

Collision Brownienne : un nouvel outil stochastique

M. Mohaupt^a, A. Tanière^a, J.-P. Minier^b

a. LEMTA - UMR 7563 CNRS, ESSTIN, Université Henry Poincaré - Nancy 1,
2 rue Jean Lamour, F-54529 Vandœuvre-Lès-Nancy, France

b. Electricité de France, R&D, MFEE, 6 Quai Watier, 78400 Chatou, France

Résumé :

Le but de ce travail est d'exposer une nouvelle méthode de traitement de la collision sur un champ de particules dans un écoulement turbulent. Il peut s'appliquer à une large gamme de diamètres, au travers des algorithmes de collisions déterministes existants, pour les particules les plus inertielles, et en comblant les lacunes de ceux-ci par le calcul stochastique, pour les particules les plus légères. Par l'exposé de cette méthode appliquée à un cas physique particulier, qui est celui de particules soumises à un mouvement Brownien pur, nous validons l'utilisation d'une telle représentation stochastique appliquée à des problèmes physique concrets.

Abstract :

The purpose of this work is to present a new approach to detect interactions between particles in a turbulent flow. This method is able to handle a wide range of particle diameters, through existing deterministic algorithms to detect collisions for large-inertia particles and by extending these algorithms with stochastic methods for smaller particles. The new method presented here is applied for a particular case in which particles follow a pure Brownian motion and numerical results validate the use of such stochastic representations to address practical physical issues.

Mots clefs : colloïdes, collision, stochastique

1 Introduction

De nombreux enjeux industriels reposent sur la prédiction du phénomène d'agglomération des particules dans des écoulements turbulents. De la médecine, l'industrie alimentaire, automobile ou dans notre cas, concernant l'ingénierie nucléaire, les domaines d'applications nécessitant une évaluation réaliste de ce phénomène sont en augmentation et la précision des résultats par rapport aux attentes industrielles ne cesse de croître. L'approche naturelle pour le traitement d'un tel phénomène est de le décomposer en deux phases d'origines physiques distinctes : la détection de l'interaction, ou collision, entre deux partenaires probables d'une agglomération et le traitement des forces électrochimiques à l'origine du collage des deux particules pour former ou non un agglomérat. Dans le contexte de la mécanique des fluides, le commencement de l'agglomération peut raisonnablement être choisi à partir d'un champ de particules colloïdale (sub-microniques), pour atteindre les plus grandes échelles de particules qui mènent aux problèmes industriels majeurs : la suspension, le dépôt et le colmatage. Plusieurs approches sont possibles pour traiter ce problème et la simulation numérique donne des résultats probants là où les expériences atteignent leurs limites, notamment en ce qui concerne les particules les plus fines. La technique la moins onéreuse en terme de coûts numériques correspond à la résolution directe des équations de bilans de population relatives aux différentes classes de particules, une classe regroupant des particules ayant des caractéristiques similaires (diamètres identiques par exemple) [6]. Cette méthode applicable sur un large champ de particules nécessite la connaissance du taux de collision théorique (nommé noyau de collision) établi dans un cadre d'hypothèses plus ou moins restrictives. Par exemple, les noyaux de collision sont connus dans nombreux cas d'écoulements tels que sous turbulence isotrope [4] et Brownien purs [6]. Une fois que les collisions sont déterminées,

les considérations physico-chimiques donnent l'efficacité d'agglomération, autrement dit le nombre de collision entraînant effectivement une agglomération. Cette efficacité est particulière au cas physique étudié. À l'opposé, un traitement local du phénomène d'agglomération est permis par l'utilisation d'algorithmes déterministes de détection de collisions [7]. Basés sur des critères purement géométriques, leur coût total de calcul est plus élevé que la résolution d'une équation de bilan de population puisqu'il s'agit de considérer le phénomène à une échelle d'observation beaucoup plus fine que la précédente approche. L'avantage majeur de ce type de méthode est la possibilité de lever les barrières posées par les hypothèses émises sur les noyaux et d'étudier le phénomène avec une résolution plus fine.

