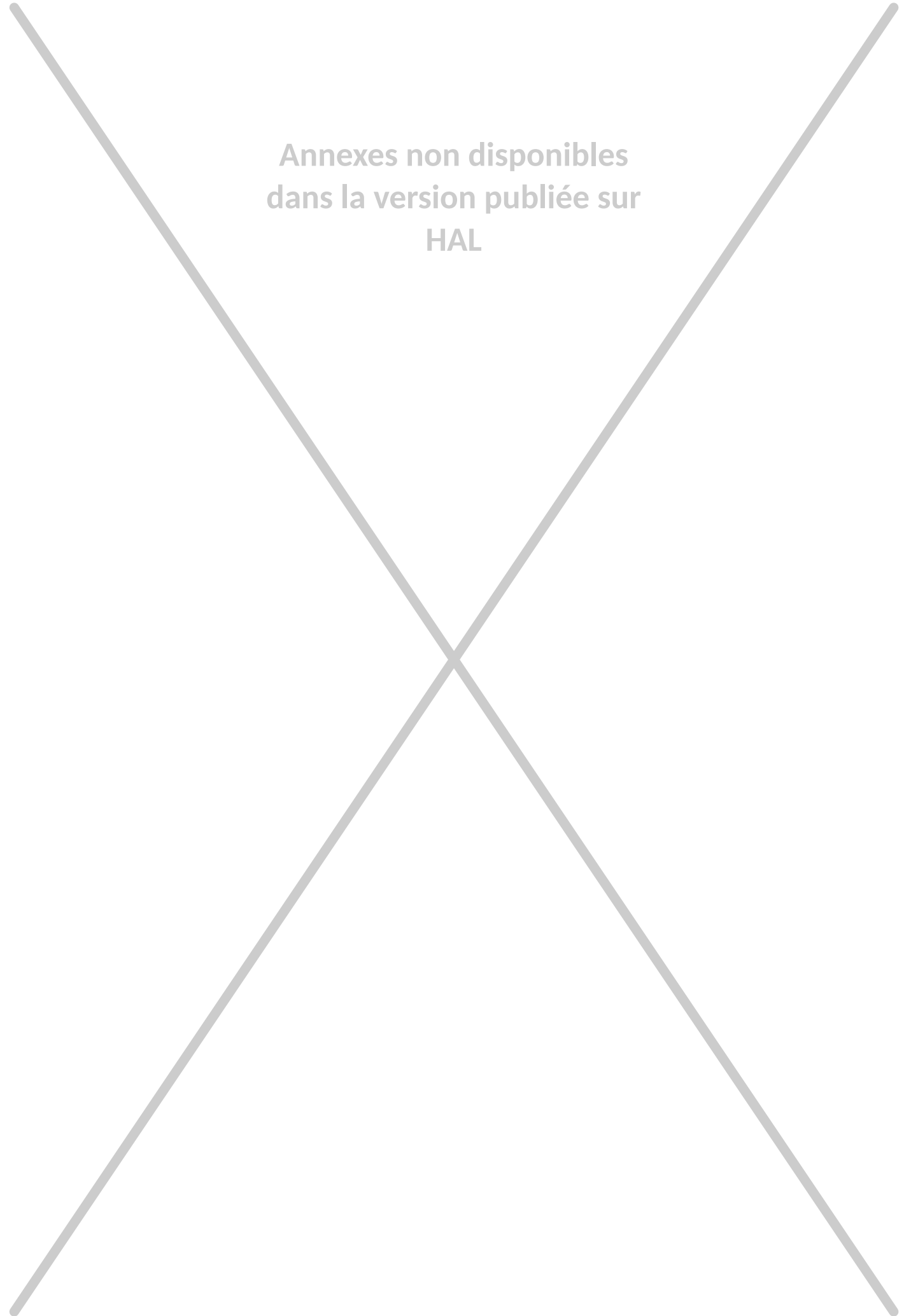
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL

1 A. Saxena, J.-S. Kroll-Rabotin, R.S. Sanders, 2022

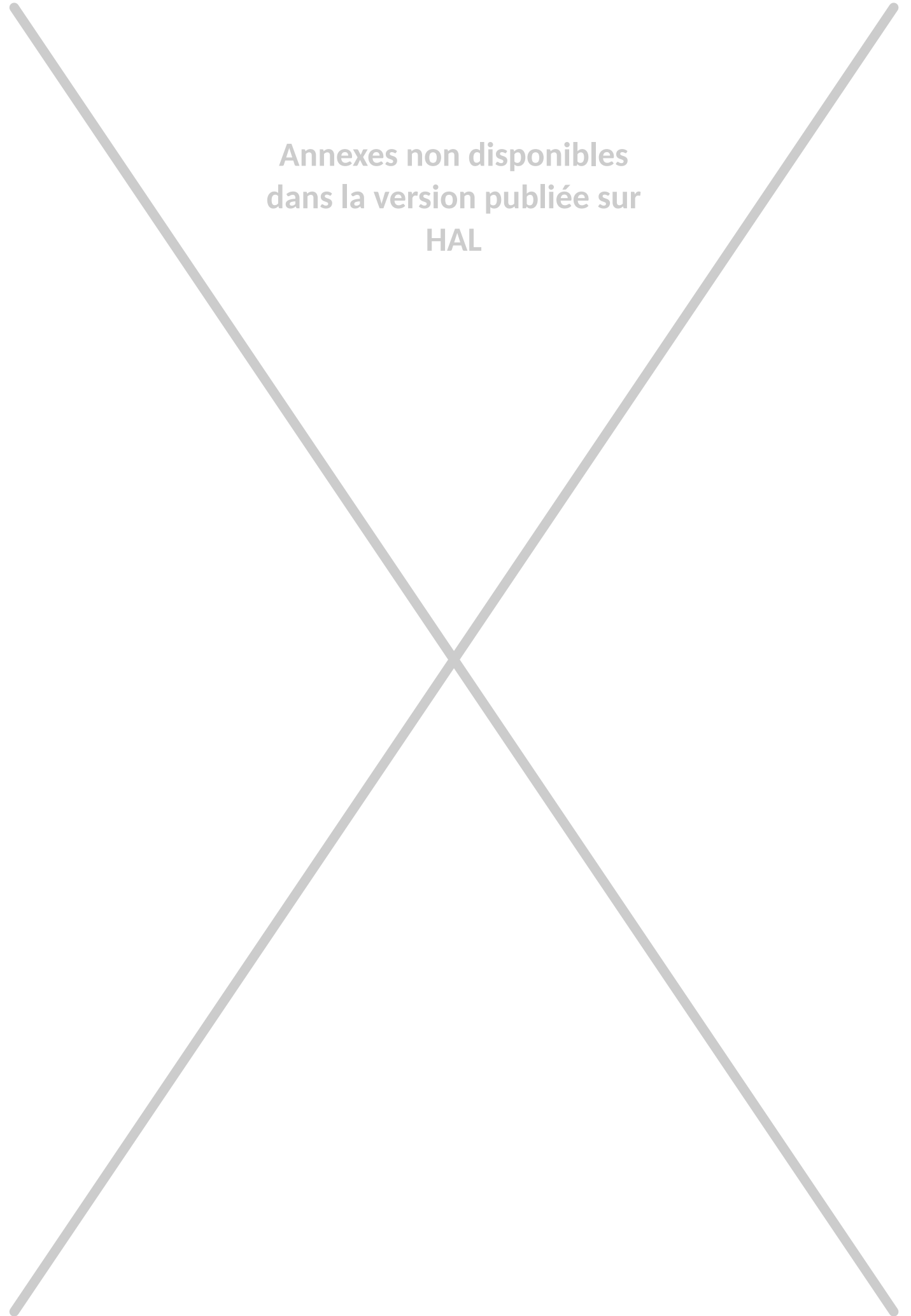
A. Saxena, J.-S. Kroll-Rabotin, R.S. Sanders : Numerical investigation of the respective roles of cohesive and hydrodynamic forces in aggregate restructuring under shear flow. *Journal of Colloid and Interface Science*, 608(1):355–365, 2022.



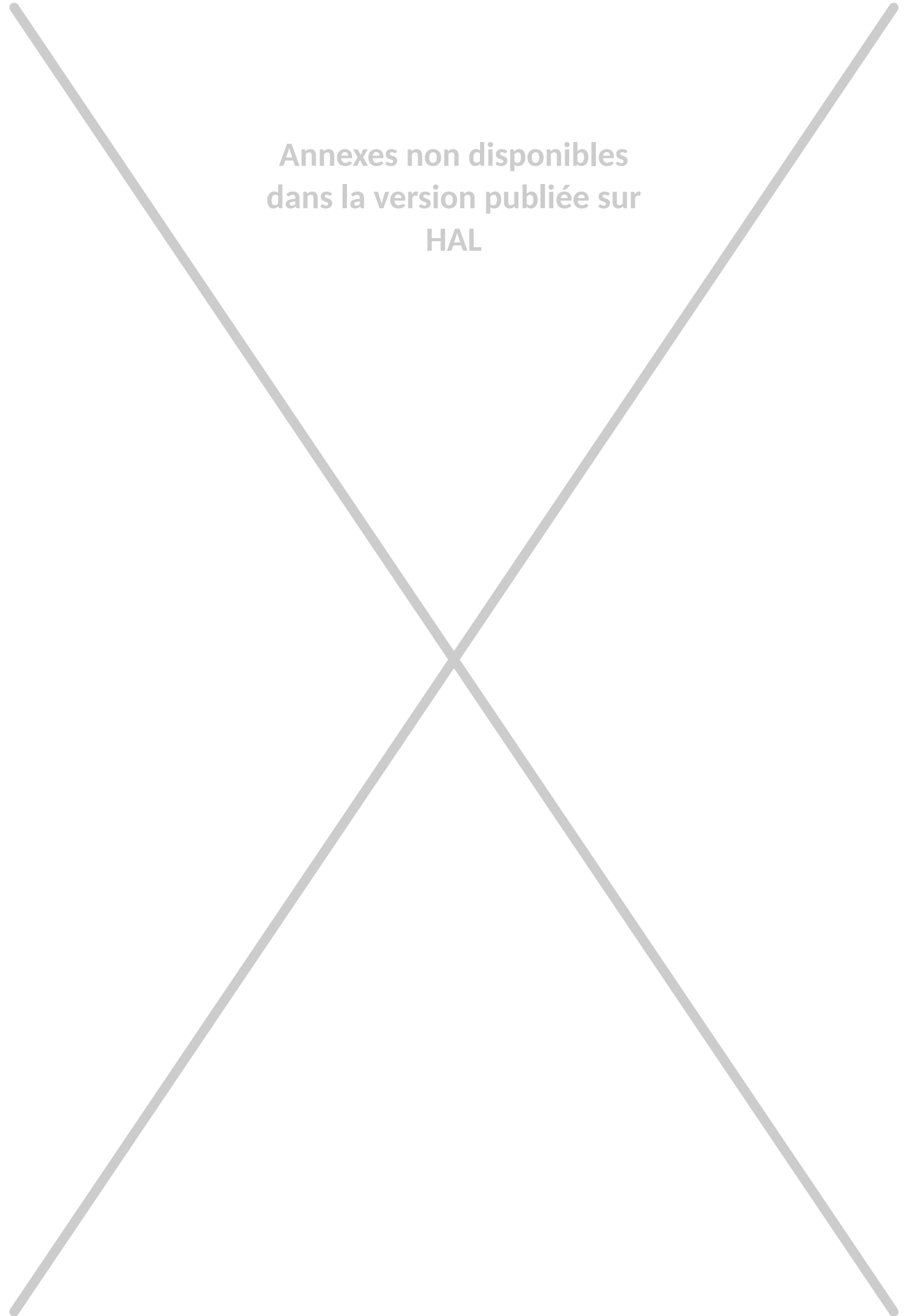
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



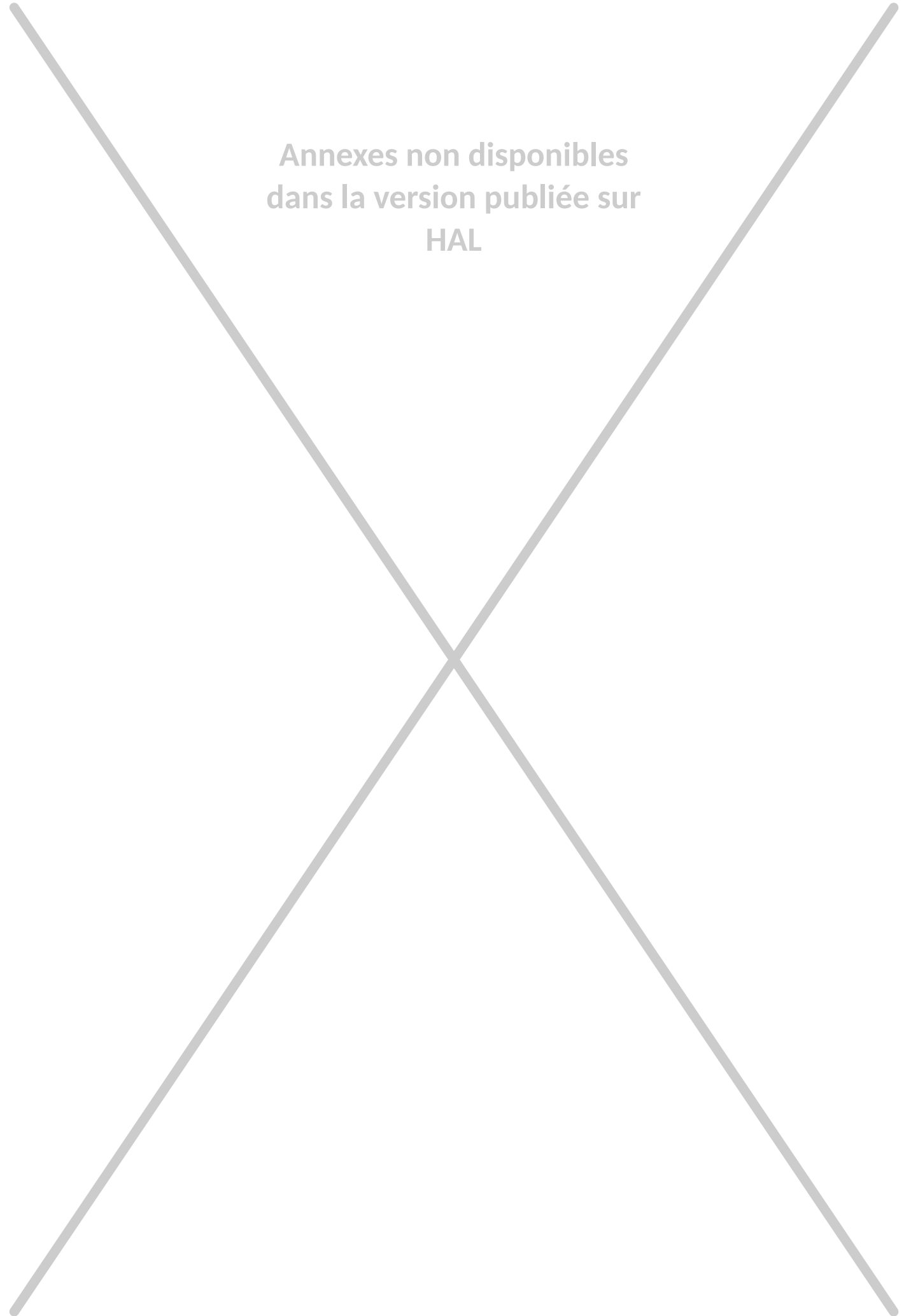
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



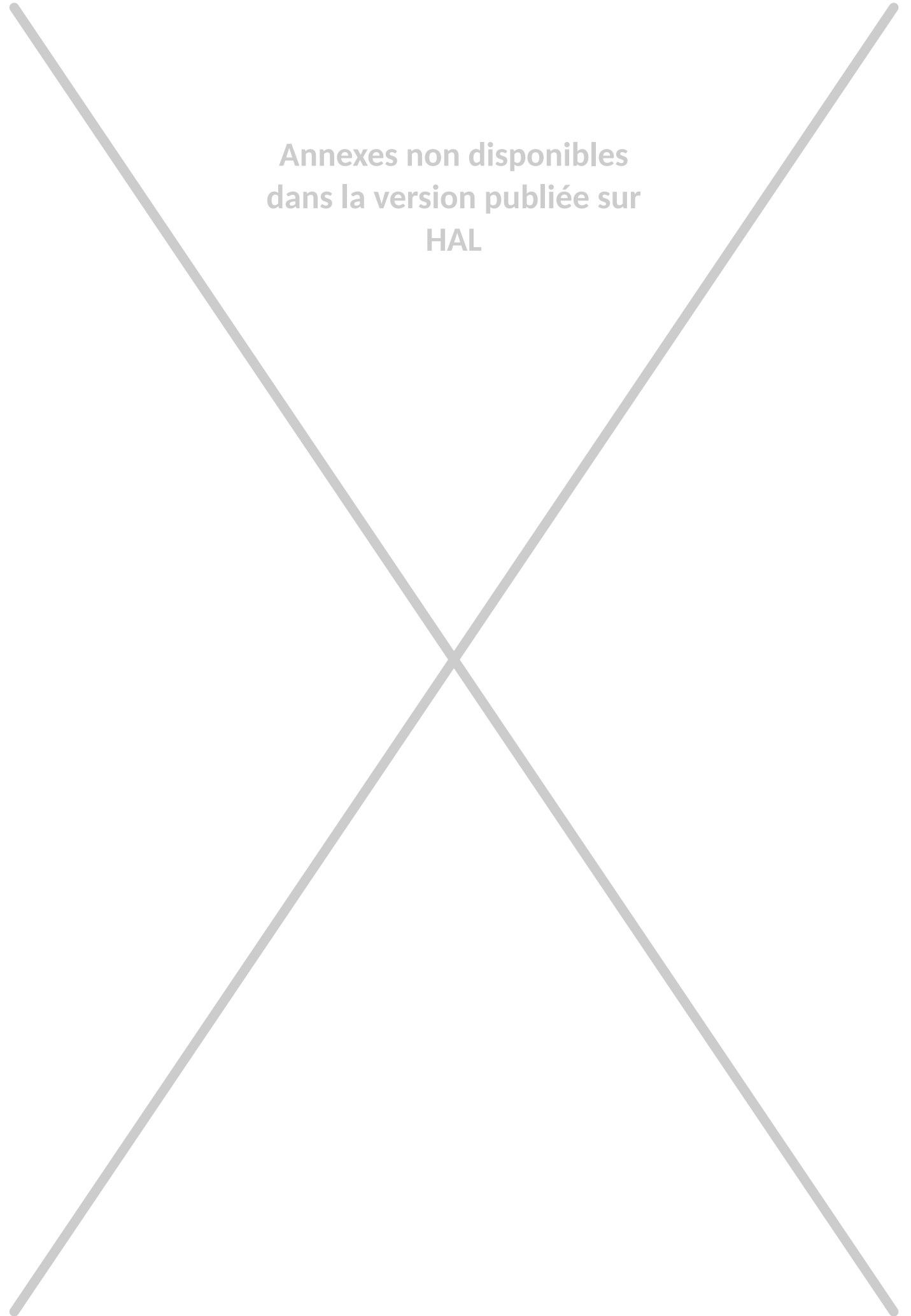
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



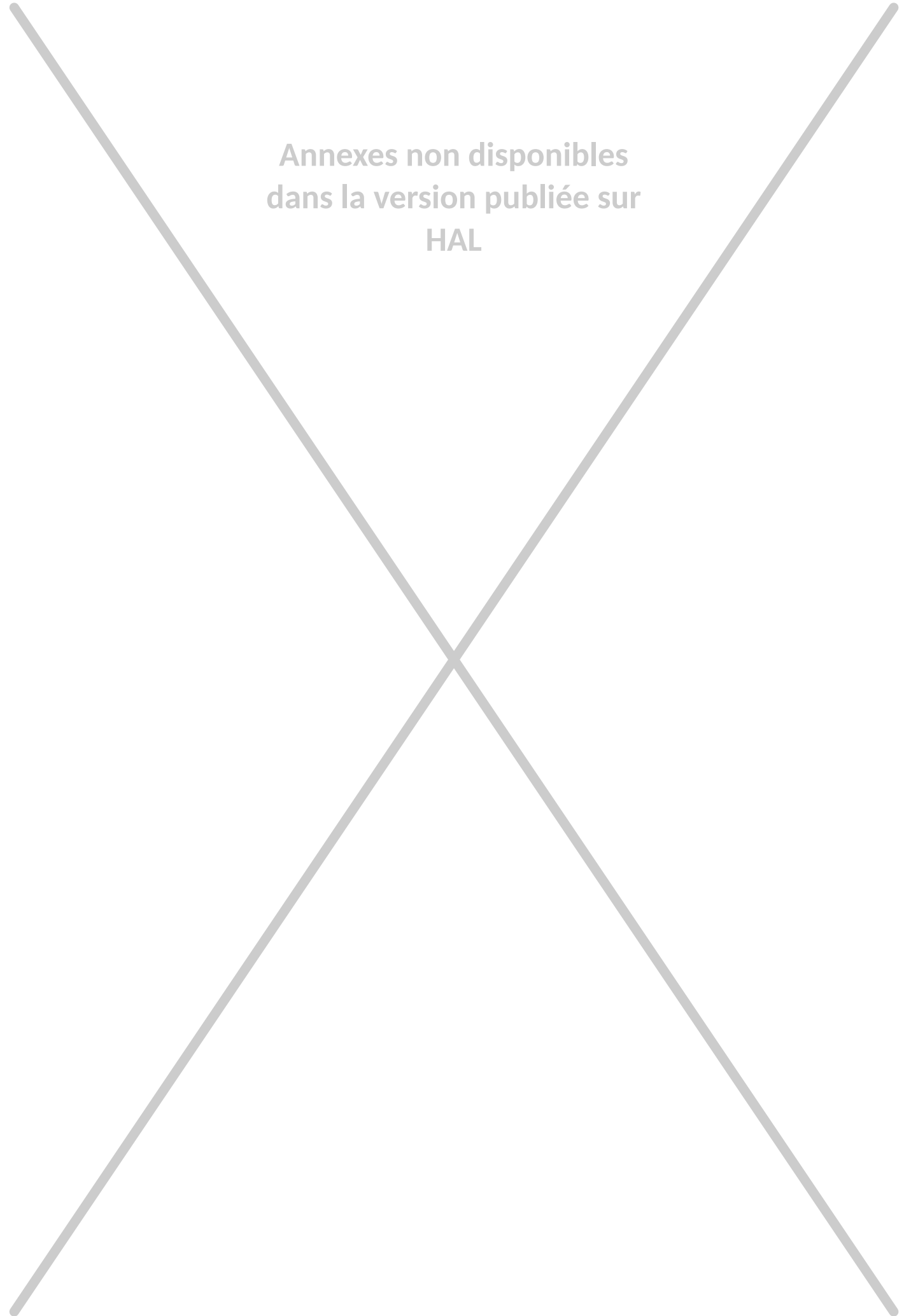
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



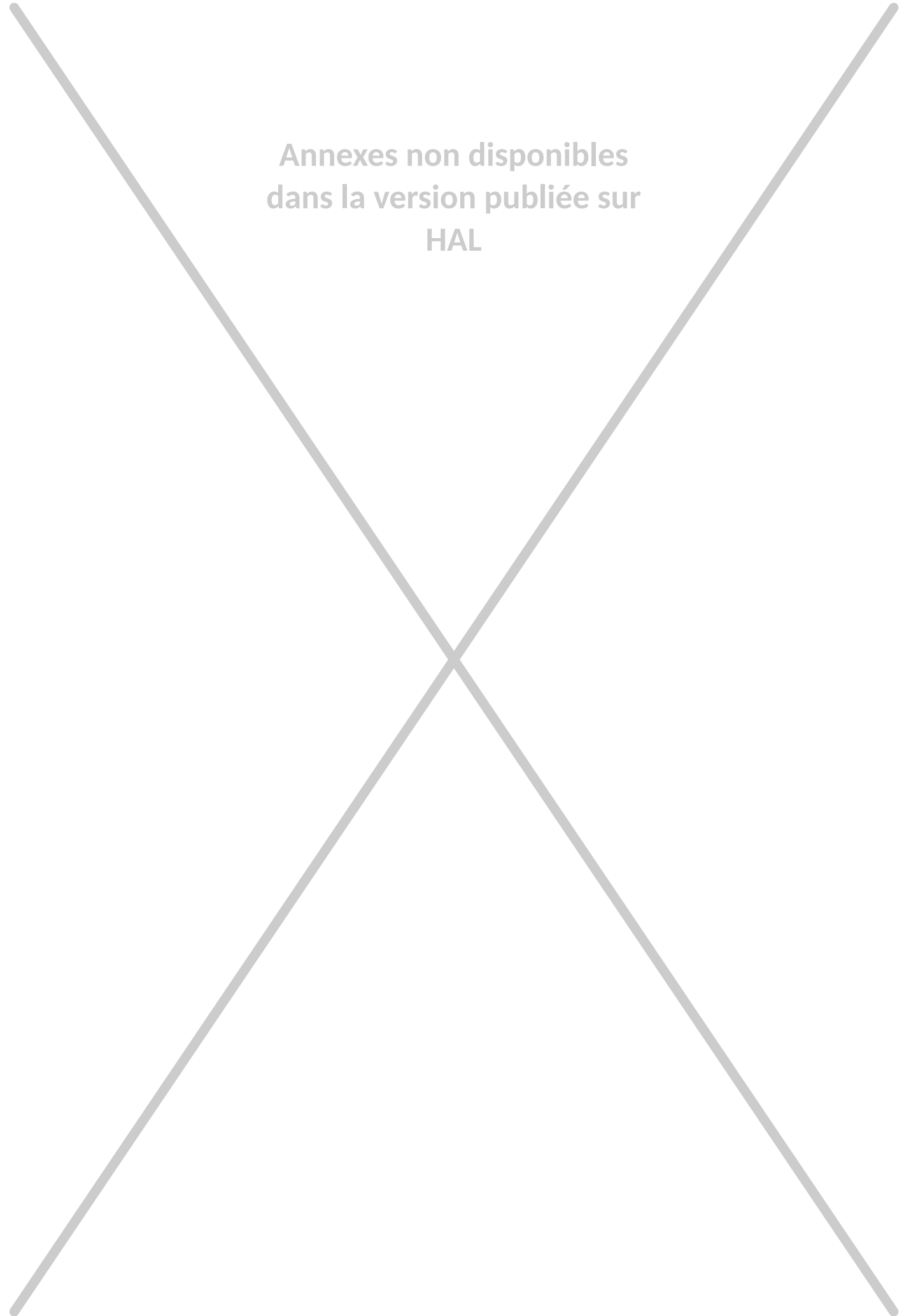
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



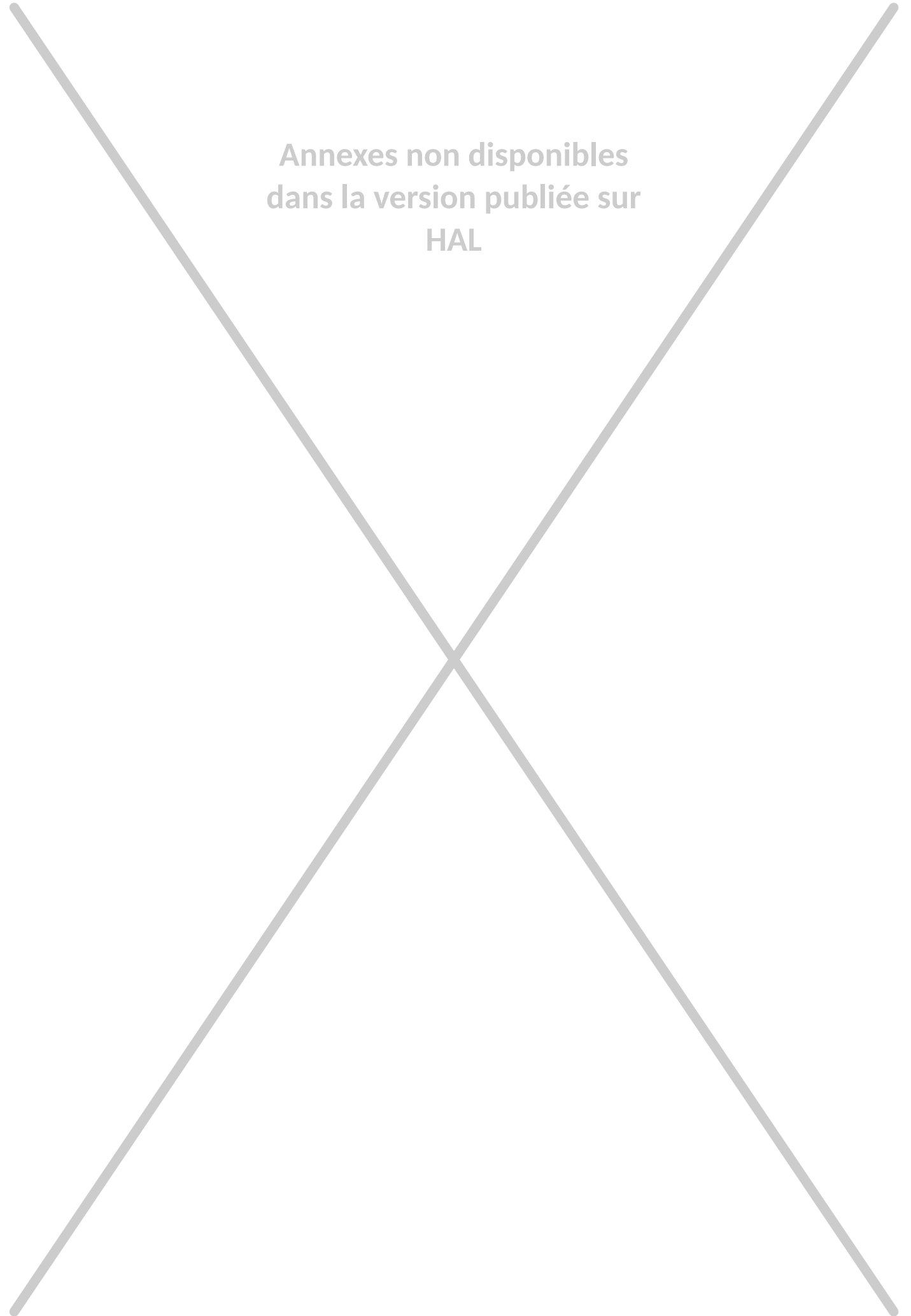
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



