

N° d'ordre: 2588

THESE

Présentée pour obtenir le titre de

Docteur de l'Institut National Polytechnique de Toulouse

Ecole doctorale: Mécanique Energétique et Génie des Procédés

Spécialité: Génie des Procédés et de l'Environnement

par

Micheline Abbas

intitulée

**AUTO-DIFFUSION DE PARTICULES DANS UN ECOULEMENT
CISAILLE: DES INTERACTIONS HYDRODYNAMIQUES AUX
EFFETS COLLISIONNELS**

Soutenue le 16 Janvier 2008 devant le jury composé de:

MM. Daniel Lhuillier (IJLRA)	Rapporteur
Dominique Salin (FAST)	Rapporteur
Eric Clément (LMMDH/PMMH)	Président
Dirk Van den Ende (PCF-Twente)	Membre
Eric Climent (LGC)	Directeur de thèse
Olivier Simonin (IMFT)	Directeur de thèse

Remerciements

"Un sage prof ne te propose pas de rentrer là où loge sa sagesse. Il te conduit plutôt jusqu'au seuil de ton esprit", *Gibran khalil Gibran*.

Il est vrai qu'une thèse nécessite plein d'efforts, de motivation et de patience. Sa réussite dépend de plusieurs facteurs. Dans mon cas, c'est l'environnement qui était propice à cette réussite: des labos très agréables pour travailler tant au niveau scientifique qu'humain, des collègues qui sont devenus mes amis, et des sages profs...

Le travail s'est déroulé au sein du Laboratoire de Génie Chimique et de l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, grâce à la structure Fédérative Fermat.

Je tiens d'abord à remercier très chaleureusement mon directeur de thèse Eric Climent, pour sa gentillesse, son encadrement scientifique que j'ose qualifier de haut niveau, sa pédagogie, ses conseils avisés et les idées toujours claires avec lesquelles on menait la barque de la thèse. Je remercie également mon co-directeur, Olivier Simonin, pour ses valeureux conseils, ses orientations scientifiques ainsi que pour nos discussions théoriques. Un grand merci pour le chef d'équipe Olivier Masbernat, pour l'appréciation qu'il portait toujours à l'égard de mon travail, et pour tous les repas amicaux qu'il organisait régulièrement.

Je voudrais remercier Denis et Iréa pour avoir veillé au bon déroulement informatique de ma thèse, Nicolas Renon pour avoir suivi avec intérêt la parallélisation du code, et Jean François pour toutes nos discussions sur les gaz-particules et la théorie cinétique.

Mon passage au LGC m'a permis de côtoyer des gens charmants qui viennent de tous les coins du monde (Alain, Amit, Maria Elena, Yongsoep...). J'ai eu le plaisir de partager mes moments de détente (repas, pauses et blagues) avec les personnes du "bureau des amis" (Christophe, Shila, Romain, Mariem, Amélie, Nicolas Abi Chebel et Nicolas Estime, Lynda, Soualo, Riccardo...) et des courses très belles au bord du lac de la Ramée avec Claudine. Je remercie Mallorie pour sa bonne humeur et ses conseils, Nancy et Dominique pour avoir été toujours là pour écouter mes soucis concernant mon petit pays. A la fin de la thèse, pendant mon séjour de rédaction à l'IMFT, j'étais entourée par mes collègues du groupe EEC qui ont été très accueillants (JF, Viviane, Dirk, Enrica, Magali, Rool, Olivier, Yannick, Laurent, Gérard, Florence...). Je vous en suis très reconnaissante. Je tiens à vous remercier pour votre gentillesse et votre sympathie, ainsi que tous les gens qui m'ont entouré et que j'ai pu oublier de citer.

Tout au long de cette thèse, j'ai partagé 10 m² avec Alicia. Malgré nos banales petites disputes (bouilloire, ventilateur, rideaux, porte...), j'ai eu la chance de l'avoir avec son mari Jesús, dans le cercle de mes meilleurs amis. J'ai également partagé 200m² avec des colocataires qui ont fait de la maison un milieu agréable où l'on pouvait se détendre après les longues journées de travail. Merci Hikmat, Wissam, Issam, Fadi, William et Youssef.

Nelson, merci pour m'avoir permis de compter sur toi sans trop réfléchir et pour tous les moments inoubliables que nous avons passé ensemble que ce soit en France ou dans ta belle principauté "Asturias".

Je voudrais remercier mes parents pour leur soutien, leurs encouragements et leur amour qui m'ont toujours donné la force d'avancer. Pour finir, un grand merci pour le "soldat inconnu", avec qui j'ai choisi de faire cette thèse pendant un beau coucher de soleil, qui m'a appris à être la femme courageuse que je suis, et mon seul regret c'est que la vie n'a pas permis qu'il soit témoin de sa fin.

Résumé de la Thèse:

Ce travail aborde, à l'aide de simulations Lagrangiennes, la description du comportement rhéophysique d'une suspension de particules solides sphériques en écoulement cisailé. Les effets de l'inertie du fluide, de l'agitation Brownienne et de la gravité sont négligés. Les suspensions étudiées sont classées en deux grandes familles, en fonction de l'inertie de la phase dispersée caractérisée par le nombre de Stokes.

A très petit nombre de Stokes, les suspensions sont de type liquide-solide où le fluide est très visqueux. Le modèle de simulation "Force Coupling Method" est utilisée pour simuler les interactions hydrodynamiques qui contrôlent la dynamique de ces suspensions. Cette méthode se base sur un développement multipolaire de la perturbation de vitesse induite par la présence des particules dans le fluide porteur. L'évolution de quantités macroscopiques en fonction de la fraction volumique du solide [$\phi=1-20\%$] est analysée dans des suspensions monodisperses. Les résultats (fluctuations de vitesse, auto-diffusion, auto-corrélation des vitesses et distribution spatiale de paires de particules...) confortent les tendances observées dans plusieurs études de la littérature. Nous montrons que l'agitation des particules induit un comportement diffusif dont l'intensité est une fonction croissante de la concentration. Le niveau d'agitation mais aussi le temps de diffusion augmentent lorsque les interactions multi-corps contrôlent la dynamique de la suspension. Les effets de lubrification associés à des particules proches du contact sont résolus précisément. Ceci permet d'utiliser la FCM pour simuler des suspensions de concentration plus élevée (allant jusqu'à 35%), et de quantifier leur viscosité effective. Le modèle de simulation est étendu aux cas de suspensions bidisperses. L'impact de la variation du rapport de taille ou de concentration sur les statistiques (des deux espèces) est examiné pour une fraction volumique constante de la phase dispersée. Pour un rapport de concentration fixe, nous avons trouvé qu'un rapport de taille croissant entraîne une augmentation (*resp.* diminution) du niveau de fluctuation des petites (*resp.* grosses) particules. Quand le rapport de taille et la concentration totale sont fixes, l'augmentation du nombre de grosses particules entraîne l'augmentation du taux de fluctuation et de la diffusion des deux espèces.

Les suspensions caractérisées par un nombre de Stokes modéré ou grand sont en général de type gaz-solide. Un modèle de simulation basé sur l'intégration des trajectoires de particules assimilées à des sphères dures est utilisé pour simuler la dynamique de la suspension. Le mouvement des particules est uniquement contrôlé par les collisions et par la force de traînée sur une particule isolée. Les simulations montrent que les propriétés de la suspension dépendent fortement de l'inertie des particules et de la concentration. La variation du nombre de Stokes de 1 à 10 induit une augmentation de l'agitation des particules de trois ordres de grandeur, et une évolution de la distribution de vitesse d'une forme très piquée (proche d'un Dirac) à une forme Maxwellienne. Les résultats numériques sont confrontés aux prédictions de deux modèles issus de la théorie cinétique des milieux granulaires adaptés aux nombres de Stokes modérés: la fonction Dirac (*resp.* Maxwellienne déviée) est utilisée pour décrire les suspensions faiblement (*resp.* fortement) agitées. Une nouvelle théorie pour déterminer les coefficients du tenseur d'auto-diffusion Lagrangienne est développée et validée avec les résultats des simulations. Les coefficients de diffusion et la viscosité de la phase solide sont également confrontés aux modèles théoriques utilisés pour la prédiction d'écoulements complexes. L'effet de l'inélasticité sur les quantités statistiques est également discuté.

La conclusion de ce document fait la synthèse de tous ces résultats en proposant une approche unifiée de l'évolution de la viscosité effective du mélange fluide/particules. Une modification de la méthode FCM est proposée pour modéliser simultanément l'inertie des particules et les interactions hydrodynamiques.

PhD thesis abstract

Lagrangian simulations are used to study the rheophysics of sheared suspensions of spherical particles. The effects of the fluid inertia, the Brownian diffusion and the gravity are neglected. Depending on the particle inertia characterized by the Stokes number, the suspensions are divided into two major classes.

The limit of vanishingly small Stokes numbers corresponds to solid particles suspended in a very viscous fluid. The "Force Coupling Method" is used to model the direct hydrodynamic interactions controlling the dynamics of these monodisperse suspensions. This method is based on a finite multipole expansion of the velocity field perturbation induced by each particle. The motion of all the suspension particles is simultaneously coupled through the direct solution of the Stokes equations written for the carrying fluid flow. The macroscopic evolution is studied while the solid volume fraction is increased from low to moderately concentrated [$\phi=1-20\%$]. The results (velocity fluctuation, self-diffusion, velocity auto-correlation and spatial distribution of pairs ...) are in agreement with several former studies of the literature. We showed that the particle agitation is enhanced by increasing the concentration and leads to a diffusive behavior of the suspension. The agitation level and the characteristic diffusion time are increasing as many-body hydrodynamic interactions control the suspension dynamics. The accuracy of the method is improved by calculating the exact lubrication forces for particle pairs near contact. Hence, this allows to simulate larger suspension concentrations (up to 35%), and to quantify the effective viscosity in this regime. The model is extended to the bidisperse suspension configurations. The dependence of the statistical quantities (of both species) on the size ratio and concentration ratio is discussed for a fixed total volume fraction. For a constant concentration ratio, we obtained that an increase of the size ratio enhances (*resp.* reduces) the fluctuation level of the small (*resp.* large) particles. The increase large particle number induces a significant enhancement of the fluctuations and self-diffusion of both species.

The suspensions characterized by moderate to high Stokes numbers are generally of gas-solid type. A hard-sphere collision model coupled with the particle Lagrangian tracking is used to simulate the suspension dynamics. The particle motion is controlled by only the drag force and particle collisions. The simulations show that the suspension properties depend strongly on the particle inertia and concentration. Increasing the Stokes number from 1 to 10 induces an enhancement of the suspension agitation by three orders of magnitude, and an evolution of the velocity distribution function from a highly peaked (close to the Dirac delta function) to a Maxwellian shape. The numerical results are compared to the predictions of two theoretical models based on the kinetic theory of granular flows adapted to moderate inertia regimes. The velocity distribution used for weakly (*resp.* highly) agitated suspensions is the Dirac delta (*resp.* deviated Maxwellian) function. A new prediction of the Lagrangian self-diffusion tensor is proposed and validated by the simulations results. The diffusion coefficients and solid phase viscosity are compared to the classical models used in engineering applications. The inelasticity effect on the statistical quantities is discussed as well.

The conclusion of the manuscript proposes a unified approach of all the results related to the evolution of the effective viscosity in the bulk. A modification of the Force Coupling Method is proposed to properly simulate the particle inertia and hydrodynamic effects simultaneously.

Chapitre 1: Introduction Générale

Chapitre 2: Suspensions cisillées contrôlées par les interactions hydrodynamiques

Chapitre 3: Sheared suspensions of inertial particles

Chapitre 4: Conclusion générale

Chapitre 1 : Introduction générale

Contexte de l'étude

Les écoulements multiphasiques constituent sans aucun doute la gamme d'écoulements la plus répandue, que ce soit au niveau naturel (sang, inhalation d'aérosol, mouvements des nuages, transport de sédiments...) ou au niveau des procédés industriels (agitation et mélange de suspension, extraction liquide-liquide, séparation solide-liquide, fermentation, transport pneumatique, fluidisation, colonnes à bulles ...). Ce sont des milieux complexes où se développent des interactions diverses entre les phases qui ont généralement des propriétés physiques différentes (densité, viscosité, concentration...).

Afin d'être capable de prédire correctement le comportement de ces écoulements, il est important de comprendre les phénomènes mis en jeu au cœur du fluide équivalent que l'on dénomme "le mélange". On peut alors avoir une approche faisant l'hypothèse d'un fluide équivalent ou bien on peut s'attacher à décrire le comportement des phases séparément, en analysant les phénomènes d'interaction et de transfert entre les différentes phases en présence (transfert de masse, de chaleur et de quantité de mouvement, réaction chimique...). Du fait de la complexité de ces phénomènes couplés, il est à l'heure actuelle impossible d'avoir une approche unifiée pour toutes les situations d'écoulements multiphasiques. Du côté de l'ingénierie, le choix d'une description macroscopique conduit à modéliser les quantités physiques effectives contrôlant la dynamique de l'écoulement pour différentes configurations ou sollicitations. Très souvent, les lois de fermeture ou de couplage sont ajustées de façon empirique à l'aide de corrélations ou d'extrapolations d'expériences de référence. Une meilleure compréhension des phénomènes physiques d'interaction entre phases permettrait d'avoir une approche plus rationnelle de la modélisation des écoulements complexes que l'on rencontre dans le milieu industriel. De nombreuses avancées théoriques, expérimentales et numériques rendent cette démarche de plus en plus réaliste et permettent de fixer un cadre d'étude mieux formalisé.

La méthode que l'on peut adopter pour modéliser un procédé complexe consiste en les étapes suivantes:

1. Simplification du problème pour en comprendre les mécanismes intrinsèques.
2. Modélisation de chaque phénomène indépendamment.
3. Extension du modèle à des situations réelles couplant plusieurs phénomènes élémentaires.
4. Validation expérimentale des prédictions du modèle.

L'étude menée pendant cette thèse se situe entre la deuxième et la troisième étape, c'est-à-dire modélisation des phénomènes d'interactions locaux et dynamique de l'écoulement couplant ces phénomènes d'interactions. De plus nous nous limiterons à l'étude d'écoulements de particules solides en suspension dans un gaz ou un liquide. Ceci rentre dans la grande famille des écoulements diphasiques à phase dispersée.

La méthodologie décrite ci-dessus peut aussi se décliner en termes d'échelles spatiales auxquelles les phénomènes se développent:

- microscopique: échelle locale correspondant à l'écoulement autour d'une ou d'un nombre très réduit d'inclusions isolées.
- mésoscopique: c'est l'échelle qui contient un ensemble de particules représentatif des effets collectifs conduisant à une microstructure particulière de la suspension.
- macroscopique: c'est en général l'échelle d'intérêt pour le procédé réel (échelle réacteur).

La principale difficulté des écoulements à phases dispersées réside dans le fait que les perturbations issues de la taille finie des inclusions, provoque des modifications qui peuvent être perceptibles jusqu'aux plus grandes échelles. Il y a donc un fort couplage entre les interactions microscopiques et la réponse de l'écoulement à l'échelle macroscopique.

La simulation numérique du mouvement de particules discrètes est un outil qui permet de faire le lien entre la microstructure locale et des quantités physiques globales représentatives au niveau statistique. Elles permettent de confirmer ou d'infirmer les modèles macroscopiques (lois empiriques ou modèles théoriques) qui existent. Ces simulations numériques sont complémentaires d'expériences de laboratoire car elles permettent un contrôle plus facile des conditions d'écoulements et des propriétés physiques des phases.

Afin d'obtenir des résultats fondamentaux sur les mécanismes d'interaction de type fluide/particules et particules/particules, il paraît naturel de simuler de tels écoulements de la manière la plus directe possible, évitant autant que possible la modélisation des termes d'interaction entre phases. Par conséquent, nous avons abordé l'étude par une approche de type Euler/Lagrange. Ce formalisme consiste à résoudre les équations dans le fluide (par exemple les équations de Navier-Stokes) d'une façon Eulérienne. Les particules sont suivies de façon Lagrangienne, ce qui permet d'avoir des informations individualisées (vitesse, position) à chaque instant. Les trajectoires des particules sont calculées à partir du bilan des forces qui leur sont appliquées par l'écoulement et les contacts avec les autres particules. Cette approche est généralement appelée "Discrete Particle Simulation".

Au cours de cette thèse, nous nous sommes intéressés à des écoulements homogènes diphasiques. Dans la pratique, la phase continue peut correspondre à un liquide ou un gaz peuplé en particules de même nature. Les particules solides sphériques sont réparties d'une façon homogène dans la phase continue (pas de gradient de concentration de la phase solide). L'ensemble {fluide+particule} constitue la suspension. Nous aborderons deux situations de

suspensions monodisperses (même taille de particules) et bidisperses (deux populations de taille différente). Nous nous plaçons dans le cadre d'hypothèses suivant:

- Il n'y a pas de réaction chimique entre les phases.
- La température n'intervient pas dans les phénomènes étudiés (pas de transfert de chaleur, pas d'agitation Brownienne).
- Les interactions de surface inter-particulaires de type physico-chimique sont négligées (pas d'agrégation)
- Les particules sont solides: les phénomènes de rupture, déformation et érosion n'ont pas lieu.

Les seules interactions qui existent sont de nature hydrodynamique ou physique:

- fluide/particule: forces hydrodynamiques appliquées sur les particules en mouvement relatif par rapport au fluide (particule isolée).
- particule/particule: chocs inter-particulaires ou interactions hydrodynamiques directes.

Bien que les écoulements réels soient très complexes, ils ont tous un point commun : la présence de gradients de vitesse qui est due soit à la présence d'une paroi ou bien à l'existence de structures tourbillonnaires. C'est pourquoi nous nous intéresserons à la configuration fondamentale d'un écoulement de cisaillement pur. Ceci permet d'évacuer les particularités liées à la géométrie de l'écoulement et ainsi de se concentrer sur les mécanismes d'interactions dans une situation homogène. La simulation d'un domaine sans parois avec des conditions aux limites périodiques permet de reproduire la situation de milieu infini. La gamme de concentration que nous allons considérer se situe entre 0.1% et 40%, ce qui impliquera des interactions fréquentes entre les particules. Dans le cas de l'écoulement cisailé, c'est l'écoulement porteur qui induit le mouvement relatif entre les inclusions qui suite aux interactions (hydrodynamiques et chocs) peuvent se déplacer à travers les lignes de courant de l'écoulement. La dynamique de la suspension est le résultat d'une compétition entre différents phénomènes.

De façon très générale, on peut caractériser le rôle respectif des différents phénomènes (l'inertie du fluide, l'inertie des particules, la dissipation visqueuse, la diffusion Brownienne et la gravité) par les nombres adimensionnels suivants:

- Le nombre de Reynolds Re caractérise le rapport entre l'inertie du fluide et les effets visqueux. Il permet de préciser si les équations de Navier-Stokes doivent être résolues entièrement (Re fini) ou si l'utilisation des équations de Stokes suffit pour décrire le mouvement du fluide ($Re \ll 1$). Quand on parle d'inertie, il est important de préciser de quelle échelle il s'agit. Il existe de nombreuses configurations où l'inertie joue un rôle important à l'échelle macroscopique tout en étant négligeable à l'échelle microscopique. Dans le cas de l'écoulement autour d'une particule et de l'interaction de particules dans une suspension de dimension infinie, c'est le nombre de Reynolds basé sur le cisaillement, la taille des particules et la viscosité du fluide qui est pertinent.
- Le nombre de Stokes St compare l'inertie des particules par rapport à leur temps de relaxation visqueux. S'il est très grand les particules ont un mouvement quasi-indépendant de celui du fluide. Si le nombre de Stokes est petit, elles s'adaptent très rapidement au mouvement du fluide local. Les nombres de Reynolds et de Stokes étant tous les deux proportionnels au carré de la taille des particules, l'inertie à petite échelle reste négligeable tant que les particules sont de petites tailles (de quelques dizaines à centaines de microns pour des fluides usuels).

- Le mouvement Brownien des particules est comparé à la convection par le nombre de Péclet Pe . Si ce nombre est faible, les particules ont un mouvement diffusif important induit par l'agitation thermique. Ceci a lieu en général pour des inclusions de taille très petite (inférieure au micron pour des particules en suspension dans de l'eau).
- Le nombre d'Archimède Ar permet de quantifier le rôle de la gravité qui agit sur la phase dispersée à travers les forces de flottabilité. Ces effets de gravité deviennent prépondérants quand les densités respectives sont différentes (bulle de gaz dans un liquide, goutte de liquide ou particule solide dans un gaz).

Les expressions des nombres adimensionnels correspondant aux particules de rayon a dans un écoulement de taux de cisaillement $\dot{\gamma}$, sont présentées dans le Tableau 1-1.

Nombre adimensionnel	Comparaison	Expression
Reynolds	Inertie du fluide / Dissipation visqueuse	$Re = \frac{\rho_f \dot{\gamma} a^2}{\mu_f}$
Stokes	Temps de réponse d'une particule/ échelle de temps de l'écoulement	$St = \gamma \tau_p = \frac{m_p / 6\pi\mu_f a}{1/\dot{\gamma}}$
Péclet	Transport convectif / Transport diffusif	$Pe = \frac{\dot{\gamma} a^2}{k_B T / 6\pi\mu_f a}$
Archimède	Flottabilité / Effet visqueux	$Ar = \frac{g a^3 \rho_f (\rho_p - \rho_f)}{\mu_f^2}$

Tableau 1-1

Nombres adimensionnels pour des particules sphériques de rayon a dans un écoulement cisailé $\dot{\gamma}$.
 ρ_f, μ_f : densité et viscosité du fluide - m_p et ρ_p : masse et densité des particules -
 g : intensité du champ de gravité - T : température.

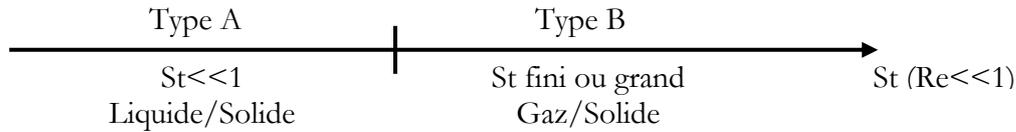
Le travail réalisé dans le cadre de cette thèse se limite aux hypothèses suivantes:

1. L'agitation Brownienne est négligeable ($Pe \gg 1$).
2. L'inertie du fluide est négligeable à l'échelle des particules ($Re \ll 1$).
3. L'inertie des particules caractérisée par le nombre de Stokes est un paramètre variable.
4. L'effet de la gravité (sédimentation, ségrégation, resuspension...) est négligé bien que pour les suspensions considérées et des configurations usuelles ce soit sûrement un effet prépondérant. Nous avons choisi de le négliger afin de ne pas mélanger les interactions liées à un glissement moyen avec celles qui sont induites par la présence d'un écoulement cisailé.

Les types de suspension satisfaisant ces hypothèses se divisent en deux classes:

- A. L'inertie des particules est négligeable: ceci exige que leur taille soit petite, que la viscosité du fluide soit importante et que la densité des particules soit du même ordre de grandeur que celle du fluide. Les suspensions concernées sont de type liquide-solide où le liquide est une huile très visqueuse. Les interactions prédominantes dans ce cas sont de type hydrodynamique.
- B. L'inertie des particules est finie ou grande: si l'inertie du fluide est toujours négligeable, ceci induit que les particules soient petites et de densité largement supérieure à celle du fluide. Ces conditions sont vérifiées par les suspensions de type gaz-solide que l'on rencontre dans de nombreuses applications industrielles (transport pneumatique, lits

fluidisées, granulation ...). Les particules s'écartent fortement de la vitesse locale du fluide, et par conséquent les collisions y sont très fréquentes.



La Figure 1-1 synthétise les propriétés physiques des suspensions qui vérifient les deux types de comportement précédemment décrits. Pour les suspensions de type A dans un écoulement avec un taux de cisaillement modéré ($\gamma=1-10s^{-1}$), $St \ll 1$ correspond à une suspension de particules solides de taille 1-100 μm dans un fluide très visqueux, typiquement 100 fois plus visqueux que l'eau. De plus, si l'on choisit de découpler les effets de la pesanteur (sédimentation) de ceux issus d'un gradient de vitesse, la Figure 1-1 montre que pour des particules de petites dimensions (100 μm), on peut conserver l'hypothèse d'un écoulement de Stokes ($Re \ll 1$) et s'intéresser alors à des suspensions inertielles $0 < St < 50$ (suspensions de type B).

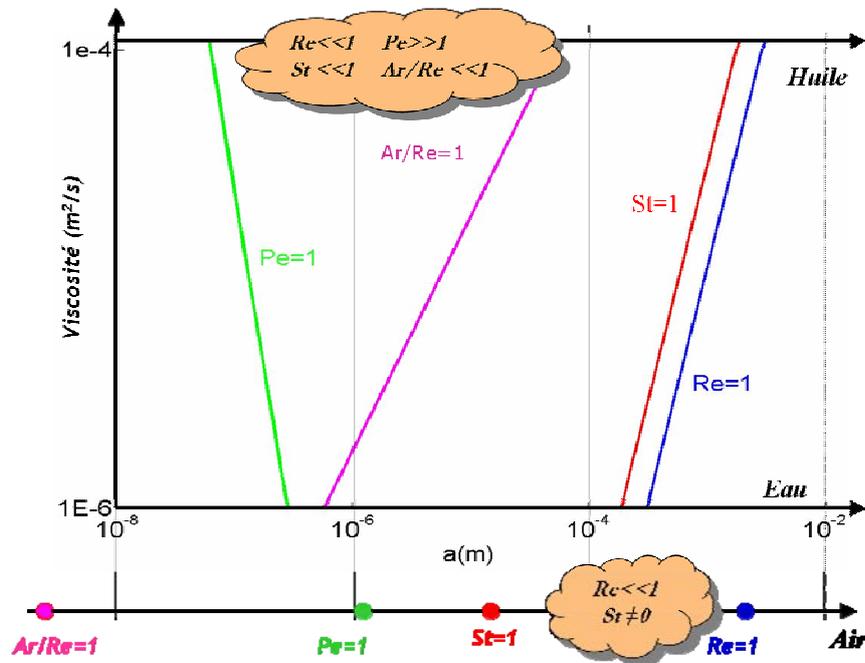


Figure 1-1

Synthèse de l'évolution des nombres adimensionnels en fonction de la taille des particules et de la viscosité du fluide. $\gamma=10s^{-1}$ et $\rho_f=10^3kg/m^3$. Les différentes lignes et points en couleur correspondent à des nombres adimensionnels égaux à l'unité (à droite de ces lignes, les nombres adimensionnels considérés sont grands et à gauche ils sont faibles).

Ce mémoire de thèse vise à apporter, à l'aide de simulations locales des deux types de suspensions A et B, une caractérisation quantitative des propriétés macroscopiques en fonction des conditions d'écoulement (fraction volumique du solide, inélasticité des particules, inertie des particules, rapport de taille ou de concentration dans le cas de suspensions bidisperses...). En effet, l'objectif est de voir dans quelle mesure une suspension peut être considérée comme un fluide équivalent ayant des propriétés physiques effectives (agitation et dispersion de la phase dispersée, dissipation d'énergie, propriétés rhéologiques du mélange...).