Le but de cette étude est de mettre en place une solution viable pour l'étude locale des interactions entre particules colloïdales. Nous nous intéressons dans un premier temps uniquement à la première phase de détection des collisions, laissant le traitement de la phase d'agglomération proprement dite aux développements futurs. La gamme de diamètres d_p que nous étudions se situe entre $[0.1\mu m; 2\mu m]$, ce qui place notre étude en amont des développements existants sur les collisions déterministes. En effet, la plus petite échelle de taille des diamètres est pour ces études, de l'ordre de $[5\mu m; 10\mu m]$. L'utilité d'un tel développement doit permettre de mieux comprendre l'agglomération résultante des forces physico-chimiques qui agissent fortement sur les très petites particules, à l'amorce du phénomène d'agglomération. D'autre part, nous cherchons à avoir une meilleure compréhension de l'agglomération résultante de plusieurs phénomènes physiques différents lors des traitements par bilans de populations et éventuellement à alimenter ces méthodes avec des noyaux élaborés pour des cas complexes.

Ce papier est organisé de la manière suivante : après la mise en place d'un système d'équations permettant de simuler le mouvement de particules dans un champ fluide turbulent sans aucune contrainte numérique, nous étudierons les capacités des algorithmes déterministes existants. Ensuite, ce travail présente le développement d'une nouvelle méthode de détection locale des interactions entre particules de type colloïdales, visant à combler les manquements des méthodes actuelles. Enfin, cette nouvelle méthode sera testée et validée dans le cas d'un champ de particules soumises à un mouvement Brownien.

2 Modélisation et intégration temporelle du suivi Lagrangien des particules

Le soucis de précision étant primordial, nous nous orientons vers un traitement local de la collision couplé à une résolution directe de la phase fluide par un code DNS (Direct Numerical Simulation). Ainsi, la vitesse du fluide est connue en tout point de l'espace et à chaque instant. Les équations de Langevin sont choisies pour représenter le mouvement d'une particule isolée de la phase dispersée. Avec une force de traînée et une force aléatoire Brownienne, il vient :

$$\begin{cases} d\mathbf{x}_p(t) = \mathbf{U}_p(t)dt, \\ d\mathbf{U}_p(t) = \frac{\mathbf{U}_s(t) - \mathbf{U}_p(t)}{\tau_p}dt + Bd\mathbf{W}(t), \end{cases} \quad (1)$$

avec τ_p le temps de relaxation de la particule et $\mathbf{U}_s(t)$ la vitesse du fluide à la position de la particule. Le mouvement Brownien est représenté dans l'équation aux moments par le processus de Wiener dont l'accroissement est noté dW (tel que $dW(t) \sim \mathcal{N}(0, dt)$) et le coefficient de diffusion noté B . Le temps de relaxation d'une particule représente le temps caractéristique d'une particule pour réagir aux sollicitations du fluide. Son expression est la suivante :

$$\tau_p = \frac{\rho_p}{\rho_f} \frac{4d_p}{3C_D|\mathbf{U}_r|},$$

avec C_D le coefficient de traînée, une fonction non-linéaire du nombre de Reynolds particulaire ($Re_p = d_p|\mathbf{U}_r|/\nu_f$) et $\mathbf{U}_r(t) = \mathbf{U}_p(t) - \mathbf{U}_s(t)$ la vitesse relative entre la phase dispersée et la phase fluide. D'autre part, considérant que l'énergie des particules atteint la valeur théorique à l'équilibre thermique dans un fluide au repos, on obtient

$$B^2 = \frac{2k_B\theta}{m_p \tau_p},$$

avec θ la température en Kelvin, k_B la constante de Boltzmann et m_p la masse d'une particule. Il faut remarquer que dans cette description, $\mathbf{U}_s(t)$ est connu en tout point et à tout instant, donné par la simulation DNS de l'écoulement fluide. On note alors $\mathbf{U}_s(t) = \mathbf{U}_s^{DNS}(t)$.