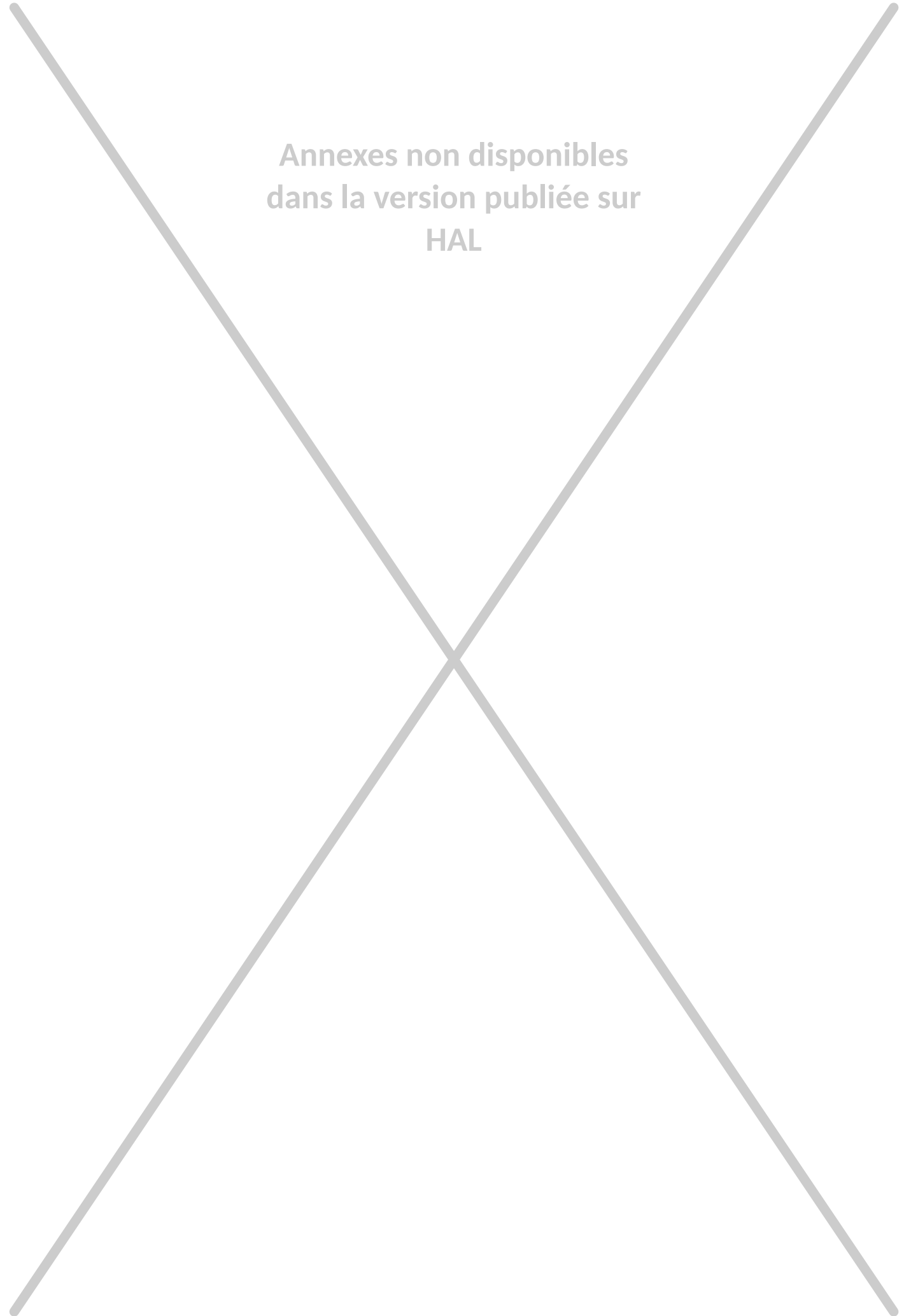
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



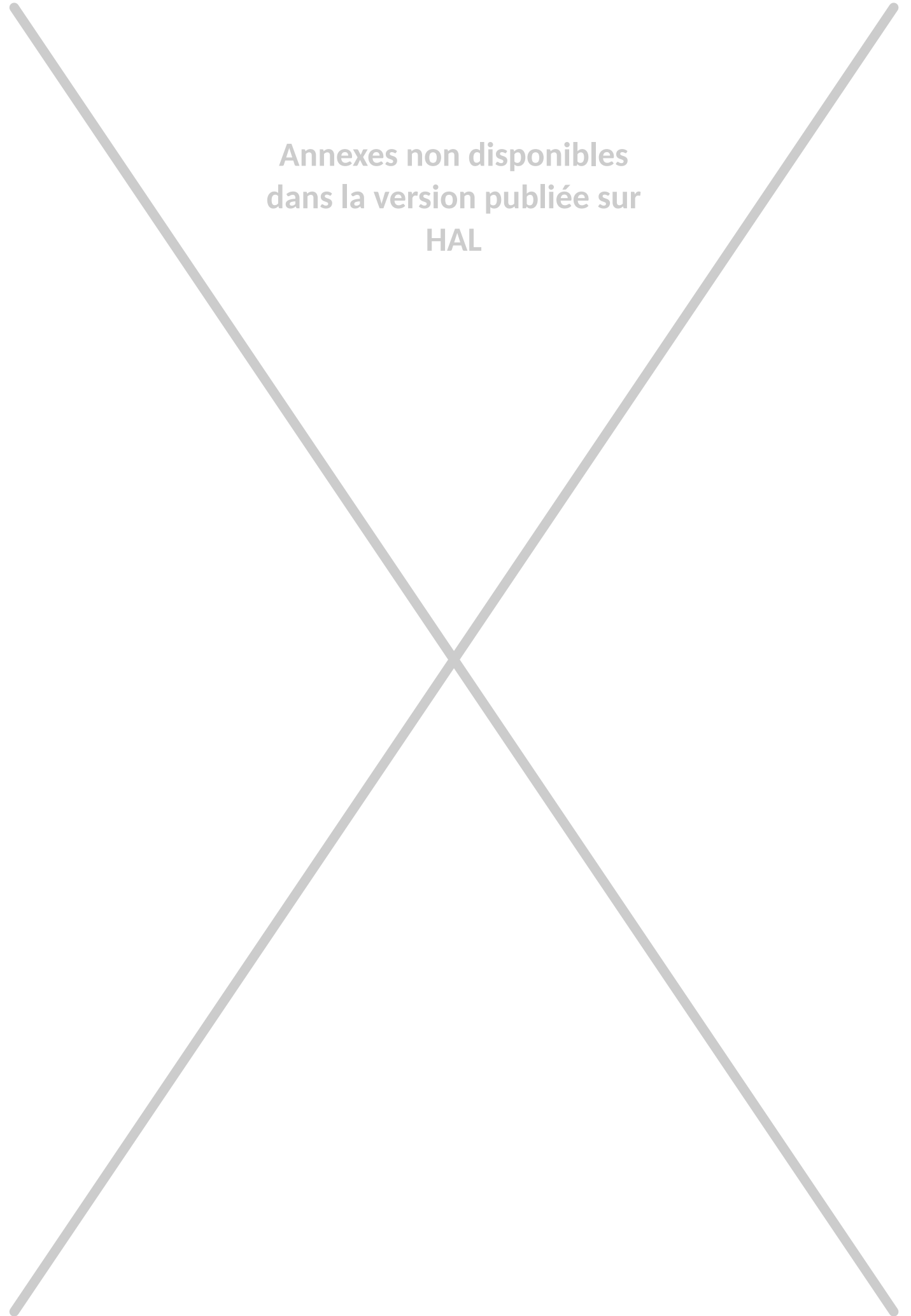
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



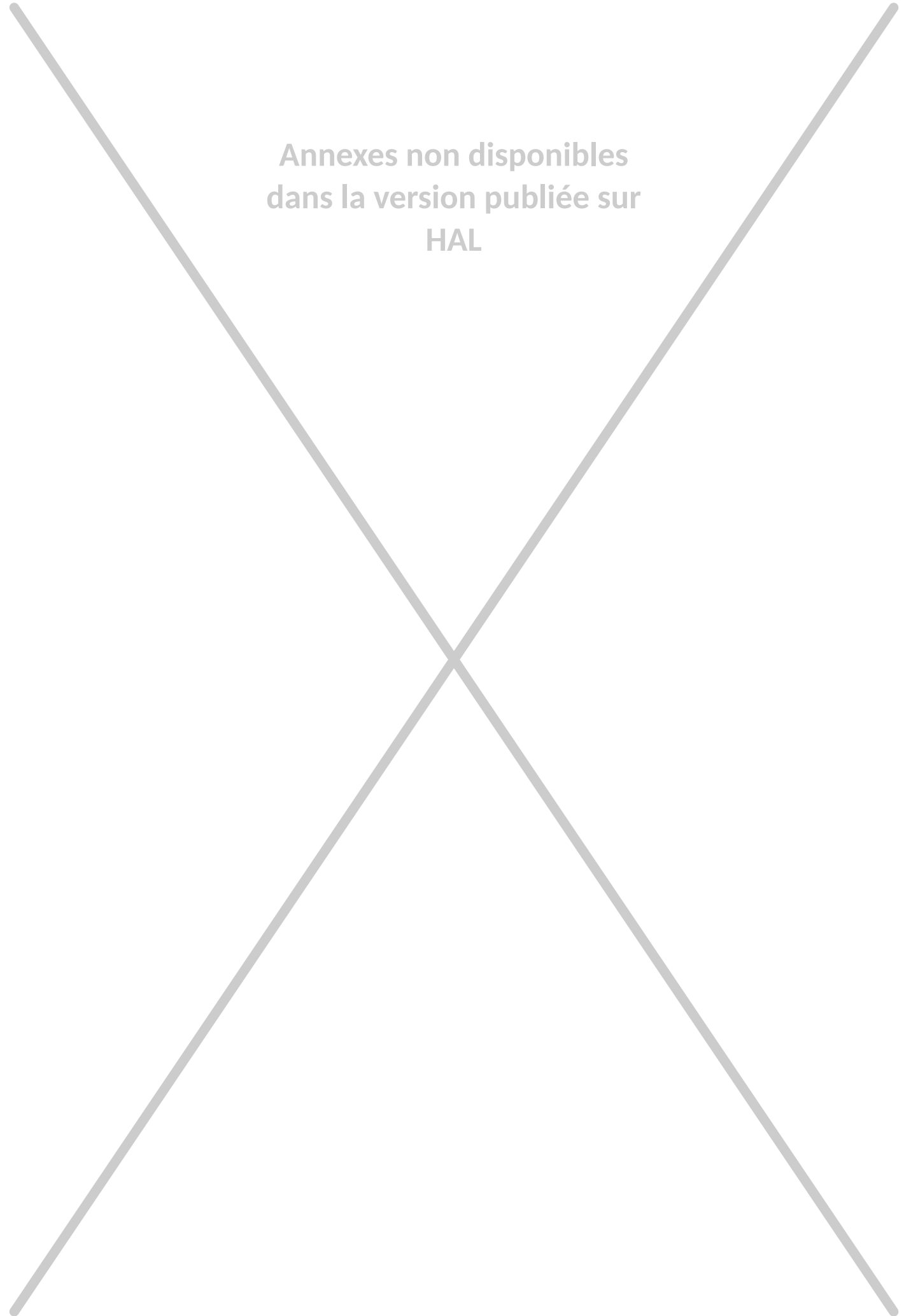
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



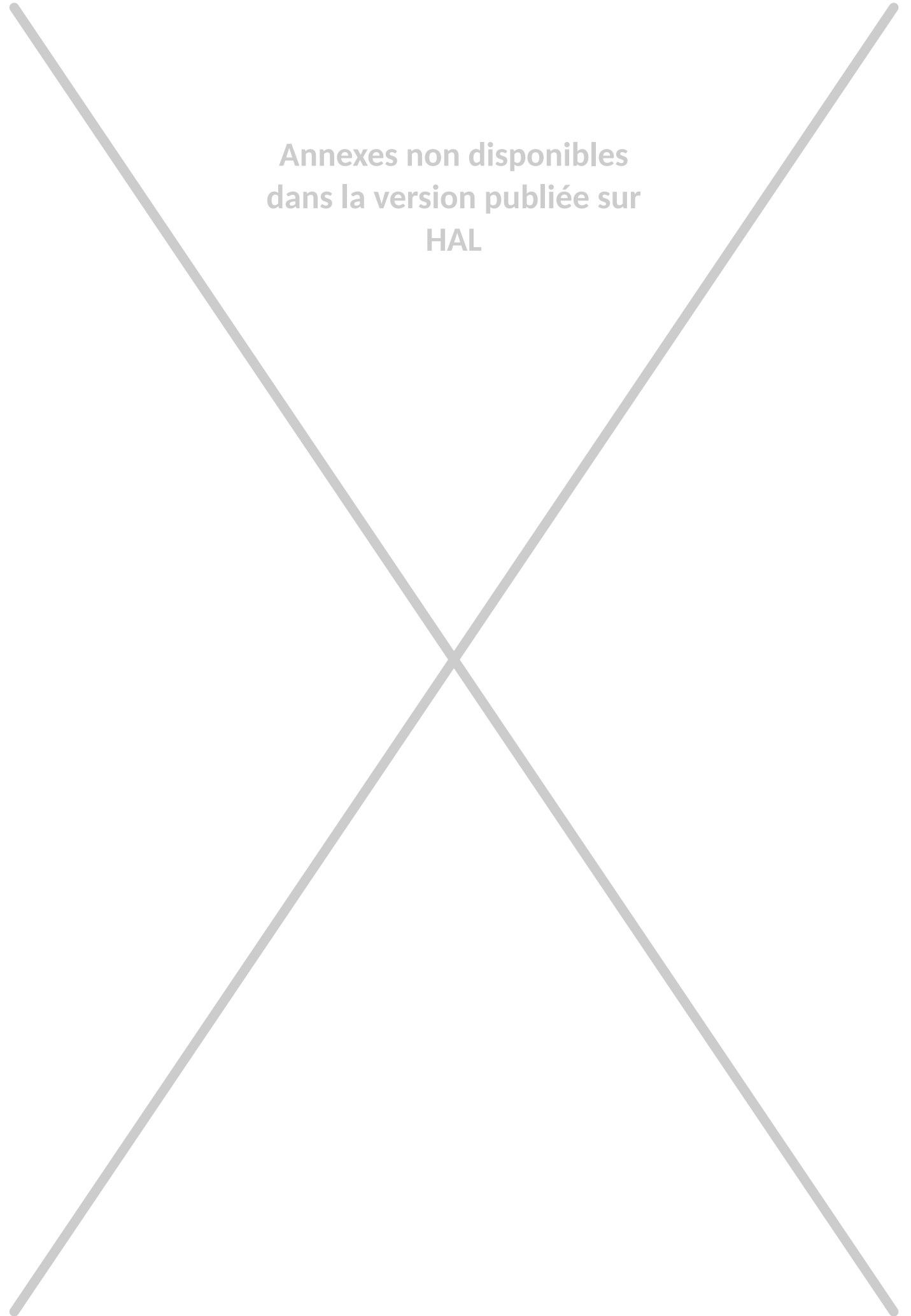
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL

2 J.-S. Kroll-Rabotin, M. Gisselbrecht, B. Ott, R. May, J. Fröhlich, J.-P. Bellot, 2020

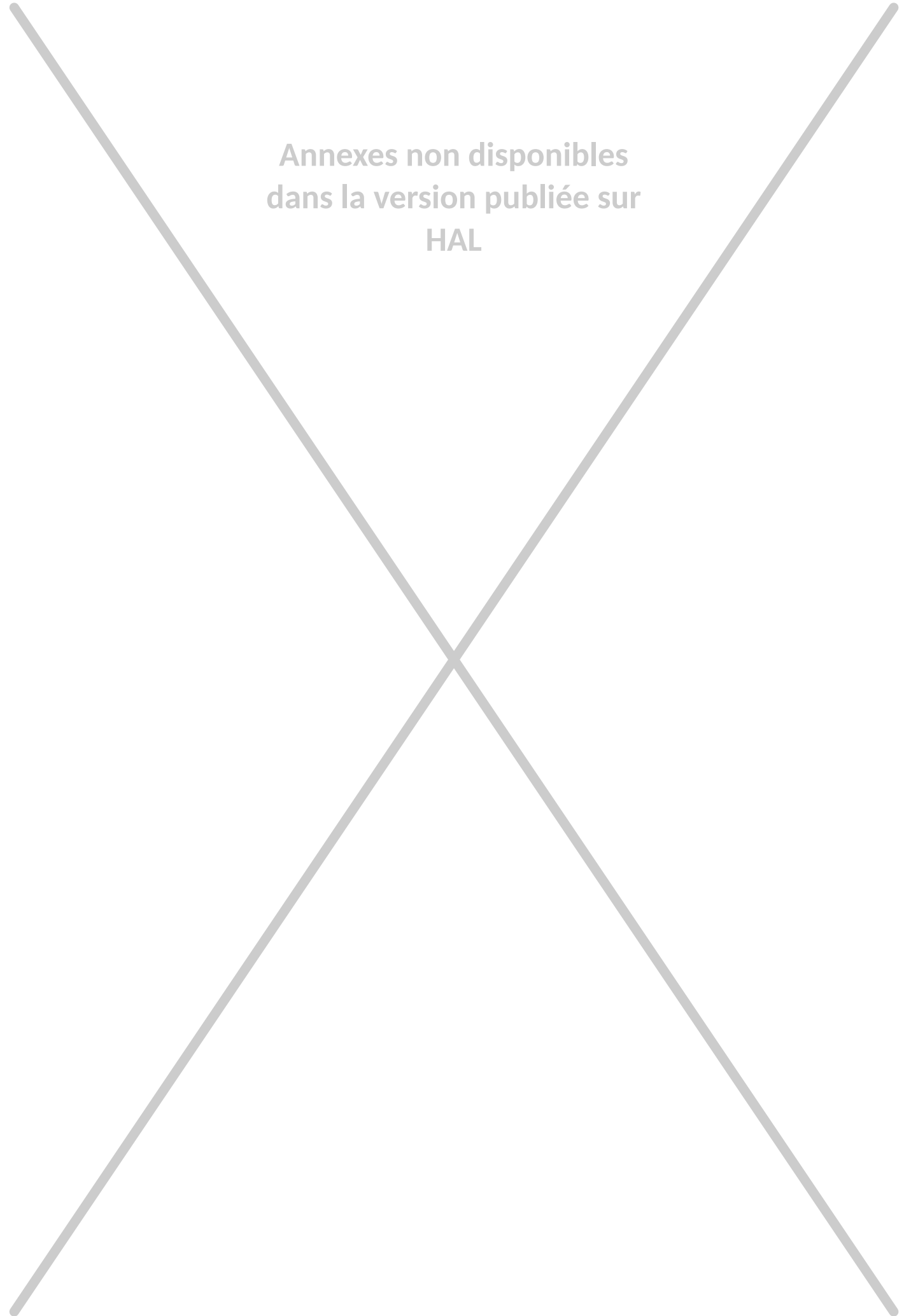
J.-S. Kroll-Rabotin, M. Gisselbrecht, B. Ott, R. May, J. Fröhlich, J.-P. Bellot : Multiscale simulation of non-metallic inclusion aggregation in a fully resolved bubble swarm in liquid steel. *Metals*, 10(4):517, 2020.



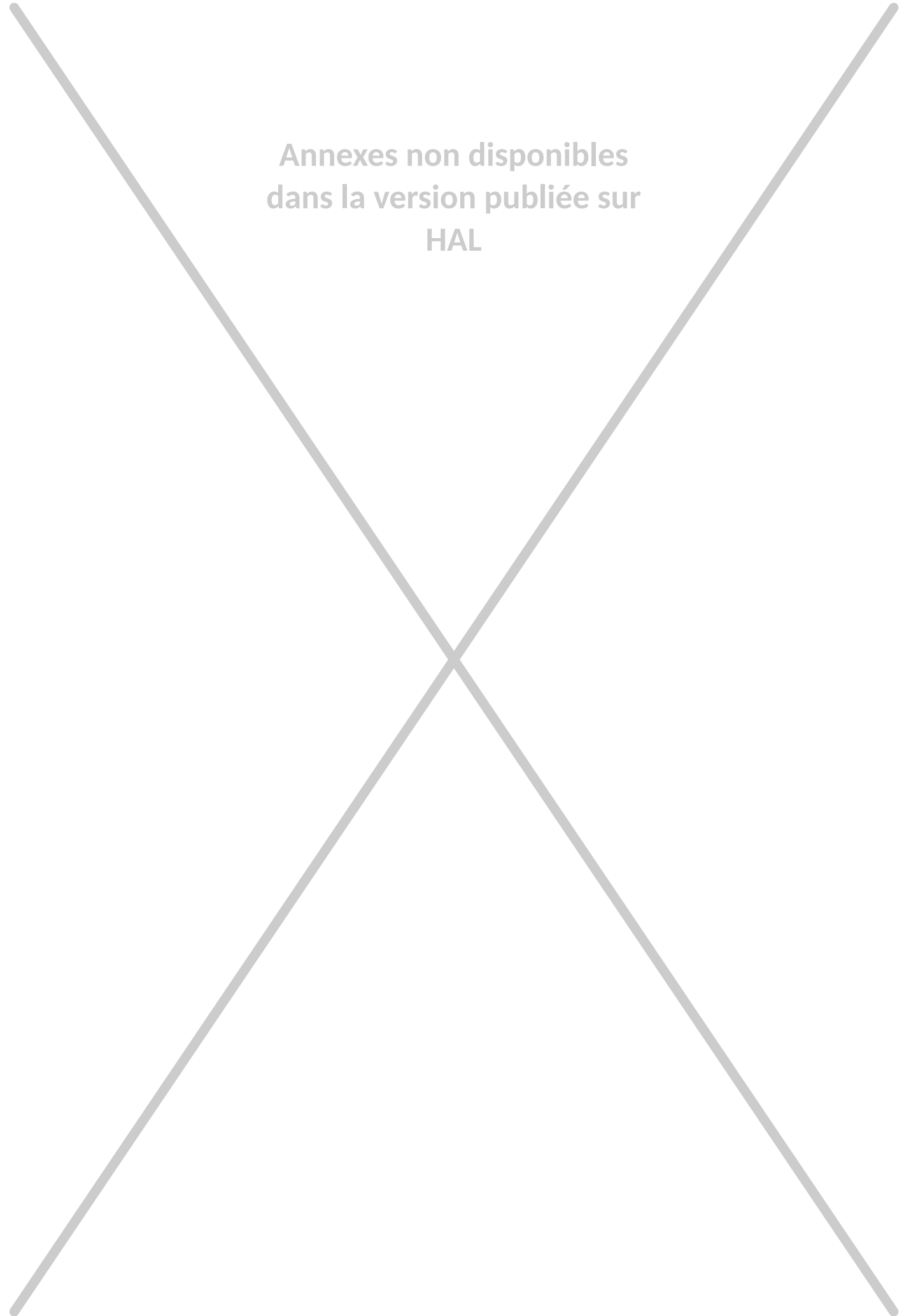
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



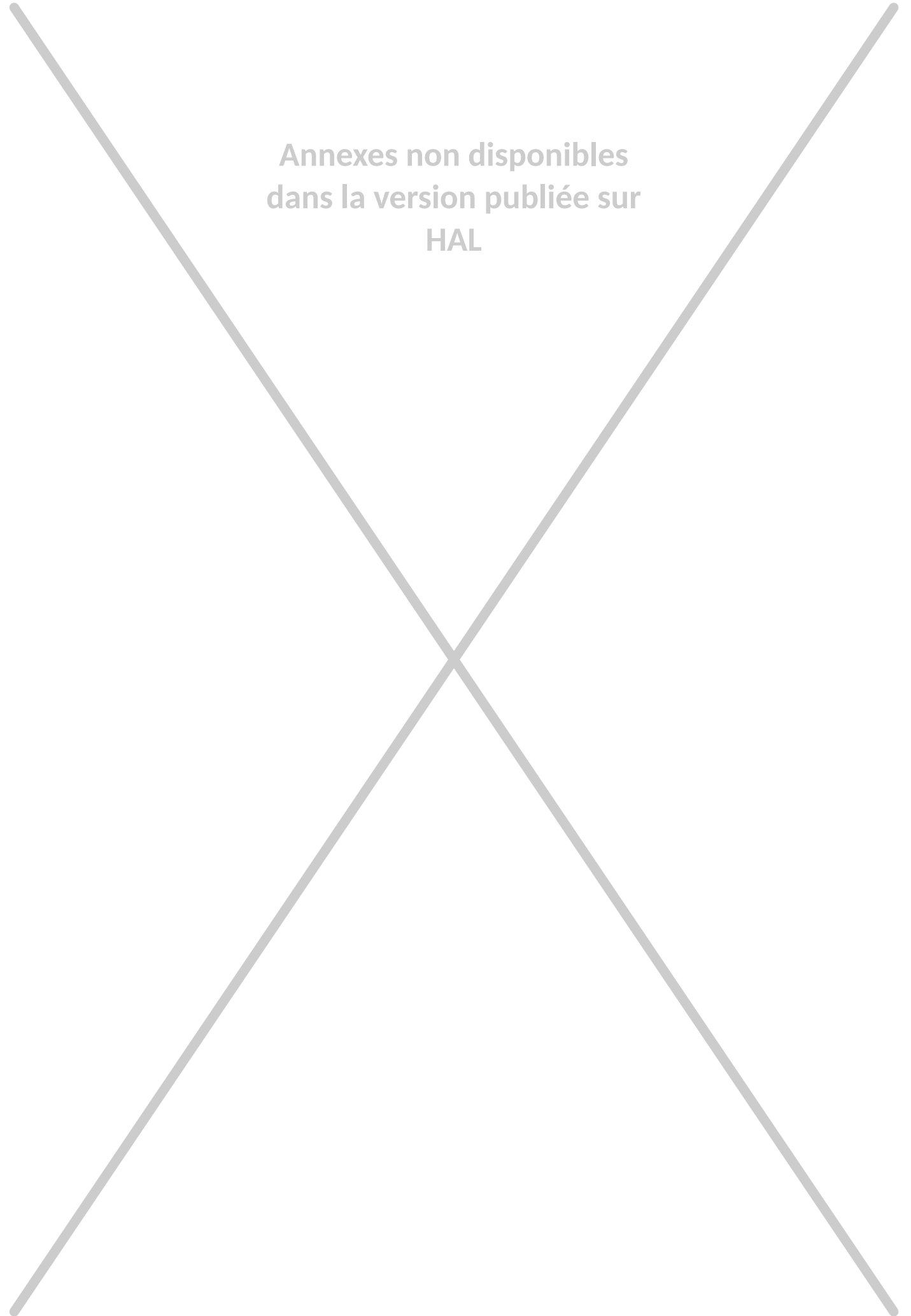
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