Le document est divisé en deux grandes parties, correspondant respectivement aux études des suspensions de type A et B. Ces parties sont conçues de telle manière qu'elles soient quasiment autonomes pour le lecteur qui serait uniquement intéressé par un des deux régimes (inertie des particules négligeable ou importante). Une méthode de simulation appropriée a été utilisée pour chaque configuration.

Répartition des chapitres

Dans le chapitre II, nous considérons les suspensions de particules non-inertielles où la dynamique est principalement contrôlée par les interactions hydrodynamiques (perturbations de vitesse dans le fluide porteur). On peut trouver dans la littérature plusieurs études théoriques sur l'analyse des perturbations de vitesse engendrées en écoulement cisailé par une particule isolée (Batchelor & Green, 1970), une paire de particules (Batchelor & Green, 1970; Lin et al., 1970) ou trois particules (Wang et al., 1996). Par contre, la détermination exacte du champ induit par des interactions multiples est beaucoup plus compliquée. Nous avons étudié l'effet des interactions hydrodynamiques à l'aide d'une méthode numérique adaptée à cette situation (Force Coupling Method). Ce modèle de simulation permet de tenir compte du couplage entre le mouvement de la phase continue et de la phase dispersée en résolvant l'écoulement à une échelle comparable au diamètre des inclusions. L'influence des interactions hydrodynamiques directes sur le mouvement de la phase dispersée est ainsi prise en compte. La méthode FCM fut validée et utilisée dans plusieurs études et pour plusieurs configurations d'écoulements (interactions avec des parois, Lomholt & Maxey, 2003; sédimentation, Climent & Maxey, 2003; particules paramagnétiques, Climent et al., 2004, ...). C'est la première fois que cette méthode est utilisée et validée pour des suspensions cisillées. Tout d'abord, nous nous intéressons à l'évolution des propriétés macroscopiques en fonction de la concentration pour des suspensions monodisperses. Puis, nous proposons également des résultats nouveaux sur le comportement de suspensions bidisperses en fonction du rapport de taille et de concentration. Les études sur le comportement macroscopique des suspensions monodisperses et bidisperses figurent également dans les articles Abbas et al. (2007) et Abbas et al. (2006), respectivement. Une amélioration de la précision du modèle numérique est réalisée au cours de ce travail en ajoutant les forces de lubrification lors du rapprochement des particules. Certains de ces calculs numériques ont été rendus possibles par le développement d'un algorithme de résolution parallèle que nous décrirons brièvement.

Dans le chapitre III, nous étudions le comportement macroscopique qui résulte de la mise en suspension de particules d'inertie finie dans un écoulement cisailé (suspension de type B). Les particules ayant une densité très différente de celle du fluide peuvent avoir un mouvement de glissement local entraînant de fréquentes collisions. Le choc entre les particules est paramétré par un coefficient d'élasticité que nous avons fait varier. Contrairement aux milieux granulaires secs où les particules se déplacent en lignes droites entre les chocs, les particules d'inertie finie sont soumises au frottement visqueux avec le fluide. Les interactions hydrodynamiques directes sont négligées en première approche et seule est considérée la traînée sur une particule isolée. Nous montrerons l'influence respective de la force de traînée et des collisions sur le comportement macroscopique de la suspension (différentes échelles de temps mises en jeu). Les quantités macroscopiques calculées sont comparées à des prédictions issues de la théorie cinétique des milieux granulaires adaptés aux nombres de Stokes modérés (développés simultanément dans la Thèse de Boelle (1997) et les articles de Tsao & Koch (1995) et Sangani et al., 1996). Une attention particulière sera portée sur la transition entre les suspensions faiblement et fortement agitées dans le cadre de suspensions modérément concentrées. Ce chapitre contient également une discussion sur l'évolution du coefficient d'auto-diffusion Lagrangienne. Les résultats des simulations sur l'auto-diffusion sont comparés à une nouvelle expression théorique développée spécifiquement pour ce type de suspension.

Finalement, le chapitre IV fait la synthèse de tout ce travail en comparant l'évolution des propriétés effectives dans les deux régimes d'écoulement étudiés. Nous présenterons une brève description des perspectives de modification de la méthode FCM pour prendre en compte à la fois l'inertie des particules et les interactions hydrodynamiques.

Références

- Abbas M., Climent E., Simonin O., Maxey M. R., 2006, "Dynamics of bidisperse suspensions under Stokes flows: Linear shear flow and Sedimentation", *Phys. Fluids* **18**: 121504:1-20
- Abbas M., Climent E., Simonin O., 2007, "Fully coupled simulations of non-colloidal monodisperse sheared suspensions", *ChERD*, **85**, 778-791.
- Batchelor, G.K. and Green, J.T., 1972, "The hydrodynamic interaction of two small freely-moving spheres in a linear flow field", *Journal of Fluid Mechanics*, **56**, 375-400.
- Boëlle A., 1997, "Validation d'un modèle à deux fluides appliqué à la simulation des lits fluidisés denses", Thèse EDF, Département Laboratoire National Hydraulique.
- Climent, E. and Maxey, M.R., 2003, "Numerical simulations of random suspensions at finite Reynolds numbers", *Int. J. of Multiphase Flow*, **29**, 579-601.
- Climent, E., Maxey, M.R., and Karniadakis, G.E., 2004, "Dynamics of self-assembled chaining in magneto-rheological fluids. *Langmuir*, 20: 507-513.
- Lin, C.J., Lee, K.J. and Sather, N.F., 1970, "Slow motion of two spheres in a shear field", *Journal of Fluid Mechanics*. **43**, 35-47
- Lomholt, S. and Maxey, M.R., 2003 "Force-Coupling Method for particulate two-phase flow. Stokes flow", *Journal of Computational Physics*, **184**, Issue 2, 381-405.
- Sangani, A., Mo, G., Tsao, H., and Koch, D., 1996, "Simple shear flows of dense gas-solid suspensions at finite Stokes numbers", *J. of Fluid Mechanics*, **313**, 109-341.
- Tsao, H., and Koch, D.L., 1995, "Simple shear flows of dilute gas-solid suspensions", *J. of Fluid Mechanics*, **296**, 211-245.
- Wang, Y., Mauri, R., and Acrivos, A., 1996, "Transverse shear-induced liquid and particle tracer diffusivities of a dilute suspension of spheres undergo a simple shear flow", *J. Fluid Mechanics*, **327**, 255-272.

Nomenclature du Chapitre 2

Calcul et simulations

a : rayon d'une particule (suspension monodisperse).
 a_s, a_L : rayon respectif des petites et grandes particules (suspension bidisperse)
 A, B, C : quantités caractérisant les interactions hydrodynamiques
 D_{ij} : Tenseur des coefficients d'auto-diffusion
 E_{ij} : partie symétrique du tenseur des gradients de vitesse du fluide non perturbé
 F_b : Force de la barrière de répulsion
 F_{ref} : Intensité de la force de barrière répulsive
 $g(r)$: fonction d'auto-corrélation de paires de particules
 L : largeur de la boîte de simulation cubique
 \mathbf{M} : vecteur de mobilité locale des particules
 N : nombre total de particules
 N_s, N_L : nombre respectif de petites et grandes particules (suspension bidisperse)
 R_{ref} : épaisseur de la barrière de répulsion
 $R_{ij}(t)$: Tenseur des coefficients d'auto-corrélation lagrangienne de vitesse
 T_{c1}, T_{c2} : temps caractéristiques dans la fonction d'auto-corrélation lagrangienne de vitesses
 T_L : Temps lagrangien d'auto-corrélation de vitesse
 T_{ij} : Tenseur des fluctuations de vitesse de translation des particules
 \mathbf{U} : Champ de vitesse du fluide non perturbé
 $\hat{\mathbf{u}}$: Champ de perturbation de vitesse du fluide induite par la présence d'une particule isolée
 \mathbf{V} : vitesse instantanée de translation d'une particule
 \mathbf{v}'' : fluctuation de vitesse de translation d'une particule
 w_{ij} : tenseur des fluctuations de vitesse de rotation des particules

ε : distance de séparation axiale entre les surfaces de deux particules
 ϕ : fraction volumique du solide ou concentration
 ϕ_s, ϕ_L : concentration respective des petites et grandes particules (suspension bidisperse)
 γ : taux de cisaillement
 γ_{ij} : tenseur de cisaillement de l'écoulement
 λ : rapport de taille $\lambda = a_L/a_s$
 μ_{eff} : viscosité effective du fluide équivalent
 Γ'' : fluctuation de vitesse de rotation d'une particule
 Ω : vitesse instantanée de rotation d'une particule
 ω : champ de vitesse de rotation du fluide non perturbé

FCM

$A_{ij}^{(n)}$: partie antisymétrique du tenseur dipôle
 $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$: expansion multipolaire du champ de force due à la présence de particules
 $F_i^{(n)}$: monopôle dans les 2 expansions multipolaires (classique et finie de forces)
 $F_{ij}^{(n)}, F_{ijk}^{(n)}$: dipôle et quadripôle de l'expansion multipolaire classique pour la particule (n)
 $\mathbf{F}_{ext}^{(n)}$: force extérieure appliquée à la particule (n)
 \mathbf{g} : accélération de la gravité
 $G_{ij}^{(n)}$: tenseur du dipôle dans l'expansion multipolaire finie de forces
 I_p, I_f : moment d'inertie des particules et du fluide respectivement

m_p, m_f : masse de particule et du fluide contenu dans le volume de la particule
 $O_{ij}(\mathbf{x})$ et $O_{ij}(\mathbf{x}, \sigma)$: tenseurs d'Oseen dans les 2 expansions multipolaires (classique et enveloppe localisée de forces)
 $p(\mathbf{x}, t)$: champ de pression dans le fluide
 $S_{ij}^{(n)}$: partie symétrique du tenseur dipôle
 $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$: champ de vitesse du fluide perturbé
 $\mathbf{V}^{(n)}$: vitesse de la particule (n)
 $V_p^{(n)}$: volume de la particule (n)
 \mathbf{x} : champ de position dans le fluide
 t : temps
 $\mathbf{T}^{(n)}$: couple appliqué par la particule sur le fluide
 \mathbf{W}_s : vitesse de sédimentation
 $\mathbf{Y}^{(n)}$: position du centre de la particule (n)

$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{Y}^{(n)})$: fonction Dirac relative au centre de la particule (n)
 μ_f : viscosité du fluide
 σ et σ' : échelles de longueur caractérisant les enveloppes Gaussiennes Δ et Δ' respectivement
 Δ et Δ' : enveloppes Gaussiennes de distribution des termes de forçages et des particules
 $\boldsymbol{\Omega}^{(n)}$: vitesse de rotation de la particule (n)

Lubrification

$\mathcal{A}_{ij}, \mathcal{B}_{ij}, \mathcal{C}_{ij}$ et \mathcal{D}_{ij} : tenseurs du second ordre
 $\mathbf{B}^{(i)}$: force à ajouter pour compléter les effets de lubrification pour la paire de particule (i,j)
 $\mathbf{H}^{(i)}$: force à ajouter pour compléter la force de traînée appliquée à la particule (i)
 R_p : rayon du cercle de lubrification
 $\mathbf{U}_*^{(i)}$: Vitesse réelle de la particule (i) au moment du calcul de la force de lubrification
 $\mathbf{U}^{(i), \text{lub}}$: Vitesse utilisée pour compléter les effets de lubrification

ε : distance de séparation axiale entre les surfaces de deux particules
 γ^{FCM} : rapport entre la force imposée à une particule et la vitesse résultant du calcul de la FCM
 λ_k : coefficients correspondant à la résolution du problème de résistance
 σ_{ij}^p : contraintes dues aux effets de lubrification

Chapitre 2 : Suspensions cisillées contrôlées par les interactions hydrodynamiques	1
1- Introduction	1
2- Méthode numérique et simulations	4
2-1 Equations du modèle.....	5
2-2 Avantages.....	10
2-3 Validation sur un écoulement cisillé.....	11
2-4 Force de répulsion.....	15
2-5 Information sur les simulations.....	18
2-6 Parallélisation MPI.....	19
3- Suspensions monodisperses	21
3-1 Tenseurs de contraintes.....	22
3-2 Microstructure: $g(r)$	25
3-3 Fluctuations de vitesse: distribution et auto-corrélation Lagrangienne.....	27
3-4 Auto-diffusion induite par le cisaillement.....	31
3-5 Ajout des forces de lubrification.....	34
3-6 Viscosité.....	40
4- Suspensions bidisperses	43
4-1 Effet du rapport de taille ($\phi_s = \phi_L$).....	45
4-2 Effet du rapport de concentration.....	46
5- Conclusion et perspectives	51
Références	54

Chapitre 2 : Suspensions cisillées contrôlées par les interactions hydrodynamiques

1- Introduction

Ce chapitre concerne l'étude numérique du comportement de suspensions cisillées de particules solides, non colloïdales, suspendues dans un fluide cisillé. On se limitera au régime d'écoulement de Stokes. Les suspensions considérées sont homogènes au niveau macroscopique et l'inertie des particules est négligeable. Le comportement global d'une suspension solide-liquide peut s'apparenter à un fluide, une pâte ou un solide, en fonction de la fraction volumique en particules et des interactions surfaciques inter-particulaires. Dans des suspensions modérément concentrées (fraction volumique supérieure à 10% et inférieure à 40%), le mouvement relatif des particules est généralement toujours possible, ce qui permet à la suspension de s'écouler comme un fluide ayant des propriétés effectives.

Les suspensions cisillées constituent une configuration propice à la migration et au mélange de particules. On s'intéressera dans ce chapitre uniquement à des suspensions contenant des particules macroscopiques (non-Browniennes). Afin de clarifier l'importance respective de chaque mécanisme pouvant entrer en jeu lors du déplacement relatif des particules, les suspensions de particules monodisperses dans un fluide visqueux soumis à un cisaillement sont caractérisées par les nombres adimensionnels présentés au Chapitre I (Reynolds, Stokes, Péclet et Archimède). La Figure 2-1 permet d'avoir une idée des propriétés physiques des suspensions qui vérifient toutes les hypothèses mentionnées ci-dessus. Cette figure met en évidence l'évolution de ces nombres adimensionnels en fonction du rayon des particules et de la viscosité cinématique du liquide dans une suspension uniformément cisillée ($\dot{\gamma}=10\text{s}^{-1}$ est un ordre de grandeur de taux de cisaillement trouvé couramment dans diverses applications). Les lignes horizontales correspondent à une viscosité constante de fluide comprise entre $\nu=10^{-6}\text{m}^2/\text{s}$ (pour l'eau) et $10^{-4}\text{m}^2/\text{s}$ (pour une huile visqueuse). Les traits pointillés verticaux correspondent à un rayon de particule constant. Les lignes solides correspondent aux nombres adimensionnels égaux à l'unité. L'interprétation des différentes régions délimitées par ces lignes est la suivante. L'effet du

mouvement Brownien doit être considéré quand les propriétés de la suspension tombent à gauche de la ligne $Pe=1$, et est négligeable à droite de cette ligne. Les trajectoires de particules sont faiblement influencées par la gravité et les effets inertiels à gauche des lignes $Ar/Re=1$ et $St=1$ respectivement, alors que le comportement des particules est contrôlé par la flottabilité et les effets inertiels à droite de ces lignes. Pour la ligne $Re=1$, les suspensions situées à gauche sont décrites par les équations de Stokes alors que les équations de Navier-Stokes doivent être utilisées pour décrire le mouvement du fluide à droite de cette ligne.

En analysant la Figure 2-1, on s'aperçoit que les effets d'inertie (des particules et du fluide), de la flottabilité et du mouvement Brownien sont tous négligeables pour des suspensions de particules de rayon $a=O(1\mu m)$ et pour un fluide très visqueux ($\nu \geq O(10^{-4} m^2/s)$). La dynamique de ces suspensions est uniquement contrôlée par les interactions hydrodynamiques, dont le rôle est déterminant surtout lorsque les particules sont proches.

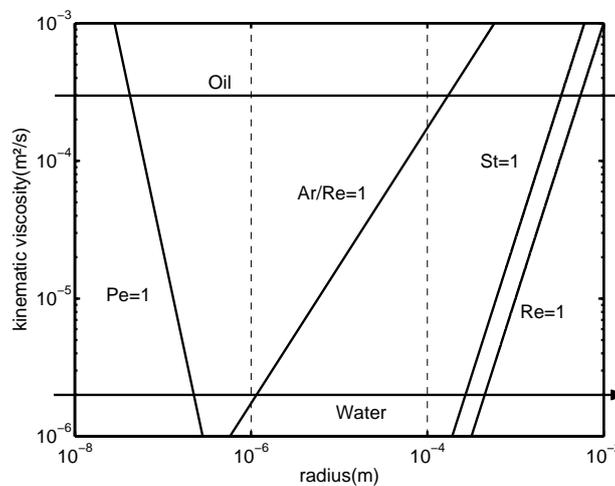


Figure 2-1

Dépendance des nombres adimensionnels en fonction des paramètres de la suspension (rayon des particules, viscosité cinématique). Chaque trait plein oblique délimite les régions où les nombres adimensionnels sont respectivement plus faibles ou plus grands que l'unité.

Une prédiction théorique exacte du résultat des interactions hydrodynamiques dans une suspension n'existe pas à cause de la difficulté de calculer analytiquement les perturbations de vitesses induites par toutes les particules. Cependant, les interactions hydrodynamiques générées par une paire isolée de particules ont été étudiées simultanément par Lin et al. (1970) et Batchelor & Green (1970). Ces derniers ont décomposé la perturbation du champ de vitesse en deux approximations différentes: celle du champ lointain et celle des courtes distances. Les interactions entre trois sphères ont été étudiées par Wang et al. (1996) en utilisant des expressions approchées du champ de vitesse proche et lointain.

De plus, plusieurs études expérimentales mais aussi numériques se sont intéressées au comportement de ces suspensions. Récemment, Drazer et al. (2004) ont étudié en détail les propriétés de suspensions monodisperses cisillées au niveau microscopique (fonction de distribution de paires) et au niveau macroscopique (tenseurs de fluctuations de vitesse de translation et de rotation), pour une large gamme de concentrations. Même si la méthode de Dynamique Stokesienne qu'ils ont utilisée est particulièrement bien adaptée pour ce genre de problème, les auteurs se sont limités à simuler l'évolution simultanée de quelques centaines de particules seulement, à cause d'un temps de calcul prohibitif au delà. Ils ont montré qu'une suspension cisillée initialement homogène le reste tout au long de la simulation. Ces auteurs ont

également mis en évidence la différence entre les statistiques dérivant de simulations dynamiques où les particules se déplacent suite à la superposition entre le champ moyen et les interactions hydrodynamiques directes entre les particules, et des simulations statiques où les moyennes sont calculées sur plusieurs configurations aléatoires indépendantes. Dans les deux cas, ils ont trouvé que les fluctuations de vitesse sont anisotropes et qu'elles suivent jusqu'à $\phi=20\%$ la prédiction théorique basée sur un régime d'écoulement dilué.

Dans un travail antérieur, Drazer et al. (2002) avaient montré que la fonction de probabilité de distribution de fluctuations de vitesse a une forme exponentielle étirée aux faibles concentrations indiquant la présence de structures corrélées aux temps longs. Cette fonction a la forme d'une fonction Gaussienne pour les fortes concentrations où les interactions multi-corps sont aléatoires. Les fonctions d'auto-corrélation Lagrangienne, calculées par Marchioro & Acrivos (2001) et Drazer et al. (2002), sont décroissantes et contiennent toutes une région négative qui commence à partir d'un temps caractéristique proche de $1/\gamma$ (où γ est le taux de cisaillement). Cette échelle montre que les trajectoires de particules sont principalement contrôlées par les interactions de paires aux faibles concentrations. Les fluctuations de vitesse restent corrélées sur une longue échelle de temps (d'ordre $8/\gamma$). Suite à la perte de corrélation, l'évolution de la suspension devient chaotique, ce qui entraîne l'apparition d'une diffusion induite par le cisaillement, même en l'absence de mouvement Brownien. La diffusion dans de telles conditions a été étudiée dans plusieurs travaux : depuis le travail expérimental de référence de Leighton & Acrivos (1986), suivi par le calcul analytique de Wang et al. (1996) jusqu'aux nouvelles techniques expérimentales développées par Breedveld et al. (1998, 2001 et 2002) et les simulations numériques de Marchioro & Acrivos (2001), Drazer et al. (2002), Sierou & Brady (2004). Les coefficients d'auto-diffusion rapportés dans ces travaux sont anisotropes et croissent avec la concentration de la suspension. On observe une certaine dispersion des résultats dont l'origine est diverse : hypothèses de la théorie, erreurs de mesures, simplifications des simulations...

La présence de particules dans un fluide cisailé augmente la viscosité apparente de la suspension. Bien après la prédiction théorique d'Einstein (1906), Batchelor & Green (1972b) ont montré que les interactions hydrodynamiques induisent une évolution quadratique de la viscosité de la suspension en fonction de la concentration. Des mesures rhéologiques (reportées dans l'article de revue de Stickel & Powell, 2005) montrent une évolution rapidement divergente quand la suspension s'approche de la concentration maximale.

Si les suspensions monodisperses ont été étudiées de nombreuses fois, le comportement macroscopique de suspensions bidisperses dans la limite des faibles nombres de Reynolds et de Stokes, a reçu beaucoup moins d'attention dans la littérature. Chang & Powell (1993 et 1994) ont étudié l'organisation de la microstructure dans des suspensions bidisperses proches de la concentration maximale, l'évolution de la viscosité de suspension ainsi que la diffusivité au temps court et au temps long.

Nous allons décrire dans ce chapitre les résultats que nous avons obtenus sur la rhéophysique de suspensions mono et bidisperses en utilisant la Force Coupling Method. C'est un modèle de simulation pour résoudre les équations de Stokes dans un écoulement diphasique en prenant en compte les perturbations de vitesse induites par les interactions hydrodynamiques entre les particules. Cette méthode consiste à remplacer les particules par des distributions de sources de quantité de mouvement forçant le fluide à se déplacer en réponse à la présence des particules. C'est un modèle de résolution numérique couplant entièrement les mouvements de la phase continue et de la phase dispersée, permettant la simulation des interactions hydrodynamiques directes entre des milliers de particules.

Le chapitre s'organise selon le plan suivant:

- *Section 2*: on commence par détailler le modèle numérique de la "Force Coupling Method", ainsi que ses avantages pour la simulation des interactions hydrodynamiques directes dans les suspensions. Quelques tests de validation sont proposés dans le contexte d'un écoulement cisailé. Ceci est suivi par une brève explication des modifications de l'algorithme qui ont permis de réduire le temps de calcul par la parallélisation sous la norme MPI (Message Passing Interface).

- *Section 3*: Le comportement macroscopique de la suspension est étudié à travers le calcul des fluctuations de vitesse, leur densité de probabilité et leur fonction d'auto-corrélation Lagrangienne. Les coefficients d'auto-diffusion sont également calculés. Dans le but d'examiner la suspension d'un point de vue microscopique, nous mettons en évidence l'orientation préférentielle des paires de particules en interaction. Les résultats sur les quantités statistiques sont comparés aux travaux de Drazer et al. (2002, 2004) qui ont utilisé la méthode de Dynamique Stokesienne. Nous allons ensuite décrire les améliorations de la méthode obtenues en ajoutant des forces de lubrification (Dance & Maxey (2003)) lors du rapprochement des paires de particules.

- *Section 4*: Après notre analyse des suspensions monodisperses, nous proposons des résultats nouveaux sur le comportement de suspensions bidisperses en fonction du rapport de taille ou de concentration des deux espèces de particules.

Nous terminons le chapitre par une conclusion synthétisant les principaux résultats et ouvrant vers les perspectives à venir.

2- Méthode numérique et simulations

L'idée originelle de la méthode FCM ("Force Coupling Method") est de construire le suivi Lagrangien des inclusions à partir de la perturbation de vitesse induite par le mouvement des particules sur le fluide porteur. Le bilan détaillé des forces (flottabilité, traînée, gradient de pression, force de masse ajoutée et portance) ne peut pas être utilisé dans cette approche pour construire la trajectoire d'une particule car le champ non-perturbé n'est pas connu. En effet, les méthodes classiques de suivi Lagrangien (même avec couplage inverse) sont basées sur l'hypothèse que le champ de vitesse et ses gradients ne sont pas modifiés par la présence de la particule souvent considérée comme ponctuelle. Les interactions hydrodynamiques directes induites par la taille finie des inclusions sont donc perdues.

Les bases de cette méthode se trouvent dans la décomposition multipolaire de la perturbation de vitesse induite par une particule isolée. En effet, en écoulement de Stokes, le champ de vitesse généré par la translation d'une particule sphérique à vitesse constante peut s'exprimer comme une somme de termes. La solution analytique exacte peut donc être approchée par un développement similaire à un développement de Taylor. Le premier ordre de ce développement est lié à la force qui s'exerce sur la particule (traînée de Stokes) et va donc reproduire le champ lointain de la perturbation de vitesse. Ce premier terme s'appelle monopôle ou Stokeslet. Le second ordre (dipôle) fait apparaître un tenseur dont la partie symétrique permet d'assurer la condition de déformation nulle dans le volume occupé par la particule et la partie antisymétrique est liée à un couple externe qui serait exercé sur la particule (ce couple entraîne une rotation solide de la particule et correspond à l'analogie en rotation de la relation force de

traînée / vitesse de translation de la particule). On pourrait continuer à énumérer les termes qui composent ce développement (quadripôle...) mais par souci de clarté, on va se limiter aux deux termes qui sont effectivement utilisés dans le modèle de simulation.

2-1 Equations du modèle

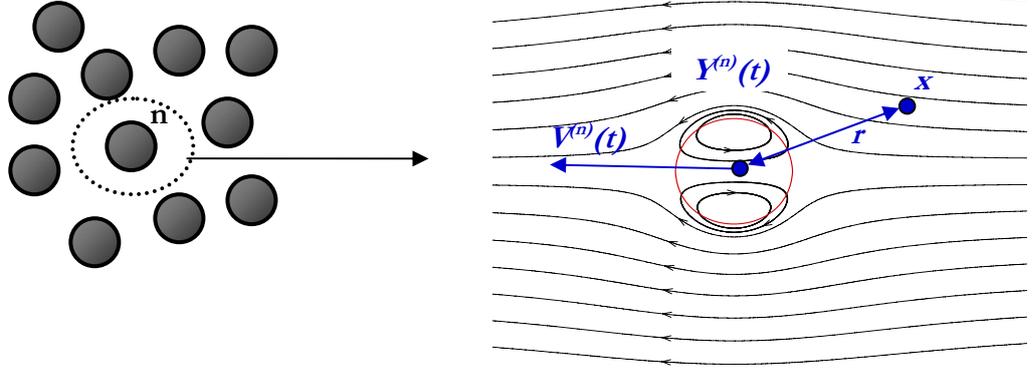


Figure 2-2

Représentation schématique de la FCM: remplacement d'une particule n par un volume fluide

Chacune des particules est représentée par un terme de forçage dans les équations du fluide porteur. Les termes de forçage $\mathbf{f}(\mathbf{x},t)$ de toutes les particules sont distribués simultanément dans les équations du fluide, de telle sorte que ces dernières couplent toutes les perturbations de vitesse des particules de la suspension. Le fluide est considéré incompressible (eq. 2-1) avec une viscosité constante μ_f . Dans le cas d'un régime d'écoulement stationnaire non inertiel ($Re \ll 1$), le champ de vitesse du fluide perturbé $\mathbf{u}(\mathbf{x},t)$ et la pression $p(\mathbf{x},t)$ en un point \mathbf{x} sont solutions des équations de Stokes (eqs. 2-2).