Suivre numériquement l'agglomérat implique la prise en compte de particules de tailles (et donc de masses) très différentes. La démarche habituelle pour conserver le sens physique du suivi Lagrangien (1) dans les simulations est de choisir le temps d'intégration Δt plus petit que le temps de relaxation de la particule fluide à considérer τ_p , autrement dit $\Delta t \ll \tau_p$. Cette hypothèse suivant le schéma d'intégration classique permet d'admettre que le déplacement de la particule sur un pas de temps peut être considéré comme un déplacement rectiligne, la force aléatoire étant prise en compte à chaque intervalle de temps Δt . Dans le cas d'un champ de particules polydispersées, le pas de temps doit rester très inférieur au plus petit des temps de relaxations de toutes les particules en présence, ce qui conduit dans le cas de particules colloïdales, à une restriction très sévère sur le pas de temps. Pour passer outre cette description, nous utilisons les travaux de Peirano *et al.* [3] qui permettent de donner une intégration formelle suivant les règles du calcul stochastique (au sens d'Itô) des équations de Langevin (1). Nous obtenons donc comme vecteur d'état discret pour une particule isolée :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{x}_p(t + \Delta t) = \mathbf{x}_p(t) + \mathbf{U}_p(t)\tau_p(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}}) + \mathbf{U}_s^{DNS}(t)[\Delta t - \tau_p(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}})] \\ \quad + B\tau_p \sqrt{\Delta t - 2\tau_p \frac{(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}})}{(1 + e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}})}} \zeta_x + B\tau_p^2 \frac{(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}})^2}{\sqrt{2\tau_p(1 - e^{-2\frac{\Delta t}{\tau_p}})}} \zeta_v, \\ \mathbf{U}_p(t + \Delta t) = \mathbf{U}_p(t)e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}} + \mathbf{U}_s^{DNS}(t)(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau_p}}) + B \sqrt{\frac{\tau_p}{2}} \left(1 - e^{-2\frac{\Delta t}{\tau_p}}\right) \zeta_v, \end{array} \right. \quad (2)$$

dans lequel ζ_x et ζ_v sont des variables gaussiennes standard suivant $\mathcal{N}(0, 1)$. Dans ces travaux, Peirano *et al.* [3] montrent la validité de ce système d'équations pour les différents cas limites. En d'autres termes, quel que soit le pas de temps Δt par rapport à τ_p , lorsque le déplacement de la particule est complètement diffusif (une particule soumise uniquement à un mouvement de nature aléatoire), le comportement diffusif est bien retrouvé. C'est le cas des particules les plus petites. À l'inverse, lorsque le déplacement de la particule est complètement déterministe, le comportement balistique est bien retrouvé, ce qui correspond aux particules les plus grandes. Pour résumer, le système (2) s'adapte de lui même à la nature des particules considérées, qu'elles aient une nature diffusif, balistique ou un mélange des deux. L'utilisation du système (2) permet de lever un premier verrou dans le traitement de particules colloïdales par un suivi Lagrangien. La petite taille des colloïdes implique naturellement des temps de relaxations très petits. L'utilisation du système (1) avec la contrainte $\Delta t \ll \tau_p$ apparaît donc, par nature, onéreuse. Le système (2) peut alors être utilisé avec $\Delta t \gg \tau_p$ pour suivre le mouvement d'une particule dans un écoulement turbulent. Ce système est capable de représenter le mouvement d'une particule isolée lorsque les trajectoires sont indépendantes. Ainsi, pour un traitement complet de la phase dispersée, il s'agit d'inclure les interactions entre les particules.

3 Les algorithmes déterministes existants

On trouve dans la littérature de nombreuses études concernant le traitement local et déterministe de la collision de particules. Les algorithmes utilisés sont dérivés soit de la dynamique moléculaire (dit "time-driven") [5]; soit basés sur la détection de recouvrement (dit "overlapping") [8] pour une paire de particules considérée. Dans tous les cas, la détection repose sur des critères purement géométriques impliquant un déplacement assimilé à une ligne droite entre deux positions distinctes à t et $t + \Delta t$. Nous appellerons ce type de déplacement "le régime balistique" dans la suite du document. Une précédente étude [2] montre le bon comportement de ces algorithmes quelle que soit la taille des particules considérées, moyennant un coût numérique croissant pour les diamètres les plus petits (de l'ordre de 0.1 à 1 μm) dû au respect de la contrainte numérique $\Delta t \ll \tau_p$. Dans cette même étude, il est montré que le non-respect de cette contrainte technique ($\Delta t \gg \tau_p$) donne des résultats non satisfaisants avec l'utilisation de ces même algorithmes, comme on pouvait s'y attendre.