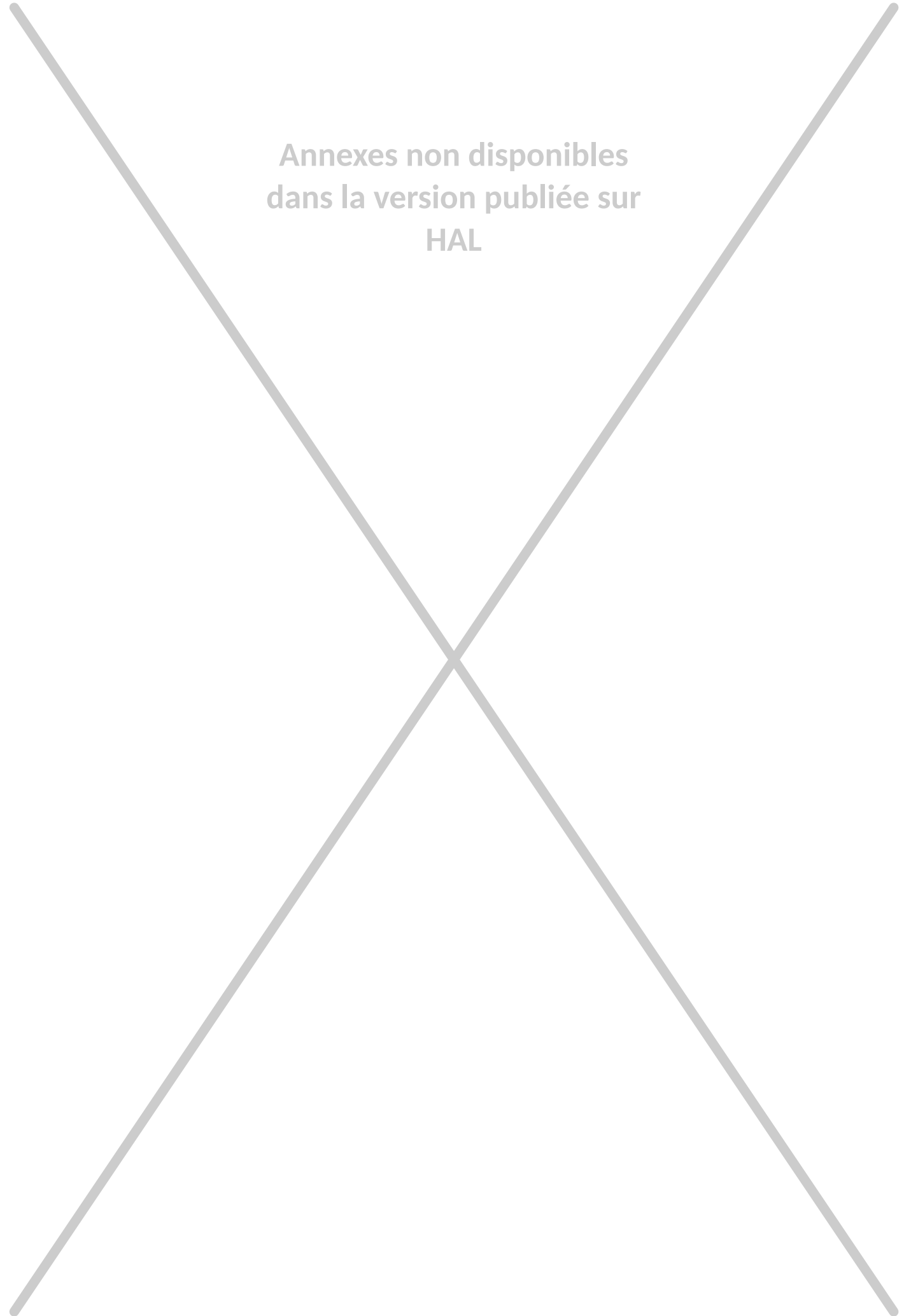
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



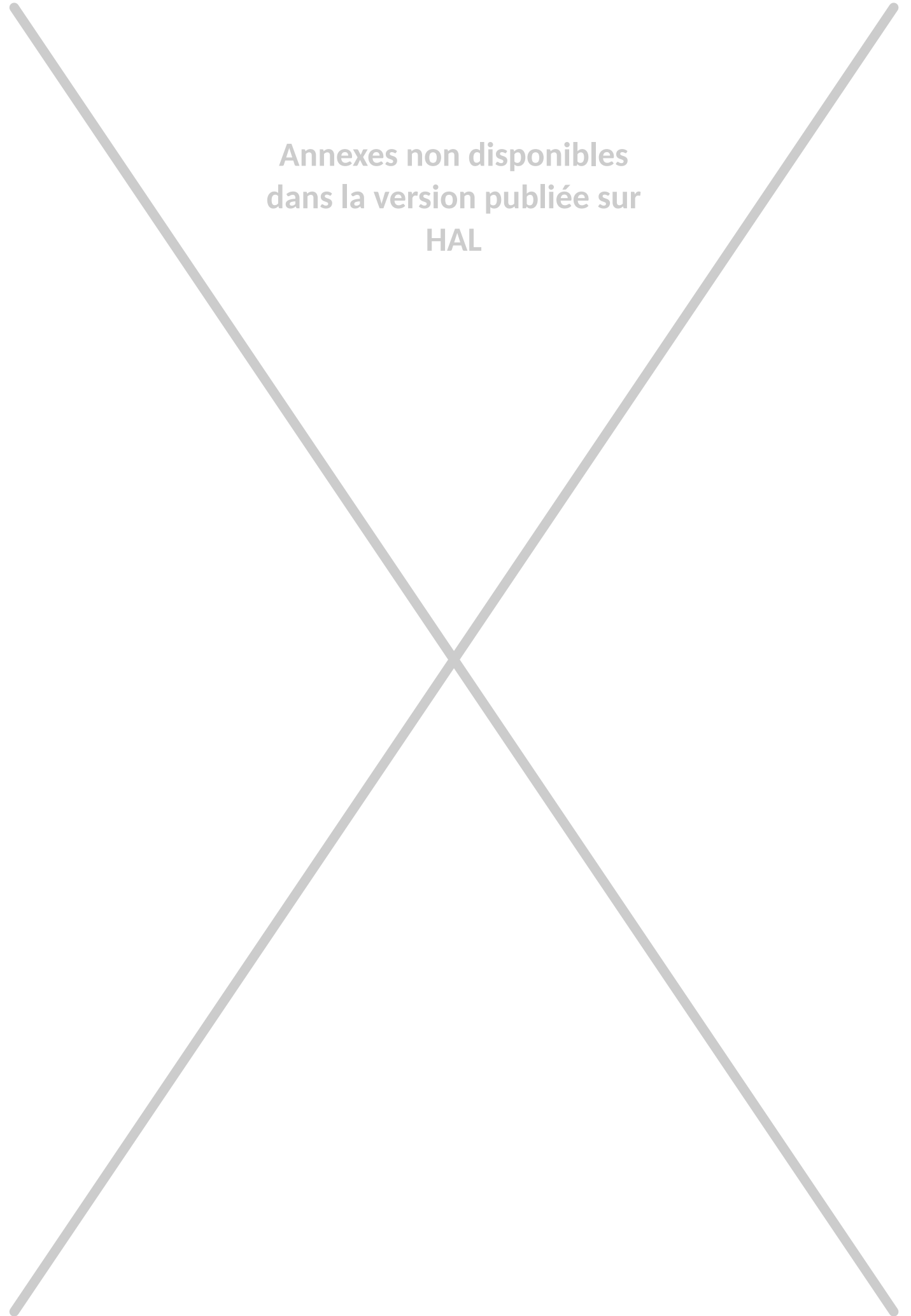
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



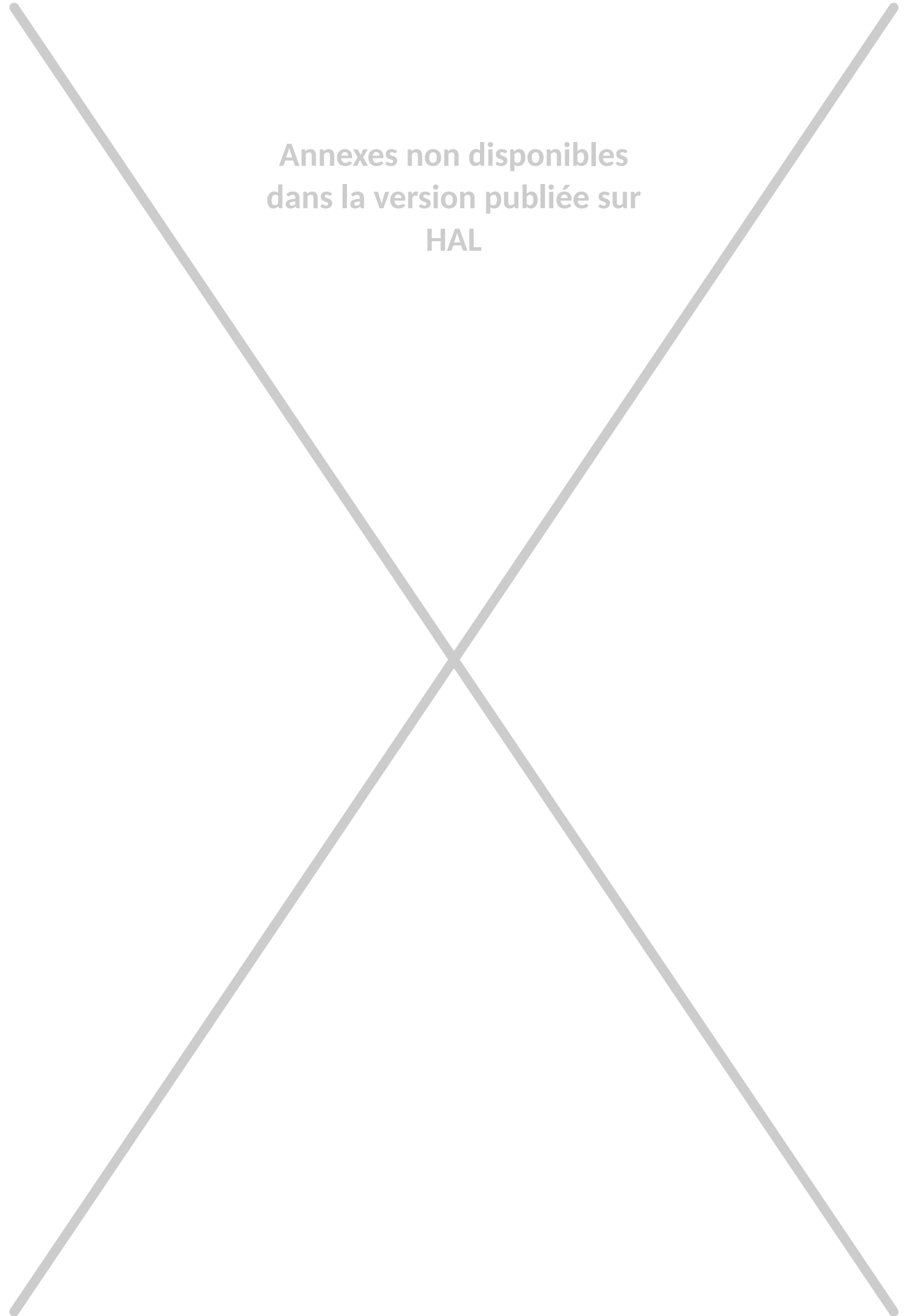
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



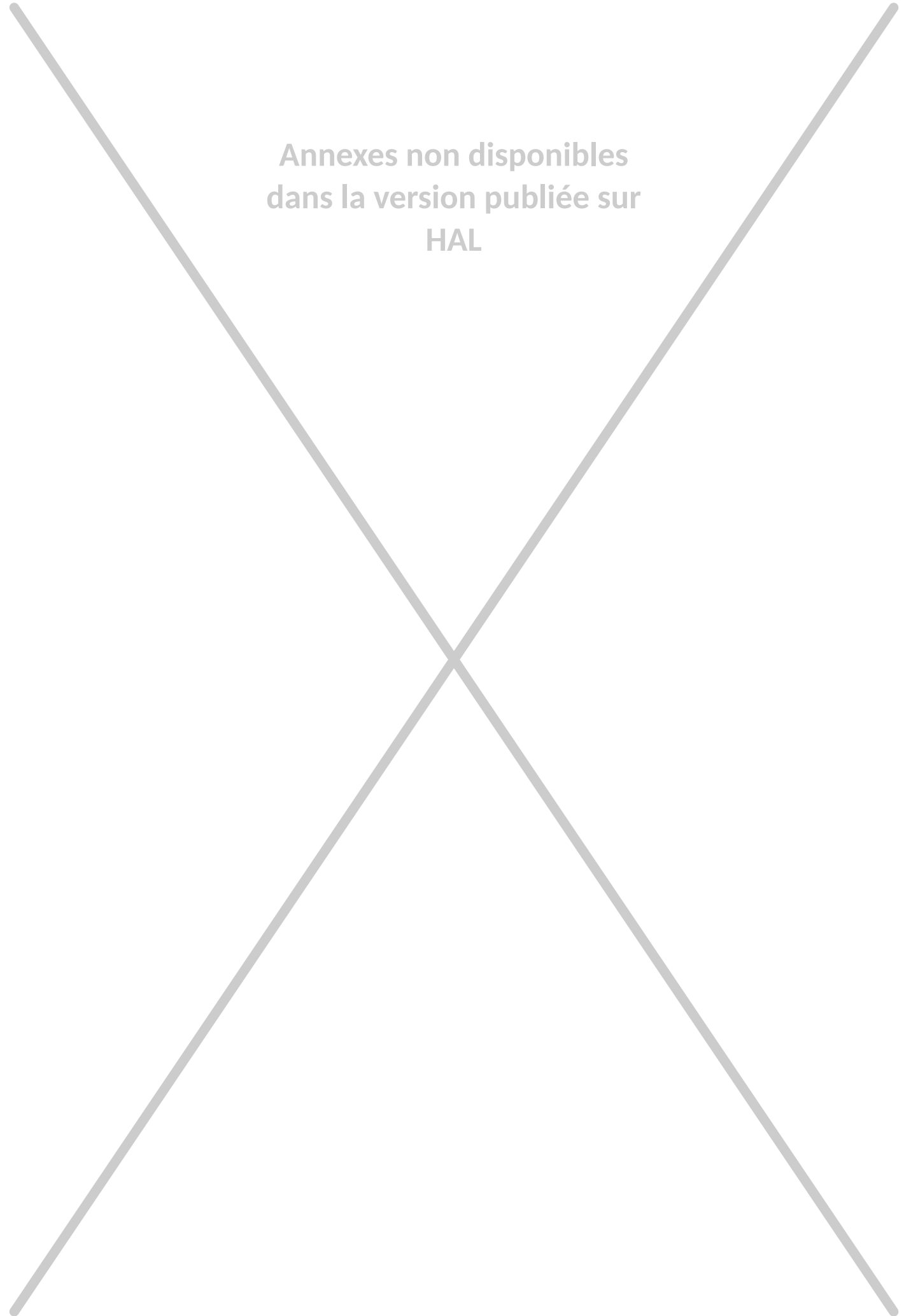
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



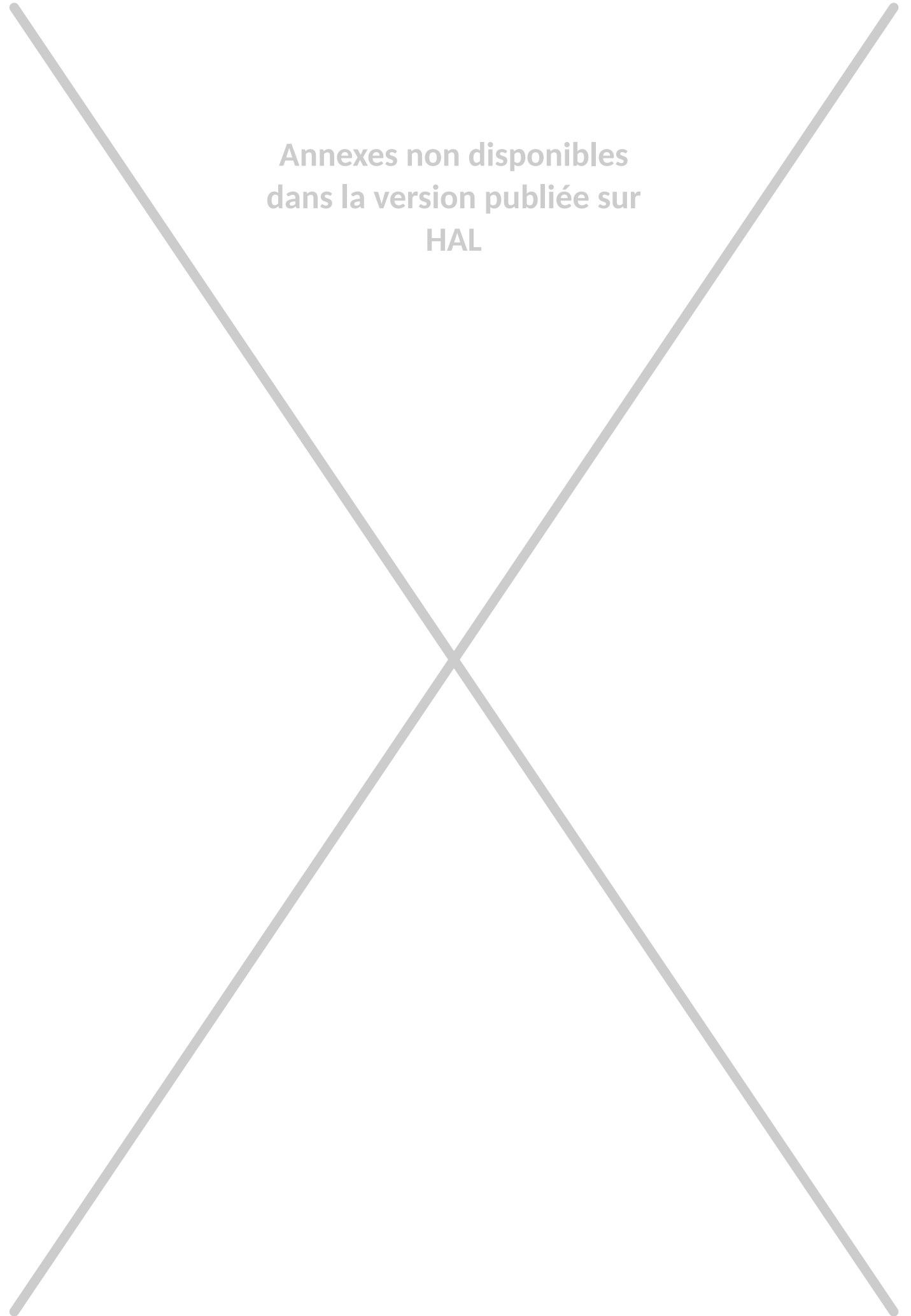
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



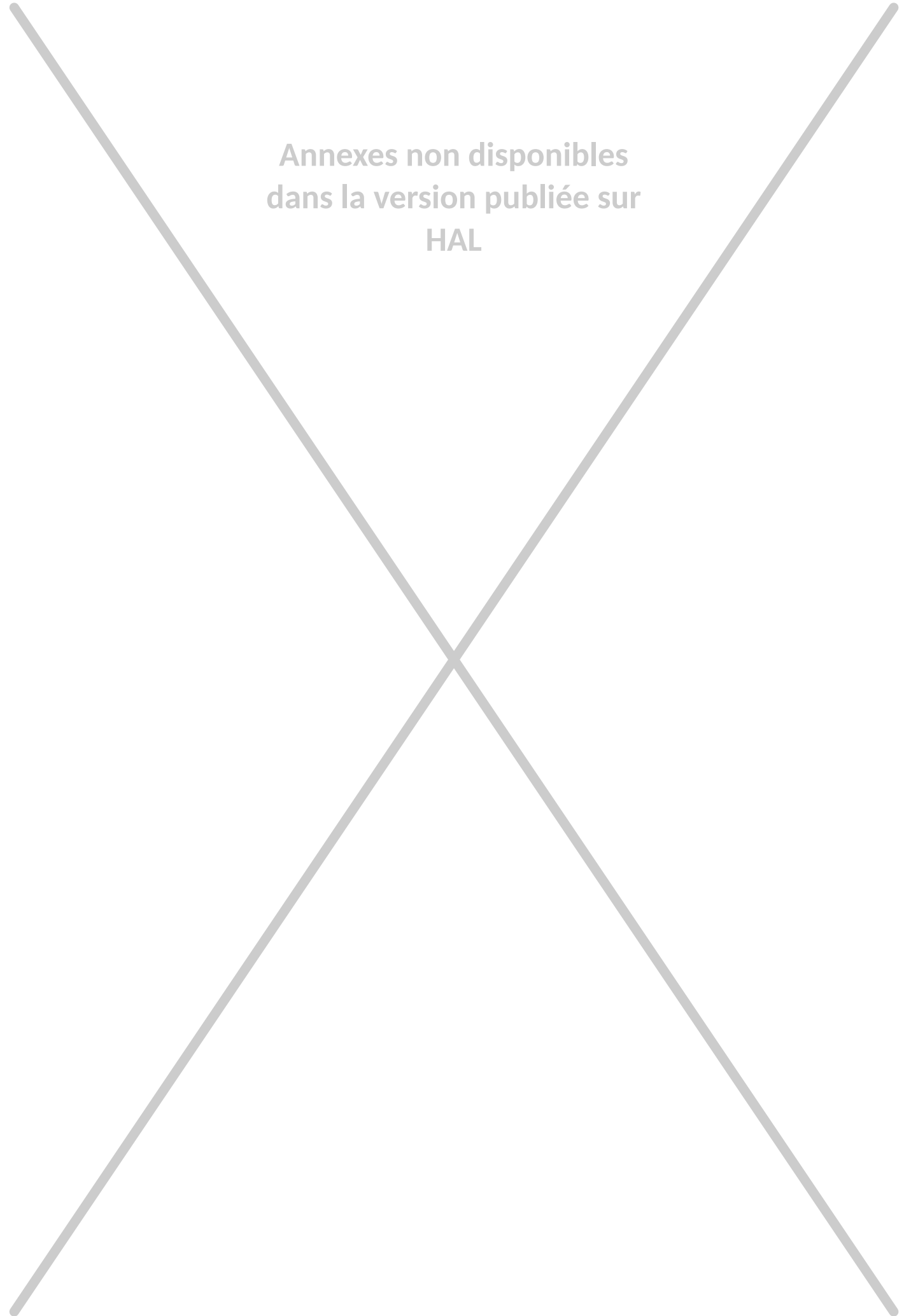
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



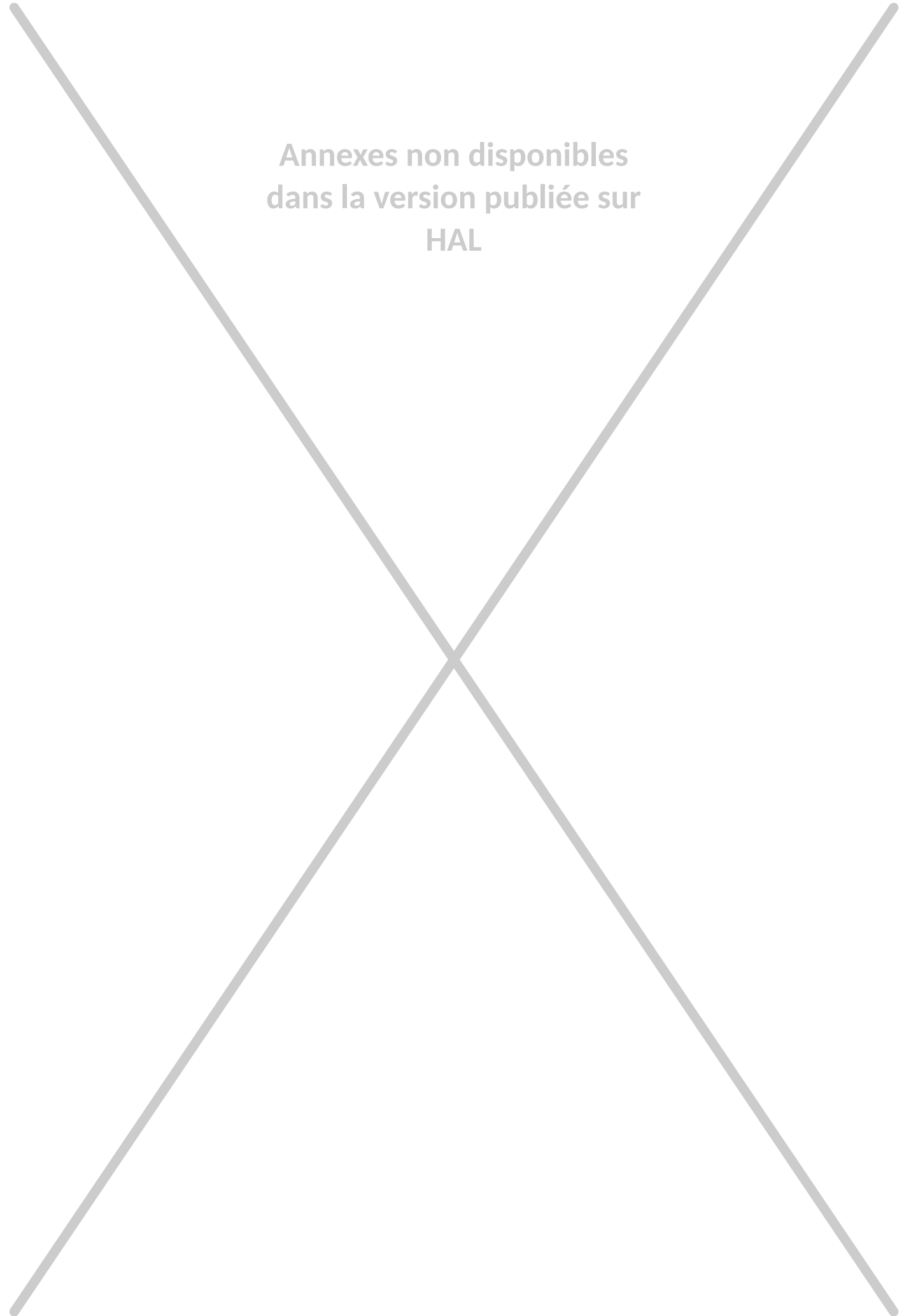
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



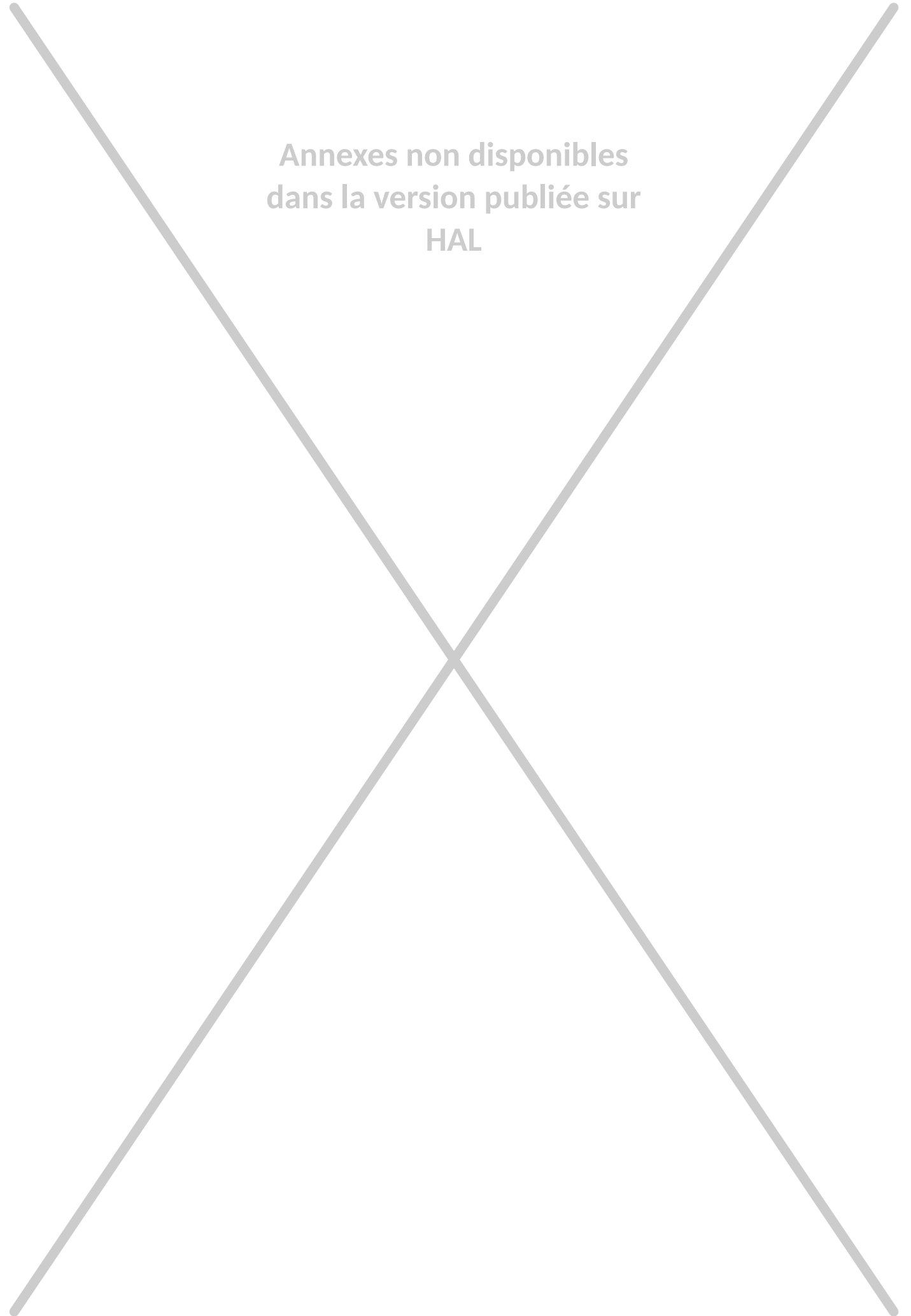
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