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

2-1

$$0 = -\nabla p + \mu_f \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$$

2-2

Dans la méthode de développement multipolaire classique (eq. 2-3), $\mathbf{f}(\mathbf{x},t)$ est exprimée en une série de termes singuliers (Saffman, 1973 et Durlofsky et al., 1987)

$$\mathbf{f}_i(\mathbf{x}, t) = \sum_{n=1}^N \left\{ \left(F_i^{(n)} + F_{ij}^{(n)} \frac{\partial}{\partial x_j} + F_{ijk}^{(n)} \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_k} \right) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{Y}^{(n)}(t)) \right\}$$

2-3

où $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{Y}^{(n)}(t))$ est la fonction Dirac centrée au point $\mathbf{Y}^{(n)}(t)$ position de la particule (qu'on écrira $\mathbf{Y}^{(n)}$ pour simplifier). Le nombre de moments ($F_i^{(n)}$ monopôle, $F_{ij}^{(n)}$ dipôle, $F_{ijk}^{(n)}$ quadripôle et ainsi de suite) inclus dans le développement détermine l'ordre de précision de la solution résultante. Si tous les effets doivent être inclus, allant des interactions de champ lointain jusqu'aux effets de lubrification aux courtes distances, tous les moments de la série 2-3 doivent être retenus.

Sachant que les équations de Stokes sont linéaires, la solution des équations 2-1 et 2-2 peut être obtenue en résolvant le système d'équations dont chaque équation résulte d'un moment. Le résultat (eq. 2-4) est alors écrit en fonction d'une série de termes obtenus à partir du développement de Taylor du tenseur d'Oseen O_{ij} (eq. 2-5)

$$\mathbf{u}_i(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^N \left\{ \left(F_i^{(n)} + F_{ij}^{(n)} \frac{\partial}{\partial x_j} + F_{ijk}^{(n)} \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_k} \right) O_{ij}(\mathbf{x} - \mathbf{Y}^{(n)}) \right\} \quad 2-4$$

$$O_{ij}(\mathbf{x}) = \frac{1}{8\pi\mu_f} \left(\frac{\delta_{ij}}{r} + \frac{x_i x_j}{r^3} \right) \quad 2-5$$

L'utilisation de cette méthode, appelée également "Particules Points", induit des difficultés d'ordre numérique, parce qu'une singularité (comme c'est le cas pour la fonction Dirac $\delta(\mathbf{x}-\mathbf{Y}^{(n)})$) ne peut pas être représentée précisément dans une simulation eulérienne des équations du fluide porteur. L'utilisation d'une approche différente est donc souhaitable. Une méthode alternative serait de remplacer la fonction Dirac par une fonction d'enveloppe spatiale. Ceci signifie que l'approximation de Points classique est remplacée par une représentation du volume réel des particules de taille finie. Loin de la particule, le champ de vitesse ne dépend pas de la forme de l'interface des particules, ce qui n'induit aucune contrainte sur l'aspect de l'enveloppe spatiale. Par contre lorsque l'on se rapproche de la particule, le champ local de vitesse est d'autant plus fidèlement reproduit que la forme géométrique de la distribution du terme de forçage est proche de la forme de la particule. Il paraît donc naturel de distribuer le Stokeslet (et les autres termes du développement) sur une enveloppe sphérique pour une particule sphérique. Les N particules centrées aux positions $\mathbf{Y}^{(n)}$, les termes de forçage sont alors distribués sur des enveloppes Gaussiennes de taille finie (eq. 2-6).

$$\Delta(\mathbf{x} - \mathbf{Y}^{(n)}) = (2\pi\sigma^2)^{-3/2} \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma^2}\right) \quad 2-6$$

où $r=|\mathbf{x}-\mathbf{Y}^{(n)}|$. L'échelle de longueur σ est utilisée comme un paramètre à déterminer afin de garantir une bonne résolution numérique et pour refléter la taille finie de particules.

Cette méthode est basée sur le travail original de Maxey & Patel (2001) où les auteurs ont fourni plus de détails sur le fondement théorique de la méthode. L'élément clé de l'expansion multipolaire standard est la solution des équations résultant d'un point-force menant au tenseur d'Oseen (eq. 2-5). Quand la fonction Dirac est remplacée par une enveloppe localisée de forces (eq. 2-6), l'élément clé reste le même. Par conséquent la solution d'un monopôle unique localisée doit être déterminée en résolvant l'équation de continuité (eq. 2-1) conjointement avec l'équation de conservation de quantité de mouvement (eq. 2-7) (écrite avec le monopôle uniquement)

$$0 = -\nabla p + \mu_f \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F}^{(n)} \Delta(\mathbf{x} - \mathbf{Y}^{(n)}) \quad 2-7$$

La solution de cette équation est décrite dans l'article de Maxey & Patel (2001). Le nouveau tenseur d'Oseen correspondant à $\Delta(\mathbf{x})$ devient alors

$$O_{ij}(\mathbf{x}, \sigma) = \frac{1}{8\pi\mu_f} \left(\frac{\delta_{ij}}{r} + \frac{x_i x_j}{r^3} \right) \operatorname{erf}\left(\frac{r}{\sigma\sqrt{2}}\right) + \left(\delta_{ij} - \frac{3x_i x_j}{r^2} \right) \left[\frac{\sigma^2}{8\pi\mu_f r^3} \operatorname{erf}\left(\frac{r}{\sigma\sqrt{2}}\right) - \frac{\sigma^4}{8\pi\mu_f r^2} \Delta(\mathbf{x}) \right] \quad 2-8$$

et la perturbation de l'écoulement induite par le monopôle \mathbf{F} est donnée par $u_i(\mathbf{x}) = F_j O_{ij}(\mathbf{x}, \sigma)$.

L'extension de la représentation pour inclure les termes d'approximation plus élevée est directe en suivant le même principe que le développement multipolaire standard. Par suite, les

équations du mouvement du champ fluide pour des particules sphériques en suspension dans un écoulement de Stokes sont décrites par eq. 2-2 en utilisant eq. 2-9 pour les deux premiers termes du développement.

$$f_i(\mathbf{x}, t) = \sum_{n=1}^N \left\{ F_i^{(n)} \Delta(\mathbf{x} - \mathbf{Y}^{(n)}) + G_{ij}^{(n)} \frac{\partial}{\partial x_j} \Delta'(\mathbf{x} - \mathbf{Y}^{(n)}) \right\}$$

2-9

Le terme de forçage dans le membre de droite de l'équation 2-2 devient une distribution spatiale de quantité de mouvement qui est due à la présence des particules qui se déplacent dans le fluide. Ce terme évolue dans le temps et l'espace pendant que les particules interagissent librement par l'intermédiaire des interactions hydrodynamiques. Les deux premiers termes du développement multipolaire, le monopôle (Stokeslet) et le dipôle (Stresslet et Rotlet) sont uniquement considérés.

L'intensité de la force d'interaction ou monopôle $\mathbf{F}^{(n)}$ est liée directement à la force appliquée au fluide, due à la présence d'une particule (source de quantité de mouvement). C'est la combinaison de l'effet de la gravité, de l'inertie et des forces extérieures (eq. 2-10).

$$\mathbf{F}^{(n)} = (m_p - m_f) \left(\mathbf{g} - \frac{d\mathbf{V}^{(n)}}{dt} \right) + \mathbf{F}_{\text{ext}}^{(n)}$$

2-10

\mathbf{g} est l'accélération de la gravité. $\mathbf{F}_{\text{ext}}^{(n)}$ représente les forces extérieures de volume appliquées sur la particule (forces magnétiques ou électriques ...).

$G_{ij}^{(n)}$ est un tenseur qui peut être décomposé en deux parties symétrique et antisymétrique ($G_{ij}^{(n)} = S_{ij}^{(n)} + A_{ij}^{(n)}$). La partie symétrique (appelée Stresslet) contribue à imposer une rotation solide et un taux de déformation $e_{ij}^{(n)}$ nul au sein du fluide occupé par la particule $V_p^{(n)}$ (eq. 2-11)

$$e_{ij}^{(n)} = \frac{1}{2} \int_{V_p^{(n)}} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \Delta'(\mathbf{x} - \mathbf{Y}^{(n)}) d^3\mathbf{x} = 0$$

2-11

La partie antisymétrique du dipôle $A_{ij}^{(n)} = 1/2 \epsilon_{ijk} T_k^{(n)}$ est reliée au couple extérieur appliqué à la particule (n) (eq. 2-12). Ceci est analogue à la relation entre les forces extérieures et la translation de la particule. Pour des particules non inertielle et non soumises à des couples extérieurs, la composante antisymétrique du dipôle est nulle.

$$\mathbf{T}^{(n)} = - (I_p - I_f) \left(\frac{d\Omega^{(n)}}{dt} \right) + \mathbf{T}_{\text{ext}}^{(n)}$$

2-12

m_p (*resp.* m_f) est la masse du volume de la particule (*resp.* fluide) et I_p (*resp.* I_f) est le moment d'inertie de la particule (*resp.* fluide occupé par le volume de la particule).

Les particules se déplacent librement, et les équations de leurs trajectoires sont résolues simultanément avec le fluide. Les vitesses de translation (eq. 2-13) et le taux de rotation (eq. 2-14)

sont obtenus par un filtrage spatial de la perturbation de vitesse induite par les particules. Les moyennes volumiques sont opérées avec les mêmes enveloppes Gaussiennes $\Delta(\mathbf{x}-\mathbf{Y}^{(n)})$ ou $\Delta'(\mathbf{x}-\mathbf{Y}^{(n)})$ utilisées pour la distribution des termes sources (eq. 2-6).

$$\mathbf{V}^{(n)}(t) = \int_{V_p^{(n)}} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \Delta(\mathbf{x} - \mathbf{Y}^{(n)}) d^3 \mathbf{x} \quad 2-13$$

$$\boldsymbol{\Omega}^{(n)}(t) = \int_{V_p^{(n)}} \nabla \times \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \Delta'(\mathbf{x} - \mathbf{Y}^{(n)}) d^3 \mathbf{x} \quad 2-14$$

La trajectoire de chaque particule est déduite par intégration de l'équation 2-15

$$\frac{d\mathbf{Y}^{(n)}}{dt} = \mathbf{V}^{(n)}(t) \quad 2-15$$

Quand deux particules sont placées simultanément dans le même champ fluide, elles sont soumises à l'effet des interactions hydrodynamiques mutuelles. La FCM permet le calcul direct de ces interactions hydrodynamiques en résolvant les équations de Stokes forcées par les deux particules. Du fait que les équations de Stokes sont linéaires, la perturbation de vitesse \mathbf{u} est la somme des perturbations de vitesse induite par chacune des particules $\mathbf{u}^{(1)} + \mathbf{u}^{(2)}$. Chaque perturbation de vitesse doit satisfaire l'équation de conservation de quantité de mouvement:

$$0 = -\nabla p^{(n)} + \mu_f \nabla^2 \mathbf{u}^{(n)} + \mathbf{F}^{(n)} \Delta(\mathbf{x} - \mathbf{Y}^{(n)}) + \dots \quad 2-16$$

avec $n=1$ ou $n=2$. Pour la particule correspondant à $n=1$, la vitesse lagrangienne $V^{(1)}(t)$ est obtenue en utilisant l'équation 2-17

$$\mathbf{V}^{(1)}(t) = \int_{V_p^{(1)}} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \Delta(\mathbf{x} - \mathbf{Y}^{(1)}) d^3 \mathbf{x} = \int_{V_p^{(1)}} [\mathbf{u}^{(1)}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{u}^{(2)}(\mathbf{x}, t)] \Delta(\mathbf{x} - \mathbf{Y}^{(1)}) d^3 \mathbf{x}$$

$$\mathbf{V}^{(1)}(t) = \langle \mathbf{u}^{(1)} \rangle_{Y^{(1)}} + \langle \mathbf{u}^{(2)} \rangle_{Y^{(1)}} \quad 2-17$$

où $\langle \rangle_{Y^{(1)}}$ indique la valeur moyennée sur tout le volume de la particule (1). D'une façon similaire la vitesse de la seconde particule est donnée par

$$\mathbf{V}^{(2)}(t) = \langle \mathbf{u}^{(1)} \rangle_{Y^{(2)}} + \langle \mathbf{u}^{(2)} \rangle_{Y^{(2)}} \quad 2-18$$

Les équations 2-17 et 2-18 mettent en évidence la prise en compte explicite, par la FCM, de la perturbation de vitesse induite par les particules voisines.

Détermination de σ et σ' :

Pour l'instant, les seuls paramètres du modèle qui restent ouverts sont les échelles caractéristiques σ et σ' des enveloppes sphériques Gaussiennes (Δ et Δ' respectivement). Ces paramètres sont liés au rayon a des particules par des expressions analytiques dérivées pour des particules isolées dans un fluide infini.

Quand une particule isolée sédimente sous l'effet de la gravité dans un fluide au repos avec une vitesse W_s , le monopole est connue, $\mathbf{F} = 6\pi\mu_f a \mathbf{W}_s$, et la perturbation de vitesse peut être représentée par le tenseur d'Oseen. En utilisant la perturbation induite par la force d'interaction, la perturbation de vitesse u_i est écrite dans l'eq. 2-19 en fonction de $O_{ij}(\mathbf{x}, \sigma)$ (eq. 2-8)

$$u_i(\mathbf{x}) = F_j O_{ij}(\mathbf{x}, \sigma) = 6\pi\mu_f a W_s O_{ij}(\mathbf{x}, \sigma)$$

2-19

La vitesse de la particule peut alors être calculée analytiquement d'après l'intégrale de volume du champ de vitesse fluide (eq. 2-13), et le résultat est le suivant

$$\mathbf{V} = \frac{a}{\sigma} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \mathbf{W}_s$$

2-20

Une identification de cette expression avec l'expression exacte de la vitesse de sédimentation de Stokes conduit à $\sigma = a\sqrt{\pi}$ (voir Maxey & Patel, 2001 pour plus de détails sur le calcul analytique).

Le rapport a/σ' est choisi de telle sorte à garantir un taux de déformation nul (eq. 2-11) à l'intérieur du volume occupé par la particule.

Cette condition est vérifiée exactement dans la limite d'un écoulement de Stokes, quand le rapport a/σ' est choisi tel que $a/\sigma' = (6\sqrt{\pi})^{1/3}$ (voir les détails dans Lomholt & Maxey, 2003). Ce choix permet de retrouver exactement la relation $\mathbf{T} = 8\pi\mu_o a^3 \mathbf{\Omega}$ où $\mathbf{\Omega}$ est évaluée en utilisant l'équation 2-14.

L'étude réalisée avec la FCM dans ce chapitre, porte uniquement sur les suspensions liquide/solide où l'on peut se permettre de négliger l'inertie des particules (de translation et de rotation). Dans le cas particulier où l'on néglige toute force d'interaction surfacique entre les particules, l'intensité des monopôles est strictement nulle. Plus de détails sur les calculs analytiques du modèle FCM, avec des validations bien détaillées de la méthode sont disponibles dans les travaux de Maxey & Patel (2001), Lomholt et al. (2002), Lomholt & Maxey (2003).

Algorithme :

En fixant σ et σ' , il ne reste aucun paramètre libre dans le modèle. Dans le cas où plusieurs particules interagissent, l'intensité de la partie symétrique du dipôle ne peut pas être prédite analytiquement. Un algorithme itératif basé sur une méthode de minimisation (type gradient conjugué, détaillé par Dance & Maxey (2003)) est utilisé de manière à renforcer un taux de cisaillement nul à l'intérieur du volume de la particule. En effet, le dipôle est basée sur la valeur locale moyenne du taux de déformation, et des itérations sont nécessaires pour obtenir une convergence des valeurs dues aux interactions mutuelles des perturbations de vitesse induites par les particules voisines.

L'algorithme résumant les différentes étapes du modèle Force Coupling Method (FCM) sur un pas de temps est le suivant:

1. On connaît la distribution spatiale des particules : $\mathbf{Y}^n(t)$ au début du pas de temps.
2. Estimation des forces et des couples agissant sur le fluide (eq. 2-10 et 2-12).
3. Résolution des équations de Stokes de la phase continue (eqs. 2-1 et 2-2) qui couplent instantanément les interactions entre les particules. Dans cette résolution, un algorithme itératif est utilisé pour déterminer l'intensité respective des Stresslets (eq. 2-11).
4. Calcul des vitesses de translation $\mathbf{V}^{(n)}$ et de rotation $\mathbf{\Omega}^{(n)}$ des particules d'après les champs de vitesse \mathbf{u} et de vorticité $\mathbf{\omega}$ déterminés dans le fluide (eqs. 2-13 et 2-14).
5. Détermination des nouvelles positions des particules par intégration de (eq. 2-15)

2-2 Avantages

Il est possible de résoudre analytiquement les interactions hydrodynamiques générées par l'introduction de particules dans un écoulement de Stokes (méthode de réflexion, Kynch (1959), méthode des forces induites, Mazur (1987) ...). Les équations correspondant à ce problème sont d'une redoutable complexité quand il s'agit de les résoudre avec des conditions aux limites sur les surfaces mobiles des particules. Ceci limite le calcul à l'ordre de quelques particules. La simulation numérique directe (DNS) des écoulements diphasiques est possible et elle conduit à une solution exacte du couplage entre le mouvement du fluide et celui des particules (Hu, 1996). Dans cette méthode, les conditions aux limites de non glissement sur les particules en mouvement sont appliquées exactement sur la frontière des particules correspondant à une frontière du maillage. Cependant les temps de calcul prohibitifs liés à la déformation, au raffinement automatique et la reconstruction du maillage à chaque pas de temps rendent cette approche très limitée en nombre de particules suivies. Par conséquent, plusieurs approches numériques (DLM, SD, FCM...) se sont développées sur l'idée commune d'utiliser des maillages fixes pour surmonter les limitations de la simulation directe. Ces méthodes sont basées sur l'introduction de nouveaux termes dans l'équation de transport pour modéliser la présence des particules, tout en forçant le fluide à respecter de manière approchée les conditions aux limites sur les interfaces des particules. La méthode DLM (Distributed Lagrange Multiplier) fut initialement développée par Glowinski et al. (1999) et Patankar et al. (2000). Elle est particulièrement bien adaptée pour suivre des corps de forme irrégulière. Cette méthode force le fluide à suivre le mouvement des particules par l'ajout de multiplicateurs de Lagrange au cœur de l'écoulement. Jusqu'à maintenant cette méthode est restée limitée à un nombre de particules de l'ordre de plusieurs centaines (utilisée avec un maximum de 1024 sphères pour un lit fluidisé tridimensionnel, Pan et al. 2002). La méthode "Stokesian Dynamics" (Brady & Bossis, 1988) est basée sur la séparation entre les différentes échelles impliquées dans un écoulement dispersé (échelle locale au niveau de la particule et échelle macroscopique). Les interactions hydrodynamiques du champ lointain sont prises en compte par les premiers termes de la série multipolaire de perturbation de vitesse et les interactions de courte distance par l'application de forces de lubrification par paires. Cette méthode était initialement très limitée en nombre de particules et fut améliorée par la suite dans le travail de Sierou & Brady (2001) pour passer à un nombre de particules de l'ordre de 10^3 . La FCM utilisée dans notre travail se situe dans le même esprit (§ 2-1). Dans cette approche, le fluide est présent partout et les particules sont remplacées par une distribution spatiale de quantité de mouvement qui va forcer le fluide à se déplacer localement comme si une particule était présente. L'écoulement n'est donc pas résolu exactement, car il n'y a pas d'interface physique entre la phase continue et les inclusions sur laquelle la condition d'adhérence serait appliquée. Par contre, cette méthode présente plusieurs avantages qui justifient son utilisation dans le cas des suspensions.

1. Les simulations utilisant la méthode FCM sont faites sur des maillages fixes qui ne dépendent pas du mouvement des particules (suivi de 4000 particules pour une concentration de 15%). Ceci permet une réduction importante du temps de calcul.
2. Cette approche est très flexible notamment à deux niveaux. D'un côté, elle permet l'ajout de forces d'interactions inter-particulaires en les cumulant dans le terme de monopôle pour étudier différents phénomènes physiques tels l'agrégation, les interactions électromagnétiques ou d'autres. D'un autre côté, la forme des particules peut être paramétrée dans l'enveloppe $\Delta(\mathbf{x}-\mathbf{Y}^{(n)})$, ce qui permet par exemple d'étudier des particules ellipsoïdale (Liu, 2004).
3. Elle est très facilement transposable au cas où l'inertie du fluide reste modérée. On peut utiliser exactement la même démarche sauf que l'on résout les équations de Navier-Stokes

à la place des équations de Stokes. Le passage aux équations de Navier-Stokes dans ce document n'est pas discuté car toute notre étude a été faite à très faible nombre de Reynolds. Climent & Maxey (2003) ont utilisé la FCM pour étudier la sédimentation de particules dans un écoulement à nombre de Reynolds fini.

4. Les équations de l'écoulement dans le modèle FCM peuvent être résolues indifféremment dans un code de simulation utilisant une formulation en différences finies, volumes finis, éléments finis ou des méthodes spectrales. Les simulations effectuées pour notre étude sont basées sur des configurations de suspension homogène. Nous avons donc tiré parti des conditions périodiques dans les trois directions afin d'utiliser une méthode spectrale avec transformées de Fourier rapides. Ces algorithmes peuvent être facilement programmés sur un ordinateur parallèle, et ceci permet de simuler des domaines de grande taille jusqu'à 256^3 (voire 512^3) nœuds de calcul sur 16 processeurs. La version originelle du code pour les équations de Stokes étant développée en Fortran, je l'ai complètement parallélisée en utilisant la bibliothèque MPI (Message Passing Interface).

2-3 Validation sur un écoulement cisailé

En absence de source de perturbation externe, la vitesse de translation \mathbf{U} et de rotation $\boldsymbol{\omega}$ d'un écoulement cisailé pur sont décrites par les équations suivantes au point \mathbf{x}

$$U_i(\mathbf{x}) = \gamma_{ij}x_j \qquad \boldsymbol{\omega} = \frac{1}{2}\nabla \times \mathbf{U}$$

2-21

où γ_{ij} est le tenseur de cisaillement de l'écoulement porteur non perturbé (écoulement linéaire).

La méthode FCM étant seulement un modèle de simulation, il faut donc la valider sur des cas génériques d'interactions hydrodynamiques entre particules de façon à évaluer la précision de ces simulations. Le modèle avec le monopôle seul a été validé pour une particule isolée en sédimentation dans le travail de Maxey & Patel (2001). L'effet additionnel du dipôle fut validé séparément sur un écoulement autour d'une sphère isolée et autour de deux particules soumises à la gravité dans le travail de Lomholt & Maxey (2003). Nous validons maintenant dans notre travail le modèle dans le cas particulier d'un écoulement de cisaillement pur qui est l'écoulement de base de l'étude statistique à venir. Dans ce cas, $\gamma_{12}=\gamma$ est l'unique composante non nulle du tenseur des gradients de vitesses, et $\boldsymbol{\omega}$ est perpendiculaire au plan de cisaillement $\boldsymbol{\omega} = (0,0,-\gamma/2)$. Les indices utilisés pour toute l'étude réfèrent aux directions suivantes: 1 celle de l'écoulement, 2 celle du gradient de vitesse et 3 celle de la vorticit .

Interaction d'une particule avec l'écoulement

Dans un écoulement de vitesse non perturbée $\mathbf{U}(\mathbf{x})$ contenant une sphère isolée en suspension de rayon a et centrée en \mathbf{x}_0 , la vitesse de l'écoulement en un point du fluide situé en \mathbf{x} s'obtient d'après Batchelor & Green (1972a), par la relation :

$$u_i(\mathbf{x}) = U_i(\mathbf{x}_0) + E_{ij}X_j + \varepsilon_{ijk}\omega_jX_k + \hat{u}_i(\mathbf{X}, a) \tag{2-22}$$

où $\mathbf{X} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_0$, $X = |\mathbf{X}|$, et E_{ij} est la partie symétrique du tenseur des gradients de vitesse du fluide non perturbé. Dans le cas d'un écoulement de cisaillement pur d'intensité γ , E_{ij} s'écrit sous la forme :

$$E_{ij} = \frac{1}{2}(\gamma_{ij} + \gamma_{ji}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \gamma & 0 \\ \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & ijk = 123, 231, 312 \\ -1 & ijk = 132, 321, 213 \\ 0 & \text{autres cas} \end{cases} \tag{2-23}$$

La perturbation de vitesse $\hat{\mathbf{u}}$ induite en \mathbf{x} est alors déterminée par l'équation suivante :

$$\hat{u}_i(\mathbf{X}, a) = E_{ij}X_j \left\{ -\delta_{ik} \frac{a^5}{X^5} + \frac{X_iX_k}{X^2} \left(\frac{-5a^3}{2X^3} + \frac{5a^5}{2X^5} \right) \right\} \tag{2-24}$$

La Figure 2-3a illustre une coupe transversale (x_1, x_2) de la perturbation de vitesse du fluide autour de la particule en suspension. La particule ayant la même densité que le fluide, le monopôle est identiquement nul. Le champ vitesse de la perturbation est créé uniquement par le forçage du dipôle. Les lignes de courant correspondant à la perturbation de vitesse analytique (eq. 2-24) sont également tracées sur la même figure.

Le cercle indique la place occupée effectivement par la particule solide. On remarque que les perturbations de plus grande amplitude sont orientées suivant les angles $\pm 45^\circ$ (caractère élongationnel de la perturbation de l'écoulement induite par le Stresslet).