Nous soulevons donc le besoin de disposer d'un algorithme capable de prendre en compte les interactions entre les particules ayant un déplacement diffusif lorsque $\Delta t \gg \tau_p$, en accord avec les équations du mouvement intégrées que nous avons choisies (2).

4 Vers un nouvel algorithme de collision adapté aux colloïdes

Dans un premier temps, considérons le cadre physique de particules uniquement soumises à l'agitation Brownienne dans un fluide au repos ($\mathbf{U}_s^{DNS}(t) = 0, \forall t$). On pose dans le système (1) les hypothèses suivantes :

$$\begin{cases} \tau_p \rightarrow 0, \\ B \rightarrow \infty, \\ B\tau_p \rightarrow \text{constante.} \end{cases} \quad (3)$$

Ces hypothèses se traduisent sur le système (1) par l'obtention du cas limite de très petites particules ayant un comportement purement diffusif [3] :

$$d\mathbf{x}_p(t) \approx B\tau_p d\mathbf{W}(t), \quad (4)$$

Il faut alors remarquer que l'équation (4) signifie que la grandeur $\mathbf{x}_p(t)$ suit la loi d'un processus stochastique dit de Wiener, qui est une loi normale de moyenne nulle et de variance $(B\tau_p)^2 t$. Ainsi, à partir de deux particules notées i et j considérées comme indépendantes, nous pouvons construire la position relative à ces deux particules $\mathbf{x}_{p,ij}(t) = \mathbf{x}_{p,j}(t) - \mathbf{x}_{p,i}(t)$. Cette position relative étant une combinaison linéaire de processus de Wiener, elle suit également un processus de diffusion de Wiener pour lequel les carrés des variances s'additionnent, comme énoncé par les règles du calcul stochastique [1]. On peut résumer ceci par :

$$d\mathbf{x}_{p,ij}(t) = K_{ij} d\mathbf{W}(t), \quad \text{avec } K_{ij} = \sqrt{(B_i\tau_{p,i})^2 + (B_j\tau_{p,j})^2}. \quad (5)$$

Nous pouvons alors construire le processus stochastique représentant la norme de la grandeur $\mathbf{x}_{p,ij}(t)$ à tout instant et pour chaque paire de particules :

$$\|\mathbf{x}_{p,ij}(t)\| = K_{ij} \left(\sum_{n=1}^3 \mathbf{W}_n^2(t) \right)^{1/2}. \quad (6)$$

Ceci est un processus de Bessel d'ordre 3, que l'on peut retrouver dans les manuels de calculs stochastiques [1]. À partir des processus que nous avons construits, il s'agit maintenant de retranscrire les événements physiques qui nous intéressent. Nous définirons, comme illustré sur la Fig. 1, l'apparition d'une collision comme le passage de la norme relative $\|\mathbf{x}_{p,ij}(t)\|$ sous la valeur minimum égale à la somme des rayons des particules $r_{ij} = r_i + r_j$. Nous devons donc pour traiter une collision évaluer la probabilité pour un processus de Bessel d'ordre 3 noté $(R_s, s \leq 0)$, partant d'une valeur initiale $R_t = a$ et arrivant à une valeur finale $R_{t+\Delta t} = b$, d'être passée sous la valeur seuil r_{ij} . Cette probabilité nous est donnée par l'expression suivante :

$$\mathbb{P} \left(\min_{t < s < t+\Delta t} (R_s) \leq r_{ij} / R_t = a, R_{t+\Delta t} = b \right) = \frac{\exp \left(\frac{2r_{ij}(a+b-r_{ij})}{K_{ij}^2 \Delta t} \right) - 1}{\exp \left(\frac{2ab}{K_{ij}^2 \Delta t} \right) - 1}, \quad \text{si } 0 < r_{ij} \leq a, b. \quad (7)$$

Cette expression est valide tant que $0 < r_{ij} \leq (a, b)$, sinon sa valeur tend naturellement vers l'unité, ce qui se traduit par une probabilité certaine de rencontrer une collision sur un pas de temps Δt . Il apparaît évident que si à l'instant de départ t ou à l'instant d'arrivée $t + \Delta t$, la distance qui sépare les deux particules est plus petite que la somme des rayons, alors on détecte un chevauchement qui signifie qu'une collision a eu lieu en t ou $t + \Delta t$. Naturellement, lorsque $\frac{\Delta t}{\tau_p}$ passe sous l'unité, cette méthode tend vers un algorithme de détection de la collision par recouvrement (overlapping).