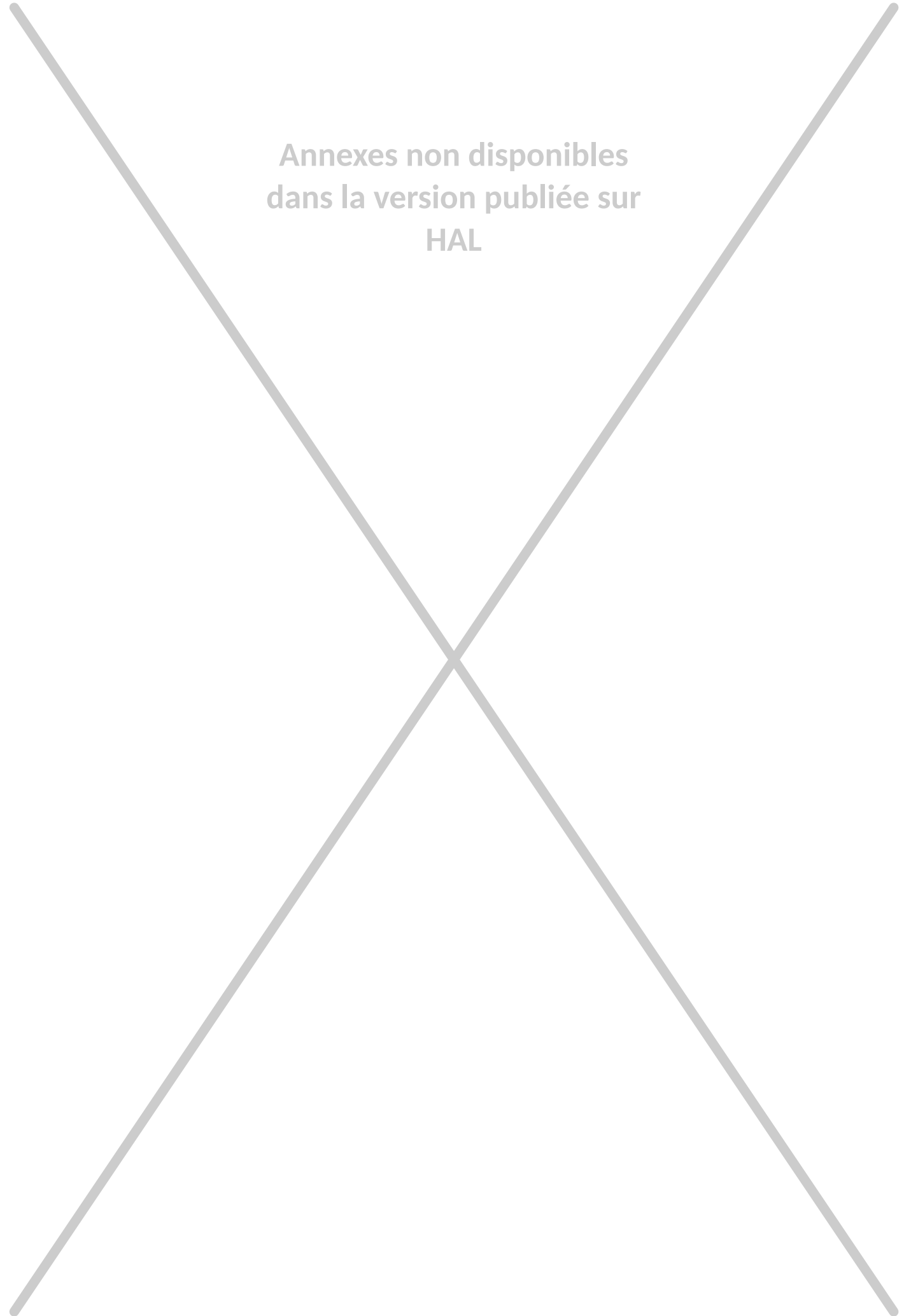
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



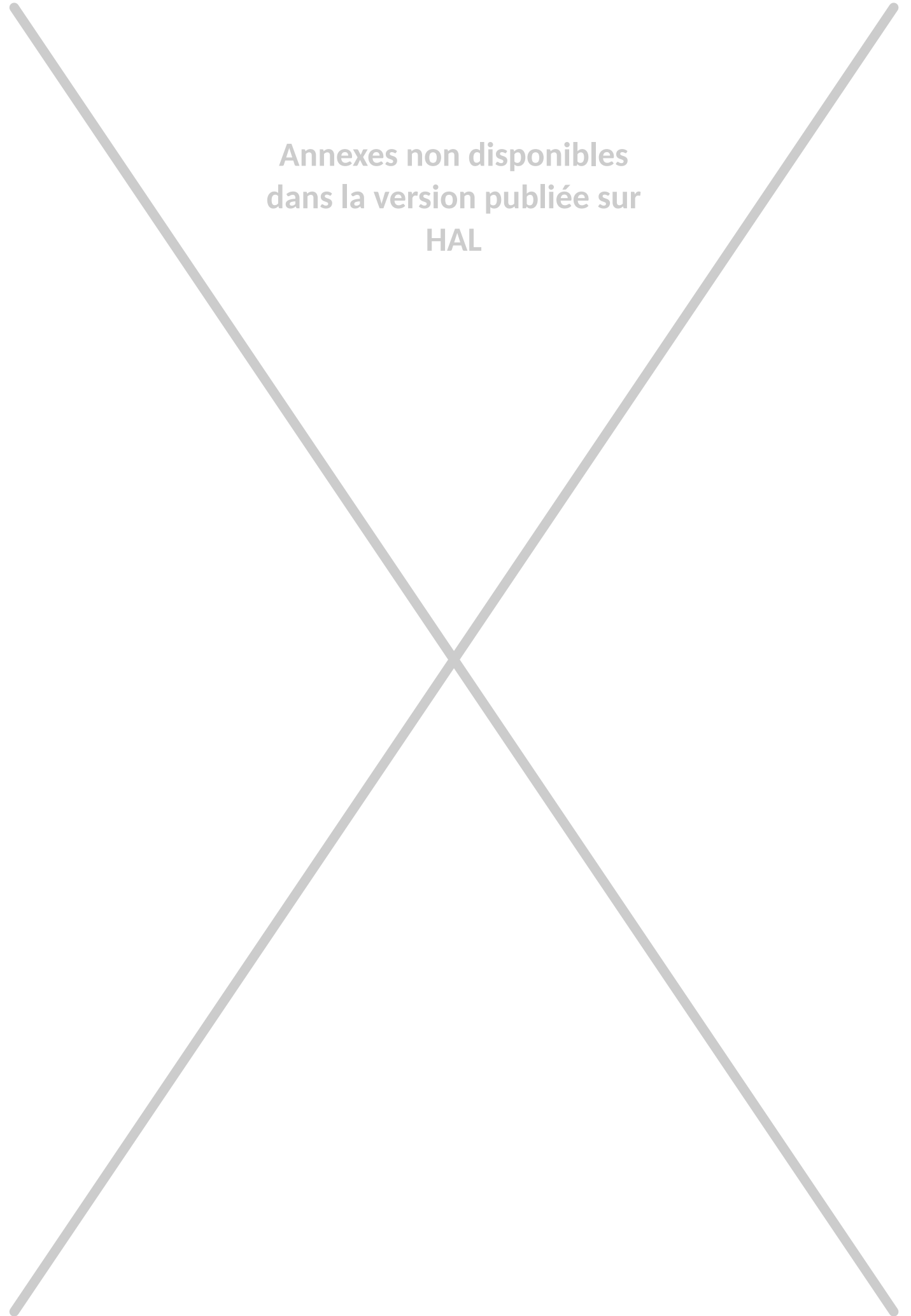
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



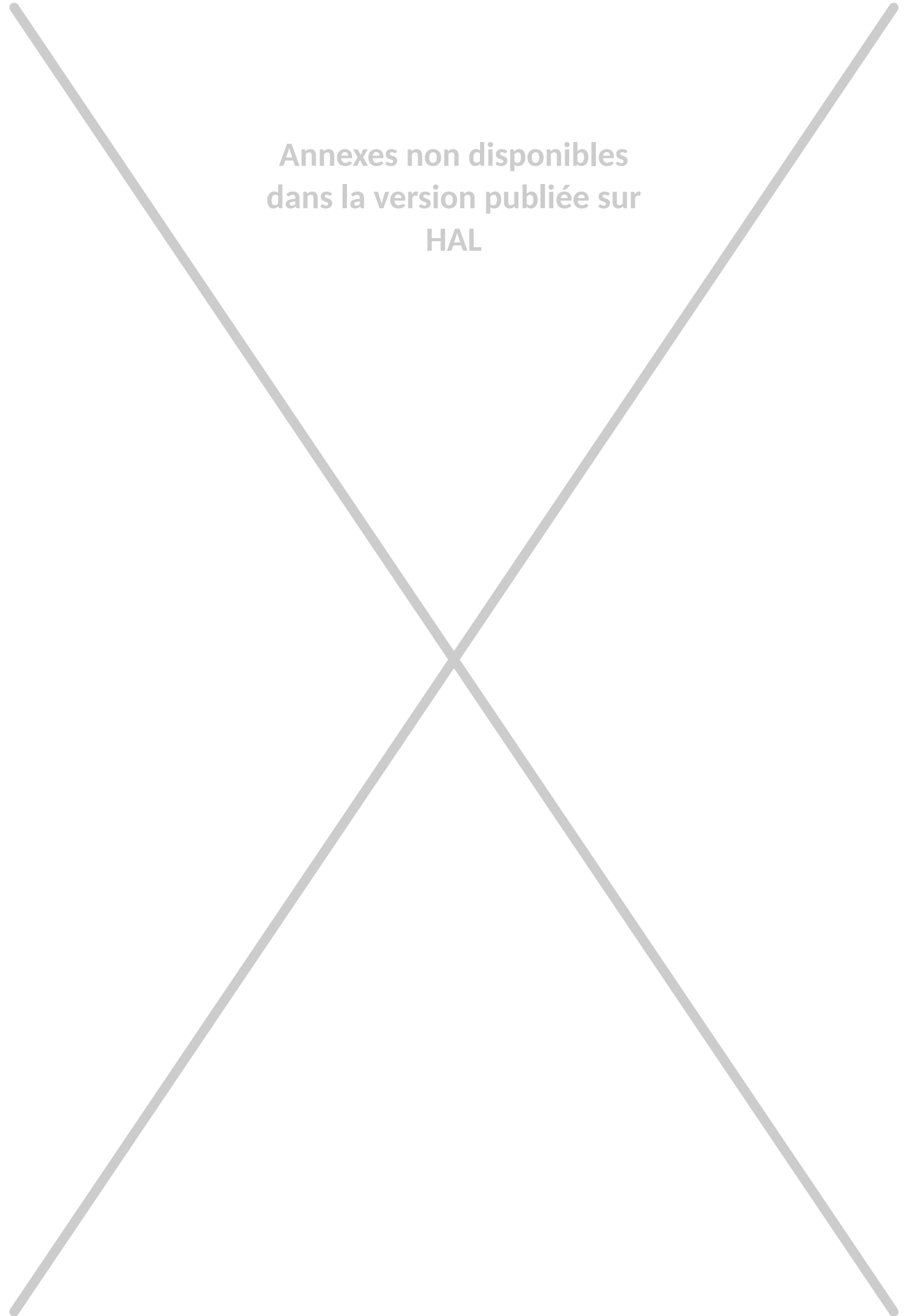
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



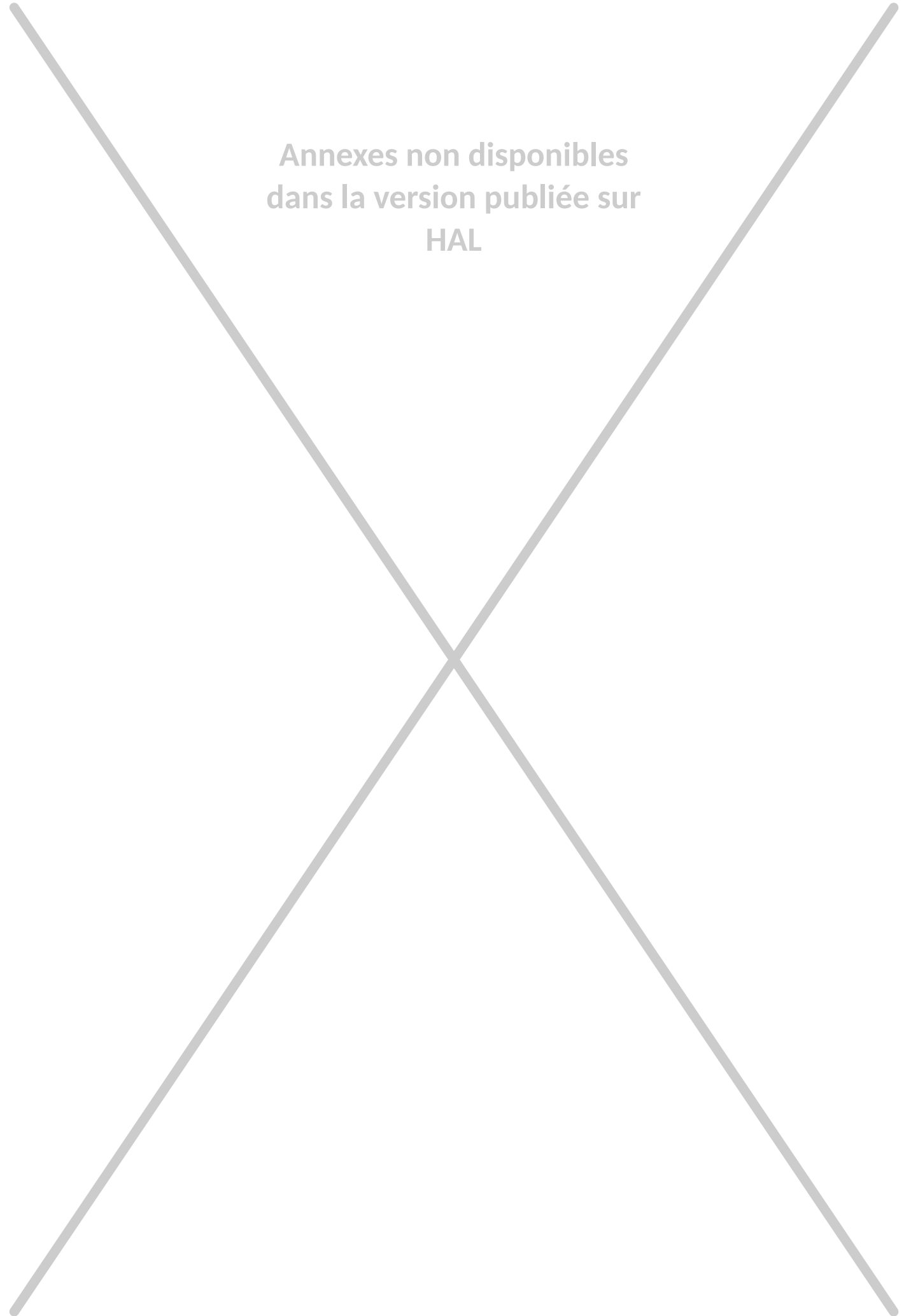
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



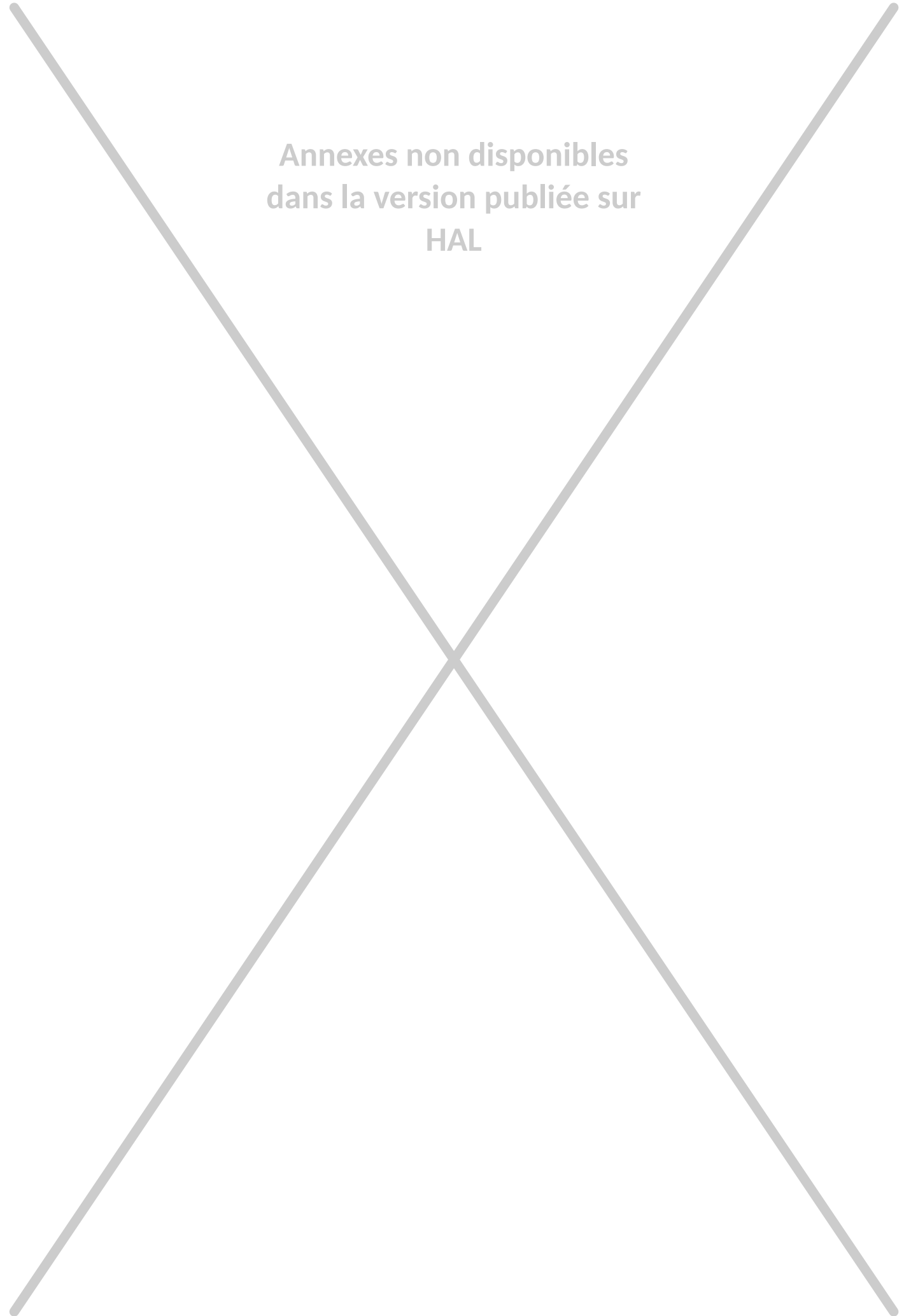
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



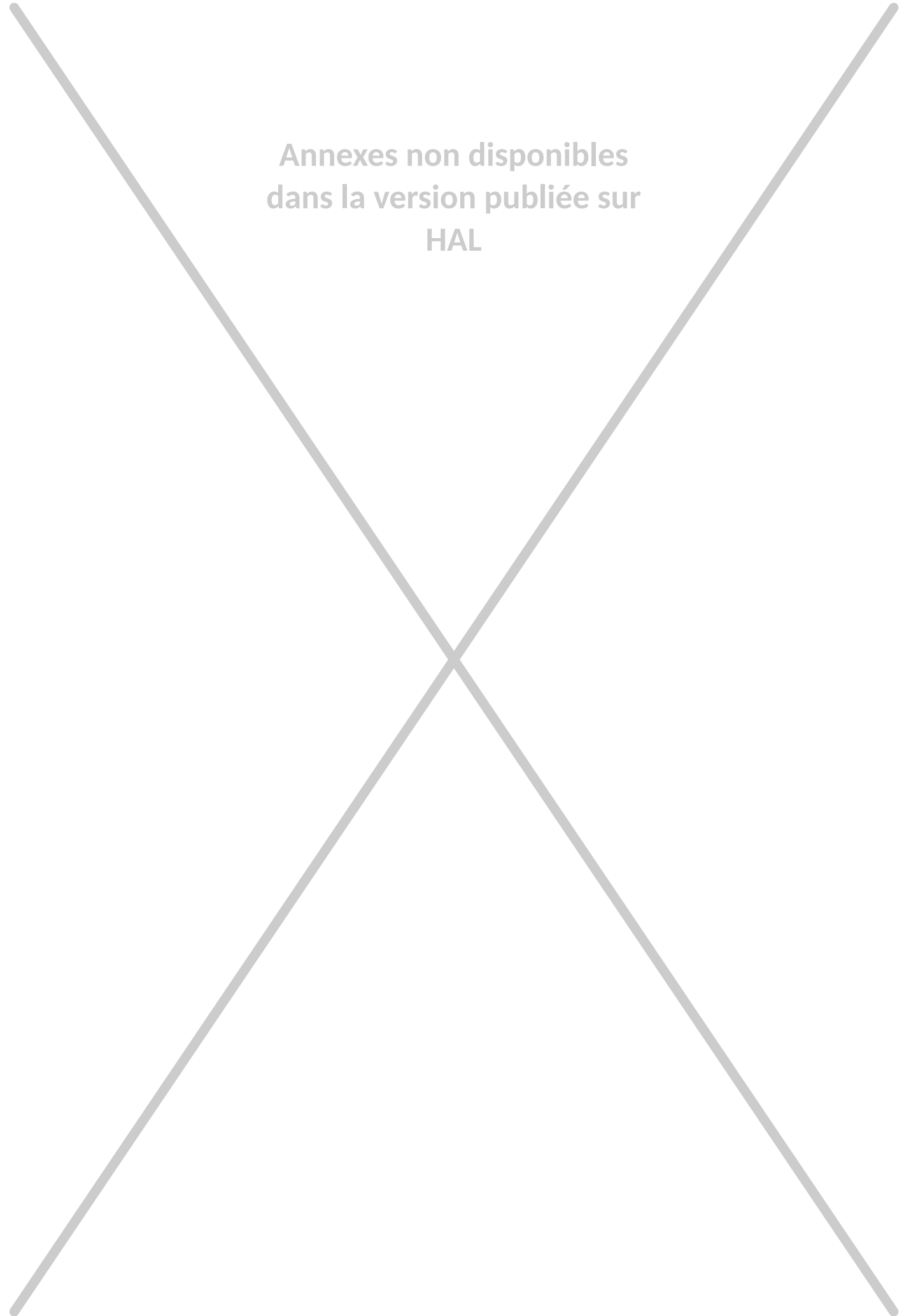
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL

3 M. Gisselbrecht, J-S. Kroll-Rabotin, J.-P. Bellot, 2019

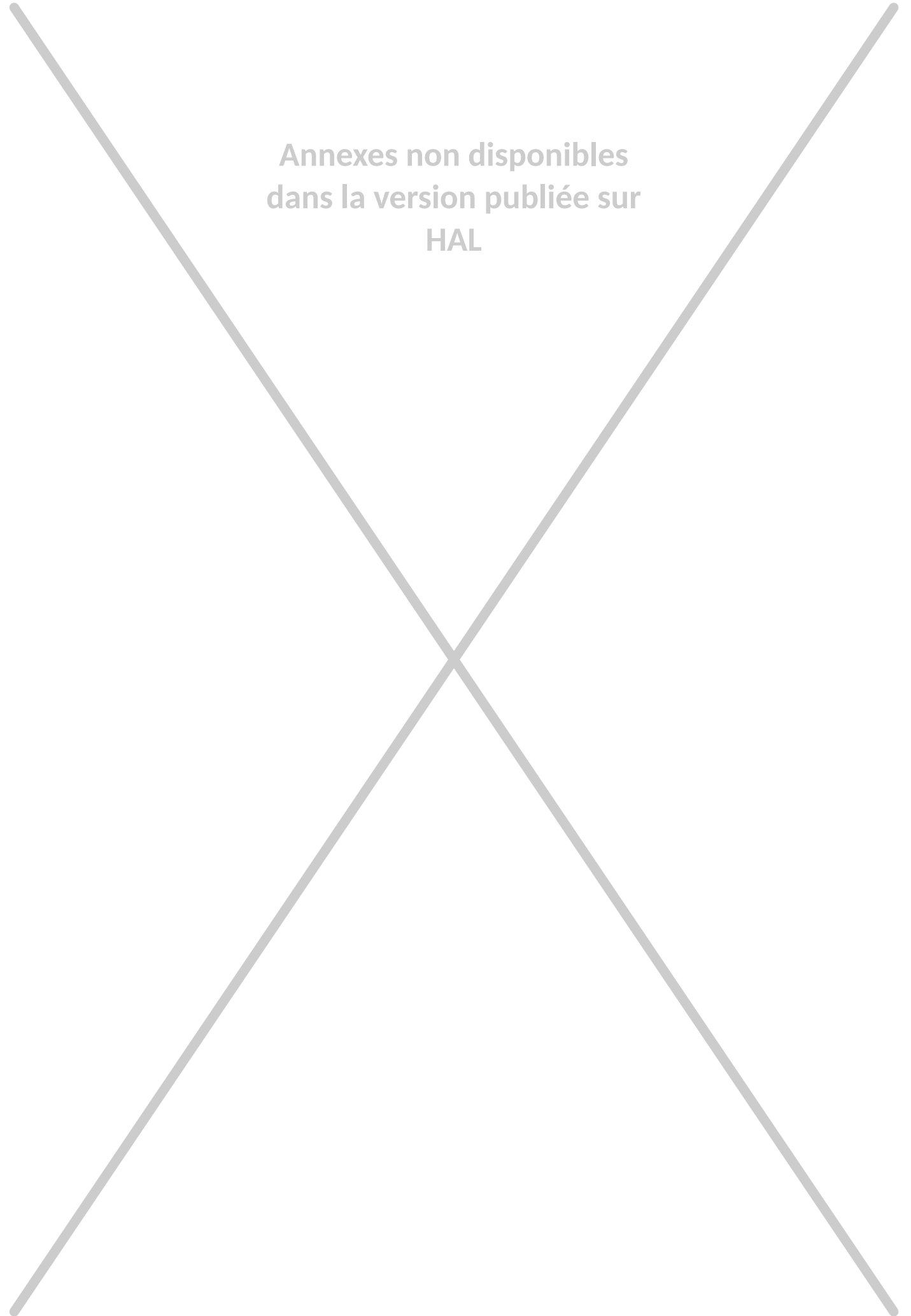
M. Gisselbrecht, J-S. Kroll-Rabotin, J.-P. Bellot: Aggregation kernel of globular inclusions in local shear flow: application to aggregation in a gas-stirred ladle. *Metallurgical Research and Technology*, 116:512, 2019.