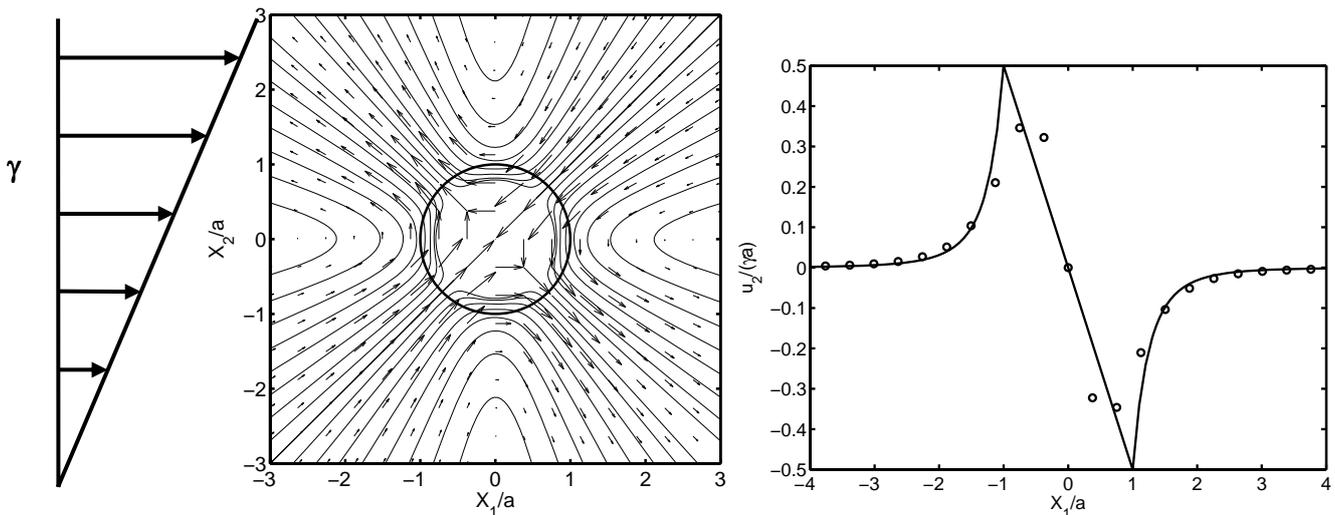


Figure 2-3

- a) Champ de perturbation de vitesse du fluide dû à la présence d'une particule dans un cisaillement pur.
- b) Perturbation de la vitesse verticale u_2 suivant la direction x_1 passant par le centre de la particule.

Sur la Figure 2-3b, la perturbation de vitesse calculée numériquement est comparée au profil de vitesse dérivant de la solution analytique (eq. 2-24). La décroissance en $1/r^2$ est bien reproduite. On remarque que le modèle est satisfaisant ; les courbes analytique et numérique se rapprochent de plus en plus au fur et à mesure que l'on s'éloigne de la surface de la particule. L'accord est très bon à partir de $X_1 > 1.25a$.

Interaction de deux particules

Quand un écoulement contient un grand nombre de particules en suspension, il est impossible de prédire théoriquement leurs interactions. Cependant, Batchelor & Green (1972a) ont déterminé les expressions analytiques correspondant aux interactions hydrodynamiques entre deux sphères solides en suspension dans un fluide cisailé (Figure 2-4).

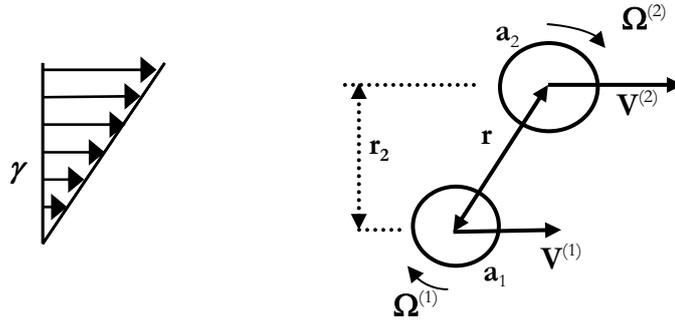


Figure 2-4

Définitions concernant deux particules dans un écoulement cisailé avec leur vitesse absolue de translation et de rotation

Pour deux particules de rayons a_1 et a_2 placées dans un écoulement cisailé, de vitesses de translation $\mathbf{V}^{(1)}$, $\mathbf{V}^{(2)}$ et de vitesse de rotation $\mathbf{\Gamma}^{(1)}$, $\mathbf{\Gamma}^{(2)}$ respectivement, l'expression analytique de la vitesse relative de translation des particules est donnée par l'équation 2-25:

$$\mathbf{V}(\mathbf{r}) = \mathbf{V}_b - \mathbf{V}_a = \varepsilon_{ijk} \omega_j \mathbf{r}_k + r_j E_{ij} - \left\{ A \frac{\mathbf{r}_i \mathbf{r}_j}{r^2} + B \left(\delta_{ij} - \frac{\mathbf{r}_i \mathbf{r}_j}{r^2} \right) \right\} r_k E_{jk}$$

2-25

où $\mathbf{r} = (r_1, r_2, r_3)$ permet de repérer le vecteur de centre à centre entre les deux particules. Les quantités scalaires adimensionnelles A et B sont fonctions uniquement de la distance adimensionnelle r/a_1 et du rapport des rayons a_2/a_1 . Cette forme de la vitesse relative a été choisie par Batchelor and Green (1972a) afin de répercuter uniquement sur A et B l'effet de la position relative des particules sur les composantes radiale et tangentielle de la vitesse.

Quant à la vitesse de rotation $\mathbf{\Omega}$ de chaque particule, elle est donnée par l'équation 2-26 :

$$\mathbf{\Omega}_i(\mathbf{r}) = \omega_i + C \varepsilon_{ijk} E_{kl} \frac{\mathbf{r}_l \mathbf{r}_j}{r^2}$$

2-26

où C est également une fonction adimensionnelle de r/a_1 et de a_2/a_1 uniquement.

La perturbation de vitesse induite par les interactions hydrodynamiques est évaluée par rapport à la situation de champ fluide non-perturbé où la vitesse relative de translation serait proportionnelle à la position relative des particules $\gamma r_2 \mathbf{i}_1$. Quant à la perturbation de la vitesse relative en rotation, elle est évaluée par rapport à la rotation d'ensemble qui force les particules à avoir une vitesse de rotation solide $\boldsymbol{\omega}$. Les perturbations des deux vitesses relatives s'expriment de la façon suivante :

$$\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{r}) = \mathbf{V}(\mathbf{r}) - \gamma \mathbf{r}_2 \mathbf{i}_1 = -\gamma \left\{ \begin{array}{l} r_2 \left(\frac{B}{2} + \frac{r_1^2}{r^2} (A - B) \right) \\ r_1 \left(\frac{B}{2} + \frac{r_2^2}{r^2} (A - B) \right) \\ \frac{r_1 r_2 r_3}{r^2} (A - B) \end{array} \right\}$$

2-27

$$\hat{\mathbf{\Omega}}(\mathbf{r}) = \mathbf{\Omega}(\mathbf{r}) - \boldsymbol{\omega} = -\gamma \frac{C}{2} \left\{ \begin{array}{l} \frac{r_1 r_3}{r^2} \\ \frac{r_2 r_3}{r^2} \\ \frac{r_2^2 - r_1^2}{r^2} \end{array} \right\}$$

2-28

Il existe une solution analytique générale pour les quantités A, B et C dans le cas où les particules sont suffisamment éloignées: c'est la solution dans l'approximation de champ lointain (eq. 2-29). Selon Batchelor & Green (1972a), la vitesse totale induite par la présence de deux particules de rayon a_1 et a_2 peut s'écrire comme la superposition du champ de vitesse induit par la présence de a_1 toute seule et de la modification qu'apporterait l'ajout de la particule a_2 dans son voisinage. Le résultat de leur calcul a conduit aux expressions suivantes pour A, B et C:

$$A = \frac{5}{2} \frac{(a_1^3 + a_2^3)}{r^3} - \frac{1}{2} \frac{3(a_1^5 + a_2^5) + 5a_1^2 a_2^2 (a_1 + a_2)}{r^5} + \frac{25a_1^3 a_2^3}{r^6} + O\left(\frac{(a_1 + a_2)^6}{r^6}\right)$$

$$B = \frac{a_1^5 + a_2^5}{r^5} + \frac{5}{3} \frac{a_1^2 a_2^2 (a_1 + a_2)}{r^5} + O\left(\frac{(a_1 + a_2)^6}{r^6}\right)$$

$$C = \frac{25a_2^3}{2r^3} - \frac{25a_1^3 a_2^3}{4r^6} + O\left(\frac{(a_1 + a_2)^6}{r^6}\right)$$

2-29

Si les particules sont proches, la solution exacte n'est plus analytique mais résulte d'un calcul numérique dont les valeurs ont été évaluées dans le travail de Lin et al. (1970) et tabulées dans Batchelor & Green (1972a) pour $a_1 = a_2$ et dans la Thèse de Pesché (LPMC, Nice) pour $a_2 = 2a_1$.

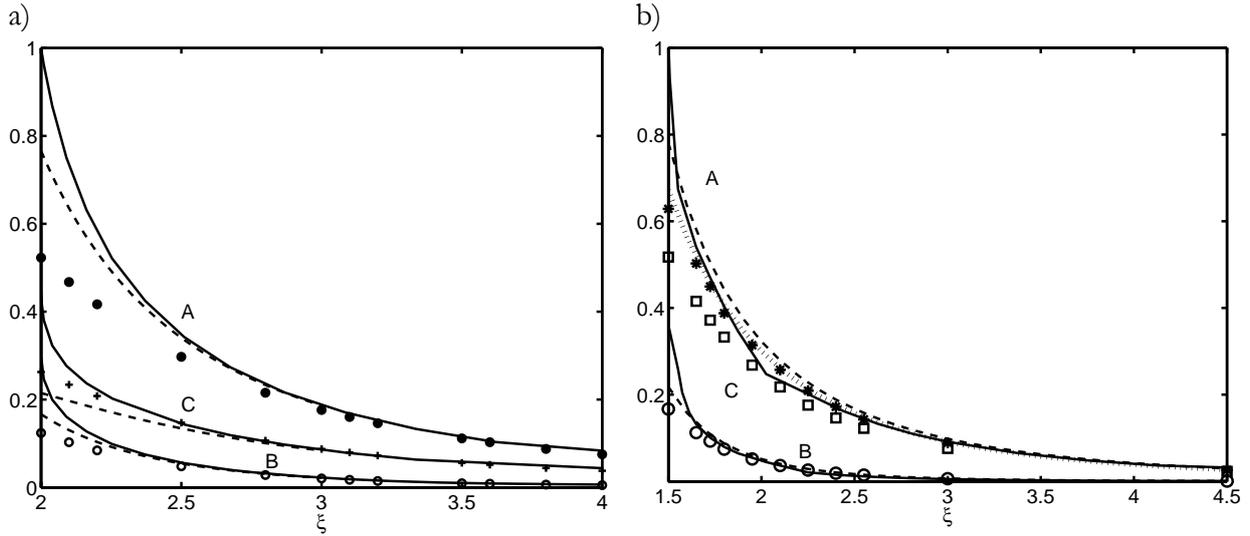


Figure 2-5

A, B et C en fonction de la distance entre les centres de deux sphères

- a) $\xi=r/a$ pour deux sphères identiques de rayon a ; Trait plein: solution exacte (Batchelor and Green, 1972); Trait pointillé: approximation champ lointain (eq. 2-29); \bullet \circ $+$: A, B et C avec FCM dipôle
- b) $\xi= r/a_2$ pour deux sphères inégales telles que $a_2=2a_1$; Trait plein: solution exacte (Pesché, 1998); Trait pointillé: approximation champ lointain (eq. 2-29); \square , \circ et $*$: A, B et C avec FCM dipôle.

Les Figure 2-5a et b montrent l'évolution de A, B et C en fonction de la distance r entre les centres des deux particules. La Figure 2-5a correspond au cas où les particules ont la même taille ($a_1=a_2$). C'est le cas de suspension monodisperse. On remarque que lorsque les particules sont séparées par une distance supérieure à 25% du rayon, les résultats obtenus par la méthode FCM sont en très bon accord avec les valeurs données par la solution exacte, et par la solution du champ lointain. Dans le cas de l'écoulement cisailé, les trajectoires de particules sont amenées à interagir jusqu'au contact (qui n'est théoriquement pas possible en écoulement de Stokes pour des particules parfaitement lisses). Il est donc important de bien reproduire les interactions hydrodynamiques lorsque les interfaces sont très proches. Pour améliorer la précision de la simulation et éviter les recouvrements numériques, nous avons ajouté des forces de répulsion et de lubrification qui seront discutées séparément dans la suite du document (Respectivement § 2.4 et § 3.5)

2-4 Force de répulsion

Pour éviter des temps de calcul considérables, la plupart des méthodes numériques utilisées pour prédire l'écoulement autour de particules mobiles ont simplifié la prise en compte des interactions hydrodynamiques lors du rapprochement des interfaces (Dance et al. 2004, Glowinsky et al. 1999, Dralter & Schowalter 1996). Dans ce genre de simulations, l'utilisation d'une force de répulsion à partir d'une distance caractéristique permet à la fois d'empêcher le recouvrement des interfaces tout en évitant l'utilisation d'un pas de temps qui tendrait vers zéro pour des particules très proches. Ces barrières de répulsion peuvent être implantées dans des simulations sous différentes formes: barrière de lubrification, de force ou de vitesse. Pour les deux dernières, leur implantation dans la FCM et la discussion de leur effet sur le comportement micro et macroscopique de la suspension en sédimentation sont détaillées dans le travail de Dance et al. (2004). La force de lubrification sert à restituer les effets visqueux lors du drainage du film fluide interstitiel. Elle sera discutée ultérieurement (§3.5).

Pour éviter le recouvrement, nous avons tout d'abord appliqué une barrière répulsive de force aux paires de particules en rapprochement. Il s'agit d'ajouter des forces potentielles notées \mathbf{F}_b au terme de monopôle dès que la distance r entre les centres de deux particules est inférieure à une distance de référence R_{ref} selon l'expression suivante :

$$\mathbf{F}_b = -\frac{F_{ref}}{2a} \left[\frac{R_{ref}^2 - r^2}{R_{ref}^2 - 4a^2} \right]^2 \mathbf{r}$$

2-30

où F_{ref} est un paramètre qui a la dimension d'une force et R_{ref} correspond à l'épaisseur de la barrière de répulsion. \mathbf{r} est le vecteur distance porté par la ligne des centres des particules se rapprochant. Ecrite ainsi, cette force est très faible à la limite de la barrière ($r=R_{ref}$) et atteint sa valeur maximale F_{ref} quand les particules se rapprochent du contact (en supposant que les particules ne s'interpénètrent pas). La raideur spatiale de la force de répulsion dans la phase de rapprochement est d'autant plus grande que l'exposant de $(R_{ref}^2 - r^2)$ est élevé. Une force ayant un profil similaire a été également utilisée par Brady & Schowalter avec la méthode Stokesian Dynamics.

La barrière de force est ajoutée par paires de particules tout en satisfaisant la troisième loi de Newton (forces égales et opposées). L'influence des paramètres F_{ref} et R_{ref} est d'abord testée sur le comportement d'une paire de particules (Figure 2-6). L'interpénétration des deux particules est évitée pour une force de référence $F_{ref} > 0.2$. Quand R_{ref} est réduite de $2.2a$ à $2.02a$, la distance minimale de séparation entre les particules diminue, sans induire un changement notable sur la trajectoire relative des particules, surtout dans la phase d'éloignement. Les simulations des suspensions monodisperses sont réalisées dans ce travail avec $F_{ref}=0.3$ et $R_{ref}=2.2a$ (ce qui est équivalent à une distance de séparation égale à 20% du rayon). Dans le cas de suspensions bidisperses le paramètre F_{ref} dépend de la taille relative des particules (§4).

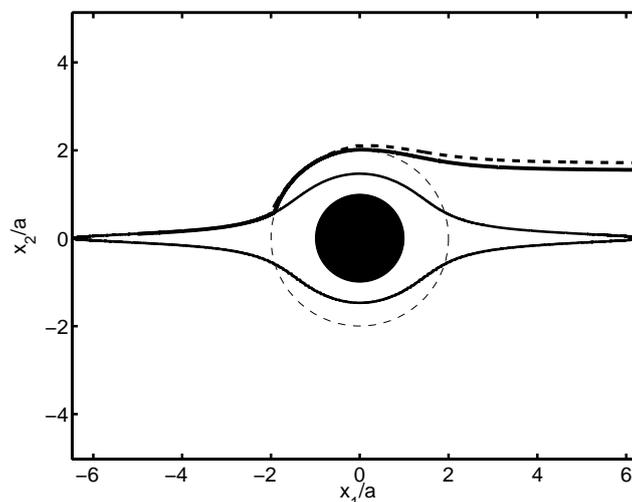


Figure 2-6

Trajectoires relatives de deux particules dans un écoulement cisailé pour différents paramètres de la force répulsive.

Position relative initiale $(-5a, 0.1a, 0)$.

Disque noir: particule de référence. Cercle pointillé: limite du recouvrement des deux particules ($r=2a$).

Trait plein fin: $F_{ref}=0$. Trait plein gras: $F_{ref}=0.3$, $R_{ref}=2.02$, $dt\gamma=2.10^{-3}$. Trait pointillé: $F_{ref}=0.3$, $R_{ref}=2.2$, $dt\gamma=10^{-2}$.

Même si à l'origine cette force a pour unique objectif d'empêcher les particules de se recouvrir lors de la simulation numérique, elle peut être apparentée à des interactions physiques réelles. Dans le cas de suspensions liquide-solide, quand les particules sont très proches ($r \approx 10^{-2}a$), même si elles ne sont pas initialement chargées, elles sont en général soumises à des forces de

type DLVO qui dérivent d'une combinaison des effets attractifs de Van der Waals et de répulsion électrostatique (double couche électrique). Cette force répulsive aide à stabiliser les suspensions en empêchant la formation d'agrégats de particules. Le rôle que peuvent jouer des interactions surfaciques de courte distance comme la force attractive de Van der Waals est écranté par les effets des interactions hydrodynamiques et de la répulsion. Ceci est vrai pour les suspensions où les forces de répulsion électrostatiques (proportionnelles à la permittivité $\epsilon_r \epsilon_0$ et au carré du potentiel de surface ψ^2) dominant sur les forces attractives de Van der Waals (reliées à la constante de Hamaker Λ).

Par exemple, une suspension de sphères de Polystyrène dans un mélange fluide eau-glycérol satisfait toutes les conditions des suspensions étudiées dans ce chapitre (faible inertie, gravité, interactions DLVO...). Les caractéristiques d'une telle suspension sont résumées dans le Tableau 2-1.

Avec ces caractéristiques, on remarque d'après l'amplitude des rapports $2\pi\epsilon_r\epsilon_0\psi^2a/\Lambda \approx 15$ et $2\pi\epsilon_r\epsilon_0\psi^2a/\mu_f\gamma a^3 \approx 3.5$ que l'énergie de répulsion électrostatique l'emporte sur les énergies d'attraction de Van der Waals ou de rapprochement induit par le cisaillement. Les valeurs des nombres adimensionnels sont bien situées dans la gamme qui correspond à notre étude.

Diamètre des particules	$2a$	$2\mu\text{m}$
Taux de cisaillement	γ	1s^{-1}
Potentiel de surface des particules	ψ	4mV
Longueur de Debye	κ^{-1}	88\AA
Permittivité électrique du milieu	$\epsilon_r\epsilon_0$	$5.9.10^{-10}\text{C}^2\text{Jm}^{-1}$
Viscosité du fluide	μ_f	4.10^{-3}Pa.s
Densité des particules et du fluide	$\rho_p = \rho_f$	1.126Kg.m^{-3}
Répulsion/Attraction électrostatique	$2\pi\epsilon_r\epsilon_0\psi^2a / \Lambda$	15
Répulsion électrostatique / Rapprochement par le cisaillement	$2\pi\epsilon_r\epsilon_0\psi^2a / \mu_f\gamma a^3$	3.5
Nombres d'Archimède / Reynolds	Ar/Re	0.0085
Nombre de Stokes	St	$2.4.10^{-7}$
Nombre de Reynolds	Re	10^{-6}
Nombre de Péclet	Pe	160

Tableau 2-1

Propriétés physiques d'une suspension de particules en Polystyrène dans un mélange fluide eau-glycérol 50% contenant 10^{-3} mole/l de KCl

D'autre part, l'effet de rugosité de surface et de mouvement Brownien résiduel peuvent être aussi non négligeables pour des particules de petite taille $O(1\mu\text{m})$. Ces phénomènes contribuent également à la répulsion des particules et peuvent être simplement modélisés par une force répulsive, même si l'intensité et l'expression exacte de cette force de répulsion n'est pas vraiment connue.

Quand les particules sont suffisamment loin ($r > R_{ref}$), la barrière de répulsion est désactivée, et le mouvement des particules ne sera contrôlé que par les interactions de dipôle. Quant au monopôle, il est toujours nul car les forces volumiques et extérieures sont négligeables (eq. 2-10), et devient égal à F_b uniquement pour $r < R_{ref}$. Ce traitement simplifié des interactions de particules très proches du contact réduit la précision du modèle et limite l'étude à des concentrations modérées ($\phi < 20\%$). Dans le cas de la sédimentation de suspension, Dance et al. 2004 ont montré que les résultats macroscopiques dépendent peu du traitement des interactions à courte distance.

Nous avons également fait des tests sur la dépendance des résultats statistiques vis-à-vis de F_b (Ces résultats seront mentionnés dans le § 3-4).

2-5 Information sur les simulations

Les simulations sont réalisées dans une boîte cubique de largeur L maintenue constante pendant toute l'étude ($L=2\pi$). Les particules ont un diamètre discrétisé sur environ six mailles ($a=1.5 \pi^{1/2} \Delta x$). La taille des particules étant constante, différentes concentrations sont obtenues en faisant varier le nombre de particules suivies (4000 particules correspondant à une concentration volumique de 15%).

Les équations de l'écoulement de Stokes étant linéaires, seule la perturbation de vitesse induite par la présence de toutes les particules (contribution des Stresslets) est calculée, et ensuite superposée à la vitesse de l'écoulement moyen $U_1=\gamma x_2$. Des conditions périodiques sont imposées sur les faces du domaine de simulation afin de maintenir l'homogénéité de la suspension. La particule qui quitte la boîte de simulation par la face supérieure (*resp.* inférieure) est réintroduite dans la face inférieure (*resp.* supérieure) en retranchant (*resp.* ajoutant) la vitesse γL qui correspond au saut de vitesse de l'écoulement moyen. Ceci revient à implanter le cisaillement d'une façon dynamique suivant la méthode de Lees-Edwards (Allen & Tildesley, 1987), comme dans d'autres études numériques traitant des suspensions cisillées (Marchioro & Acrivos (2001), Brady & Bossis (1985)).

Le suivi Lagrangien des particules est réalisé à l'aide du schéma d'Adams-Bashforth d'ordre 4. La taille de la particule et l'intensité du cisaillement sont les échelles de longueur et de temps caractéristiques (respectivement a et γ^{-1}) que nous avons choisies pour adimensionner les différentes quantités statistiques.

Nous avons réalisé deux types de simulation pour décrire le comportement macroscopique de la suspension cisillée :

- "statique" - simulation où les statistiques sont calculées sur une série indépendante de distribution aléatoire de particules
- "dynamique" - simulation où les statistiques sont calculées au cours de l'évolution des particules dans le temps. Cette situation est évidemment la plus proche de la réalité.

Une simulation statique peut paraître inhabituelle. Pourtant elle est possible car dans les équations de Stokes où les interactions hydrodynamiques ne dépendent que des positions relatives des particules. Ces simulations correspondent à un modèle de microstructure parfaitement aléatoire et homogène. Elle consiste à générer plusieurs configurations indépendantes de particules aléatoirement distribuées. Ceci revient à négliger les réorganisations possibles induites par le cisaillement. Le calcul des interactions hydrodynamiques pour chaque configuration se fait selon les équations 2-2, 2-10, 2-11 et 2-12 fournissant le champ de vitesse dans le fluide et les vitesses des particules.

Par contre, une simulation dynamique est basée sur l'évolution dans le temps des trajectoires des particules de la suspension. Le mouvement des particules totalement corrélé avec le mouvement du fluide local est déterminé d'après les équations 2-15, 2-13 et 2-14. Les trajectoires sont intégrées avec un pas de temps constant $dt=5.10^{-3}\gamma^{-1}$, ce qui correspond en moyenne à une décroissance de la distance interparticulaire de 1% du rayon à chaque pas de temps. Nous avons réalisé les simulations pendant un temps t/γ proportionnel à $100\phi^{-1/3}$. Ce

temps qui dépend de la concentration volumique ϕ est estimé afin que chaque particule subisse un nombre suffisant d'interactions avec d'autres particules et permettre la convergence des statistiques (la quantité la plus critique étant surtout le coefficient d'auto-diffusion). D'ailleurs, il a été clairement mis en évidence dans la littérature qu'une suspension met un temps très long avant d'atteindre un régime diffusif pour le transport des particules (Sierou & Brady 2004).

Nous avons utilisé un maillage de 128^3 pour la plupart des simulations afin de réduire l'effet des images périodiques de la suspension (le calcul de la perturbation de vitesse générée par une force $\mathbf{F}=6\pi\mu\mathbf{V}_0$ appliquée sur une particule isolée dans cette boîte donne une vitesse $\mathbf{V}=0.941\mathbf{V}_0$; en effet la perturbation de vitesse décroît en $1/r$ pour le monopôle donc la précision sera encore meilleure dans le cas du dipôle seul en écoulement cisailé dont la perturbation décroît en $1/r^2$). Les résultats statistiques se sont avérés indépendants des conditions initiales pour cette taille de maillage. Par contre, les résultats obtenus pour un maillage de 64^3 sont à prendre avec précaution car il faut alors moyenner plusieurs réalisations de simulations dynamiques d'une même suspension en changeant la distribution initiale des particules pour garantir des résultats équivalents à ceux réalisés dans un maillage 128^3 .

2-6 Parallélisation MPI

La version initiale du code était séquentielle (exécutable sur un seul processeur) écrite en Fortran F90. J'ai mené la parallélisation de la version du code destinée à résoudre les équations de Stokes en collaboration avec l'Institut du Développement et des Ressources en Informatique Scientifique (IDRIS), et avec Nicolas Renon au Centre Interuniversitaire de Calcul de Toulouse (CICT) que je tiens particulièrement à remercier.

MPI ou "*Message Passing Interface*" est une norme définissant une bibliothèque de fonctions sous un protocole de communications. Il permet d'exécuter différentes parties d'un programme sur plusieurs processeurs simultanément, communiquant ensemble par passage de messages, avec une grande performance, portabilité et extensibilité. Toutes les variables du programme sont privées et résident dans la mémoire locale allouée à chaque processus. Des commandes (également appelées sous-programmes) particulières permettent aux processeurs d'échanger des informations entre eux.

La parallélisation du code est réalisée en divisant la boîte de simulation en tranches parallèles au plan de cisaillement. Le nombre de tranches est un multiple de 2 pour garantir le fonctionnement efficace des transformées de Fourier rapides (FFT). La stratégie de parallélisation que nous avons choisie consiste à répartir le champ fluide des différentes tranches sur les processeurs, et de garder toutes les variables concernant les particules (positions, vitesses...) communes et accessibles à tous les processeurs. Les perturbations de vitesse dans un champ fluide n'étant connue que localement dans le processeur correspondant, il faudra mettre en communication tous les processeurs à chaque fois qu'un calcul sur les particules a lieu (intégration du champ vitesse fluide eq. 2-13 et 2-14).