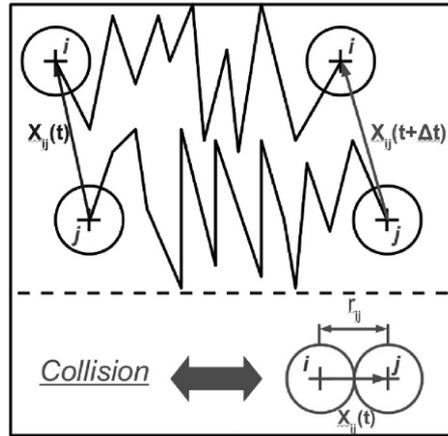


FIGURE 1 – Position relative d'une paire de particules et illustration du critère de collision.

5 Utilisation et validation du nouvel algorithme

Afin de savoir si cette collision est effective ou non à partir de la probabilité calculée, nous appliquons la règle suivante où ϵ est un nombre aléatoire de distribution uniforme entre 0 et 1 tel que :

$$\begin{cases} \text{si } \mathbb{P} \left(\min_{t < s < t + \Delta t} (R_s) \leq r_{ij} / R_t = a, R_{t+\Delta t} = b \right) \geq \epsilon \Rightarrow \text{collision,} \\ \text{si } \mathbb{P} \left(\min_{t < s < t + \Delta t} (R_s) \leq r_{ij} / R_t = a, R_{t+\Delta t} = b \right) < \epsilon \Rightarrow \text{pas de collision.} \end{cases} \quad (8)$$

Un cas test numérique permet de valider l'utilisation de l'algorithme élaboré, dans le cas d'un champ de particules monodispersées soumises uniquement à l'agitation Brownienne dans un fluide au repos. Les caractéristiques choisies sont référencées dans la Table. 1, dans lequel N_c^{th} représente le nombre de collisions théoriques attendu.

TABLE 1 – Paramètres utilisés dans les simulations.

Variable	ϕ	L (m)	$\frac{\rho_p}{\rho_f}$	N_c^{th}	θ (K)	μ_f (Pa.s)	k_B (SI)
Value	10^{-4}	10^{-4}	1000	2500	296.15	$1.83245 \cdot 10^{-5}$	$1.3806503 \cdot 10^{-23}$

Le taux de collisions théoriques Browniennes est donné par $K_{théorique} = \frac{8k_B\theta}{3\mu}$ [6]. La figure 2 montre le noyau de collision estimé à partir de la simulation adimensionné par $K_{théorique}$ et valide l'utilisation de l'algorithme exposé ici dans le cas de particules purement diffusives.

6 Conclusion

L'utilisation d'un système d'équations intégrées suivant les règles du calcul stochastique est exposée et son utilité dans le cadre d'un champ de particules fortement soumises à la diffusion est expliquée. Le verrou de simulation numérique $\Delta t \ll \tau_p$ est ainsi levé. Les lacunes des algorithmes de détection de collision pour des particules trop petites sont prises en compte et la nécessité d'un traitement stochastique de détection de la collision pour les particules les plus petites a été exposée. La probabilité de rencontre pour une paire de particules est évaluée dans le cas d'un mouvement diffusif. Pour notre cas, la diffusion est observée sur un intervalle de temps Δt choisi plus grand que le temps caractéristique du phénomène physique considéré (τ_p - qui est par nature très petit dans le cas des colloïdes). L'algorithme de détection de collision exposé dans cette étude est validé dans le cas particulier de particules soumises uniquement à l'agitation Brownienne dans un fluide au repos. Des résultats encourageants pour ce cas particulier sont retrouvés.