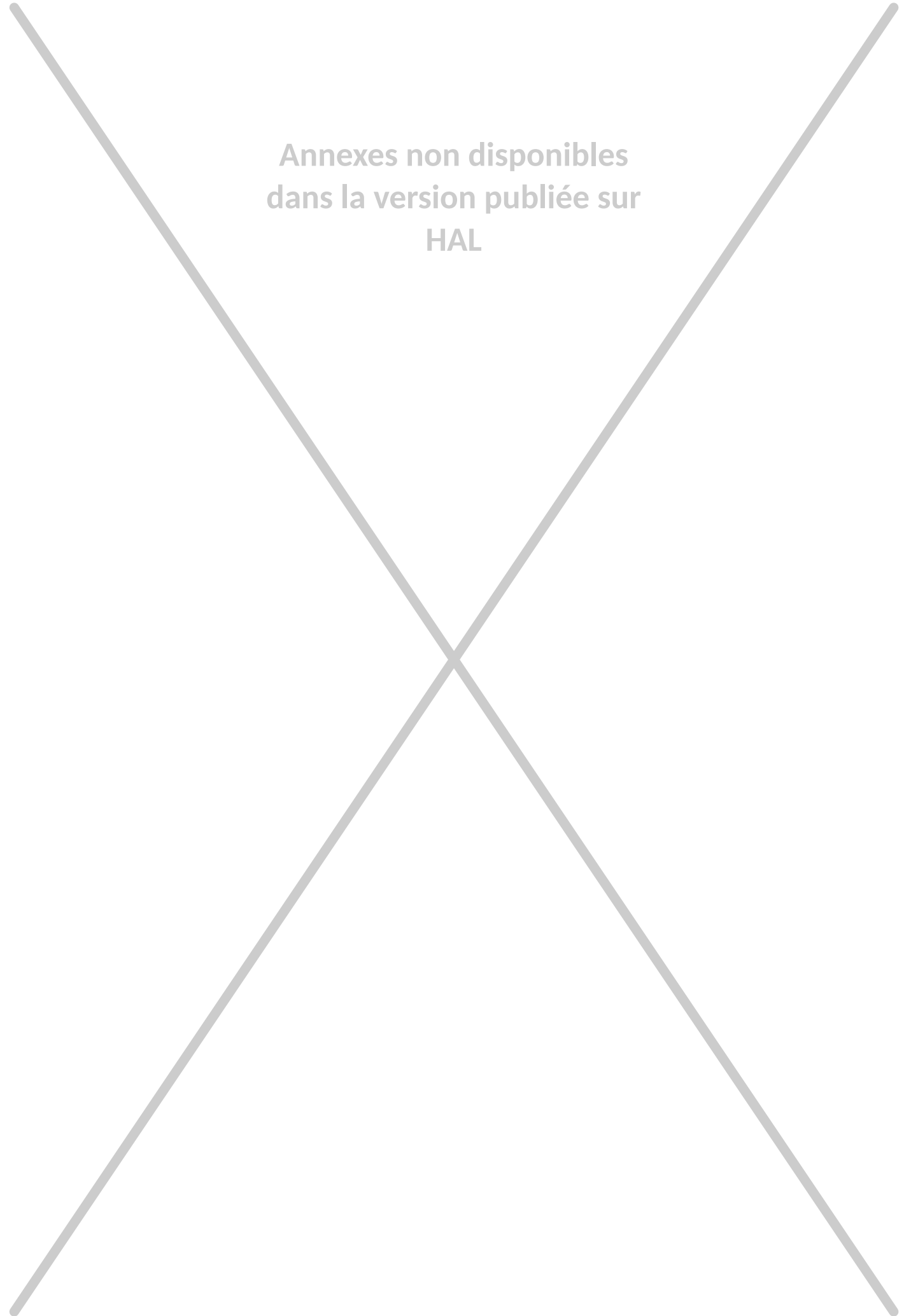
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



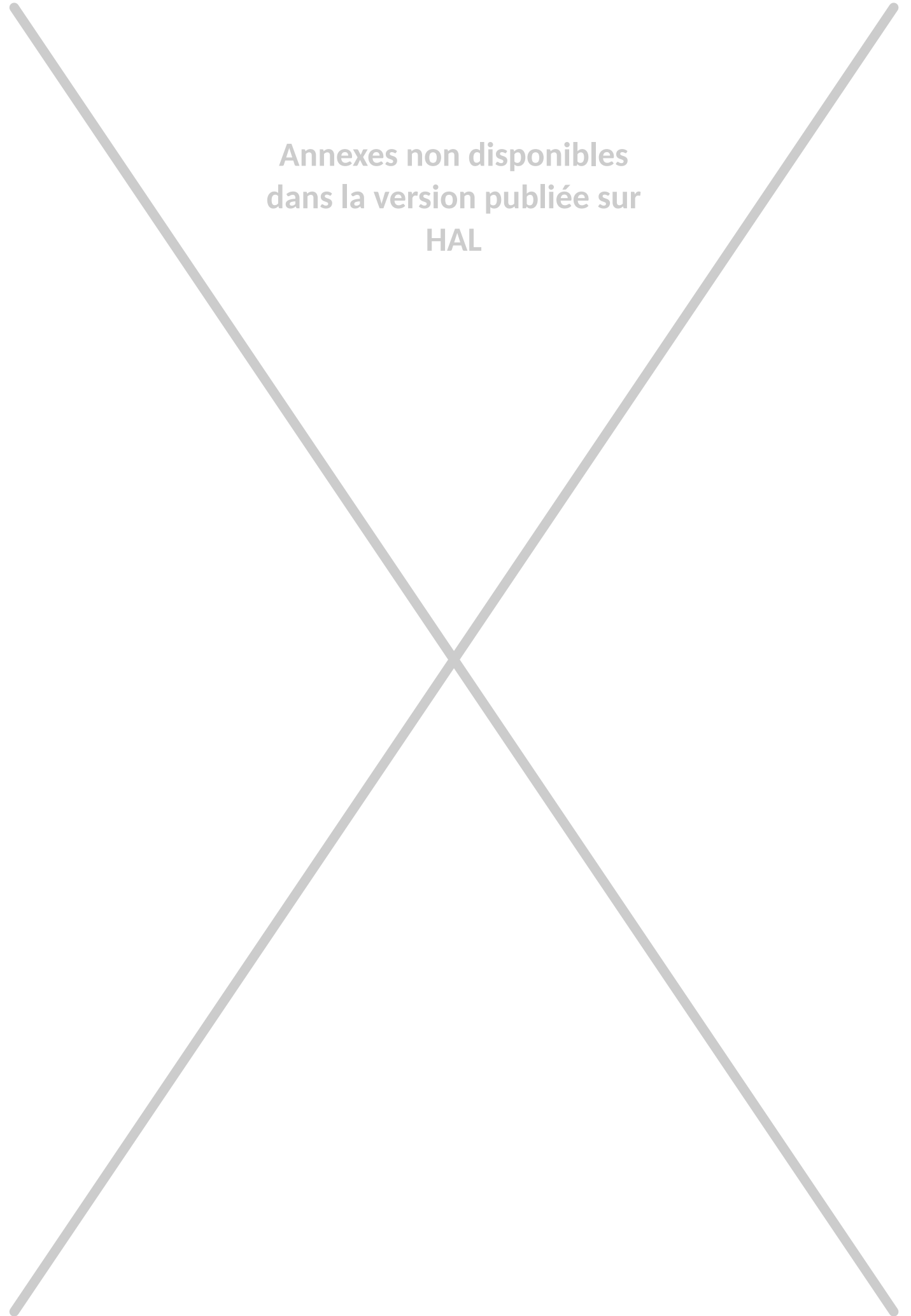
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



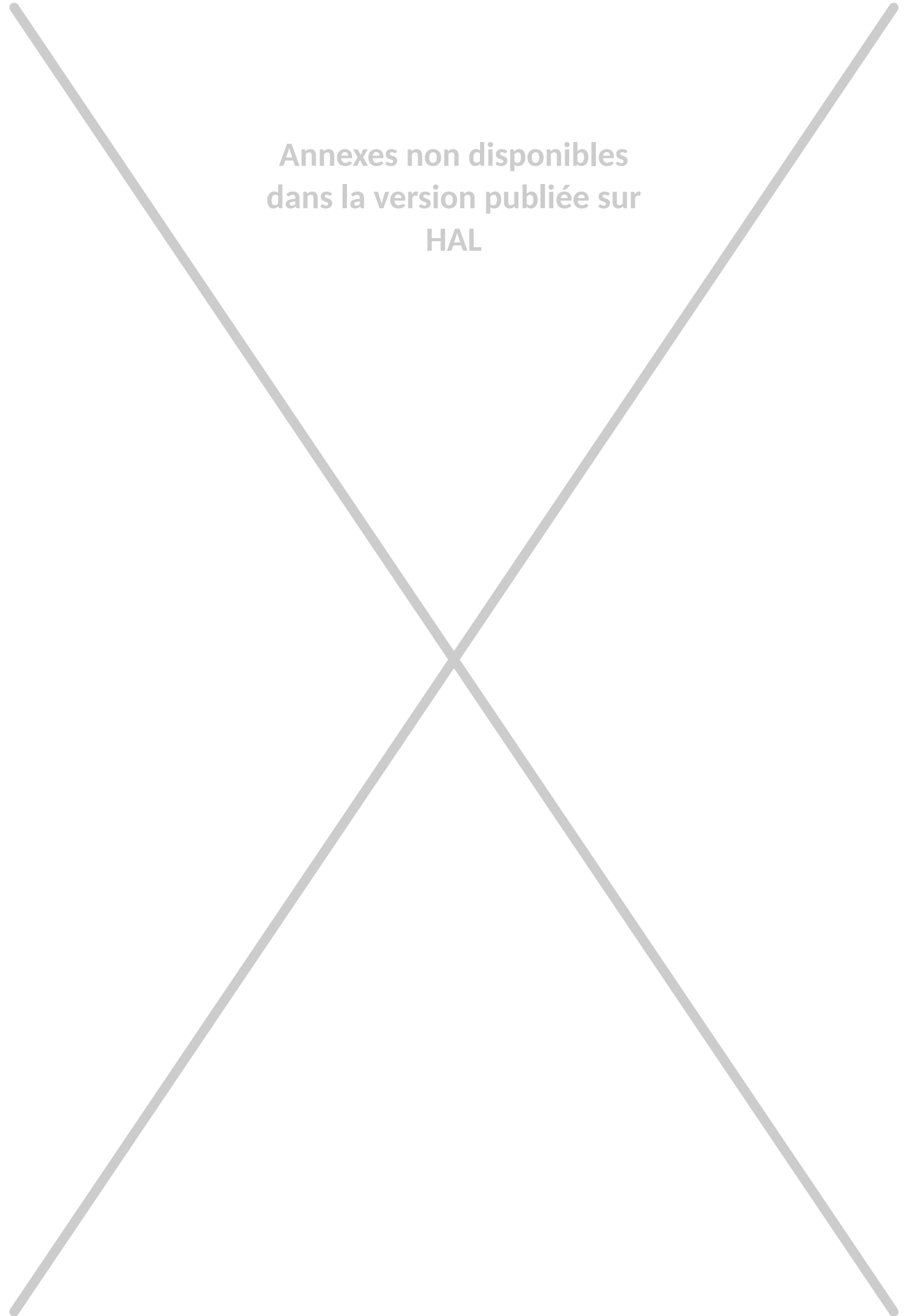
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



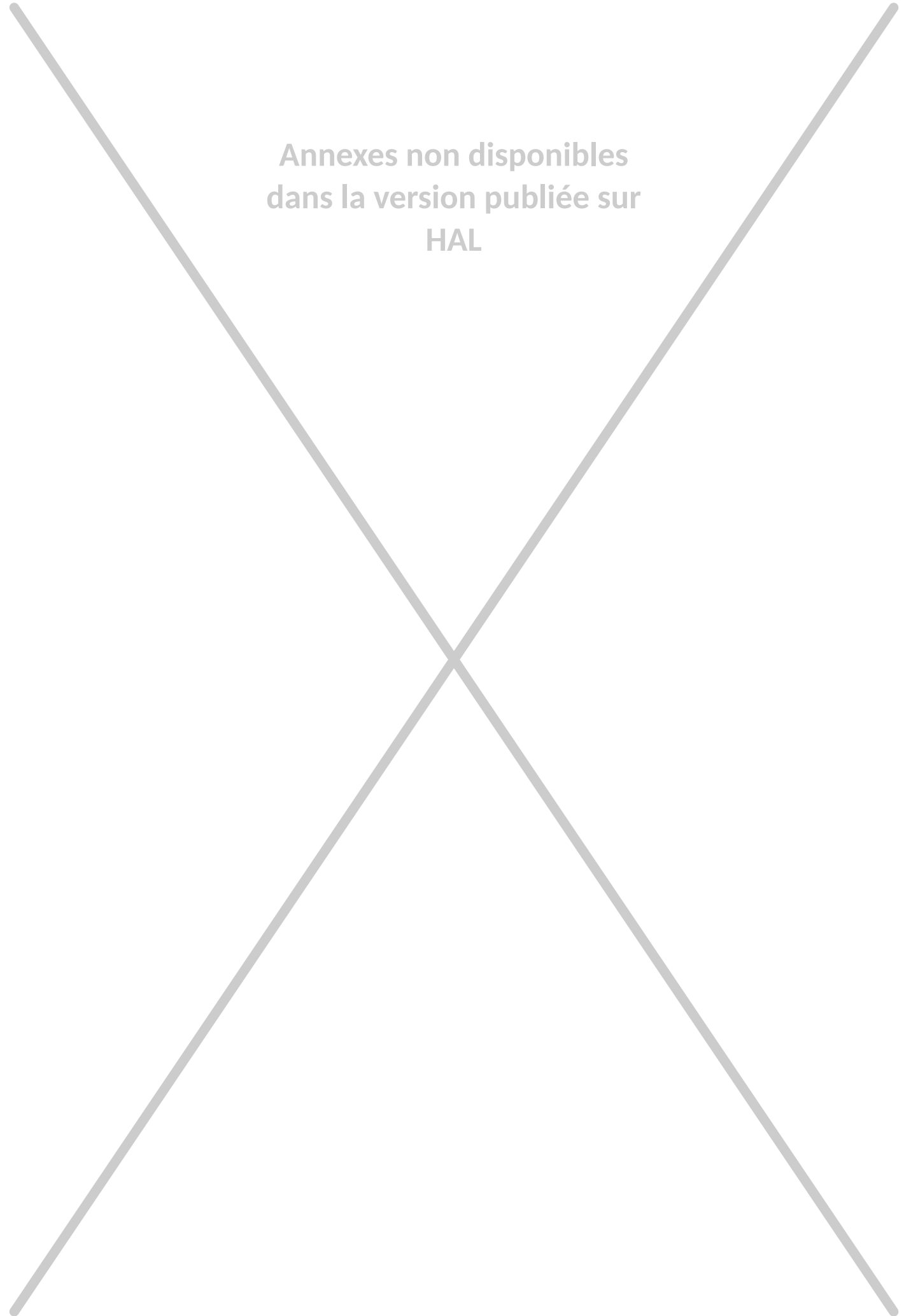
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



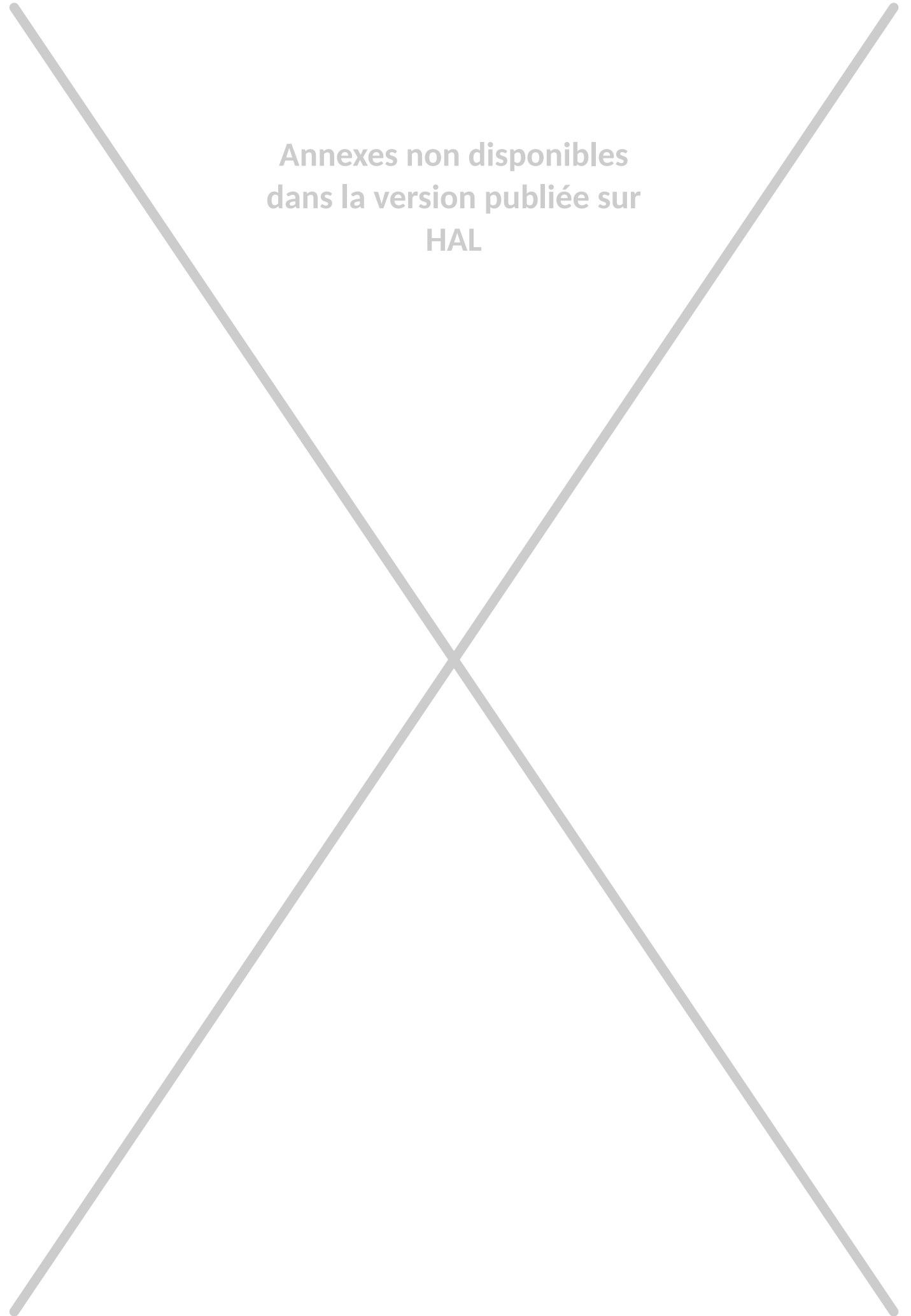
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



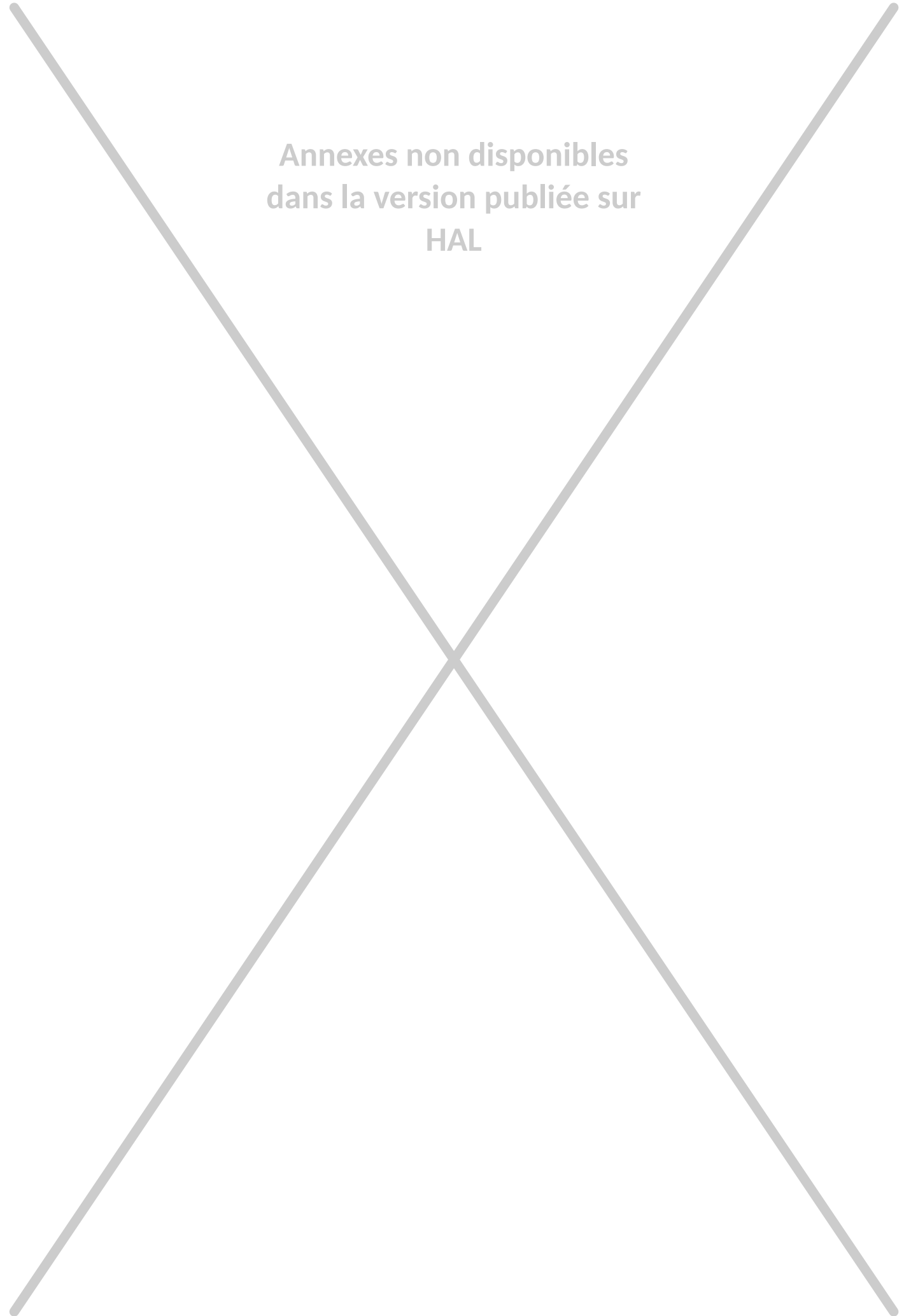
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



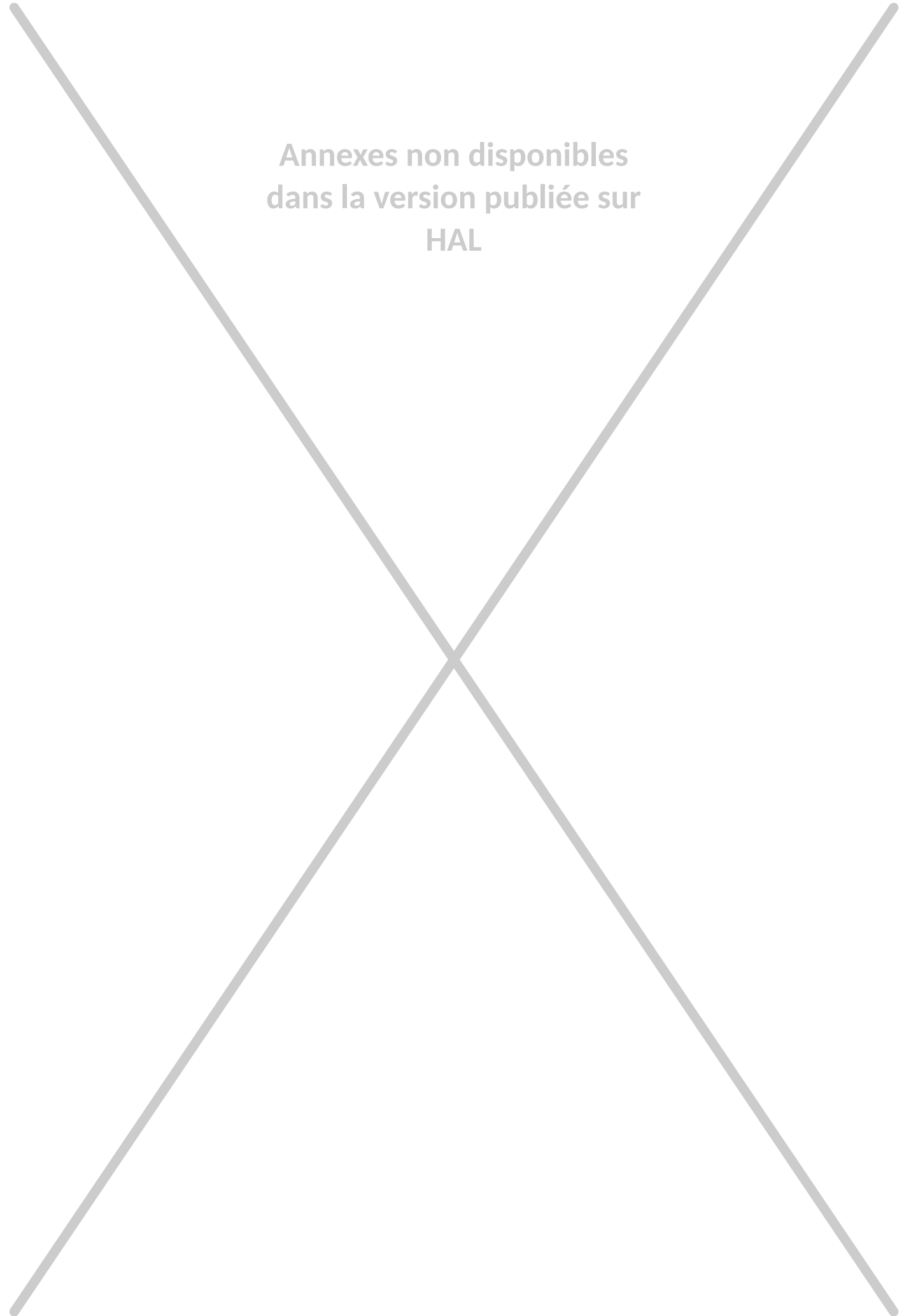
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



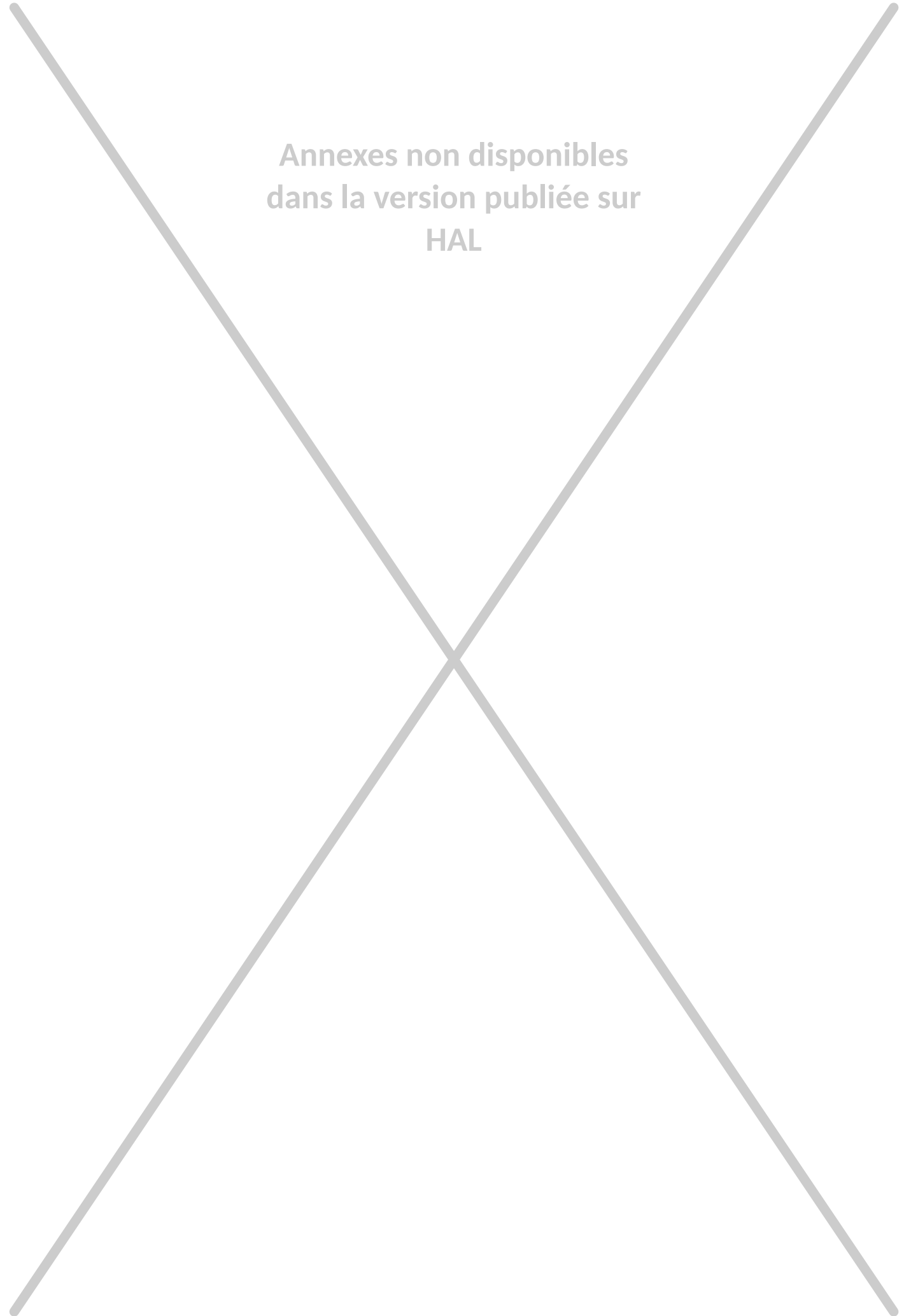
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