Les différentes étapes du code parallélisé sont les suivantes:

1. Initialisation de l'environnement MPI à l'aide de `MPI_INIT()`
2. Les opérations effectuées avec MPI portent sur des communicateurs. `MPI_COMM_WORLD` est celui utilisé dans notre cas (c'est le communicateur par défaut).

3. Division en processeurs et attribution d'un rang à chaque processeur à l'aide des fonctions `MPI_COMM_SIZE ()` et `MPI_COMM_RANK ()`.
4. Création de plans fftw à l'aide des commandes spéciales pour MPI: `rfftwnd_f77_local_sizes ()` et `rfftwnd_f77_create_plan ()`.
5. Répartition des mailles: les indices de mailles dans la direction de l'écoulement et du gradient de vitesse vont de 1 jusqu'au nombre maximal de mailles n_1 . Dans la direction de la vorticit e suivant laquelle le domaine est divis e en tranches, les indices de mailles sont locaux. Un indice local k est tel que

$$(no_p - 1) \cdot \frac{n_1}{N_p} + 1 \leq k < no_p \cdot \frac{n_1}{N_p}$$

o u no_p est le num ero du processeur et N_p est le nombre total de processeurs.

6. A l'instant t_n , le calcul de champ de vitesse du fluide perturb e et les all es-retours entre l'espace de Fourier et l'espace physique ont lieu s epar ement dans chaque processeur.
7. Communications collectives du champ de perturbation de vitesse entre tous les processeurs   l'aide de la fonction `MPI_ALL_REDUCE ()`
8. Tous les processeurs effectuent les m emes op erations sur les particules: calcul de \mathbf{V} et de $\mathbf{\Omega}$   l'aide des  quations 2-13 et 2-14, d eplacement par l' equation 2-15 ainsi que les quantit es statistiques (vitesses moyennes, variance de d eplacement...).
9. Retour   l' etape 6.

A la fin du programme, la fermeture de l'environnement MPI est effectu ee   l'aide de la commande `MPI_FINALIZE ()`.

La Figure 2-7 montre le gain de temps $t_{s equentiel}/t_{parall ele}$, appel e encore speed-up, obtenu en fonction du nombre de processeurs utilis es par le code parall elis e   l'aide de MPI. Id ealement, le temps de calcul du code parall elis e devrait  tre  gal au temps s equentiel divis e par le nombre de processeurs. Mais il y a une partie du temps de calcul qui est perdue pour l'intercommunication des processeurs entre eux. L'augmentation en nombre de processeurs permet un gain au niveau du temps de calcul, mais on observe une diminution de la performance avec l'augmentation du temps n ecessaire pour la communication entre les processeurs. Ceci est confirm e par le fait que le raffinement du maillage (essai   64^3 et 128^3) entra ne des performances du code parall ele plus int eressantes : plus de temps d edi e au calcul par rapport aux communications.

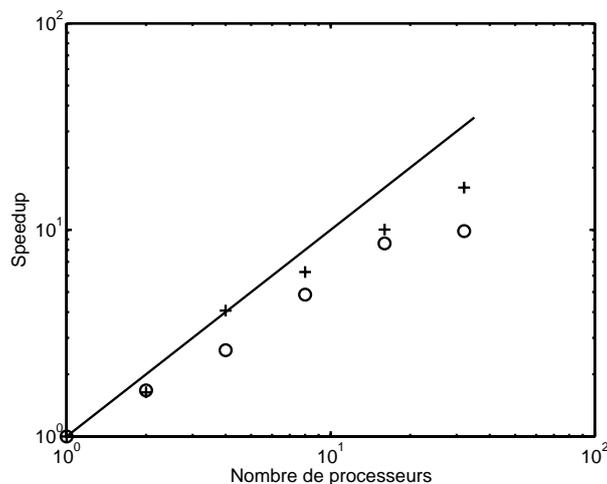


Figure 2-7

Gain de temps du code parall elis e avec MPI par rapport au code s equentiel en fonction du nombre de processeurs utilis es. Calcul r ealis e sur une machine IBM Power4 (IDRIS) avec une seule particule dans le champ fluide.

Trait plein: gain id eal ; + et o: gain des simulations avec un maillage de 128^3 et 64^3 .

3- Suspensions monodisperses

Nous avons validé la FCM pour calculer les interactions hydrodynamiques entre deux particules sous l'influence unique du dipôle (le monopôle étant nul). Nous allons maintenant déterminer des quantités macroscopiques, moyennées sur un grand nombre de particules. Dans le cas des simulations dynamiques les moyennes sont calculées une fois que la suspension a atteint un régime statistiquement établi.

Nous nous intéressons au cas particulier d'une suspension macroscopiquement homogène. Sous l'effet du cisaillement, les particules ne se déplacent pas avec les mêmes vitesses ce qui engendre des interactions successives entre particules. Une particule isolée aurait le mouvement du fluide local non perturbé, mais dans une suspension cisillée, elle interagit avec les autres particules sous l'effet du champ moyen, et donc elle est sujette à des fluctuations de vitesse autour du déplacement moyen. Le mouvement moyen des particules est identique au mouvement d'ensemble de l'écoulement en cisaillement pur, où $\gamma_{12}=\gamma$ est l'unique composante non nulle du tenseur de cisaillement γ_{ij} .

$$\langle V_i \rangle = \gamma_{ij} x_j \qquad \langle \Omega \rangle = \frac{1}{2} \nabla \times \langle \mathbf{V} \rangle \qquad 2-31$$

avec $\langle \rangle$ représentant une moyenne temporelle sur toutes les particules. On notera alors \mathbf{v}'' et $\mathbf{\Gamma}''$ les vitesses fluctuantes de translation et de rotation d'une particule de vitesse instantanée \mathbf{V} et $\mathbf{\Omega}$ telle que

$$\mathbf{v}'' = \mathbf{V} - \langle \mathbf{V} \rangle \qquad \mathbf{\Gamma}'' = \mathbf{\Omega} - \langle \mathbf{\Omega} \rangle \qquad 2-32$$

Dans les simulations, nous avons vérifié que les moyennes de fluctuations de vitesse obtenues sont bien négligeables devant les moments d'ordre 2 [$\langle v''_i \rangle \langle v''_j \rangle / \langle v''_i v''_j \rangle = O(10^{-5})$].

Le comportement rhéophysique ou macroscopique de la suspension est caractérisé dans ce chapitre par l'évolution des contraintes normales et de cisaillement, l'auto-diffusion ainsi que la viscosité effective de la suspension. En effet le mouvement fluctuant des particules devient rapidement chaotique malgré le caractère déterministe des équations d'un écoulement de Stokes. Du fait du mouvement couplé de toutes les particules, le système devient extrêmement sensible aux conditions initiales. Ces fluctuations de vitesse augmentent la capacité de la suspension à transférer la quantité de mouvement (contraintes cinétiques). La décorrélation des fluctuations de vitesse avec le temps engendre le phénomène d'auto-diffusion. De plus, on observe une microstructure particulière induite par le cisaillement.

Dans les trois paragraphes suivants, nous allons décrire les résultats de nos simulations concernant l'intensité des variances de vitesse ainsi que la microstructure qui en résulte. Nous proposerons une comparaison entre des simulations statiques et dynamiques. Le calcul de la fonction d'auto-corrélation des vitesses et de la variance de déplacement nécessite un suivi temporel des particules. Il n'a donc été réalisé que dans les simulations dynamiques. Les paramètres de la force de barrière de répulsion, F_{ref} et R_{ref} sont respectivement fixés à 0.3 et 2.2a dans les simulations dynamiques.

3-1 Tenseurs de contraintes

Les contraintes qui résultent des fluctuations de vitesse (de translation et de rotation) suite aux interactions sont purement cinétiques. Les tenseurs de fluctuations de vitesse (ou variance des fluctuations) de translation et de rotation sont définis par:

$$(\gamma a)^2 T_{ij} = \langle v''_i v''_j \rangle - \langle v''_i \rangle \langle v''_j \rangle \quad 2-33$$

$$\gamma^2 w_{ij} = \langle \Gamma''_i \Gamma''_j \rangle - \langle \Gamma''_i \rangle \langle \Gamma''_j \rangle \quad 2-34$$

où \mathbf{v}'' et $\mathbf{\Gamma}''$ représentent respectivement la fluctuation de vitesse de translation et de rotation des particules.

D'un point de vue théorique, il est possible de calculer exactement les perturbations de vitesse générées par l'interaction d'une paire de particules isolée d'après les équations 2-27 et 2-28 (Batchelor & Green, 1972a). Par contre, quand plus que deux particules sont introduites dans l'écoulement, les équations deviennent trop compliquées et il n'existe pas de solution complète de la perturbation de vitesse prenant en compte ces interactions multicorps. Seules des approximations pour le champ lointain ont été établies par Wang et al. (1996). Néanmoins, à partir du travail analytique de Batchelor & Green (1972a) et de Da Cunha & Hinch (1996), Drazer et al. (2004) ont prédit théoriquement, dans la limite des suspensions diluées, l'évolution des termes du tenseur des fluctuations. Ainsi, ils ont écrit que les termes T_{ij} de ce tenseur, peuvent être calculées d'après les fluctuations de vitesse $v''_i v''_j$ ayant lieu dans une configuration \mathcal{E}_N multipliée par la probabilité de l'occurrence de cette configuration $P(\mathcal{E}_N | \mathbf{r})$, et en intégrant sur toutes les configurations possibles.

$$T_{ij} = \frac{1}{N!} \int v''_i v''_j d\mathcal{E}_N P(\mathcal{E}_N | \mathbf{r}) \quad 2-35$$

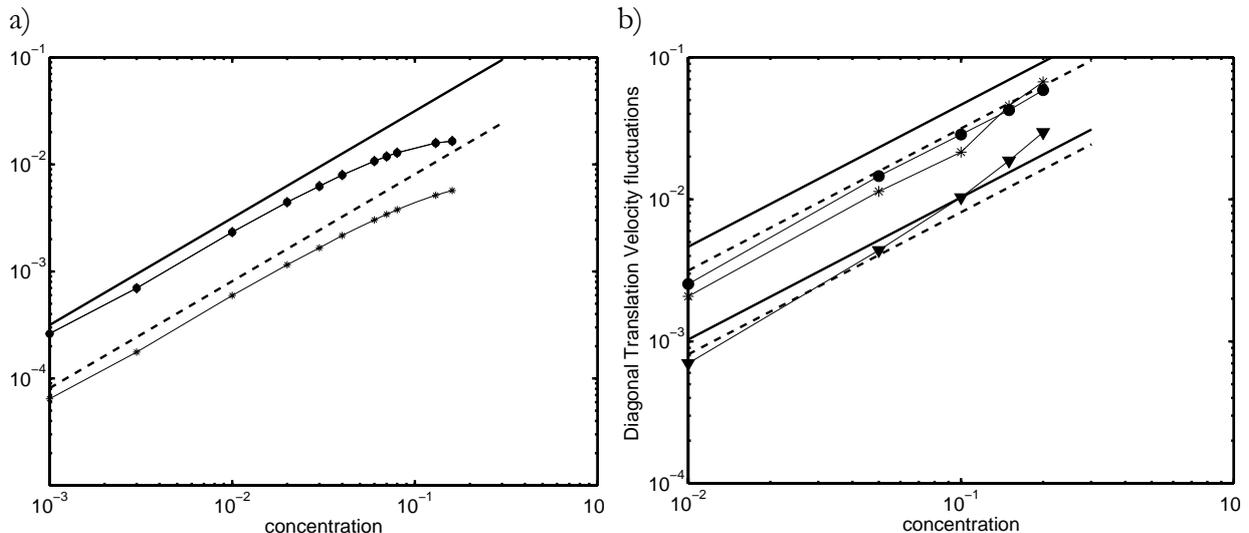
où la probabilité de configurations est liée à la fonction de corrélation de paires $g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\theta})$ qui caractérise la microstructure de la suspension et qui sera discutée ultérieurement. Dans la limite des suspensions diluées, les fluctuations de vitesse proviennent principalement des interactions de paires de particules. La superposition des interactions aux champs lointains entraîne que n'importe quelle composante du tenseur de fluctuations de la forme $v''_i v''_j$ décroît plus rapidement que $1/r^3$, ce qui a permis à Drazer et al. (2004) de calculer les termes T_{ij} en intégrant sur les interactions hydrodynamiques par paires. Les termes résultants sont alors proportionnels à la concentration de la suspension, avec un coefficient de proportionnalité qui est propre à chaque direction et qui est la somme de trois contributions (le champ lointain, le champ intermédiaire et le champ proche) où la contribution du champ lointain est la plus importante. Les termes du tenseur des fluctuations de rotation sont obtenus de la même façon en remplaçant les vitesses de translation par la vitesse de rotation.

Les auteurs ont calculé ces tenseurs pour deux types différents de microstructure caractérisée par la fonction de corrélations de paires $g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\theta})$. Dans un premier cas, ils ont utilisé $g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\theta})$ correspondant à des positions de particules complètement décorréliées en considérant le cas purement aléatoire (analogue à des simulations statiques où les particules sont positionnées au hasard). Dans un autre cas, ils ont considéré $g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\theta})$ qui dérive du travail de Batchelor & Green (1972b), tenant ainsi compte des interactions hydrodynamiques entre les particules dans un écoulement cisailé (simulations dynamiques). Pour des raisons de symétrie, les termes diagonaux des tenseurs de fluctuations de vitesses T_{11} et T_{22} (resp. w_{11} et w_{22}) obtenus théoriquement sont

égales mais différentes de T_{33} (resp. w_{33}) dans une suspension diluée. Les termes non-diagonaux sont strictement nuls quand la condition de symétrie amont-aval est bien respectée, en particulier pour les configurations de suspension purement aléatoires. Les valeurs théoriques de T_{ij} sont présentées en traits pleins sur les Figure 2-8 a-d.

Nous avons étudié l'évolution des composantes du tenseur de fluctuations de vitesse en fonction de la concentration en réalisant deux campagnes de simulations: statiques et dynamiques. Les Figure 2-8 montrent l'évolution des fluctuations de vitesse de translation et de rotation pour les deux cas. Qu'il s'agisse de simulations statiques ou dynamiques induites par le cisaillement, les fluctuations de vitesse de translation ou de rotation évoluent proportionnellement avec la concentration et elles sont anisotropes avec un facteur d'anisotropie égal environ à 4. Pour une concentration donnée, les fluctuations de vitesse les plus intenses ont lieu dans le plan de cisaillement. La fluctuation de vitesse dans la direction de la vortécité T_{33} (resp. w_{33}) est quatre fois plus petite (resp. plus grande) que les fluctuations de vitesse dans les autres directions. Cette forte anisotropie a été également mise en évidence expérimentalement dans un écoulement de couette dans le travail de Shapley et al. (2002).

Dans les simulations statiques les variances T_{11} et T_{22} , w_{11} et w_{22} sont bien identiques, satisfaisant l'hypothèse de symétrie de la prédiction théorique. Les termes des tenseurs de fluctuations obtenus par les simulations dynamiques sont très proches des résultats statiques pour les concentrations faibles $\phi \approx 1\%$ et les dépassent largement quand la concentration augmente (un facteur 3 pour $\phi = 20\%$). Nous n'avons pas réalisé de simulations dynamiques pour des conditions très diluées ($\phi < 1\%$) à cause du temps énorme que les statistiques mettent pour converger, mais on s'attend à ce que ces suspensions se comportent comme si elles étaient statiques du fait de la forte diminution du nombre d'interactions. Dans les simulations dynamiques où l'évolution des suspensions est suivie dans le temps, on remarque que la croissance des termes de fluctuations reste linéaire jusqu'à $\phi = 20\%$ tout en suivant d'une façon assez satisfaisante la théorie diluée. Ce bon accord même jusqu'à des concentrations modérées est lié à la décroissance rapide de la perturbation de vitesse: le Stresslet $\sim 1/r^2$. Ceci n'est pas le cas dans d'autres configurations physiques comme la sédimentation par exemple, où les effets de gravité par l'intermédiaire du monopôle induisent des perturbations de vitesse qui décroissent plus lentement $\sim 1/r$.



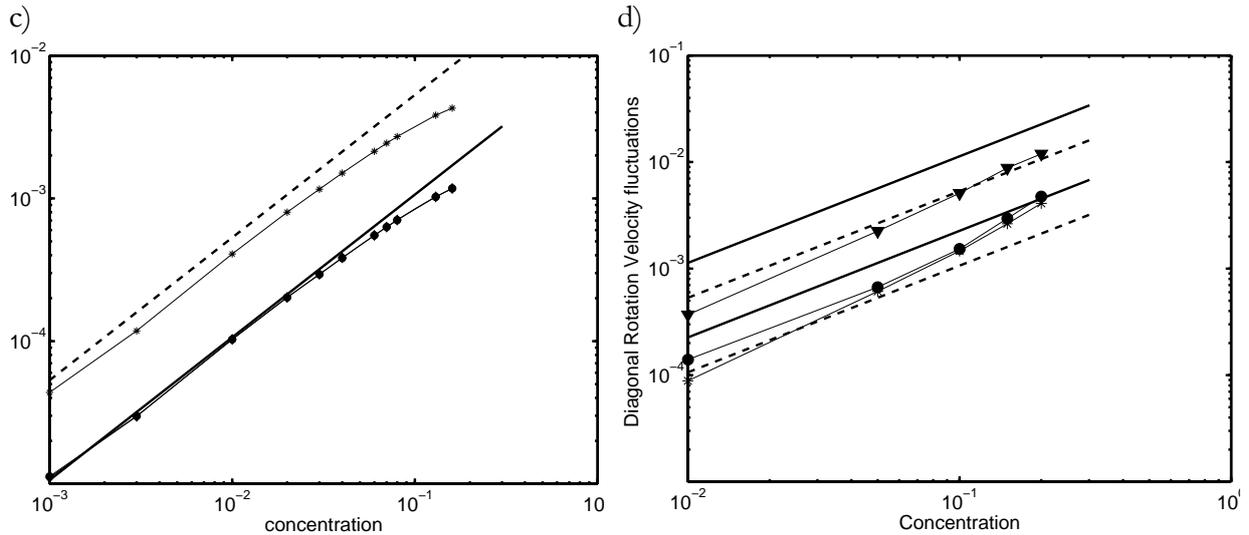


Figure 2-8

Termes diagonaux du tenseur de fluctuations de vitesse de translation (a et b) et de rotation (c et d) en fonction de la concentration. Traits: théorie développée par Drazer et al. (2004) pour les suspensions diluées.

a) et c): simulations statiques.

Traits pleins et pointillés: théorie basée sur une distribution aléatoire analogue à une simulation statique b) et d): simulations dynamiques.

Traits pleins: théorie basée sur la fonction de probabilité de paires de Batchelor & Green (1972b).

Traits pointillés: théorie basée sur une distribution aléatoire à comparer à une simulation statique

a) ♦ et • confondues: $T_{11}=T_{22}$; *: T_{33} b) *: T_{11} •: T_{22} ; ▼: T_{33}
 c) ♦ et • confondues: $w_{11}=w_{22}$; *: w_{33} d) *: w_{11} •: w_{22} ; ▼: w_{33}

Nos résultats sont en bon accord avec les résultats numériques de Drazer et al. (2004) qui ont d'ailleurs validé expérimentalement les valeurs de T_{11} à l'aide de mesures effectuées par LDV (Laser Doppler Velocimetry). Ils ont trouvé que les résultats numériques sont en bon accord avec les expériences à condition de retrancher les erreurs de mesure dues à la rotation solide des particules. Si l'on suit la théorie développée pour les suspensions diluées, la symétrie amont-aval de la trajectoire relative de paire de particules induit que tous les termes non diagonaux du tenseur de fluctuation sont nuls. Les Figure 2-9 a et b montrent que cette hypothèse est vérifiée par les simulations pour tous les termes sauf T_{12} et w_{12} qui sont différents de zéro uniquement dans les simulations dynamiques. Comme pour les simulations de Drazer et al. 2004, nous avons trouvé que les termes T_{12} et w_{12} sont respectivement négatifs et positifs et que leur intensité augmente avec la concentration. Dans le cas de simulations dynamiques, les fluctuations de vitesse ne sont pas uniformes à l'échelle de quelques rayons autour de la particule puisqu'elles dépendent fortement des positions relatives des particules voisines, qui elles ne sont pas du tout uniformes (Figure 2-10).

Les valeurs non nulles de T_{12} et w_{12} sont la trace d'une rupture de symétrie due sans doute au développement au cours du temps de positions préférentielles induites par le cisaillement. Une représentation graphique des centres de n'importe quelle paire de particules proches ($r < 2.5a$) est tracée dans la Figure 2-10 pour une concentration $\phi = 15\%$. Il est clair que les positions relatives des particules ne sont pas réparties d'une façon isotrope dans l'espace et que le cisaillement favorise l'orientation d'une paire de particules selon l'axe de compression (direction propre du tenseur des déformations). Après la phase de rapprochement et l'interaction avec la barrière de répulsion les paires de particules tendent à se séparer plus rapidement du côté aval. Cette orientation préférentielle des paires rend plus probables les produits de vitesses négatives $v_1 v_2$ et positives $\Gamma_1 \Gamma_2$ (d'après les expressions des vitesses relatives d'une paire de particules équations 2-27 et 2-28).

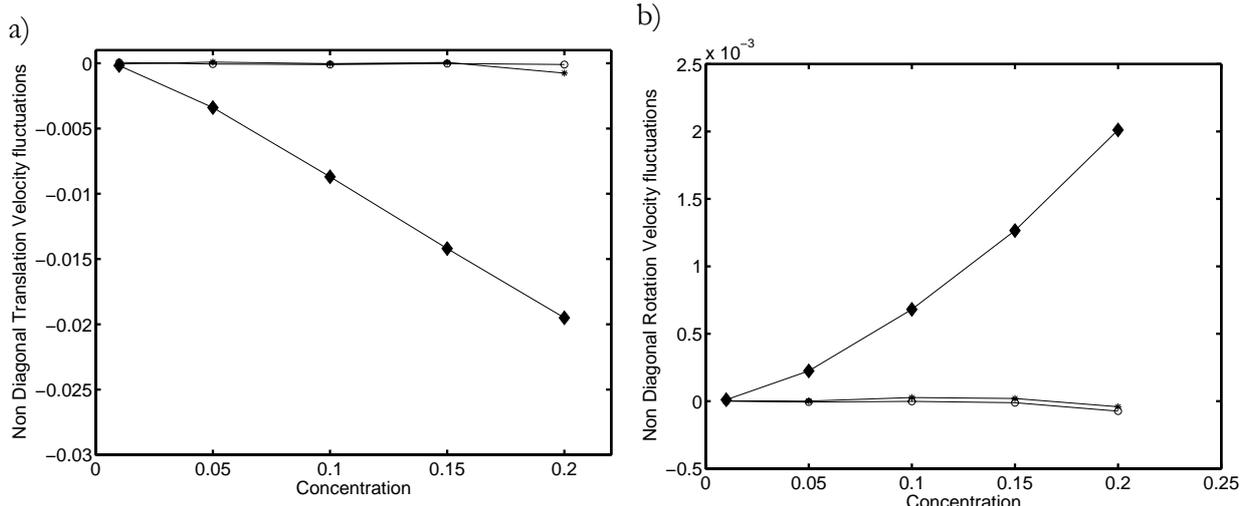


Figure 2-9

Termes non-diagonaux du tenseur de fluctuations de vitesse de a) translation et b) rotation en fonction de la concentration.

◆ : T_{12} et w_{12} obtenus par simulations dynamiques.

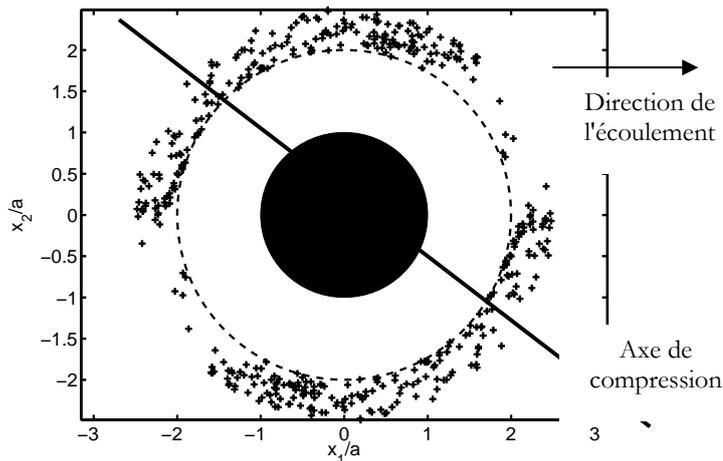


Figure 2-10

Positions relatives du centre de paires de particule dans un écoulement cisillé. Disque noir: particule de référence.

Cercle pointillé: limite de recouvrement ($r=2a$).

+ : Position des particules à proximité de la particule de référence ($r < 2.5a$)

Cette figure a été générée en cumulant des statistiques à des instants indépendants les uns des autres.

L'axe de compression est représenté par le trait plein incliné à -45° .

3-2 Microstructure: $g(r)$

Contrairement aux simulations statiques où les positions des particules sont purement aléatoires (ce qui correspond à une absence d'orientation relative préférentielle $\Rightarrow T_{12}$ et w_{12} nulles), la Figure 2-10 montre une distribution angulaire anisotrope qui se développe avec le temps dans une suspension cisillée ($T_{12} < 0$ et $w_{12} > 0$). Les interactions hydrodynamiques augmentent quand les particules sont rapprochées les unes des autres par les lignes de courant de l'écoulement cisillé, et les paires de particules ont tendance à passer plus de temps dans le voisinage proche du côté de l'axe de compression avant de s'éloigner. La phase d'éloignement des particules du côté aval est accélérée par les forces répulsives. La Figure 2-19b plus loin dans le

document montrera que ceci reste vrai même après renforcement des effets de lubrification qui restaurent la symétrie amont-aval des interactions.

Même quand elles sont faibles, ces interactions irréversibles intervenant à l'échelle microscopique ont un effet considérable sur le comportement macroscopique de la suspension: T_{12} , w_{12} et l'auto-diffusion comme cela sera discuté ultérieurement (Zarraga & Leighton 2001). Nous n'avons pas calculé dans ce travail la variation angulaire de densité de probabilité de paires (car c'est une statistique très sensible et extrêmement longue à converger), mais la Figure 2-10 donne une idée claire de son allure : dans l'intervalle $60^\circ < \theta < 150^\circ$, la valeur de la fonction angulaire est la plus grande. Cependant il est intéressant d'analyser l'organisation microscopique de la microstructure de la suspension à l'aide de la fonction radiale de corrélations de paires $g(r)$. Cette fonction constitue une mesure quantitative de la probabilité de trouver une particule à une distance r de la particule de référence.