Les limites d'utilisations d'un tel algorithme doivent encore être étudiées et les développement futurs doivent permettre de mieux comprendre la connexion de ce type d'algorithme avec des algorithmes de

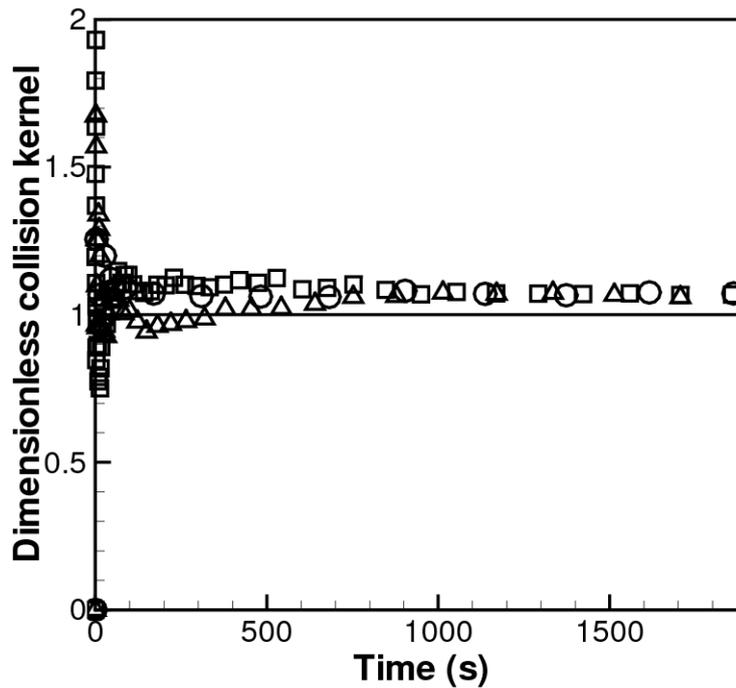


FIGURE 2 – Noyaux de collision adimensionné pour le nouvel algorithme pour différentes valeurs de $\frac{\Delta t}{\tau_p}$ ($\frac{\Delta t}{\tau_p} = \{10 (\square), 100 (\triangle), 1000 (\circ)\}$) pour un champ de particules monodisperses de diamètres $1\mu\text{m}$.

nature balistique, existants et valables pour des particules les plus inertielles. L'exposé valide également le raisonnement stochastique dont on peut imaginer l'application à de nombreux cas physiques.

Remerciements

Nous tenons à remercier particulièrement le Dr. Christophe Profeta (*Institut Élie Cartan de Nancy*) pour les discussions et les remarques intéressantes qui ont permis de mener à bien ces travaux.

Références

- [1] A. N. Borodin and P. Salminen, *Handbook of Brownian Motion - Facts and Formulae*, second edition ed. (Birkhauser, 2002).
- [2] M. Mohaupt, J.-P. Minier, and A. Tanière, "A new approach for the detection of particle interactions for large-inertia and colloidal particles in a turbulent flow," *International Journal of Multiphase Flow* (2011).
- [3] E. Peirano, S. Chibbaro, J. Pozorski, and J.-P. Minier, "Mean-field/pdf numerical approach for polydispersed turbulent two-phase flows," *Progress in energy and combustion science* **32** (2006).
- [4] P. G. Saffman and J. S. Turner, "On the collision of drops in turbulent clouds," *J. Fluid Mech.* **1**, 16–30 (1956).
- [5] H. Sigurgeirsson, A. Stuart, and W. L. Wan, "Algorithms for particle-field simulation with collisions," *Journal Of Computational Physics* **172**, 766–807 (2001).
- [6] M. Smoluchowski, "Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider Lösungen," *Z. Physik Chem.* **92**, 129–168 (1917).
- [7] S. Sundaram and L. R. Collins, "Numerical considerations in simulating a turbulent suspension of finite-volume particles," *Journal of Computational Physics* **124**, 337–350 (1996).
- [8] D. Wunsch, *Theoretical and numerical study of collision and coalescence - Statistical modeling approaches in gas-droplet turbulent flows*, Ph.D. thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse (2009).