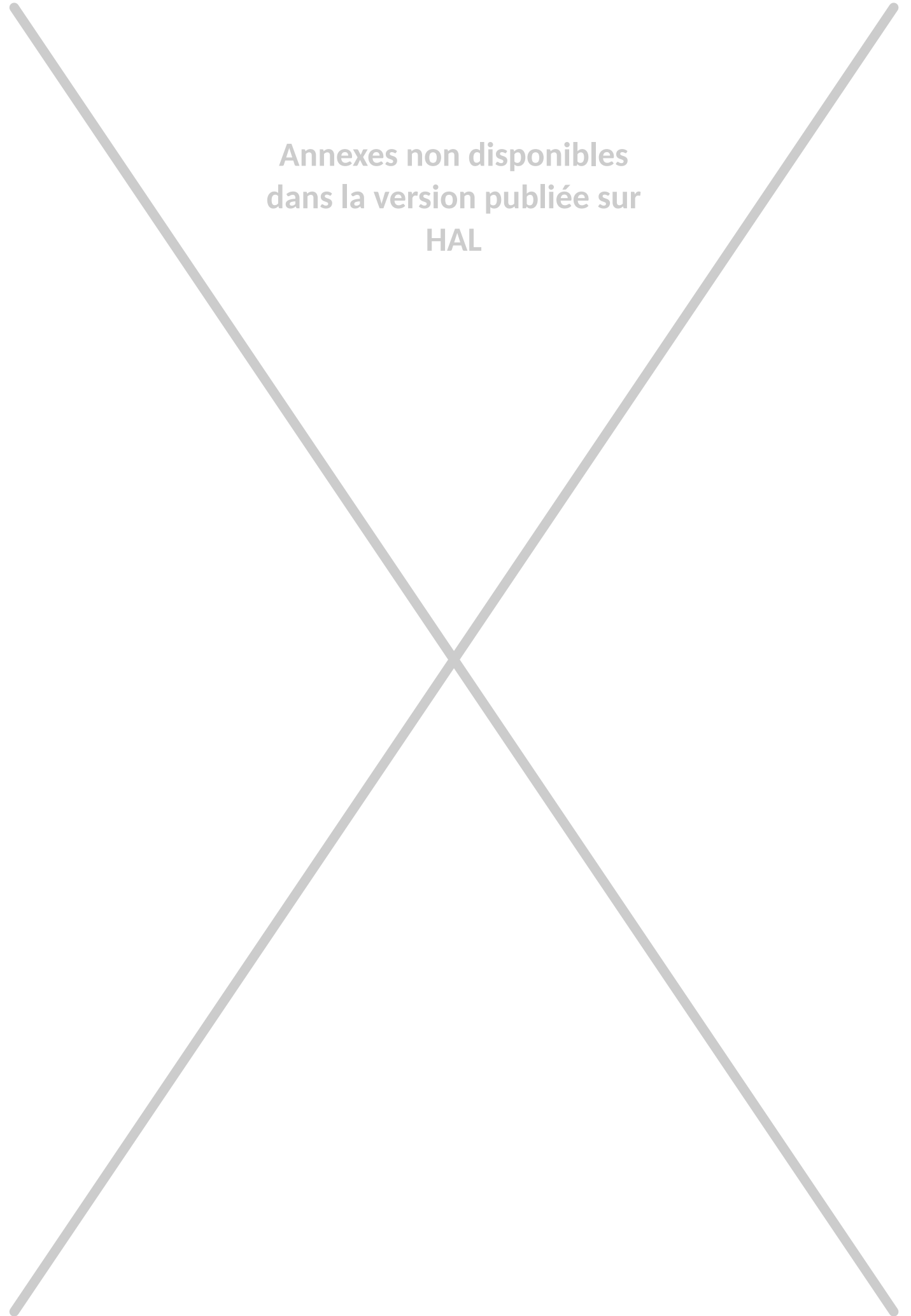
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL

4 Q. Dehaine, Y. Foucaud, J.-S. Kroll-Rabotin, L.O. Filippov, 2019

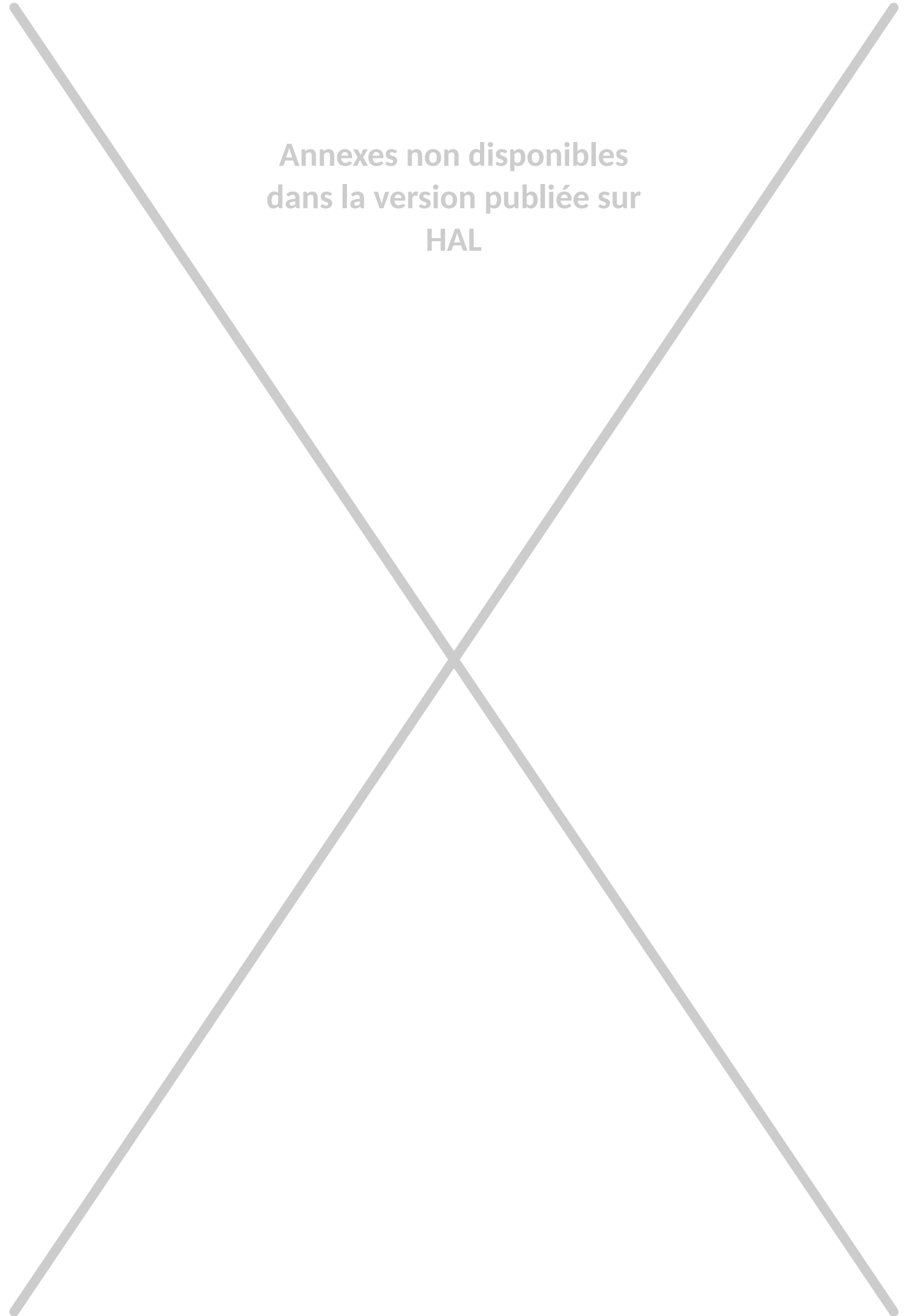
Q. Dehaine, Y. Foucaud, J.-S. Kroll-Rabotin, L.O. Filippov : Experimental investigation into the kinetics of Falcon UF concenp ration: implications for fluid dynamic-based modelling. *Separation and Purification Technology*, 215:590–601, 2019.



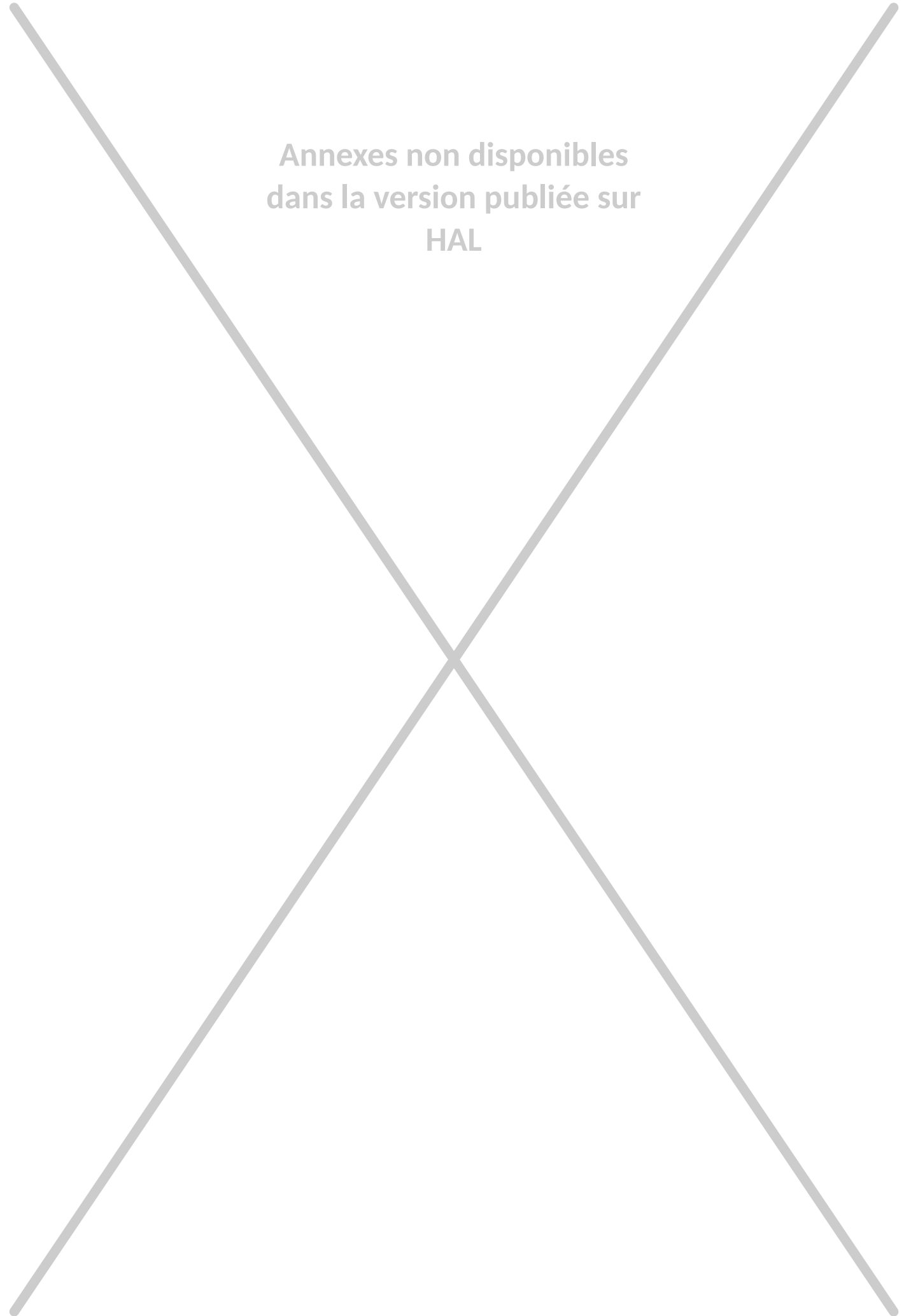
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



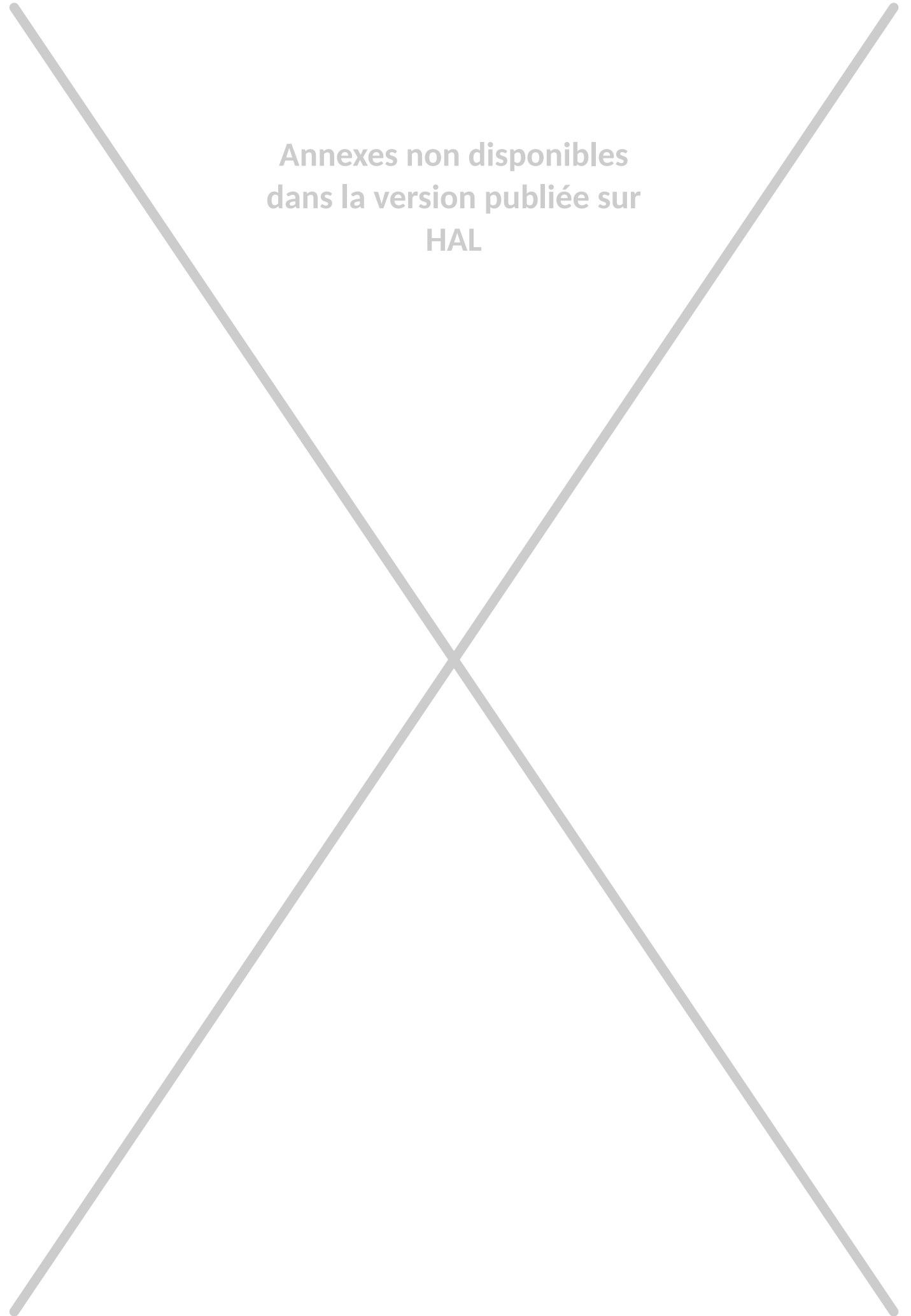
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



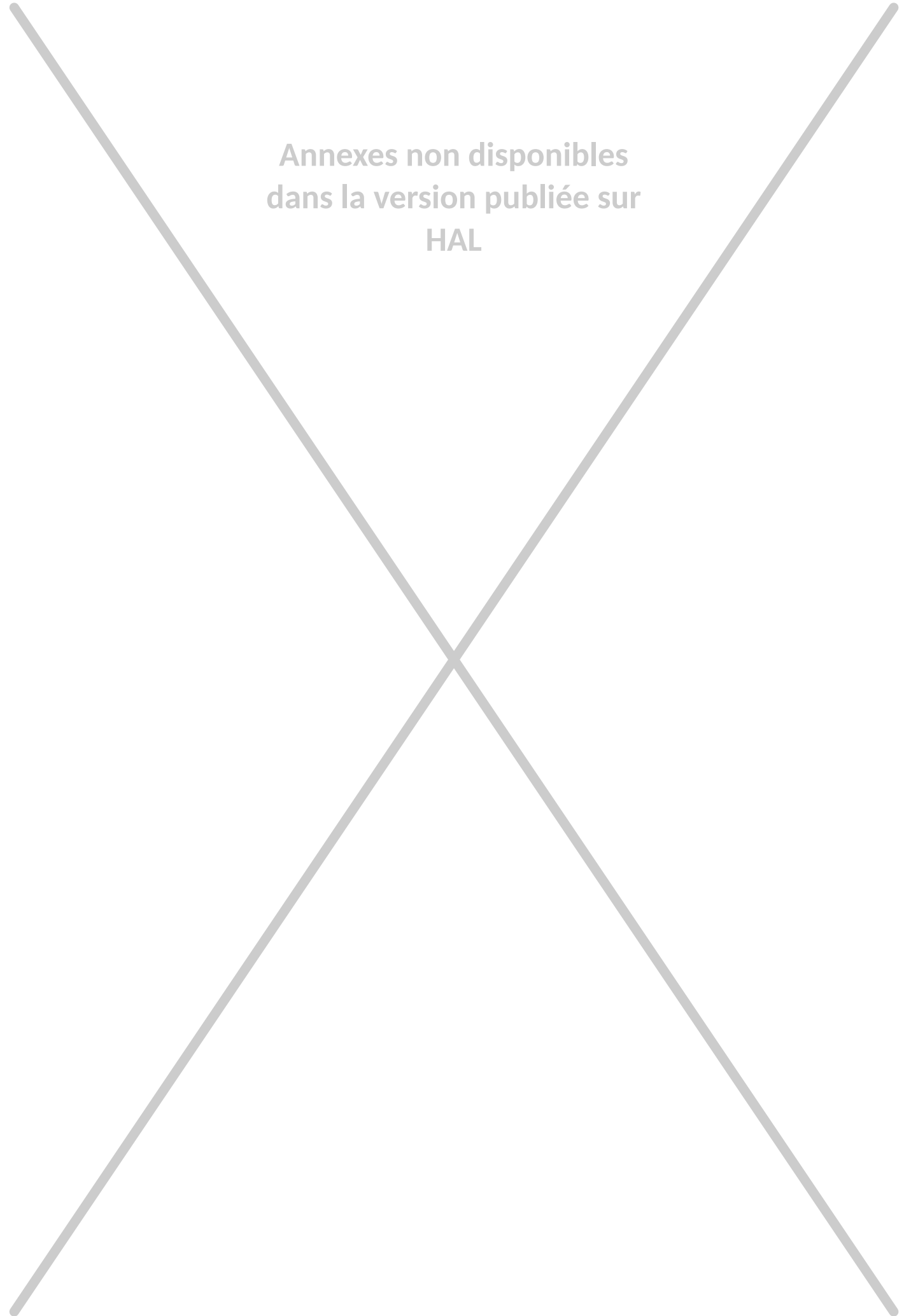
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



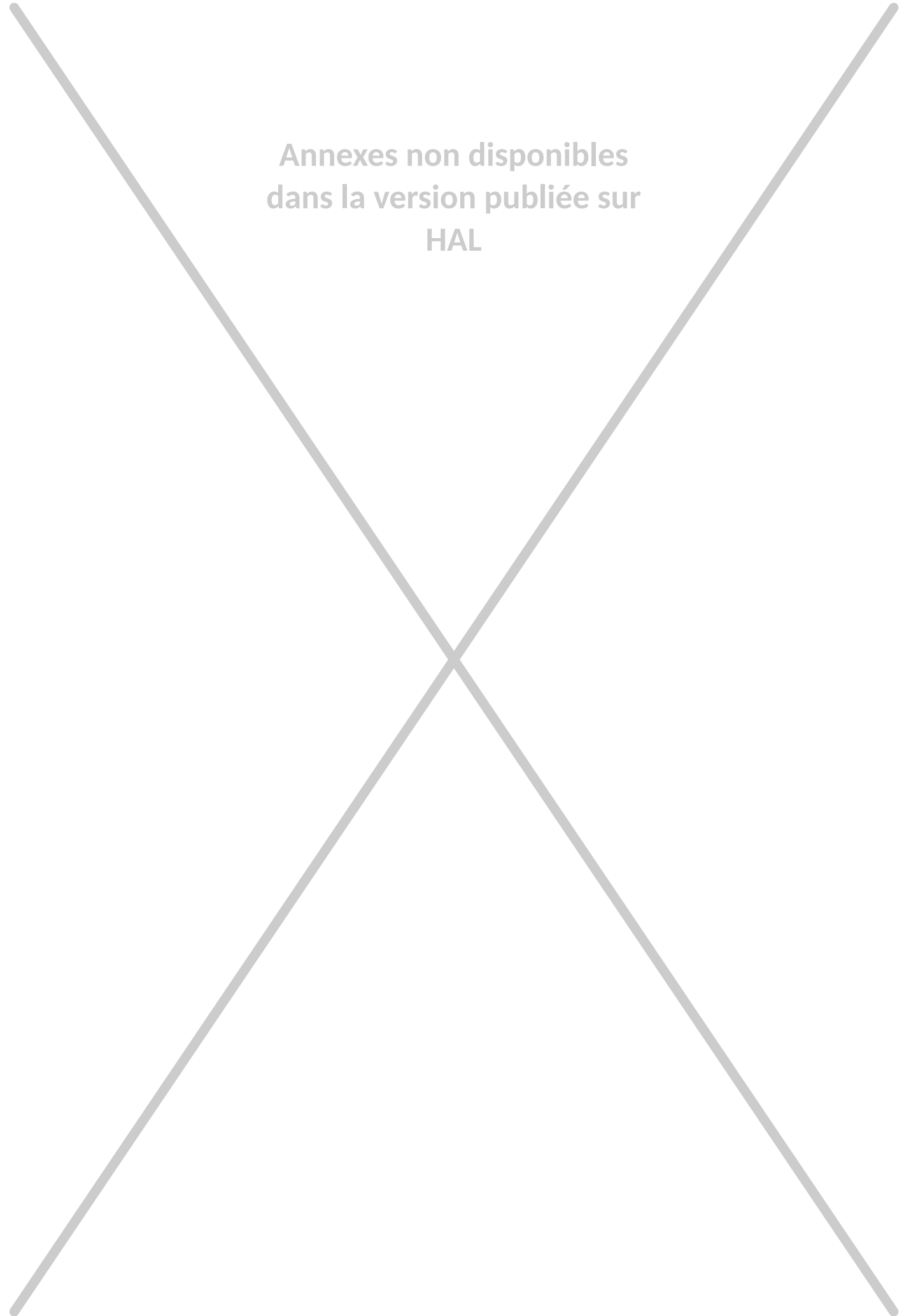
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



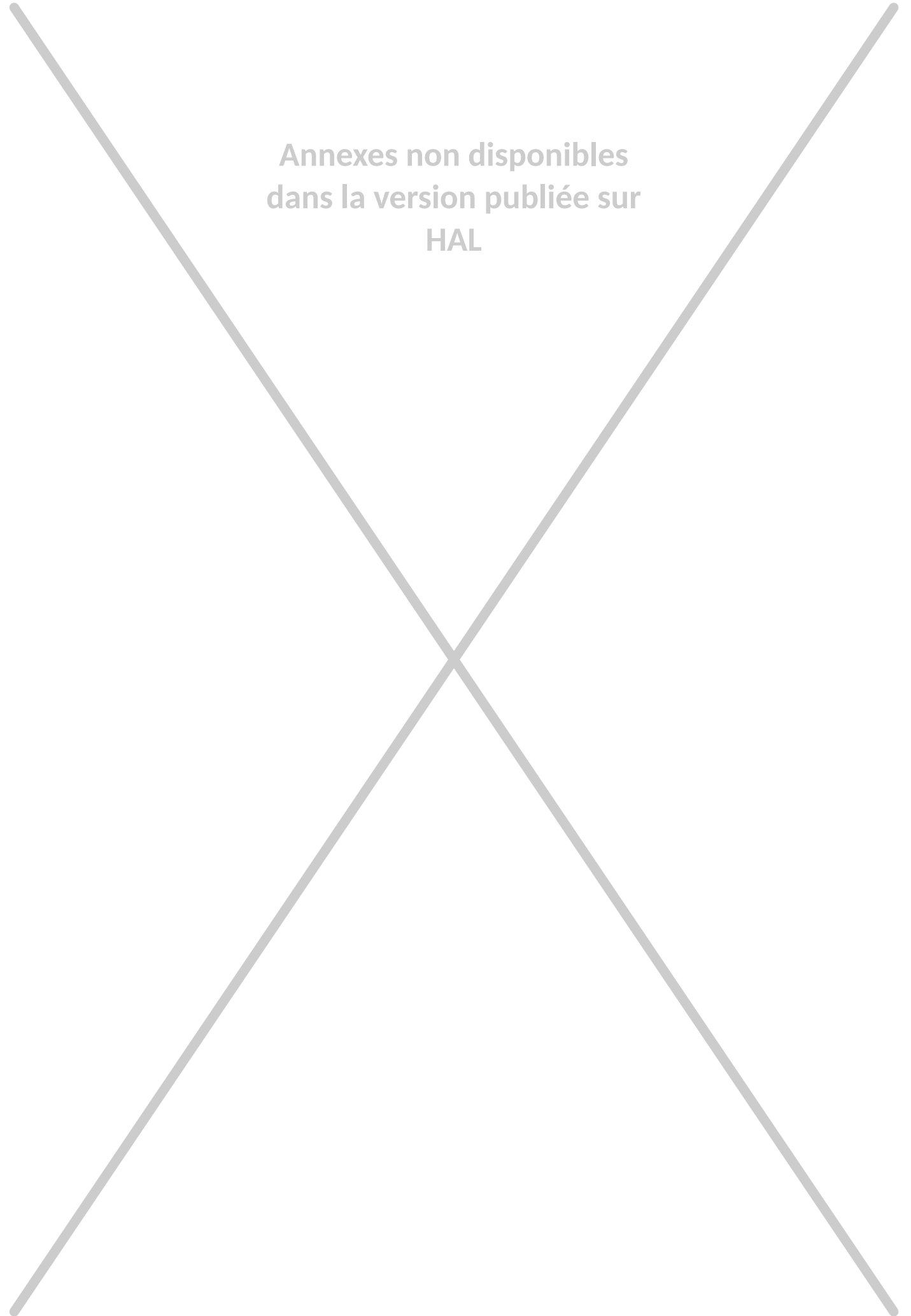
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



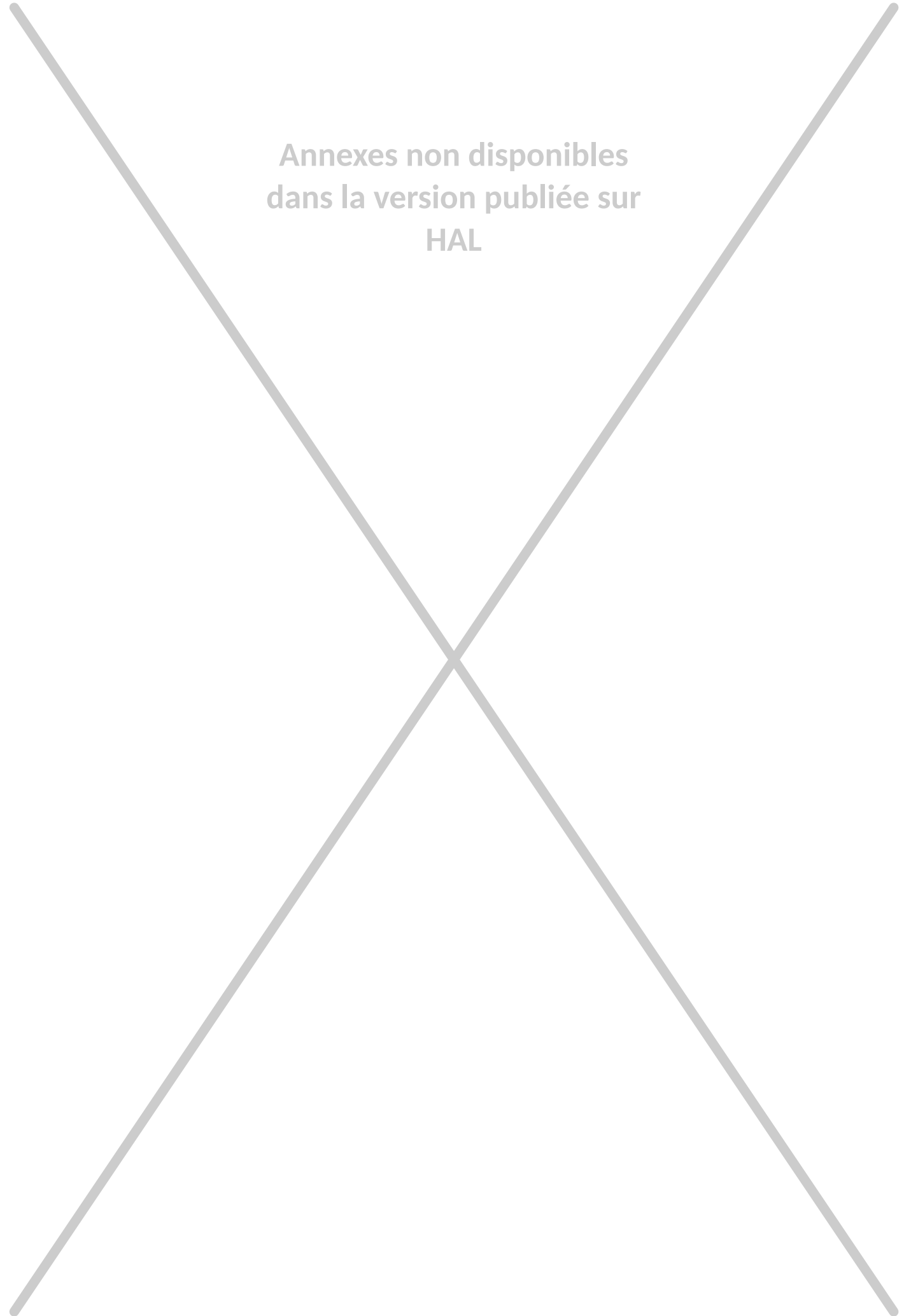
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