A l'aide des expressions analytiques des vitesses relatives de paires de particules dans un écoulement de Stokes cisailé, Batchelor & Green (1972b) ont calculé théoriquement les trajectoires des particules et en ont ainsi déduit la fonction de densité de probabilité de paires. Pour certaines configurations particulières, ils ont montré l'existence de trajectoires fermées traduisant des interactions permanentes de paires de particules. Ceci induit une divergence de la fonction $g(r)$. Cependant les barrières de répulsion non hydrodynamiques et les interactions multi-corps contribuent au passage des particules à travers les différentes lignes de courant ; ceci élimine la possibilité de trouver des paires de trajectoires en interaction pour des temps infinis. De plus, ceci garantit la convergence de la fonction de probabilité de paires dans toutes les suspensions (Bossis & Brady, 1985).

La fonction d'auto-corrélation de paires $g(r)$ est obtenue par le rapport entre le nombre de particules qui sont localisées dans une couronne de volume $dV(r)$ à une distance r d'une particule donnée et le nombre de particules qu'il devrait y avoir dans celle-ci si la suspension était homogène.

$$g(r) = \frac{V_p}{N\phi dV(r)} \sum_{i=1}^N n_i(r)$$

2-36

Comme nous l'avons observé dans la Figure 2-10, la fonction de probabilité de paires n'est en général pas isotrope et par conséquent $g(r)$ a été intégrée sur toutes les orientations angulaires possibles. Elle est nulle pour une distance entre les centres inférieures au diamètre de particules [$g(r < 2a) = 0$] puisque le recouvrement de particules n'est pas permis. $g(r)$ doit également tendre vers 1 aux grandes distances si la suspension est homogène.

Nous avons déterminé $g(r)$ dans les simulations statiques et dynamiques, et pour différentes concentrations. Les Figure 2-11 a et b montrent que les fonctions de probabilité de paires ont qualitativement le même comportement dans les deux types de simulation: $g(r)$ tend vers 1 aux grandes distances indiquant que la distribution de particules est bien homogène à grande distance, la probabilité de trouver des paires est maximale au voisinage du contact ce qui se traduit par les pics pour $r=2a$, et l'intensité du pic augmente avec la concentration. Dans les simulations statiques où les distributions sont purement aléatoires, les pics de $g(r)$ révèlent l'existence de corrélations dues uniquement aux effets d'exclusion de volumes de particules (effet de taille finie). Quand les particules sont entraînées dans le temps par l'écoulement cisailé, il est clair que des paires de particules proches ont plus de chance de se former. Des résultats similaires ont été présentés pour des suspensions Browniennes (Morris & Kathyal 2002) ou non Browniennes (Brady & Bossis 1985, Sierou & Brady 2002, Drazer et al. 2004) soumises à un cisaillement pur.

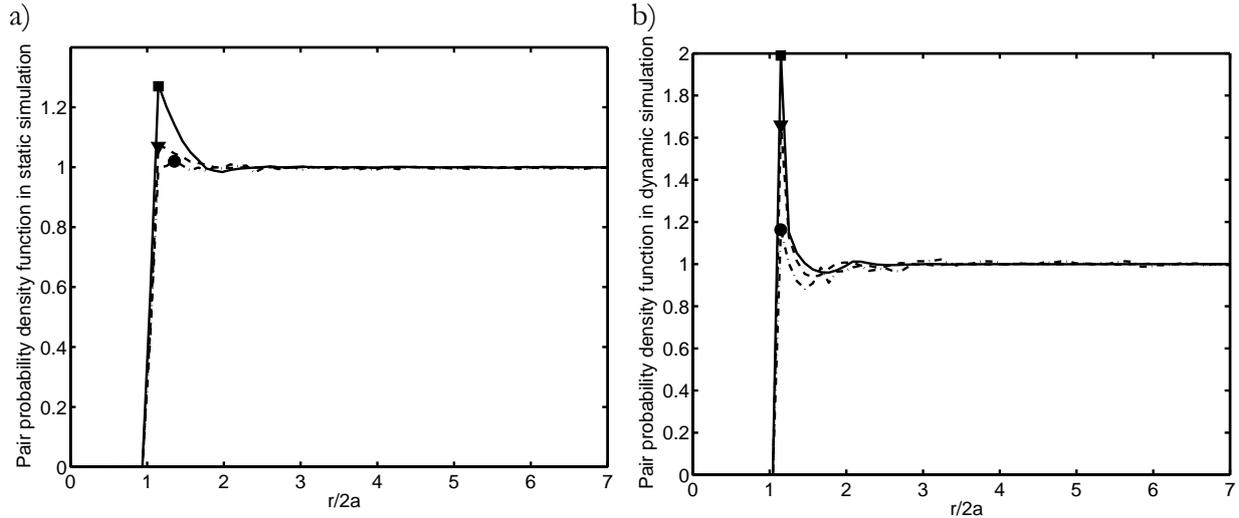


Figure 2-11

Fonction de densité de probabilité de paires $g(r)$ obtenues par des simulations a) statiques et b) dynamiques.

Les symboles \bullet \blacktriangledown \blacksquare correspondent respectivement aux pics des fonctions pour $\phi=1, 5$ et 15%

3-3 Fluctuations de vitesse: distribution et auto-corrélation Lagrangienne

Distribution

Les fluctuations de vitesse sont plus ou moins intenses en fonction de la distance des particules en interaction. Nous allons nous intéresser à la forme des distributions de vitesse. Nos simulations fournissent en plus de l'intensité des variances de fluctuations, des résultats qui permettent une description complète de la densité de probabilité de ces fluctuations dans toutes les directions. Les fonctions de distribution des fluctuations de vitesses dans la direction du gradient de vitesse sont présentées dans la Figure 2-12 pour quatre concentrations différentes. Les distributions des autres composantes des fluctuations de vitesse ont pratiquement la même allure. Toutes les distributions de vitesse ont une forme très proche d'une Gaussienne (eq. 2-37) pour les fluctuations de vitesse de faible amplitude, et s'en éloignent au niveau des fluctuations d'amplitude plus large d'autant plus que la concentration est petite (queue de la distribution). La comparaison avec une distribution de vitesse Gaussienne est intéressante parce que cette dernière est associée à la somme de variables aléatoires non corrélées. En considérant que les fluctuations de vitesse sont indépendantes dans chaque direction, une distribution Gaussienne pour les fluctuations de vitesse normalisées par l'écart type dans la direction α (qui est d'ailleurs égale à $T_{\alpha\alpha}$) s'écrit comme suit:

$$f\left(\frac{v''_{\alpha}}{\sqrt{T_{\alpha\alpha}}}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi T_{\alpha\alpha}}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{v''_{\alpha}}{\sqrt{T_{\alpha\alpha}}}\right)^2\right)$$

2-37

La Figure 2-12a montre que la probabilité d'apparition de fluctuations de vitesses de grande amplitude est plus élevée que celle qui est estimée à partir d'une distribution Gaussienne.

Pour une suspension faiblement concentrée $\phi=5\%$, la Figure 2-12b montre qu'une meilleure approximation de la distribution de vitesse serait la combinaison d'un comportement

Gaussien pour les faibles fluctuations ($v''_\alpha / \sqrt{\Gamma_{\alpha\alpha}} < 1$) et d'une queue exponentielle pour les fluctuations de vitesse intenses. Cette exponentielle d'équation

$$f\left(\frac{v''_\alpha}{\sqrt{\Gamma_{\alpha\alpha}}}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Gamma_{\alpha\alpha}}} \exp\left(-1.5 \left|\frac{v''_\alpha}{\sqrt{\Gamma_{\alpha\alpha}}}\right|\right)$$

2-38

est de la forme $f(v'') \sim \exp(-\beta v''^\delta)$. Drazer et al. (2004) ont montré que l'exposant δ est égal à 2 pour les fortes concentrations où la PDF ressemble à une Gaussienne, et qu'il décroît quand la concentration diminue pour atteindre 0.25 pour $\phi=1\%$. Un tel comportement est la conséquence de la présence de structures persistantes à petite échelle qui sont dues principalement à des interactions hydrodynamiques de paires de particules dominant la dynamique aux faibles concentrations (Drazer et al., 2002). Par contre, pour des concentrations plus élevées, la fonction de densité de probabilité a une allure proche de la Gaussienne même pour les fortes fluctuations. Dans ces suspensions la distance de séparation moyenne entre les particules est réduite avec l'augmentation de fraction volumique, induisant des interactions multi-corps plus fréquentes et une décorrélation temporelle des fluctuations de vitesse plus rapide.

De telles évolutions sur les statistiques ont été observées par Verzicco & Camussi (2001) dans le cas d'un écoulement turbulent. A bas nombre de Reynolds, la distribution des fluctuations de vorticité est presque une Gaussienne associée à de faibles corrélations du fluide en mouvement. Quand le nombre de Reynolds augmente, des structures cohérentes de vorticité à petites échelles se développent entraînant une distribution de vitesse qui ressemble à une exponentielle étirée plutôt qu'une Gaussienne. Ce comportement est courant dans les systèmes complexes même si le sens d'évolution et l'origine peuvent être très spécifiques (dans des lits fluidisés par exemple, la distribution de vitesse passe d'une Gaussienne à une exponentielle étirée quand la concentration augmente (Rouyer et al., 1999)).

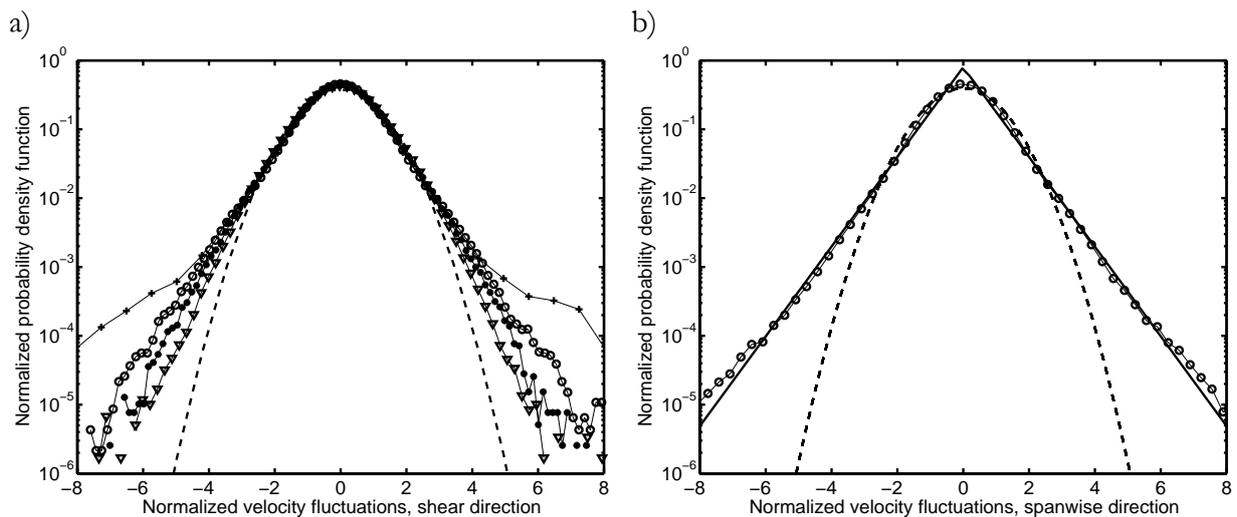


Figure 2-12

Fonction normalisée de densité de probabilité des fluctuations de vitesse a) dans la direction du gradient de vitesse et b) dans la direction de la vorticité.

+ o * ▽: simulations à $\phi=1, 5, 10$ et 20% respectivement.

Trait pointillé: distribution normale (Gaussienne, eq. 2-37). Trait plein dans b): distribution exponentielle étirée (eq. 2-38)

Sensibilité aux conditions initiales et auto-corrélation des vitesses

Les multiples interactions de particules dans un écoulement entraînent un comportement chaotique de la suspension. Même si les équations de Stokes sont linéaires, les interactions multi-corps et les barrières de répulsion non hydrodynamiques forcent les particules à se déplacer à travers les lignes de courant. Une perturbation, même d'amplitude très faible, conduit l'écoulement à perdre complètement la mémoire de son état initial. La Figure 2-13 montre par exemple, l'effet du cumul d'erreurs numériques sur l'évolution temporelle de la variance de fluctuations vitesse pour une suspension de concentration 18%. Les positions initiales des particules sont identiques (jusqu'à la précision machine) pour deux simulations distinctes de la même suspension : une petite erreur de l'ordre de 10^{-15} est commise par le calcul sur deux machines différentes (calcul en double précision sur SGI et IBM effectués respectivement sur les centres de calcul de CALMIP et du CINES). Les deux signaux de l'évolution temporelle de T_{22} sont superposables pour un temps adimensionnel inférieur à 100. Aux temps plus longs, les deux signaux ont une évolution instantanée différente même si les statistiques (moyenne et écart-type) sont conservées. Ceci montre bien que les quantités macroscopiques sont conservées bien que la position instantanée des particules se soit peu à peu complètement décorrélée des conditions initiales pourtant extrêmement proches.

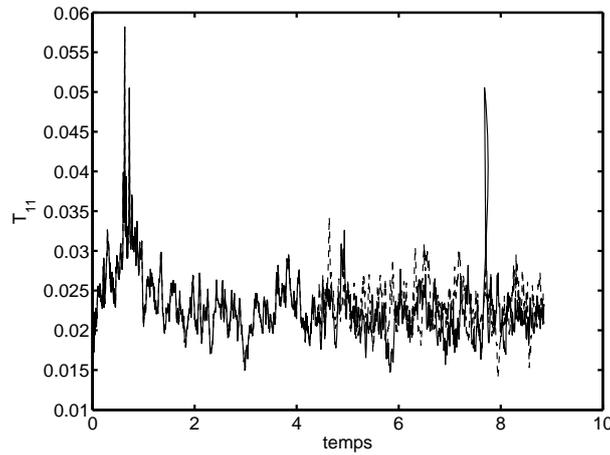


Figure 2-13

Signal temporel de fluctuations de vitesse ($\phi=18\%$). Traits pleins et pointillés: deux simulations avec une condition initiale identique contenant une légère perturbation d'amplitude 10^{-15} .

L'information sur le temps que les fluctuations de vitesses mettent avant de devenir complètement décorrélées est extraite à partir de la fonction d'auto-corrélation Lagrangienne des vitesses fluctuantes $R_{\alpha\alpha}(t)$ (eq. 2-39) calculée suivant les directions du gradient de vitesse et de la vorticit .

$$R_{\alpha\alpha}(t) = \frac{\langle v''_{\alpha}(\tau)v''_{\alpha}(\tau+t) \rangle}{T_{\alpha\alpha}}$$

2-39

Le produit $v''_{\alpha}(\tau)v''_{\alpha}(\tau+t)$ est moyenn  sur toutes les particules   partir de plusieurs temps initiaux τ .

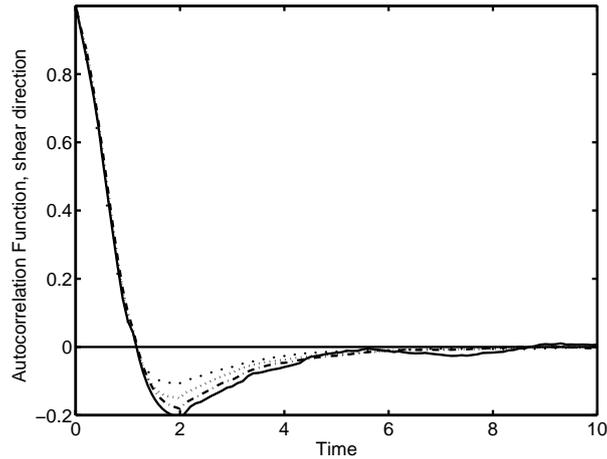


Figure 2-14

Fonction d'auto-corrélation Lagrangienne des fluctuations de vitesse dans la direction du gradient de vitesse obtenues pour différentes concentrations: — $\phi=1\%$ - - - $\phi=5\%$ $\phi=10\%$ ••••• $\phi=20\%$

Dans la Figure 2-14 les fonctions d'auto-corrélation Lagrangienne de fluctuation de vitesses sont tracées pour différentes concentrations jusqu'à 20%. Nous observons que dans tous les cas, la fonction devient négative au bout du temps T_{c1} qui est de l'ordre de γ^{-1} , avant de tendre vers zéro. Ceci révèle que les interactions de paires dans un écoulement cisailé sont un mécanisme majeur de la dynamique de la suspension. La boucle négative a une intensité plus grande pour les faibles concentrations, mais elle persiste aux concentrations modérées (20%), en accord avec ce que Marchioro & Acrivos (2001) ont observé. L'échelle de temps T_{c2} correspond au temps moyen que les fluctuations de vitesse mettent pour devenir complètement décorréelées. Les mouvements sont complètement décorréelés après un temps adimensionnel $t\gamma^{-1}$ égal à 8 environ, et légèrement inférieur pour les concentrations plus élevées. La troisième échelle de temps T_L (temps intégral) permet de déterminer le coefficient de diffusion (eqs. 2-40 et 2-41). T_L représente l'échelle de temps Lagrangienne du mouvement fluctuant des particules. On observe qu'elle augmente avec la diminution de la boucle négative quand la suspension est plus concentrée.

$$T_{L,\alpha} = \int_0^{\infty} R_{\alpha\alpha}(t) dt$$

2-40

Le Tableau 2-2 résume les différents résultats obtenus pour toutes ces échelles de temps.

ϕ (%)	1	5	10	15	20
γT_{c1}	1.16	1.18	1.16	1	1
γT_{c2}	8.8	8.8	8.8	6.5	6.5
γT_L	0.14	0.2	0.24	0.26	0.3

Tableau 2-2

Temps caractéristiques de corrélation de vitesse en fonction de la concentration

3-4 Auto-diffusion induite par le cisaillement

Si les particules avaient un mouvement purement Brownien, elles seraient soumises à une auto-diffusion dès les temps courts (le temps de relaxation visqueux est en général très court pour des particules de masse volumique proche de celle du fluide environnant). Un autre phénomène qui aurait pu provoquer une diffusion serait la présence d'un gradient soit de concentration soit de cisaillement, où l'on observerait une migration macroscopique collective des particules. Cependant, bien que les particules que nous étudions ne sont pas Browniennes et qu'elles sont réparties d'une façon homogène dans la suspension, la perte de corrélation après un temps long révèle la présence d'un phénomène aléatoire dans le transport de la suspension et ceci malgré le caractère déterministe et linéaire des équations de Stokes. Cette évolution chaotique appelée également auto-diffusion induite par le cisaillement est due forcément à la dérive des particules à travers les lignes de courant à cause des interactions multi-corps (Wang et al., 1996) et de la rupture de symétrie induite par les interactions non-hydrodynamiques.

Nous avons déterminé les coefficients d'auto-diffusion dans les directions transversales D_{22} et D_{33} de différentes façons. Par contre, la détermination de la diffusion dans la direction de l'écoulement est plus compliquée, en raison d'un couplage entre le mouvement diffusif transversal et convectif induit par l'écoulement moyen (Sierou & Brady, 2004). Acrivos et al. (1992) ont proposé une prédiction théorique du coefficient d'auto-diffusion induite par le cisaillement D_{11} dans la direction de l'écoulement en introduisant un mécanisme d'interaction avec une paire additionnelle de particules. Sierou & Brady (2004) ont calculé ce coefficient en utilisant avec précautions une équation d'advection-diffusion ou l'équation de Fokker-Planck. En ce qui nous concerne, nous n'avons pas déterminé ce coefficient dans les simulations.

Deux méthodes Lagrangiennes différentes permettent d'aboutir à un coefficient d'auto-diffusion transversal (D_{22} ou D_{33}). La première méthode est basée sur l'intégration de la fonction d'auto-corrélation Lagrangienne des vitesses. Le coefficient de diffusion (adimensionnel) est alors évalué par l'équation 2-41

$$D_{\alpha\alpha} = \frac{T_{\alpha\alpha}}{\gamma a^2} \int_0^{\infty} R_{\alpha\alpha}(t) dt$$

2-41

Le coefficient de diffusion est comparé à γa^2 relatif à la taille de la particule et au taux de cisaillement local. Dans l'eq. 2-41, ce coefficient est défini comme le produit de la fluctuation de vitesse moyenne dans une direction par l'échelle de temps Lagrangienne T_L . L'intégrale est convergente car la fonction d'auto-corrélation tend vers zéro en un temps fini. Nous notons que quand la concentration augmente, il résulte des simulations non seulement une augmentation de l'intensité des fluctuations de vitesse, mais également l'augmentation de l'échelle intégrale de temps diffusif. Ces deux phénomènes contribuent simultanément à l'augmentation du coefficient d'auto-diffusion avec la concentration.

L'autre méthode est basée sur le comportement aux temps longs de la variance de déplacement des particules (eq. 2-42)

$$D_{\alpha\alpha} = \frac{1}{2\gamma a^2} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} \langle (x_{\alpha}(t) - x_{\alpha}(0))^2 \rangle$$

2-42

Dans la Figure 2-15a l'évolution temporelle de $\langle (x_i(t) - x_i(0))^2 \rangle$ est représentée sur une échelle log-log, pour des concentrations de suspension variant de 1 à 20%. Cette figure met en évidence que

la variance de déplacement est sujette à un changement de régime, caractérisée par le changement de pente des courbes correspondant à toutes les concentrations.

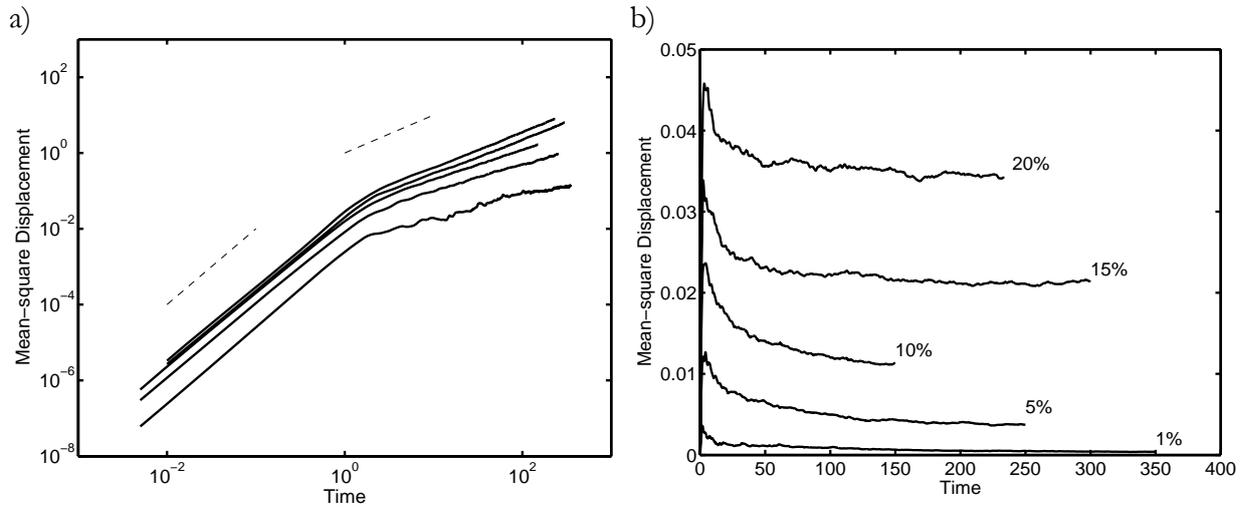


Figure 2-15

Evolution temporelle de la variance de déplacement des particules dans la direction du gradient de vitesse

a) Diagramme log-log de $\langle(x_2(t)-x_2(0))^2\rangle/2\gamma a^2$.

Traits pleins de bas en haut : $\phi=1, 5, 10, 15$ et 20% . Traits pointillés: pentes logarithmiques 2 et 1.

b) Diagramme linéaire de $\langle(x_2(t)-x_2(0))^2\rangle/2\gamma a^2 t$ pour les mêmes simulations

Aux temps courts, la variance de déplacement a une croissance quadratique (ou d'une façon équivalente l'écart-type de déplacement est linéaire), ce qui correspond à un comportement balistique. Le coefficient M_α (eq. 2-43) caractérise la mobilité des particules pour ce régime de transport.

$$M_\alpha = \frac{\sqrt{\langle(x_\alpha(t) - x_\alpha(0))^2\rangle}}{at\gamma}$$

2-43

Les valeurs de M_2 dans le Tableau 2-3 confirment qu'aux temps courts, les particules se déplacent dans les directions transversales avec une vitesse dont l'intensité est proche de l'amplitude des fluctuations de vitesse $\sqrt{T_{22}}$ en accord avec la théorie de Taylor sur la diffusion turbulente

ϕ (%)	1	5	10	15	20
M_2	.0505	.096	.133	.141	.199
$(T_{22})^{1/2}$.0503	.12	.169	.206	.242

Tableau 2-3

Comparaison du coefficient de mobilité locale M_2 et de l'intensité des fluctuations de vitesse dans la direction du gradient de vitesse, pour différentes concentrations.

L'évolution de la variance de déplacement devient linéaire à partir du moment où les fluctuations de vitesse atteignent le régime où elles sont décorrélées. La représentation logarithmique de la variance de déplacement est classique dans la littérature (Marchioro & Acrivos (2001), Drazer et al. (2002), Sierou & Brady (2004)). Une autre façon pour présenter le changement de régime temporel de la variance de déplacement consiste à tracer $\langle(x_i(t)-x_i(0))^2\rangle/t$ en fonction du temps dans un diagramme linéaire. L'entrée dans le régime diffusif est clairement marquée par un plateau aux temps longs où $\langle(x_i(t)-x_i(0))^2\rangle/t$ devient constant. Le coefficient de

diffusion $D_{\alpha\alpha}$ pour chaque concentration est obtenu indifféremment à partir de la pente des courbes aux temps longs dans la Figure 2-15a ou d'après le niveau du plateau atteint dans la Figure 2-15b.

Les coefficients transversaux de diffusion dépendent fortement de la fraction volumique (Figure 2-16 a et b). Da Cunha & Hinch (1996) et ensuite Zarraga & Leighton (2001) ont montré que l'auto-diffusion induite par le cisaillement dépend linéairement de la concentration dans la limite des suspensions diluées. Dans leurs travaux, les interactions des particules sont contrôlées principalement par des forces non-hydrodynamiques qui empêchent le recouvrement. Ceci entraîne une dérive finie à travers les lignes de courant à chaque interaction de particules. D'autre part, Wang et al. (1996) ont montré théoriquement que l'auto-diffusion due aux interactions hydrodynamiques entre plus que deux particules a une évolution quadratique en fonction de la concentration. Drazer et al. (2002) ont mis en évidence une transition entre ces deux comportements limites quand l'intensité de la force répulsive est considérablement augmentée. L'évolution du coefficient d'auto-diffusion passe de quadratique au linéaire lorsque la force dominante est la force de répulsion non-hydrodynamique.

Nos simulations montrent que le processus de diffusion ne dépend pas uniquement des effets non-hydrodynamiques puisque l'évolution des coefficients transversaux n'est pas strictement linéaire en fonction de la concentration. Avec des simulations réalisées dans la limite d'un régime très dilué ($\phi < 1\%$), on devrait retrouver ce comportement linéaire, mais les statistiques mettent très longtemps à converger à cause des très rares rencontres de particules. Afin de connaître l'influence du choix de la force non-hydrodynamique sur les résultats, nous avons réalisé des simulations en changeant l'intensité de cette force de répulsion pour une même concentration. Nous avons obtenu un écart de moins de 30% pour les plus larges variations de la force de répulsion ($0 < F_{ref} < 1.2$ pour $R_{ref} = 2.2a$).

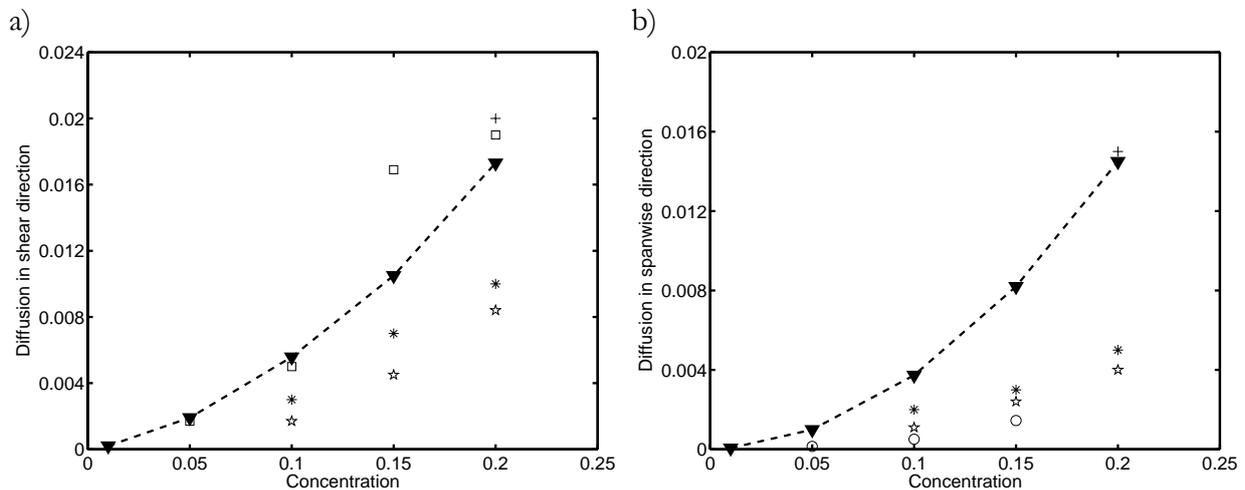


Figure 2-16

Coefficients d'auto-diffusion induite par le cisaillement: a) direction du gradient de vitesse et b) direction de la vortécité.

□ et +: Travaux expérimentaux de Leighton & Acrivos (1986) et Breedveld *et al.* (2002)

*: Travail analytique, Acrivos *et al.* (1992)

o et ☆ : Simulations de Stokesian Dynamics (Drazer *et al.*, 2002) et Accelerated Stokesian Dynamics (Sierou & Brady, 2004)

▼ et trait pointillé: simulations avec la Force Coupling Method

Le tenseur d'auto-diffusion est anisotrope, $1.2 < D_{22}/D_{33} < 3$ pour $1 < \phi < 20\%$, ce qui est une conséquence de l'anisotropie des fluctuations de vitesse qui sont plus importantes dans la direction de gradient de vitesse que dans la direction de la vorticit  ($T_{22} \approx 4T_{33}$). Cette anisotropie tr s marqu e de l'auto-diffusion a  t   galement observ e par Da Cunha & Hinch (1996) pour les suspensions dilu es ($D_{22}/D_{33} \approx 10$). Comme nous l'avons d j  mentionn , les fluctuations de vitesse aux faibles concentrations et par cons quent les coefficients de diffusion sont principalement contr l es par les interactions de paires qui sont tr s anisotropes. Quand la concentration augmente, les interactions hydrodynamiques multi-corps tridimensionnelles augmentent les fluctuations de vitesse dans la direction de la vorticit , et les rapports T_{33}/T_{22} ainsi que D_{33}/D_{22} augmentent tout en restant inf rieurs   1 (Figure 2-17). Cette tendance reste inchang e jusqu'  des concentrations aussi grandes que 50% (Sierou & Brady, 2004 et Marchioro & Acrivos, 2001).

Compar s aux r sultats ant rieurs, les r sultats obtenus avec la FCM se trouvent dans la gamme des diff rents travaux num riques et exp rimentaux de la litt rature. On observe de toute fa on une forte dispersion des r sultats suite aux incertitudes exp rimentales (nouvelle technique de Breedveld et al. 1998) ou aux limitations des simulations (discussion dans Sierou & Brady 2004) ou aux hypoth ses th oriques (Wang et al. 1996). Les coefficients d'auto-diffusion obtenus par la FCM sont l g rement sup rieurs, ce qui est sans doute li    la simplification de la mod lisation des interactions proches. Les effets de lubrification d'origine visqueuse ont  t  remplac s par une force purement r pulsive engendrant une forte anisotropie des interactions de paires.

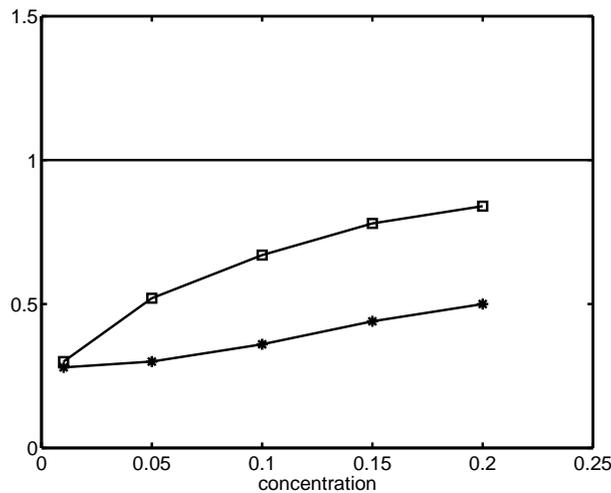


Figure 2-17

Evolution des coefficients d'anisotropie T_{33}/T_{22} (carr s) et D_{33}/D_{22} ( toiles) en fonction de la concentration

3-5 Ajout des forces de lubrification

L'objectif de cette section est de compl ter la prise en compte des interactions hydrodynamiques lorsque les particules sont proches du contact. Afin d' valuer la d pendance des quantit s macroscopiques vis- -vis du traitement simplifi  des interactions   courtes distances (force purement r pulsive), il est important de comparer le comportement des suspensions par rapport au cas o  les effets de lubrification sont correctement reproduits. En effet, l' coulement porteur  tant cisail , les particules sont souvent amen es   se rapprocher, m me jusqu'au contact. Les effets de lubrification li s au drainage du film liquide entre les deux interfaces induit des

forces d'interaction qui divergent comme ε^{-1} lorsque les particules se rapprochent (ε étant la distance adimensionnelle entre les surfaces de particules).

Pour améliorer la précision de la méthode FCM, nous avons suivi la démarche proposée par Dance & Maxey (2003). L'idée de départ est de compléter les résultats FCM {monopôle+dipôle} par des forces additionnelles paramétrées de façon à restituer les comportements analytiques connus de l'interaction entre deux sphères en écoulement de Stokes (Kim and Karrila, 1991). Ces interactions \mathbf{F} et \mathbf{T} (forces et moments) sont écrites en suivant la formulation du problème de résistance (vitesses connues, forces à calculer) pour une paire de particules isolées identiques α et β (équations 2-44)

$$\begin{aligned} F_i^\alpha &= 6\pi\mu a \left(\mathcal{A}_{ij}^\alpha V_j^\alpha + \mathcal{A}_{ij}^\beta V_j^\beta + a\mathcal{B}_{ij}^\alpha \Omega_j^\alpha - a\mathcal{B}_{ij}^\beta \Omega_j^\beta \right) \\ F_i^\beta &= 6\pi\mu a \left(\mathcal{A}_{ij}^\alpha V_j^\beta + \mathcal{A}_{ij}^\beta V_j^\alpha + a\mathcal{B}_{ij}^\beta \Omega_j^\alpha - a\mathcal{B}_{ij}^\alpha \Omega_j^\beta \right) \\ T_i^\alpha &= 8\pi\mu a^2 \left(\mathcal{C}_{ij}^\alpha V_j^\alpha + \mathcal{C}_{ij}^\beta V_j^\beta + a\mathcal{D}_{ij}^\alpha \Omega_j^\alpha - a\mathcal{D}_{ij}^\beta \Omega_j^\beta \right) \\ T_i^\beta &= 8\pi\mu a^2 \left(-\mathcal{C}_{ij}^\alpha V_j^\beta - \mathcal{C}_{ij}^\beta V_j^\alpha - a\mathcal{D}_{ij}^\beta \Omega_j^\alpha + a\mathcal{D}_{ij}^\alpha \Omega_j^\beta \right) \end{aligned}$$

2-44

où \mathcal{A} , \mathcal{B} , \mathcal{C} et \mathcal{D} sont des tenseurs du second ordre dont les termes ne dépendent que de la configuration géométrique des particules (Kim and Karrila 1991, Jeffrey and Onishi 1984...) (Tableau 2-4). Dans la paramétrisation des forces de lubrification, on calcule de nouvelles forces qu'il faut ajouter à l'ensemble {monopôle + dipôle} existant. Ces forces complémentaires sont basées sur les solutions exactes associées à une paire de particules isolées. Ces termes supplémentaires ne sont activés que lorsque les particules sont distantes d'une longueur inférieure à une valeur critique que l'on désignera dans la suite par barrière de lubrification. Le traitement de ces interactions est fait de façon cumulative et traitant les particules deux par deux. La superposition des forces de lubrification est une simplification du problème réel dépendant de la configuration géométrique complexe de la suspension. Ceci est rendu possible dans la formulation du problème de mobilité sur lequel est basée la FCM : une force et un couple étant fixé pour chaque particule, la FCM permet de calculer la vitesse et le taux de rotation de toutes les particules simultanément. Le problème de mobilité est l'inverse du problème de résistance, plus naturelle dans les expériences car ce sont les forces qui sont les quantités imposées aux particules (forces de gravité, électromagnétiques...) et non les vitesses. En imposant la nullité de la résultante des forces et des couples pour chaque paire de particules, l'intensité des multipôles et par la suite les vitesses sont déterminées à partir de ce calcul par paires. En sommant toutes les interactions par paires, on aura la distribution des forces de lubrification concernant toutes les particules.

	Solution principale	$\mathbf{O}(1)$	+ $\mathbf{O}(\varepsilon)$
$\mathcal{A}_{11}^{(i)}$	= $-0.25 \varepsilon^{-1} + 9/40 \ln \varepsilon + 3/112 \varepsilon \ln \varepsilon$	+	-0.995
$\mathcal{A}_{11}^{(o)}$	= $0.25 \varepsilon^{-1} - 9/40 \ln \varepsilon - 3/112 \varepsilon \ln \varepsilon$	+	0.350
$\mathcal{A}_{22}^{(i)}$	= $1/6 \ln \varepsilon$	+	-0.92
$\mathcal{A}_{22}^{(o)}$	= $-1/6 \ln \varepsilon$	+	0.274
$\mathcal{B}_{23}^{(i)}$	= $-1/6 \ln \varepsilon - 1/12 \varepsilon \ln \varepsilon$	+	-0.159
$\mathcal{B}_{23}^{(o)}$	= $1/6 \ln \varepsilon + 1/12 \varepsilon \ln \varepsilon$	+	0.001
$\mathcal{D}_{11}^{(i)}$	= $1/8 \varepsilon \ln \varepsilon$	+	-1.052
$\mathcal{D}_{11}^{(o)}$	= $-1/8 \varepsilon \ln \varepsilon$	+	-0.15
$\mathcal{D}_{33}^{(i)}$	= $1/5 \ln \varepsilon + 47/250 \varepsilon \ln \varepsilon$	+	-0.703
$\mathcal{D}_{33}^{(o)}$	= $-1/20 \ln \varepsilon - 31/500 \varepsilon \ln \varepsilon$	+	-0.027

Tableau 2-4

Coefficients des tenseurs \mathcal{A} , \mathcal{B} , \mathcal{C} et \mathcal{D} correspondant à la théorie de la lubrification pour une paire de particules isolées (tabulés dans l'article de Dance & Maxey, 2003)

Pour caractériser la largeur de la barrière de lubrification, une distance R_p est fixée autour d'une particule (i), et les forces d'interaction de lubrification sont calculées pour toute particule (j) dont le centre se trouve à l'intérieur du cercle $C_i(R_p)$ autour de la particule (i). Finalement, le monopôle total appliqué à la particule considérée sera de la forme

$$\mathcal{F}^{(i)} = \mathbf{F}^{(i)} + \sum_{j \in C_i(R_p)} \mathbf{B}^{(ij)} \quad 2-45$$

où $\mathbf{F}^{(i)}$ est la force (monopôle) initialement appliquée à la particule (i) (nulle dans notre étude) et $\mathbf{B}^{(ij)}$ est la force de barrière de lubrification que l'on doit calculer pour la paire de particules (i,j). Cette force de lubrification est calculée d'après les équations de 2-46 à 2-51. Le repère ($\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$) utilisé pour ce calcul est relié à la paire de particules, tel que \mathbf{e}_1 est porté par la ligne des centres des deux particules, et \mathbf{e}_2 et \mathbf{e}_3 sont les deux vecteurs dans le plan perpendiculaire à la direction axiale de telle sorte que le repère soit direct. L'indice k est utilisé pour faire référence à une de ces trois directions.



Figure 2-18

Représentation schématique de la zone d'action de la barrière de lubrification (à gauche) et du repère relatif à une paire de particules isolées (à droite).

A un instant donné t_n , les forces de lubrification dans la suspension sont introduites en suivant la méthode suivante:

1. Résoudre les équations de Stokes en imposant aux particules uniquement les monopôles $\mathbf{F}^{(i)}$ (qui sont nuls dans notre cas), sans nécessairement calculer l'intensité des dipôles. Les particules ont alors la vitesse locale du fluide cisailé non perturbé, qu'on note $\mathbf{U}_*^{(i)}(t_n)$
2. Déterminer les zones d'action $C_i(R_p)$ des particules, en faisant attention à ne considérer la paire qu'une seule fois.
3. Calculer l'intensité des barrières de lubrification $\mathbf{B}^{(ij)}$ (eq. 2-46. à 2-51) pour chaque paire de particules (i,j) tel que $j \in C_i(R_p)$.
4. Sommer toutes les barrières de lubrification pour obtenir le monopôle total par particule (eq. 2-45)
5. Résoudre les équations de Stokes (eq. 2-2) en imposant le nouveau monopôle tout en résolvant les itérations du dipôle pour plus de précision (schéma itératif pour l'intensité des dipôles).
6. Calculer les nouvelles vitesses des particules $\mathbf{V}^{(i)}(t_n)$ par intégration des perturbations de vitesse (eq 2-13), ainsi que les vitesses de rotation (eq. 2-14).
7. Déplacer les particules avec les vitesses $\mathbf{V}^{(i)}(t_n)$ (eq. 2-15)

Le calcul de la force de lubrification permet de corriger la valeur du rapport γ^{FCM} égal au rapport entre la force imposée à une paire et la vitesse résultant du calcul de la FCM ($\gamma^{\text{FCM}} = F_k / (6\pi\mu a U_k)$). γ^{FCM} est sous-estimée par rapport au vrai rapport théorique connu pour deux particules en interactions. Ceci est bien évidemment dû au fait que la FCM ne considère que les deux premiers ordres du développement multipolaire et donc sa précision est réduite lorsque les

particules sont proches du contact. Dance & Maxey (2003) ont approximé γ^{FCM} pour les directions axiales et tangentielles sous la forme de polynômes de second degré $\gamma^{\text{FCM}} = a_0 + a_1 \varepsilon + a_2 \varepsilon^2$, dont les coefficients dépendent de l'utilisation ou non du dipôle lors de la résolution numérique (voir Tableau 2-5).

	Direction	a_0	a_1	a_2
$\gamma_1^{\text{FCM-M}}$	axiale (1)	2.7253	-1.4872	0.7579
$\gamma_2^{\text{FCM-M}}$	tangentielle (2/3)	1.7367	-0.6973	0.4670
$\gamma_1^{\text{FCM-MD}}$	axiale (1)	4.0699	-4.9662	3.8485
$\gamma_2^{\text{FCM-MD}}$	tangentielle(2/3)	1.7597	-0.7747	0.5565

Tableau 2-5

Coefficients des polynômes γ_k^{FCM} écrits d'après l'annexe D du travail de Dance & Maxey (2003), calculés dans les directions axiale et tangentielles. $\gamma_k^{\text{FCM-M}}$: monopôle seul - $\gamma_k^{\text{FCM-MD}}$: monopôle+dipôle

Le calcul à l'instant t_n de la barrière de lubrification entre la paire de particules (i,j) tel que $j \in C_i(\mathbb{R}_p)$ se fait donc selon les étapes suivantes:

- Détermination du repère $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ relié à la paire de particules. Les vitesses relatives sont calculées avec précautions sur les frontières du domaine en utilisant les conditions de périodicité : le décalage de vitesse $L\gamma$ est retranché ou ajouté à la vitesse relative entre deux particules si elles se trouvent au voisinage des faces supérieure ($x_2=L$) ou inférieure ($x_2=0$) de la boîte de simulation.
- En supposant que la paire de particule (i,j) est isolée dans un milieu infini, on calcule la force $\mathbf{H}^{(i)}$ qu'il faut ajouter au monopôle $\mathbf{F}^{(i)}$ pour assurer l'égalité suivante

$$\frac{(\mathbf{F}_k^{(i)} + \mathbf{H}_k^{(i)}(t_n)) - (\mathbf{F}_k^{(j)} + \mathbf{H}_k^{(j)}(t_n))}{6\pi\mu\alpha(U_{*,k}^{(i)}(t_n) - U_{*,k}^{(j)}(t_n))} = \gamma_k^{\text{FCM-M}}(\varepsilon)$$

2-46

où la force \mathbf{H} vient compléter le monopôle pour restituer l'interaction hydrodynamique exacte associée à la paire de particules considérées. $\gamma_k^{\text{FCM-M}}$ correspond à la fonction appropriée de la FCM calculée avec le monopôle seulement.

$\mathbf{F}^{(i)} + \mathbf{H}^{(i)}$ représentent la force de traînée appliquée à la particule (i) . $\mathbf{H}^{(i)}$ et $\mathbf{H}^{(j)}$ sont calculées en imposant en plus, l'équilibre des forces de lubrification d'après le principe de l'action-réaction:

$$\mathbf{F}^{(i)} + \mathbf{H}^{(i)}(t_n) = -(\mathbf{F}^{(j)} + \mathbf{H}^{(j)}(t_n))$$

2-47

- Or si on retourne à la solution exacte du problème de résistance d'une paire de particules dans un écoulement de Stokes, on comprend que pour une force imposée $\mathbf{F} + \mathbf{H}$, la paire devrait répondre par une vitesse relative $(\mathbf{U}^{(i),\text{lub}} - \mathbf{U}^{(j),\text{lub}})$ plus faible que $(\mathbf{U}_*^{(i)} - \mathbf{U}_*^{(j)})$ telle que

$$(\mathbf{F}_k^{(i)} + \mathbf{H}_k^{(i)}(t_n)) - (\mathbf{F}_k^{(j)} + \mathbf{H}_k^{(j)}(t_n)) = -6\pi\mu\lambda_k (U_k^{(i),\text{lub}} - U_k^{(j),\text{lub}})$$

2-48

λ_k sont les coefficients qui correspondent à la résolution du problème de résistance pour une paire de particules isolée sans rotation et ils sont déterminées à partir des coefficients des tenseurs \mathcal{A} , \mathcal{B} , \mathcal{C} et \mathcal{D} . Dance & Maxey (2003) ont rassemblé dans leur article les différents résultats de la littérature. Ils ont écrit ces coefficients en fonction de ε (Tableau 2-4). Pour des particules proches, ces coefficients ont un comportement évoluant comme ε^{-1} ; ils tendent donc vers l'infini alors que la vitesse relative tend vers zéro, et le produit donne une valeur finie pour \mathbf{F} .

$$\lambda_1 = \mathcal{A}_{11}^\alpha - \mathcal{A}_{11}^\beta$$

$$\lambda_2 = \frac{(\mathcal{A}_{22}^\alpha - \mathcal{A}_{22}^\beta)(\mathcal{D}_{33}^\alpha - \mathcal{D}_{33}^\beta) - (\mathcal{B}_{23}^\alpha - \mathcal{B}_{23}^\beta)(\mathcal{C}_{32}^\alpha - \mathcal{C}_{32}^\beta)}{(\mathcal{D}_{33}^\alpha - \mathcal{D}_{33}^\beta)}$$

$$\lambda_3 = \frac{(\mathcal{A}_{33}^\alpha - \mathcal{A}_{33}^\beta)(\mathcal{D}_{22}^\alpha - \mathcal{D}_{22}^\beta) - (\mathcal{B}_{32}^\alpha - \mathcal{B}_{32}^\beta)(\mathcal{C}_{23}^\alpha - \mathcal{C}_{23}^\beta)}{(\mathcal{D}_{22}^\alpha - \mathcal{D}_{22}^\beta)}$$

2-49

- d. La force de barrière de lubrification sera donc la contribution qu'il faut appliquer en plus de celle contenue initialement dans la FCM pour obtenir la vraie traînée qui doit être appliquée à la paire de particules. Elle est notée $\mathbf{B}^{(ij)}$ et elle est calculée d'après les équations 2-50 et 2-51:

$$\frac{(\mathbf{F}_k^{(i)} + \mathbf{B}_k^{(ij)}(t_n) + \mathbf{H}_k^{(i)}(t_n)) - (\mathbf{F}_k^{(j)} + \mathbf{B}_k^{(ji)}(t_n) + \mathbf{H}_k^{(j)}(t_n))}{6\pi\mu a \gamma_k^{\text{FCM-MD}}(\varepsilon)} = \mathbf{U}_k^{(i),\text{lub}} - \mathbf{U}_k^{(j),\text{lub}}$$

2-50

$$\mathbf{B}_k^{(ij)}(t_n) + \mathbf{B}_k^{(ji)}(t_n) = 0$$

2-51

Les polynômes $\gamma_k^{\text{FCM-MD}}$ contiennent à la fois la contribution du monopôle et du dipôle (voir Tableau 2-5).

Les modifications induites par la prise en compte des forces de lubrification ont tout d'abord été testées sur les quantités purement hydrodynamiques (Figure 2-19a) : perturbation de la vitesse de translation. Cependant, il est important de se rappeler qu'il ne faut appliquer la barrière de lubrification que lorsque la distance de séparation ε est très petite car les expressions analytiques des coefficients des tenseurs \mathcal{A} , \mathcal{B} , \mathcal{C} et \mathcal{D} sont basées sur des développements limités au voisinage de $\varepsilon \ll 1$. Dans le cas de deux particules dans un écoulement cisailé, les interactions hydrodynamiques sont clairement améliorées quand les particules sont proches du contact. Les résultats pour la fonction B sont moins proches des valeurs analytiques que pour A. En effet, la valeur de la fonction B est associée à la vitesse tangentielle relative entre les deux particules, qui est plus délicate à déterminer dans un écoulement cisailé. Par contre, elle ne doit pas jouer un rôle majeur pour les particules proches car l'effet de la force relative tangentielle est ($O(\ln\varepsilon)$) alors que celui de la force radiale ($O(\varepsilon^{-1})$).

L'effet des forces de lubrification peut être aussi observé sur la trajectoire relative d'une paire de particules dans un écoulement de Stokes (Figure 2-19b). La barrière de lubrification permet non seulement d'empêcher le recouvrement des deux particules, mais aussi de restituer la symétrie amont-aval de la trajectoire relative des deux particules : répulsion du côté du rapprochement et attraction du côté de l'éloignement.

Quand il s'agit d'interactions entre plus de deux particules, Dralter & Schowalter (1996) ont montré qu'avec un pas de temps fini, et contrairement à la réalité physique, les interactions hydrodynamiques toutes seules ne sont pas suffisantes pour éviter l'interpénétration numérique des particules à partir d'une certaine distance de rapprochement même si localement l'écoulement du fluide entre les deux particules est résolu exactement. A partir de cette constatation, il est nécessaire de rajouter des forces de répulsion afin d'éviter le recouvrement dans les simulations. Or on sait que l'ajout d'une force de répulsion entraîne une dérive dans la trajectoire relative malgré le calcul des interactions issu de la lubrification (Figure 2-19b). Bien sûr cette dérive est moins importante que lorsque la force de répulsion est utilisée toute seule.

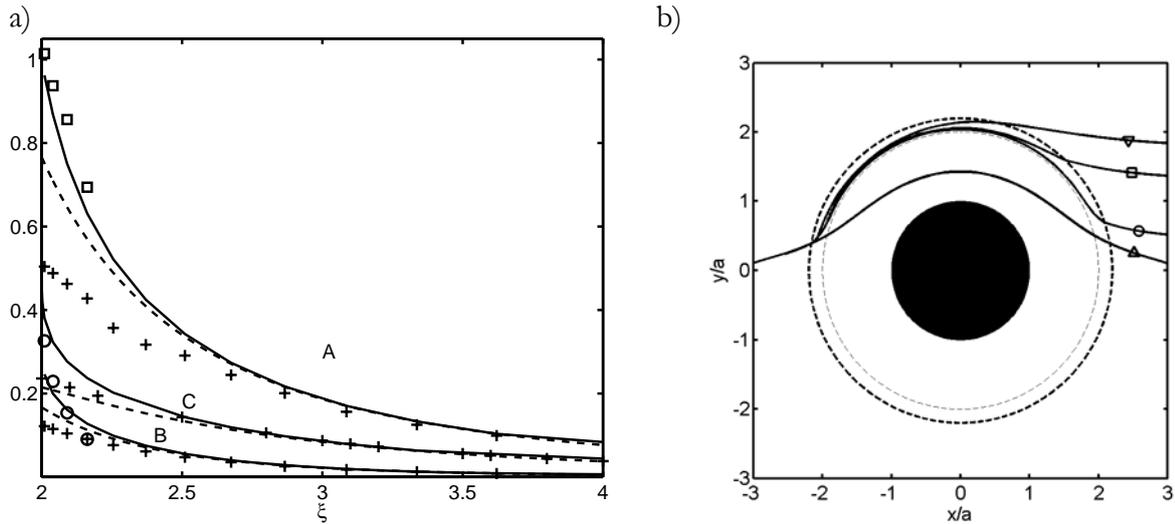


Figure 2-19

a) Amélioration de A et B (par rapport à la Figure 2-5a) en rajoutant les forces de lubrification pour deux particules proches

Traits: même légende que Figure 2-5a

+ : A, B et C avec FCM dipôle ; o et □: A et B avec {FCM dipôle + effets de lubrification ($r \leq 2.2a$)}.

b) Trajectoires relatives des centres de deux particules égales lors du rapprochement induit par le cisaillement.