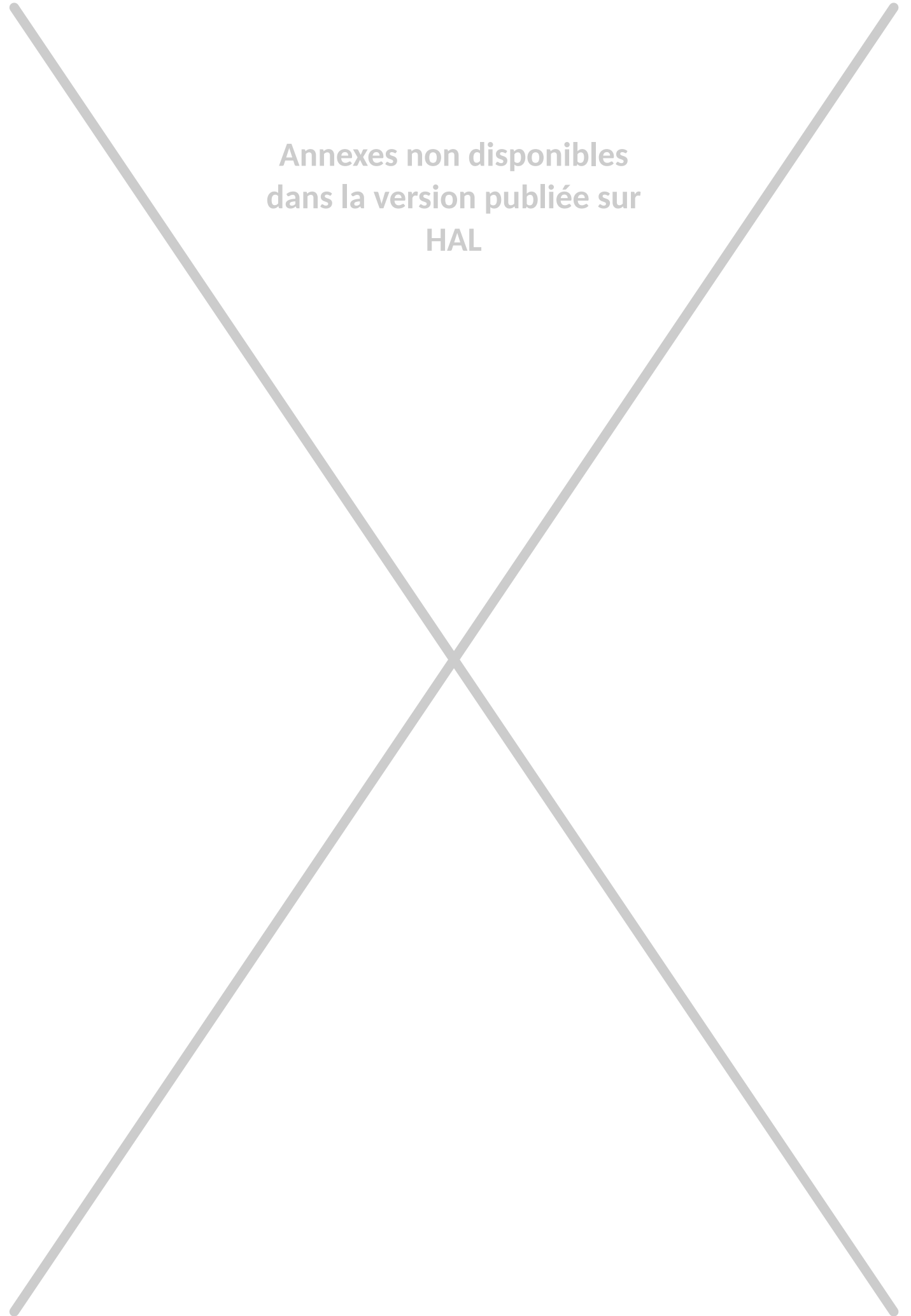
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



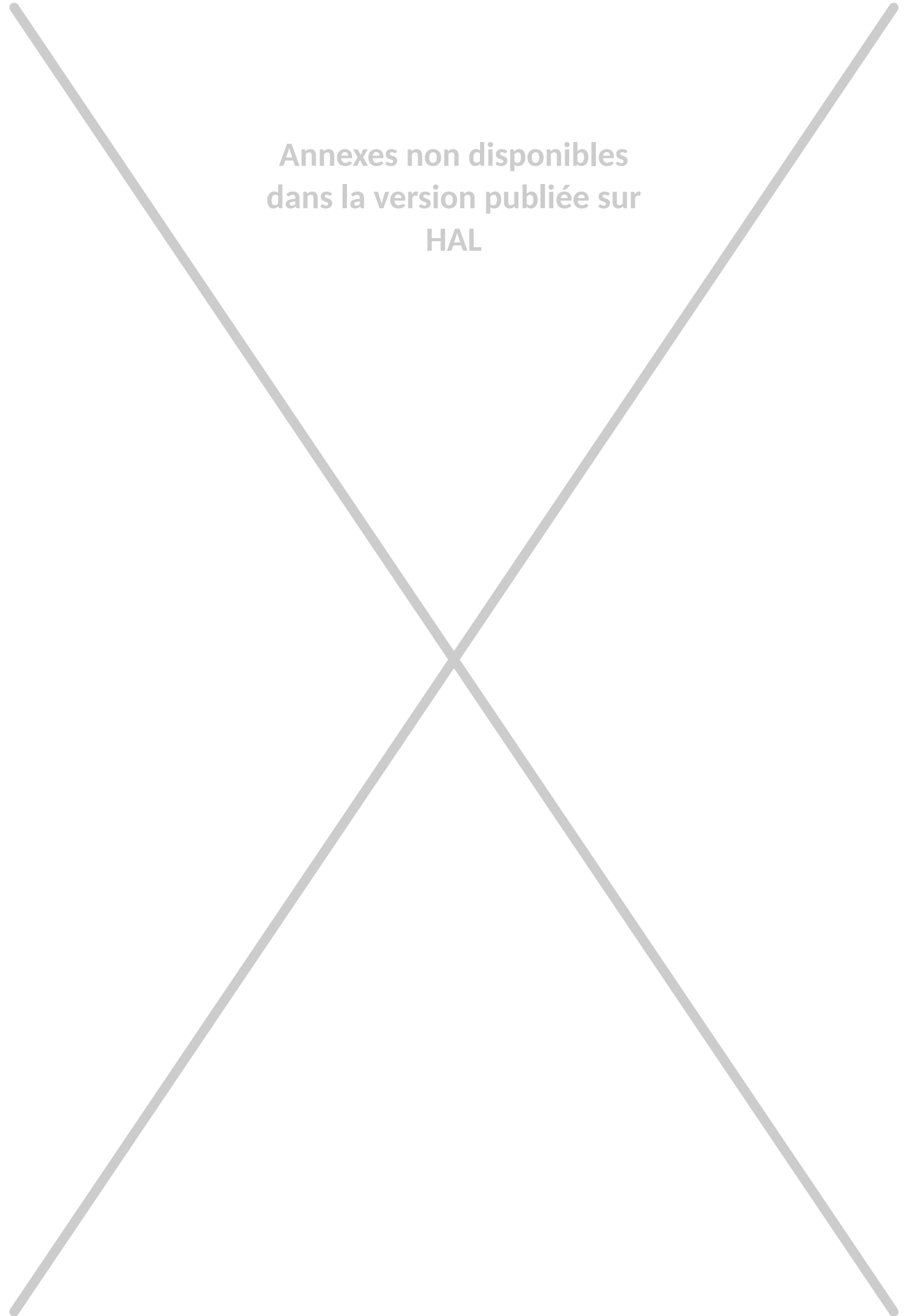
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



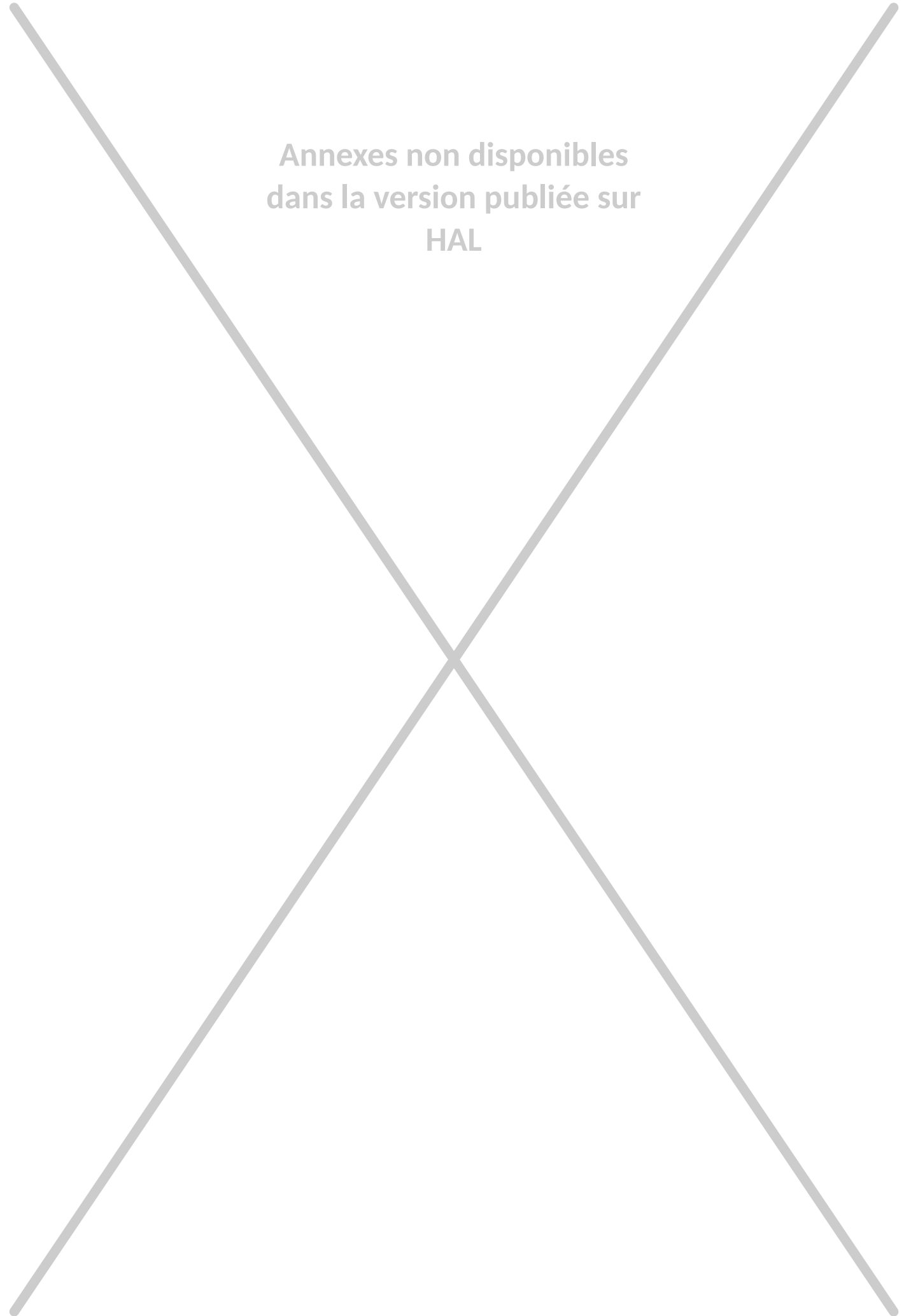
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



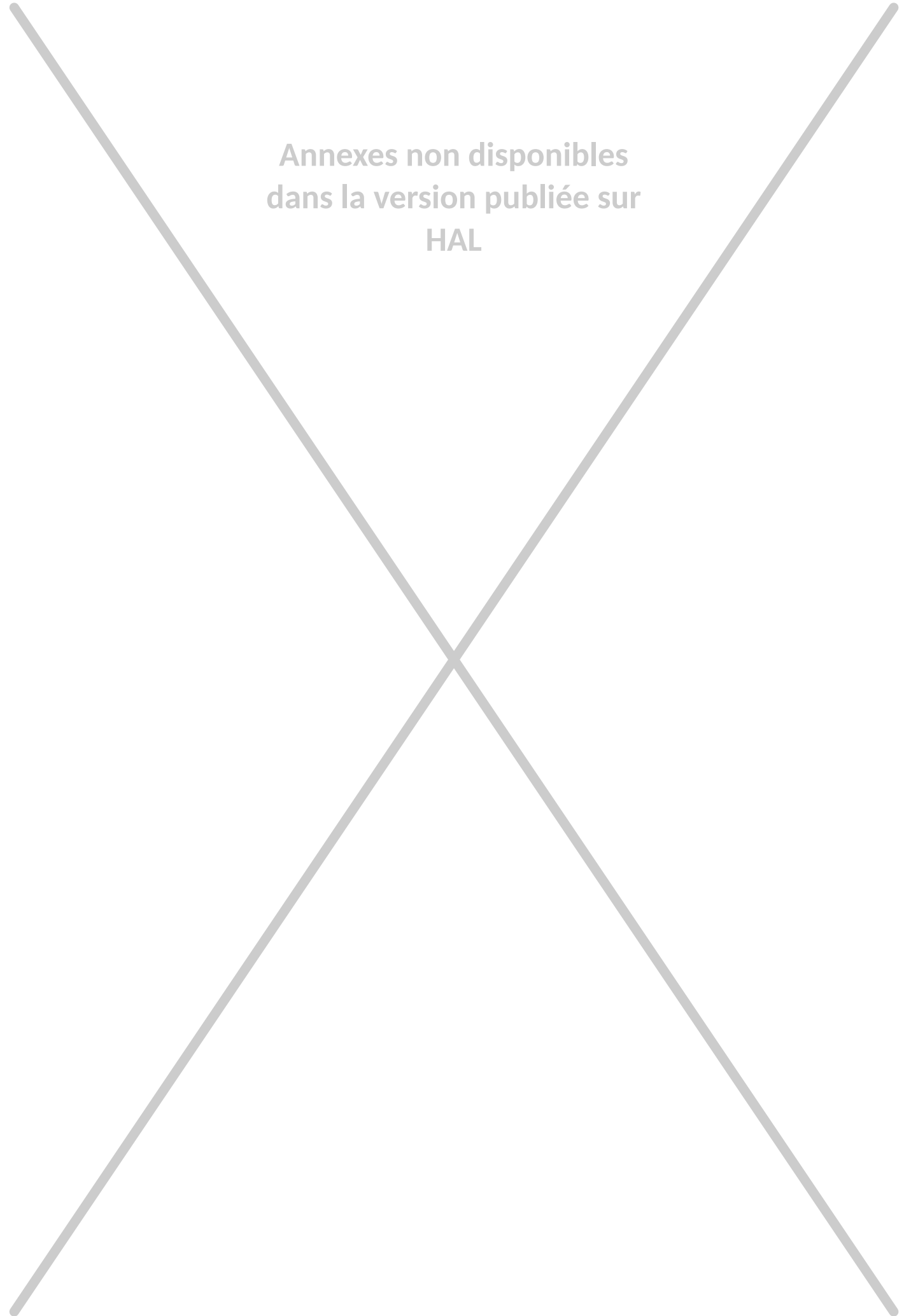
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



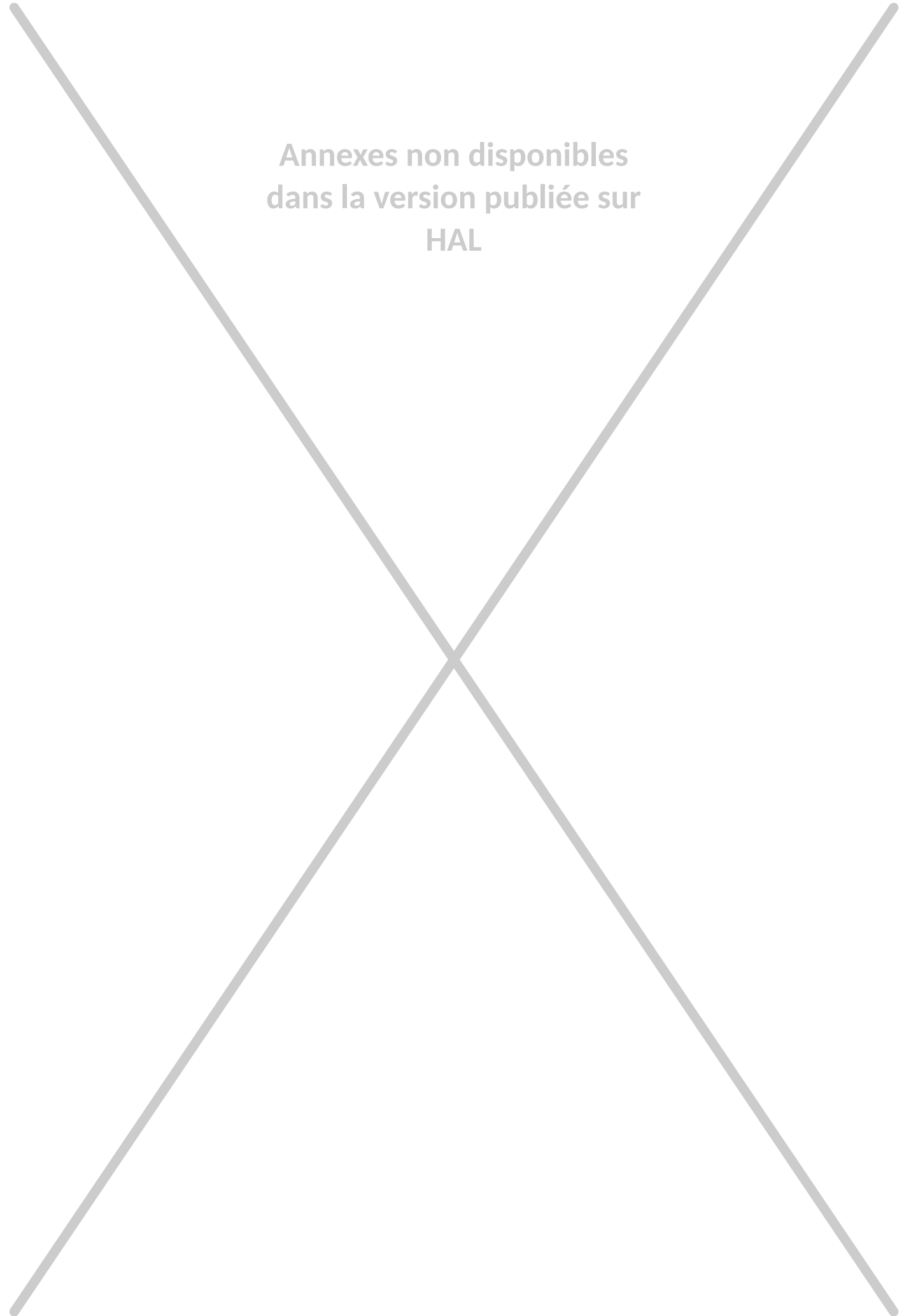
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL

5 J.-S. Kroll-Rabotin, F. Bourgeois, É. Climent, 2013

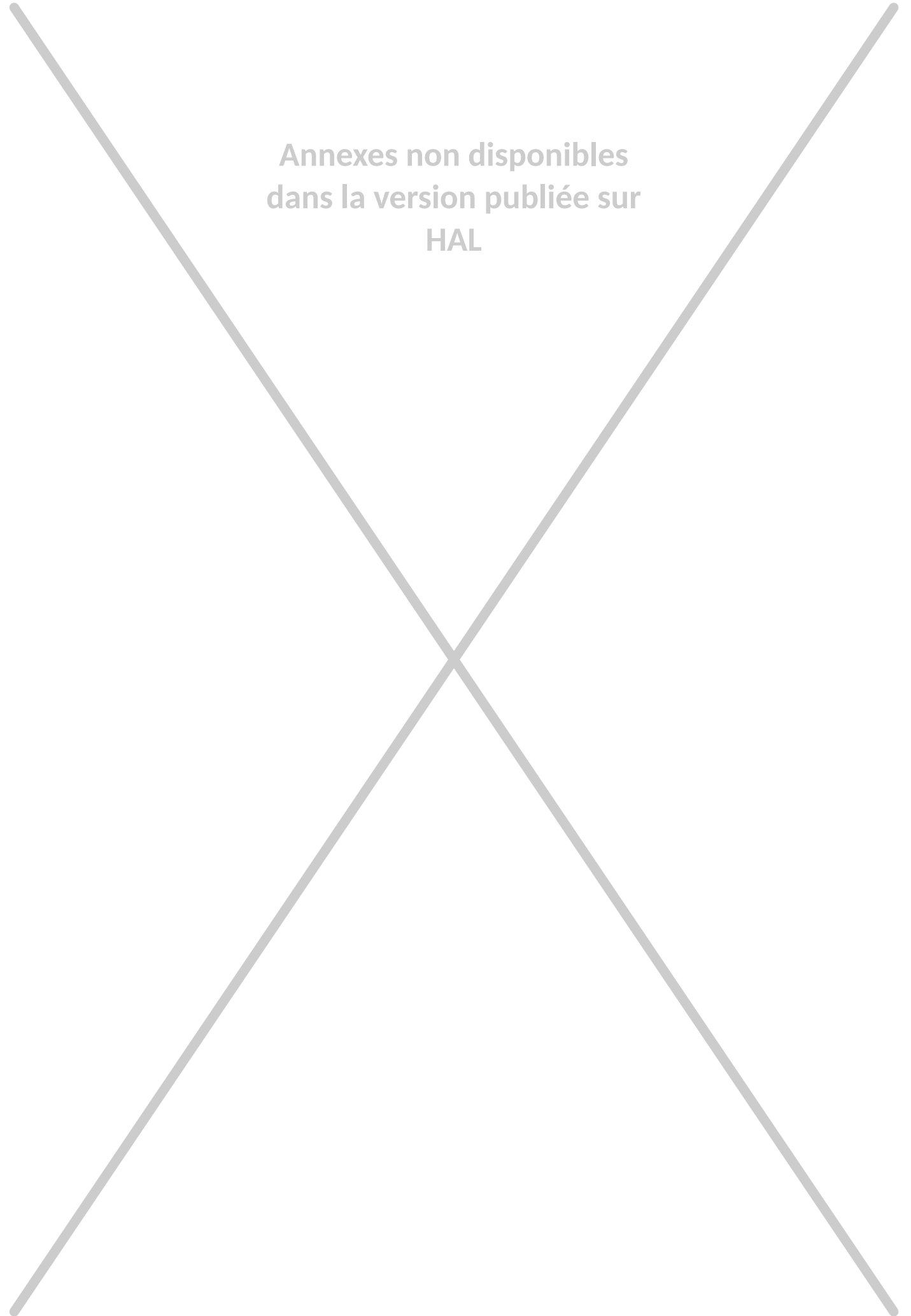
J.-S. Kroll-Rabotin, F. Bourgeois, É. Climent, 2013 : Physical analysis and modelling of the Falcon concentrator for ultrafines beneficiation. *International Journal of Mineral Processing*, 121:39–50, 2013.



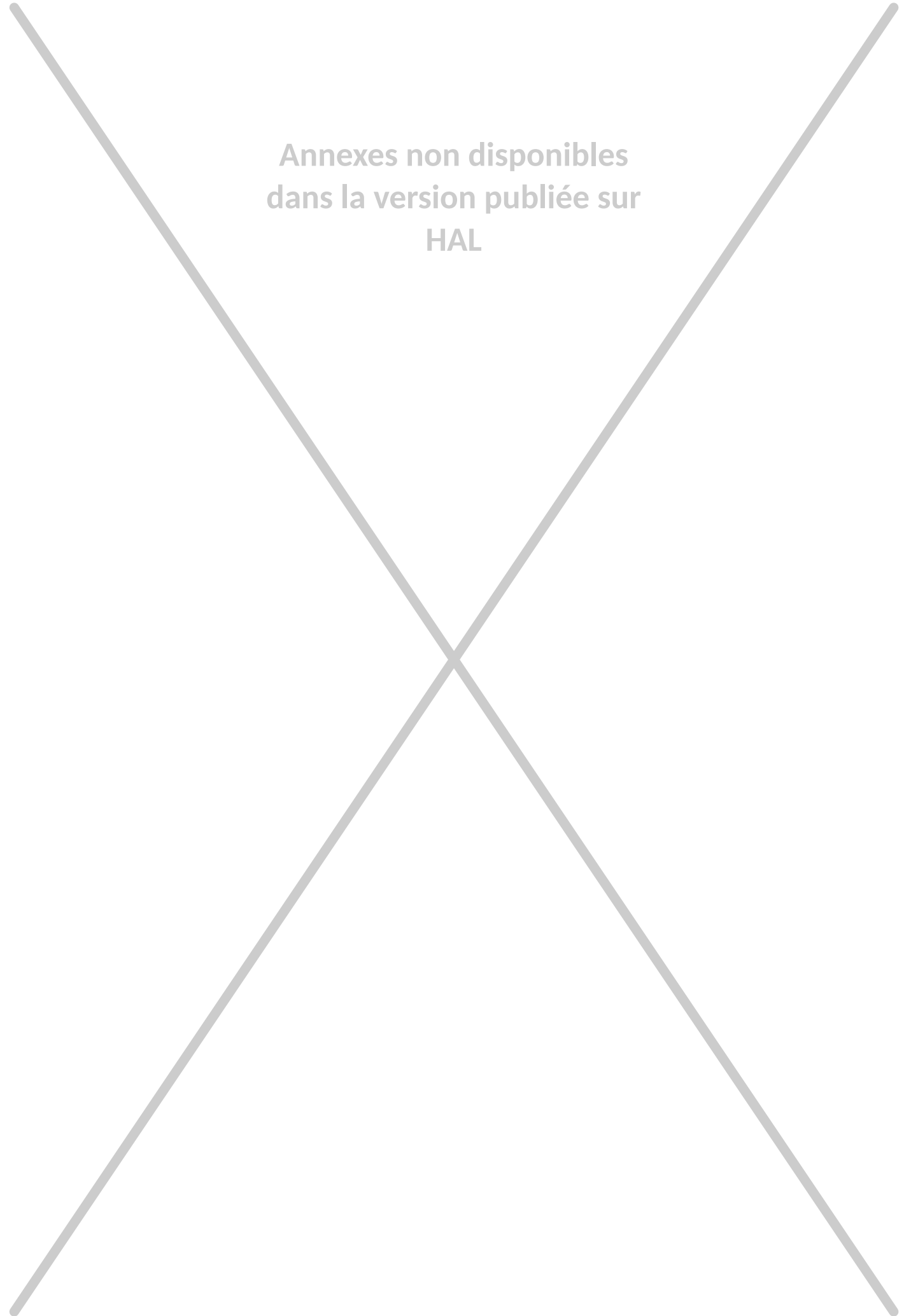
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



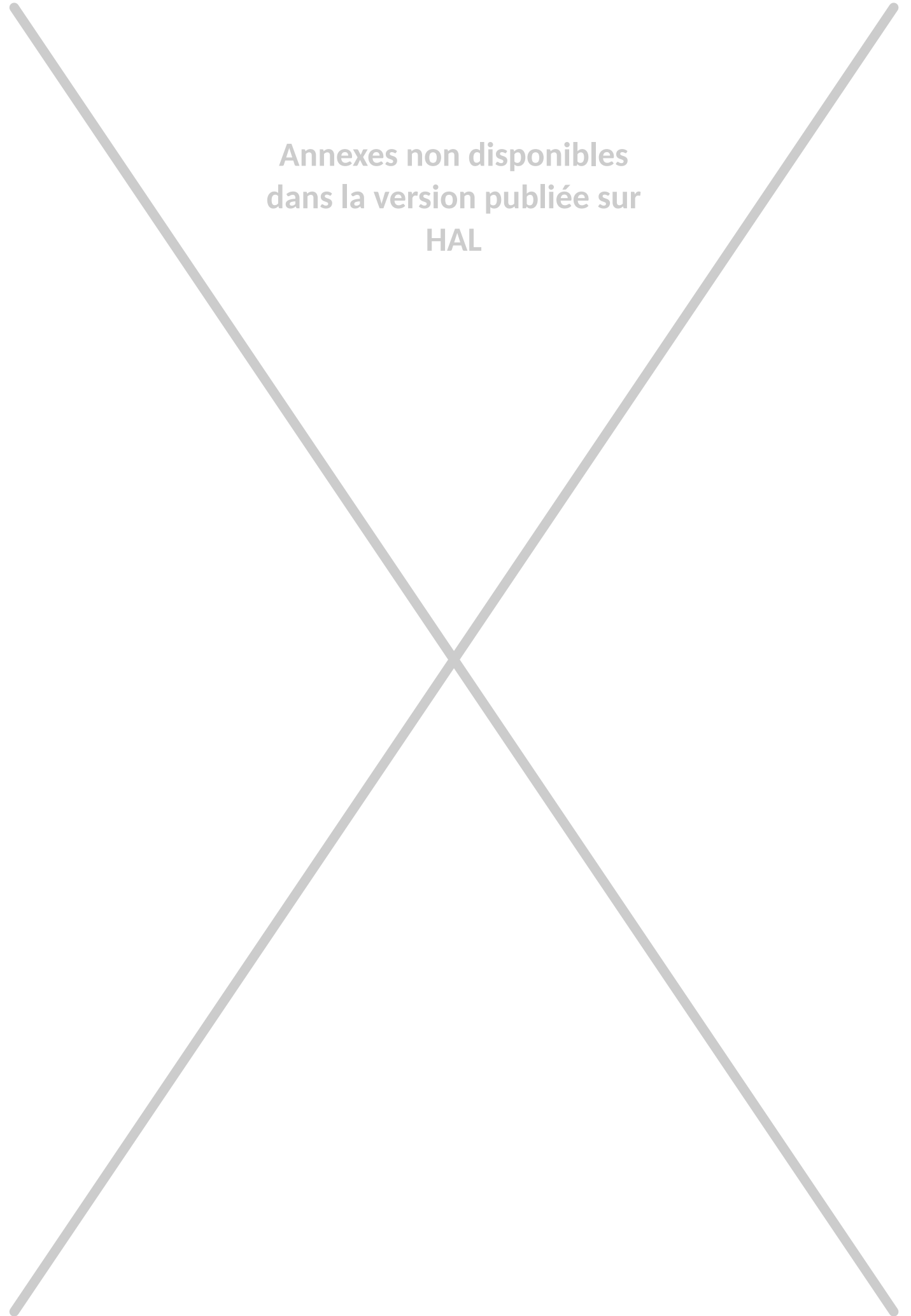
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



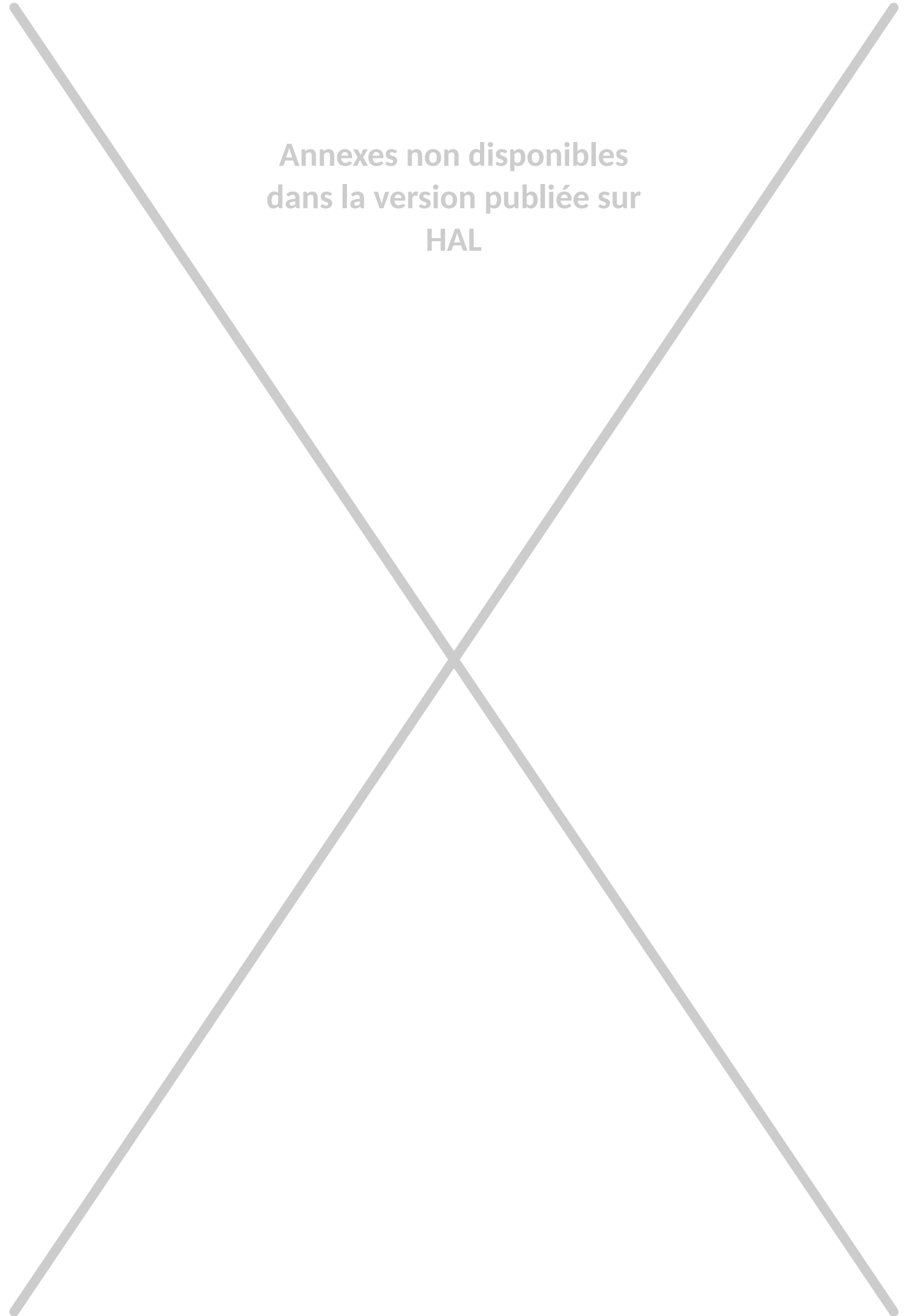
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



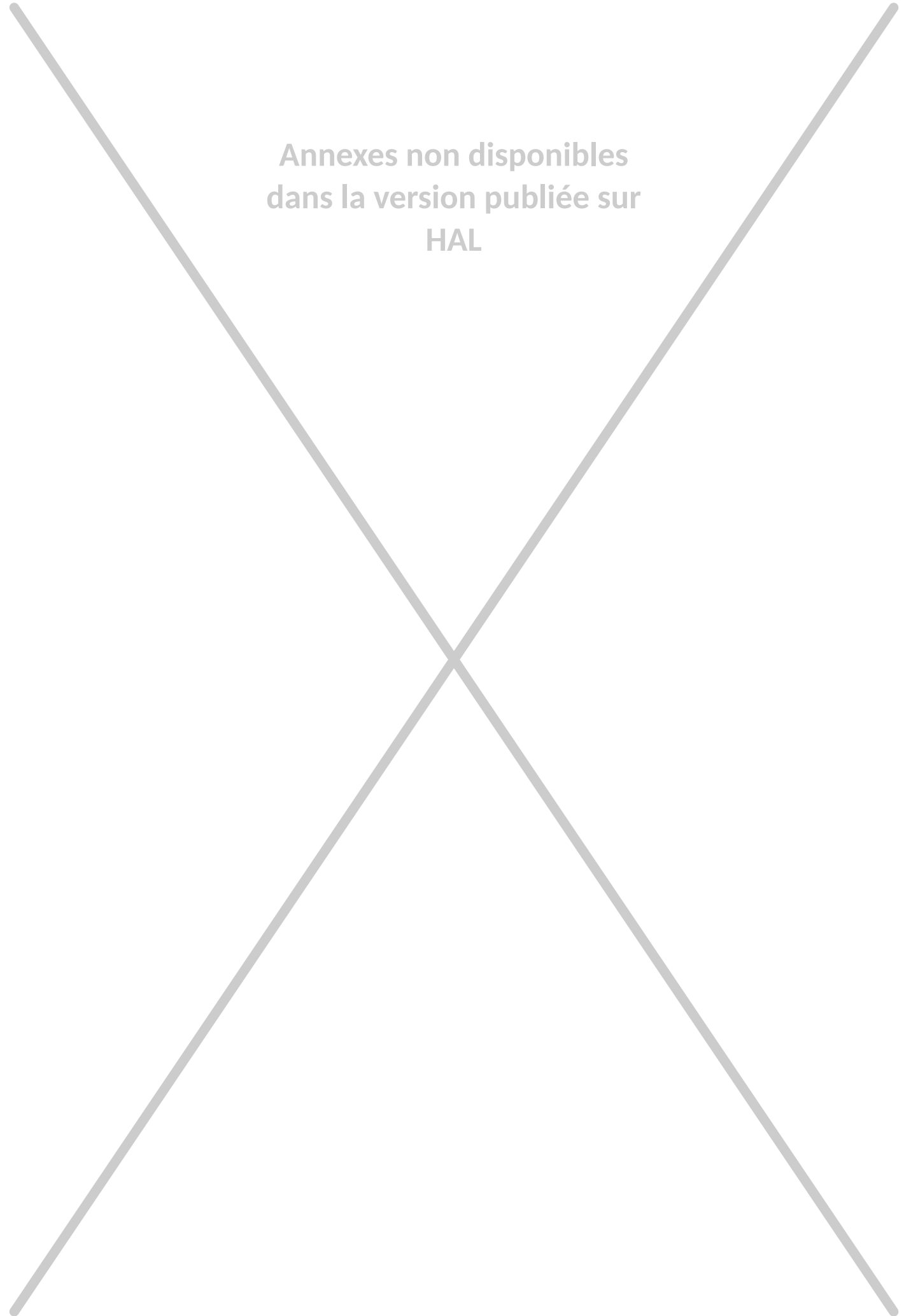
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



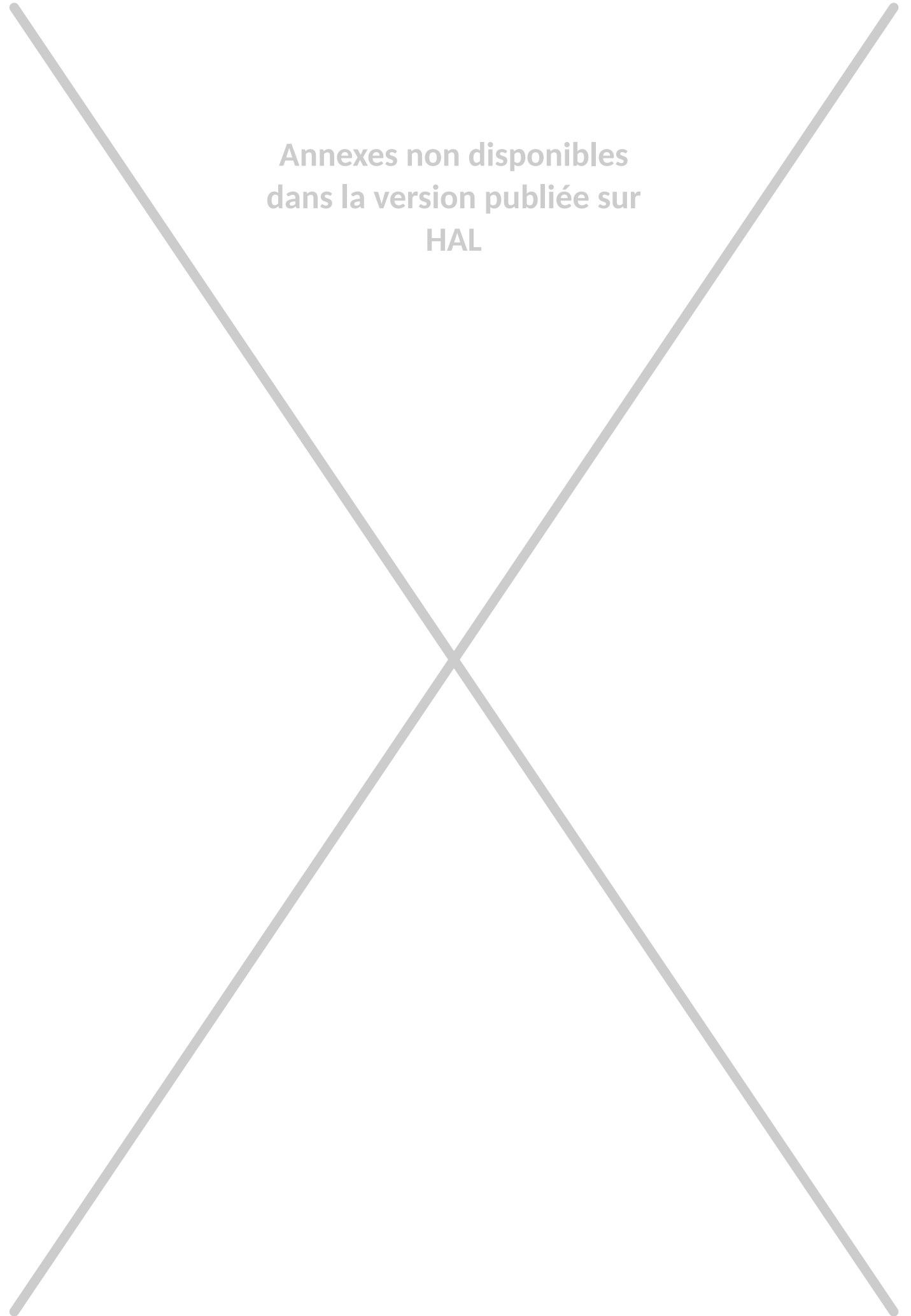
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



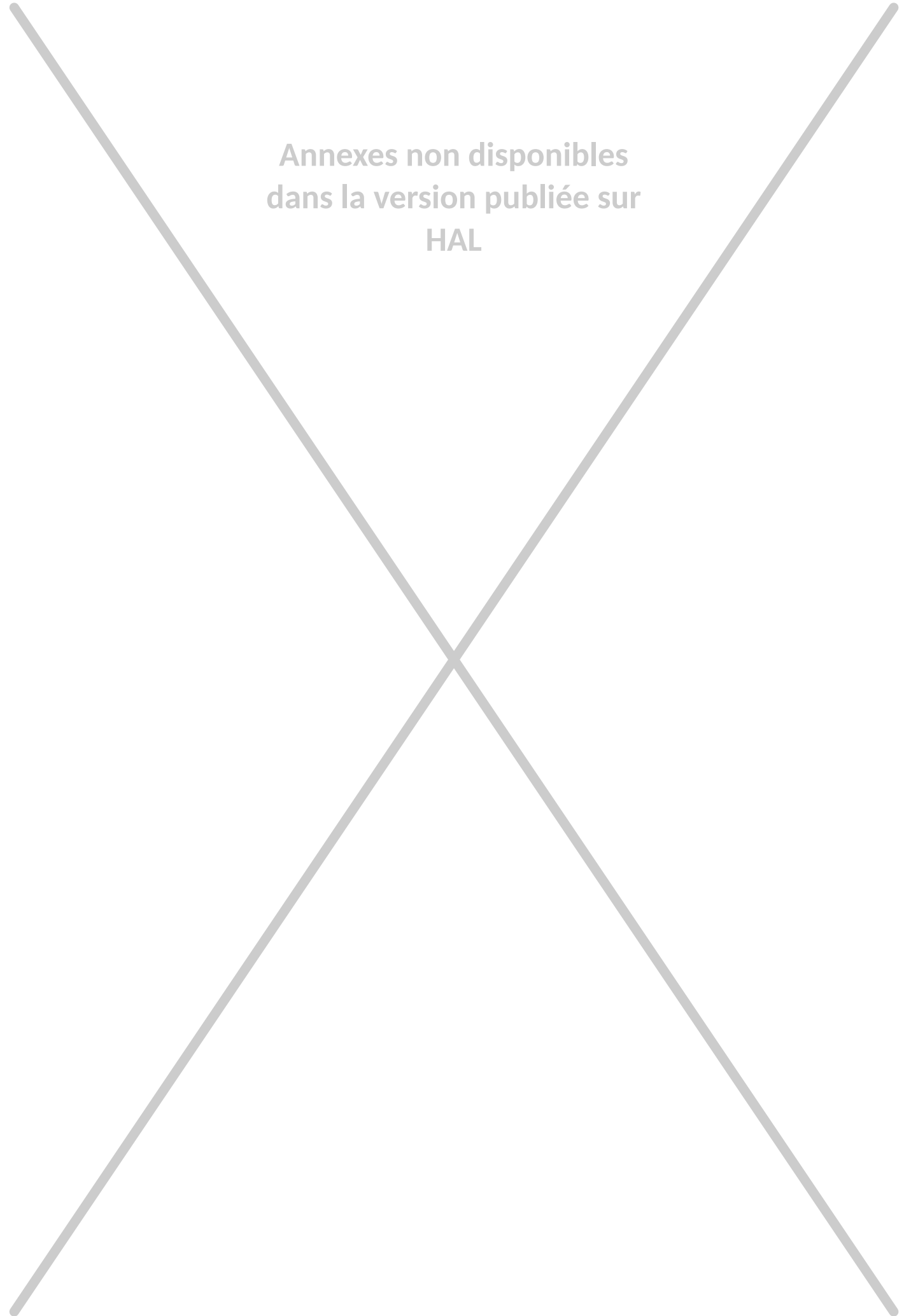
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



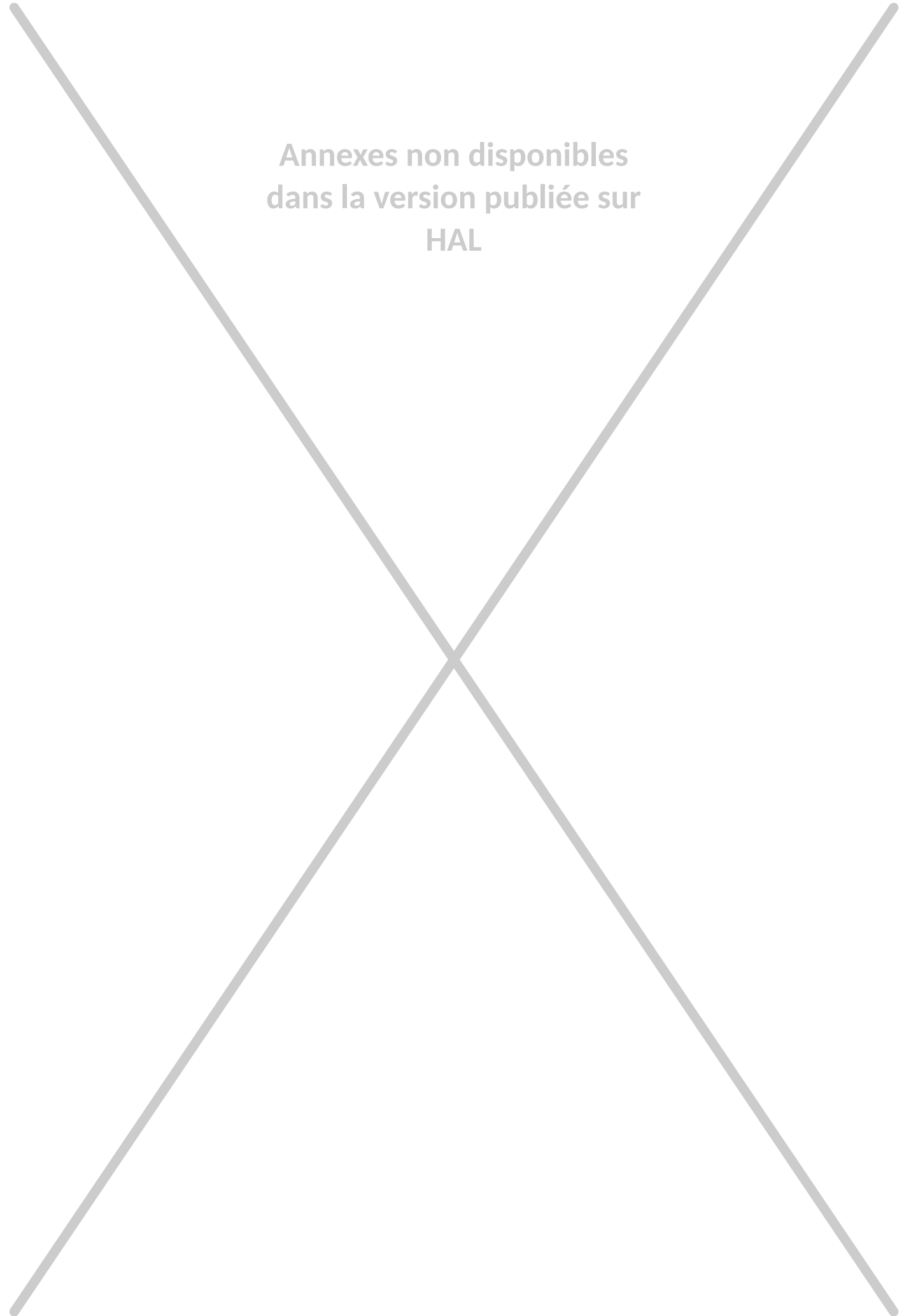
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



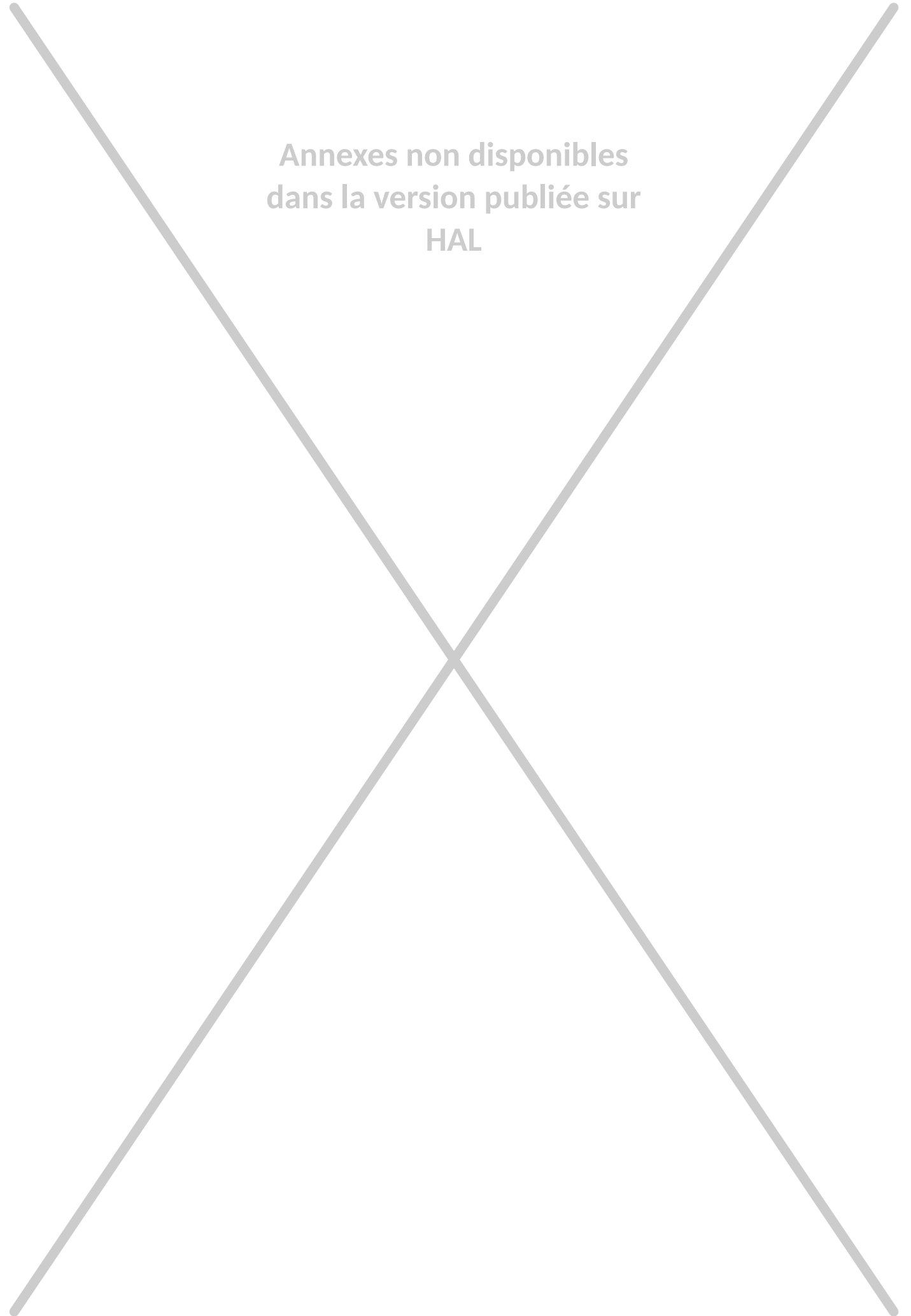
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



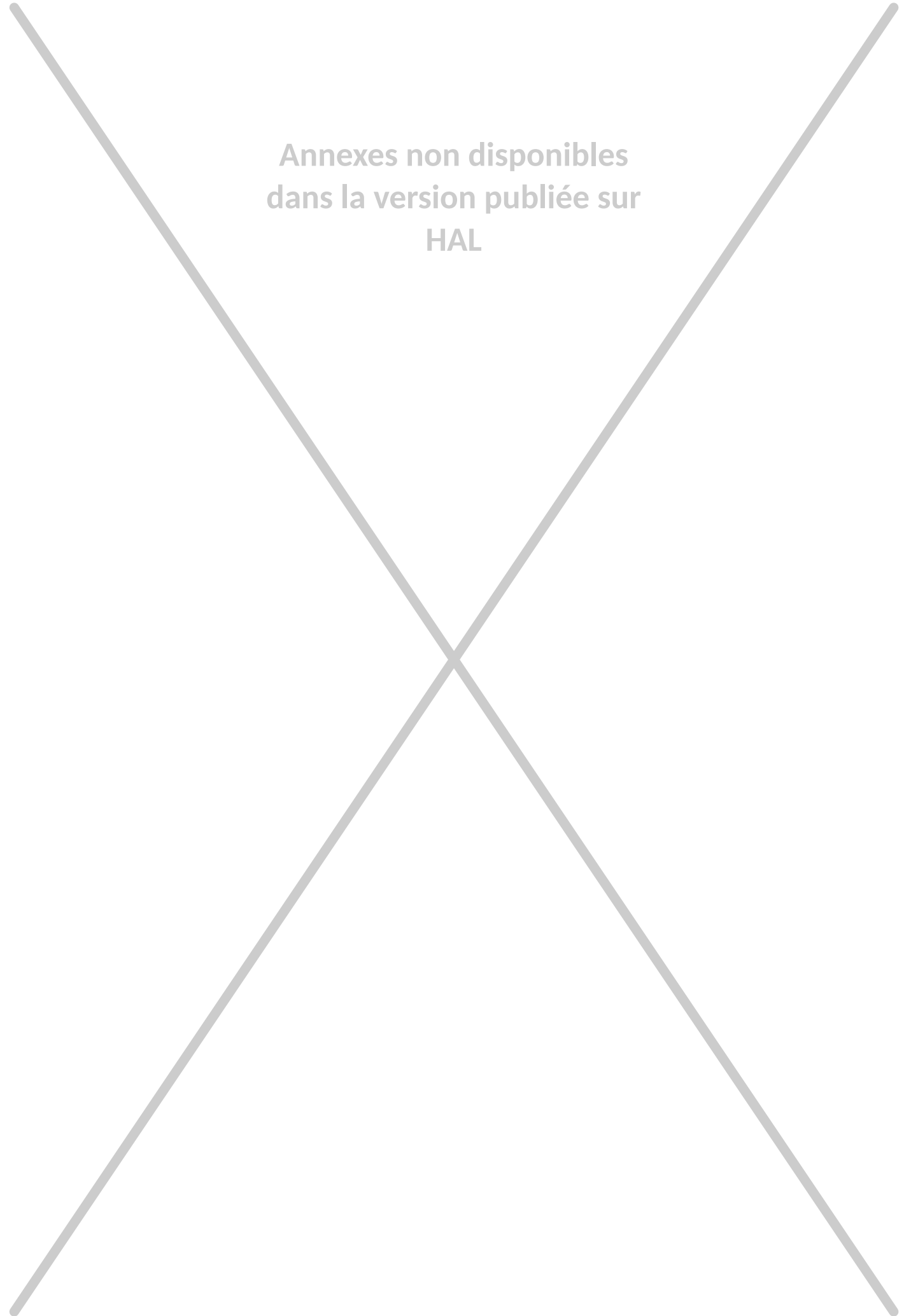
Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL



Annexes non disponibles
dans la version publiée sur
HAL