Position relative initiale: $(-3a, 0.1a, 0)$ – Disque noir: particule de référence

Cercle pointillé fin: limite de recouvrement ($\epsilon=0$) – Cercle pointillé gras: limite de la zone de lubrification ($\epsilon=0.2$)

Δ : (Monopôle + Dipôle)

O: {Monopôle + Dipôle + force de lubrification ($\epsilon \leq 0.2$)}

□: {Monopôle + Dipôle + force de répulsion ($\epsilon \leq 0.05$) + force de lubrification ($\epsilon \leq 0.2$)}

∇ : {Monopôle + Dipôle + force de répulsion ($\epsilon \leq 0.2$)}

Nous avons aussi testé l'influence des deux barrières sur le comportement macroscopique des suspensions étudiées au préalable. Le rayon de la zone d'action de la barrière de lubrification est fixé à $R_p = 2.2a$. Les valeurs choisies pour F_{ref} et R_{ref} sont les mêmes que dans les simulations où la force de barrière de répulsion était utilisée toute seule (1.2 et 2.2a respectivement). L'intensité des fluctuations de vitesses est augmentée d'environ 15% pour les composantes normales et de 5% pour les composantes non diagonales, mais leur distribution (PDF) reste pratiquement identique. Par contre les coefficients d'auto-diffusion qui sont en général plus critiques puisqu'ils dépendent des interactions multi-corps et de la dérive des particules à travers les lignes de courant sont réduits de 35% tout en étant en bon accord avec les simulations numériques de Sierou & Brady (2004) (Figure 2-20). On peut conclure que bien que l'on ait fait un effort particulier pour restituer précisément les effets de lubrification, les résultats sont peu différents de ceux que l'on avait obtenus avec la force de répulsion pure au paragraphe (§ 3-4).

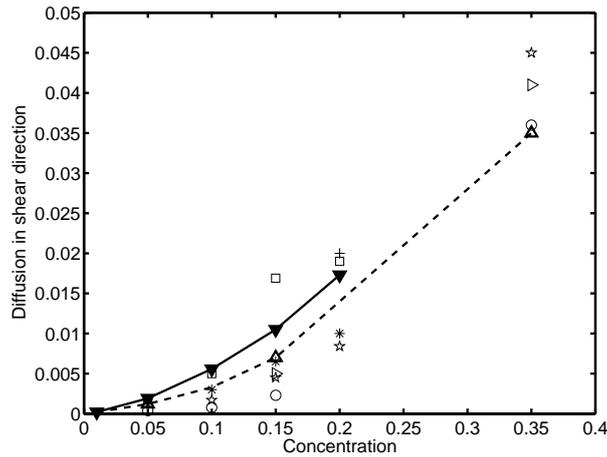


Figure 2-20

Effet de l'ajout des forces de lubrification sur le coefficient d'auto-diffusion induite par le cisaillement.

Même légende que Figure 2-16 pour les différents travaux de la littérature.

△ avec trait pointillé: FCM: {monopôle+dipôle+ force de barrière de répulsion ($\epsilon \leq 0.05$) + force de lubrification ($\epsilon \leq 0.2$)}

3-6 Viscosité

En plus de l'organisation de la microstructure et de la diffusion, l'étude des variations de la viscosité effective de la suspension est nécessaire pour compléter la description du comportement rhéophysique. La viscosité est une quantité physique qui permet de quantifier la capacité de résistance de la suspension à se déformer sous une contrainte donnée. Elle est aussi responsable de la dissipation d'énergie lorsque la suspension est mise en écoulement. Dans un écoulement de cisaillement imposé, le rajout des particules induit une contribution additionnelle aux contraintes dans le fluide entraînant une augmentation de la viscosité apparente de toute la suspension. On peut définir la viscosité effective à partir du déviateur du tenseur des contraintes totales dans la suspension selon l'équation suivante

$$\langle \sigma_{ij} \rangle - \frac{1}{3} \langle \sigma_{kk} \rangle \delta_{ij} = -2E_{ij} \mathbf{u}_{eff}$$

2-52

Dans la limite des suspensions diluées, les interactions hydrodynamiques directes entre les particules sont négligeables. Batchelor (1970) a démontré que sous cette hypothèse (particules très éloignées les une des autres), on peut considérer que la contribution des particules aux contraintes dans la suspension est purement additive. Ces particules ayant une viscosité infinie, le mouvement dans le volume intérieur à A_0 est celui d'une rotation solide. Chaque particule induit donc dans le fluide un Stresslet qui n'est autre que l'intensité du dipôle intégrée sur toute la surface A_0 de la particule, et résultant du remplacement du fluide par les particules solides. Le Stresslet induit par la particule (n) isolée est reliée au taux de déformation du fluide non perturbé par $S_{ij}^{(n)} = (20\pi\mu a^3/3)E_{ij}$. La viscosité effective résultant de la somme de tous les Stresslets (relation proposée initialement par Einstein (1906)) est alors:

$$\frac{\mu_{\text{eff}}}{\mu_f} = 1 + \frac{5}{2}\phi$$

2-53

Pour des suspensions de concentration plus importante (ϕ au voisinage de 10%), les interactions liées aux forces de lubrification peuvent être toujours négligées ; Batchelor & Green (1972b) ont montré de manière théorique que les interactions entre les particules induisent une contribution additionnelle de l'ordre ϕ^2 selon l'équation suivante

$$\frac{\mu_{\text{eff}}}{\mu_f} = 1 + \frac{5}{2}\phi + K\phi^2$$

2-54

où K est un coefficient qui dépend des interactions hydrodynamiques et de la microstructure de la suspension par l'intermédiaire de la fonction de distributions de paires. Les auteurs insistent sur le fait que la forme Newtonienne du terme d'ordre 2 est une conséquence directe de l'hypothèse d'isotropie de la structure de la suspension et donc liée à l'absence de doublets permanents. La détermination théorique de K dans le cas général n'est pas évidente car la solution exacte nécessite la connaissance précise de la fonction de distribution de paires. Celle-ci est basée sur les fonctions hydrodynamiques A et B dont la solution analytique exacte n'est pas connue. Le calcul de Batchelor & Green a abouti à $K > 5$, en particulier $K = 7.6$ dans le cas de particules non Browniennes dans un écoulement purement élongationnel. Batchelor (1977) a trouvé $K = 6.2$ pour le même type d'écoulement chargé avec des particules Browniennes. Dans le cas du cisaillement pur, l'existence de doublets permanents fait diverger la fonction de probabilité de paires et nécessite donc une interaction avec une troisième particule ou l'ajout de force de répulsion qui force la séparation des couples de particules.

Pour des suspensions plus chargées en particules ($\phi \geq 15\%$), la fréquence d'apparition de paires de particules soumises aux forces de lubrification n'est plus négligeable. Batchelor (1970) a expliqué que lorsqu'une paire de particules est soumise à des forces égales et opposées, elles se comportent comme des cordes élastiques qui transmettent les forces (doublet de forces opposées assimilable à un dipôle). La contribution aux contraintes d'une paire de particules (m,n) soumise à une force $\mathbf{F}^{(mn)}$ s'écrit en fonction du vecteur de séparation entre les deux centres de particules $\mathbf{Y}^{(m)} - \mathbf{Y}^{(n)}$ sous la forme:

$$-\frac{1}{L^3} \sum_{(m,n)} F_i^{(mn)} (Y_j^{(m)} - Y_j^{(n)})$$

2-55

Ainsi la viscosité effective totale de la suspension devient

$$\frac{\mu_{\text{eff}}}{\mu_f} = 1 + \frac{5}{2}\phi + K\phi^2 - \frac{1}{L^3 \gamma \mu_f} \sum_{(m,n)} F_i^{(mn)} (Y_j^{(m)} - Y_j^{(n)})$$

2-56

La méthode FCM, permet de calculer les deux contributions: Stresslets et forces de lubrification dans un écoulement cisailé. En effet, il est possible de prendre en compte l'effet des interactions multi-corps et de la microstructure de la suspension (suspensions périodiques : Adler et al. 1985, Nunan & Keller, 1984). La contribution des forces de lubrification est calculée de la même manière que l'équation 2-55 mais en tenant compte du remplacement des forces ponctuelles par des distributions de forces sur le volume des particules. L'existence d'une force à

l'intérieur d'une paire de particules produit un dipôle local agissant sur le fluide. La densité volumique locale de la force à la position \mathbf{x} est alors

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{F}^{(mn)} \left(\Delta(\mathbf{x} - \mathbf{Y}^{(m)}) - \Delta(\mathbf{x} - \mathbf{Y}^{(n)}) \right) \quad 2-57$$

où $\mathbf{F}^{(mn)}$ égale à la force de lubrification dans la paire (m,n) représente l'intensité du dipôle. Le développement limité de l'équation 2-57 au voisinage de $(\mathbf{Y}^{(m)} + \mathbf{Y}^{(n)})/2$ permet d'écrire de manière approchée l'intensité du dipôle en fonction de la distance de séparation des deux particules:

$$f_i(\mathbf{x}) = -F_i^{(mn)} \left(Y_j^{(m)} - Y_j^{(n)} \right) \frac{\partial}{\partial x_j} \Delta \left(\mathbf{x} - \frac{1}{2} (\mathbf{Y}^{(m)} + \mathbf{Y}^{(n)}) \right) \quad 2-58$$

L'équation 2-58 a la forme d'un tenseur des contraintes

$$f_i(\mathbf{x}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \sigma_{ij}^p \quad 2-59$$

où p est utilisée pour faire référence aux particules. Les contraintes dues aux effets de lubrification sont alors:

$$\langle \sigma_{ij}^p(\mathbf{x}) \rangle = - \sum_{m=1}^N \sum_{n=m+1}^N F_i^{(mn)} \left(Y_j^{(m)} - Y_j^{(n)} \right) \Delta \left(\mathbf{x} - \frac{1}{2} (\mathbf{Y}^{(m)} + \mathbf{Y}^{(n)}) \right) \quad 2-60$$

Dans le cas d'une suspension homogène et soumise à une sollicitation isotrope, il n'y a pas d'orientation préférentielle pour les paires de particules et ces contraintes doivent agir de la même façon dans toutes les directions comme une pression.

$$\langle \sigma_{ij}^p(\mathbf{x}) \rangle = - \sum_{m=1}^N \sum_{n=m+1}^N F_i^{(mn)} \left(Y_j^{(m)} - Y_j^{(n)} \right) \quad 2-61$$

Dans le cas d'un écoulement cisailée, la viscosité effective est déduite d'après la composante non-diagonale σ_{12}^p du tenseur des contraintes totales. Le rapport entre la viscosité effective du fluide chargé de particules et sa propre viscosité μ_{eff}/μ_f est tracé dans la Figure 2-21. La viscosité de suspension obtenue par la méthode FCM avec uniquement le dipôle (le monopôle étant nul), est en très bon accord avec la loi d'Einstein (eq. 2-53) pour les faibles concentrations. Quand la concentration augmente, elle est en meilleur accord avec l'évolution quadratique prédite par Batchelor & Green (1972b) (eq. 2-54 avec $K=6.2$). Puis l'ajout des forces de lubrification augmente fortement la viscosité effective de la suspension pour des suspensions concentrées. La corrélation de Krieger & Dougherty (1959) (eq. 2-62) est alors en bon accord avec nos simulations pour $\phi \geq 15\%$.

$$\frac{\mu_{\text{eff}}}{\mu_f} = \left(1 - \frac{\phi}{\phi_m} \right)^{-2.5\phi_m} \quad 2-62$$

Ce modèle est exprimé en fonction du rapport entre la concentration de la suspension et la concentration maximale ϕ_m (qui reste d'ailleurs un paramètre ouvert compris entre 0.524 pour un entassement cubique et 0.74 pour un entassement hexagonal). La Figure 2-21 est réalisée avec la valeur $\phi_m=0.7$ proche de la valeur d'un empilement aléatoire de 0.65 .

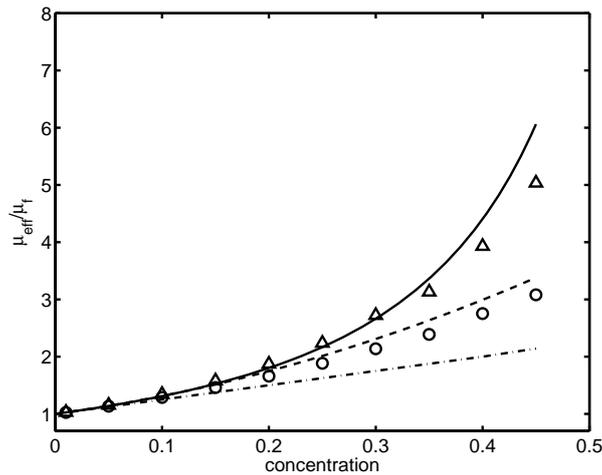


Figure 2-21

Effet des interactions hydrodynamiques sur la viscosité effective de la suspension.

o: FCM {dipôles}

Δ : FCM {dipôles + forces de lubrification ($\epsilon \leq 0.2$)}

-.-.-: Einstein (1906); ----: Batchelor & Green (1972b) avec $K=6.2$;

Trait plein: Krieger & Dougherty avec $\phi_m=0.7$ (1959)

Les résultats proposés dans la Figure 2-21 sont obtenus pour des simulations statiques. Le calcul de la viscosité pour des simulations dynamiques est plus délicat, surtout pour les concentrations importantes. En effet ces simulations nécessitent l'utilisation de la force de répulsion, qui selon Brady & Bossis (1985), réduit la viscosité de suspension empêchant ainsi la persistance de particules en interactions proches.

4- Suspensions bidisperses

Dans la continuité de l'étude des suspensions monodisperses, nous nous sommes intéressés au comportement macroscopique de suspensions bidisperses soumises à un cisaillement pur. En effet, la plupart des applications pratiques sont confrontées à l'utilisation de distributions de particules fortement polydisperses. Une manière simplifiée de modéliser le comportement de la suspension est d'essayer de relier les quantités statistiques à une taille moyenne des particules représentative de l'ensemble de la suspension. A notre connaissance, deux travaux uniquement (Chang & Powell, 1993 et 1994) ont proposé une étude numérique statistique détaillée de l'effet du cisaillement sur les suspensions polydisperses. Ils se sont limités à des configurations bidimensionnelles fortement concentrées (proches de la concentration maximale). On peut citer plusieurs travaux expérimentaux intéressants sur la rhéologie de suspensions bidisperses (Gondret et Petit, 1997 et les références qui y sont citées)

Dans une suspension bidisperse, les petites particules se déplacent plus facilement que les grosses. Toivakka & Eklund (1996) ont montré que dans un écoulement de Couette les suspensions bidisperses subissent un phénomène de ségrégation, les petites migrant vers les parois. Chang & Powell (1994) ont aussi observé des inhomogénéités ; à une concentration totale de 50%, soulevées par la rotation d'ensemble induite par le cisaillement les petites particules ont tendance à être plus présentes dans la partie supérieure de l'écoulement. Ils ont également montré la formation d'amas de particules, due essentiellement aux forces de lubrification. Dans le cas de suspensions plus diluées, ces phénomènes de ségrégation ne sont pas apparents. En effet, pour des simulations à une concentration volumique totale de 10%, nous avons vérifié que des

particules initialement distribuées de manière aléatoire conservaient au cours du temps de la simulation une microstructure statistiquement inchangée. La Figure 2-22 illustre aux instants $t=0$ et $t=150\gamma^{-1}$ la projection des positions des centres de particules dans le plan de cisaillement et le plan perpendiculaire. La répartition dans tout le domaine des petites et des grosses particules prouve que la suspension conserve son homogénéité spatiale au cours du temps. On observe néanmoins une légère tendance des grosses particules à écarter les petites perpendiculairement à la direction de l'écoulement.

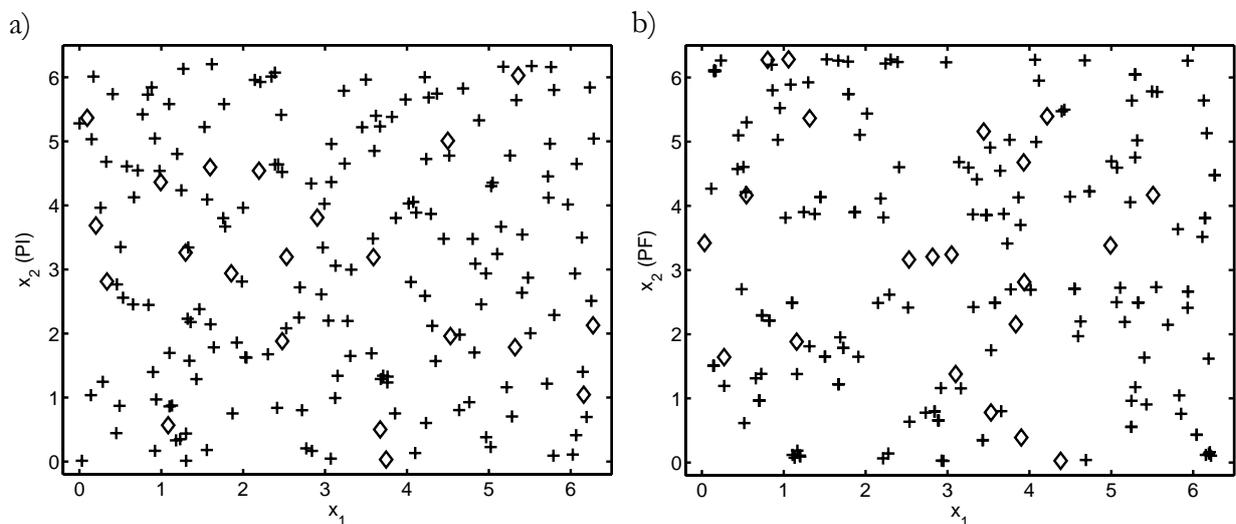
Les forces de répulsion entre les particules proches du contact empêchent l'agglomération, en forçant les particules à se séparer à travers les lignes de courant. La force de répulsion est similaire à celle des suspensions monodisperses (eq. 2-30). Elle est paramétrée pour chaque rapport de taille. La largeur de barrière de répulsion est fixée à $R_{\text{ref}}=2.2$. L'intensité choisie pour la force de répulsion F_{ref} correspond à la plus petite valeur qui empêche le recouvrement de deux particules rapprochées par le cisaillement.

λ	F_{ref}
1	0.3
1.25	0.4
2	0.5
2.5	0.6

Tableau 2-6

Intensité de la force de répulsion F_{ref} pour chaque rapport de taille.

L'analyse systématique des résultats pour des suspensions bidisperses est plus compliquée. En effet, la dynamique dépend simultanément de plusieurs nombres adimensionnels (rapport de taille $\lambda=a_L/a_S$, rapport de concentration volumique ϕ_L/ϕ_S et concentration totale $\phi_t=\phi_L+\phi_S \dots$). Les lettres L et S sont respectivement employées pour désigner les particules de taille différente (« Large and Small »). Nous avons négligé les effets de l'inertie pour toutes les populations des particules étudiées. Nous proposons alors d'étudier l'impact de la variation du rapport de taille et du rapport de concentration volumique sur le comportement de suspensions dont la concentration totale est environ 10%.



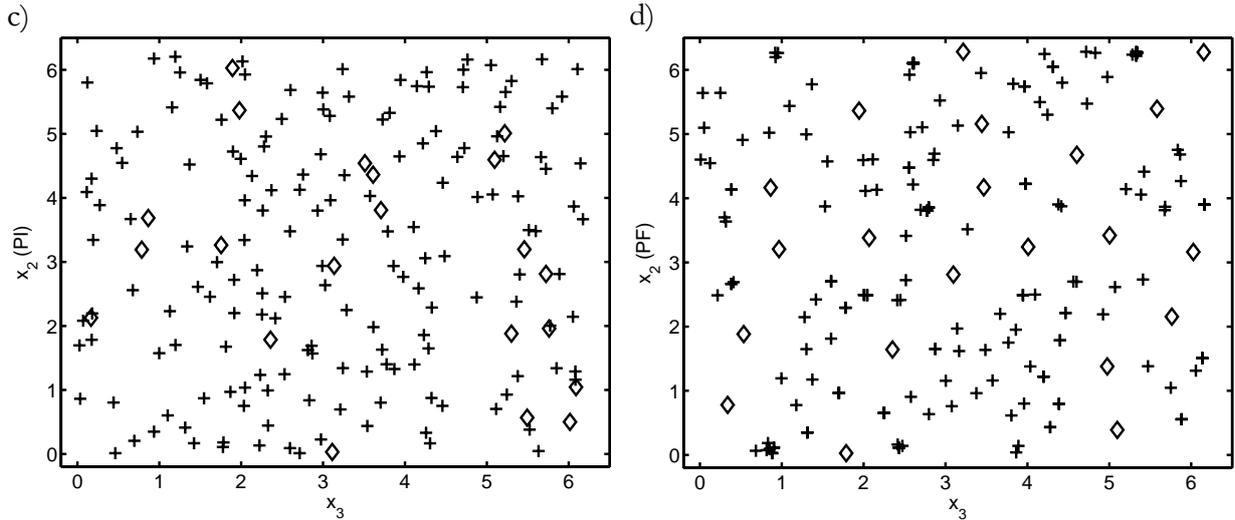


Figure 2-22

Projection des positions de toutes les particules: petites (+) et larges (◇). $\phi_t=10\%$, $\phi_L/\phi_S=1$ et $\lambda=2$
 a) et c) correspondent à $t=0$. b) et d) correspondent à $t=150\gamma^{-1}$. Les figures a) et b) sont des projections dans le plan de cisaillement. c) et d) dans le plan perpendiculaire au plan de cisaillement.

4-1 Effet du rapport de taille ($\phi_S=\phi_L$)

Le rapport de concentration étant fixé à $\phi_L/\phi_S=1$, nous avons étudié l'effet du rapport de taille des particules sur le comportement macroscopique, pour $\phi_t=10\%$. Pour une taille de domaine fixe, le nombre de grosses particules diminue avec le rapport de taille λ . La Figure 2-23a montre l'évolution de la variance des fluctuations de vitesse dans la direction du gradient de vitesse, les autres composantes ayant un comportement similaire. Le niveau de fluctuation de chacune des deux espèces est adimensionné par la taille des particules correspondantes. Cette représentation adimensionnelle facilite l'analyse des résultats permettant par exemple une comparaison directe avec une configuration monodisperse équivalente. Sur le même graphe sont tracés les niveaux de fluctuation de suspensions monodisperses à $\phi=5$ et 10% . Le comportement des fluctuations est différent pour les deux espèces. Quand le rapport de taille augmente, les fluctuations de vitesse des plus petites particules s'amplifient en comparaison avec le cas monodisperse (concentration égale à la concentration totale $\phi=10\%$). Par exemple, quand $\lambda=2.5$, les fluctuations de vitesse des petites particules sont approximativement égales au double du cas monodisperse. La forte présence de petites particules semble empêcher les grosses particules de fluctuer librement. Le niveau de fluctuations de ces dernières diminue alors considérablement, et devient même inférieure au niveau de fluctuations dans une suspension monodisperse pour $\phi=5\%$ (c'est-à-dire si elles étaient seules dans le domaine de simulation).

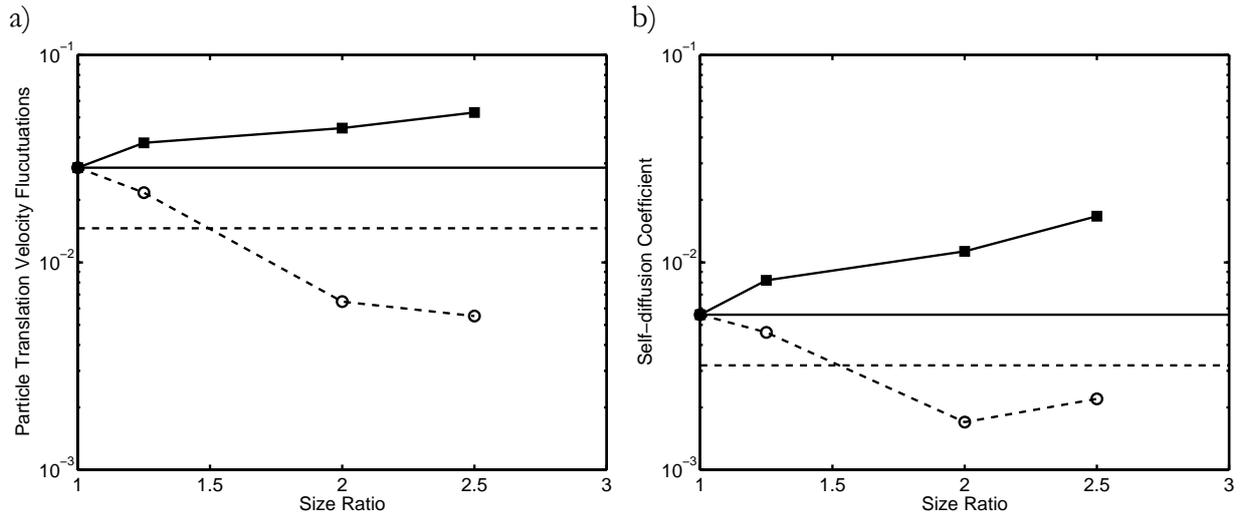


Figure 2-23

Effet de la variation du rapport de taille sur a) les fluctuations de vitesses T_{22} et b) les coefficients d'auto-diffusion

$$D_{22} (\phi_t=10\% \text{ et } \phi_L/\phi_S=1)$$

Carrés avec trait plein: petites particules. Cercles avec trait pointillé: grosses particules.

Traits horizontaux: résultats de la FCM pour les suspensions monodisperses (trait plein $\phi=10\%$ et trait pointillé: $\phi=5\%$).

Les coefficients de diffusion dans les différentes directions ont un comportement similaire à celui des fluctuations de vitesse (Figure 2-23b). D'ailleurs, il était clair dans l'étude monodisperse que le tenseur de coefficient de diffusion est étroitement lié au tenseur d'agitation obtenu dans les différentes directions.

4-2 Effet du rapport de concentration

Dans cette partie, l'influence du rapport de concentration ϕ_L/ϕ_S est étudiée pour un rapport de taille constant ($\lambda=2$ ou $\lambda=2.5$), et pour une concentration totale constante $\phi_t=\phi_L+\phi_S=10\%$. Le Tableau 2-7 résume les différents paramètres des suspensions que nous avons simulées et dont les résultats statistiques seront discutés dans ce paragraphe. Nous analyserons les cas extrêmes de suspensions majoritairement constituées de petites ou grosses particules : rapport de concentration ϕ_L/ϕ_S est faible ou élevé ($\phi_L/\phi_S=1/9$ et $\phi_L/\phi_S=9$ correspondent respectivement à 10% et 90% de grosses particules).

ϕ_L/ϕ_S	λ	N_L	N_S
1	1	1333	1333
1	1.25	1333	684
1	2	1333	167
1	2.5	1333	85
1/9	2	34	2400
1/9	2.5	17	2400
2	2	223	889
5	2	278	444
9	2	900	267
9	2.5	154	267

Tableau 2-7

Paramètres des simulations de suspensions bidisperses

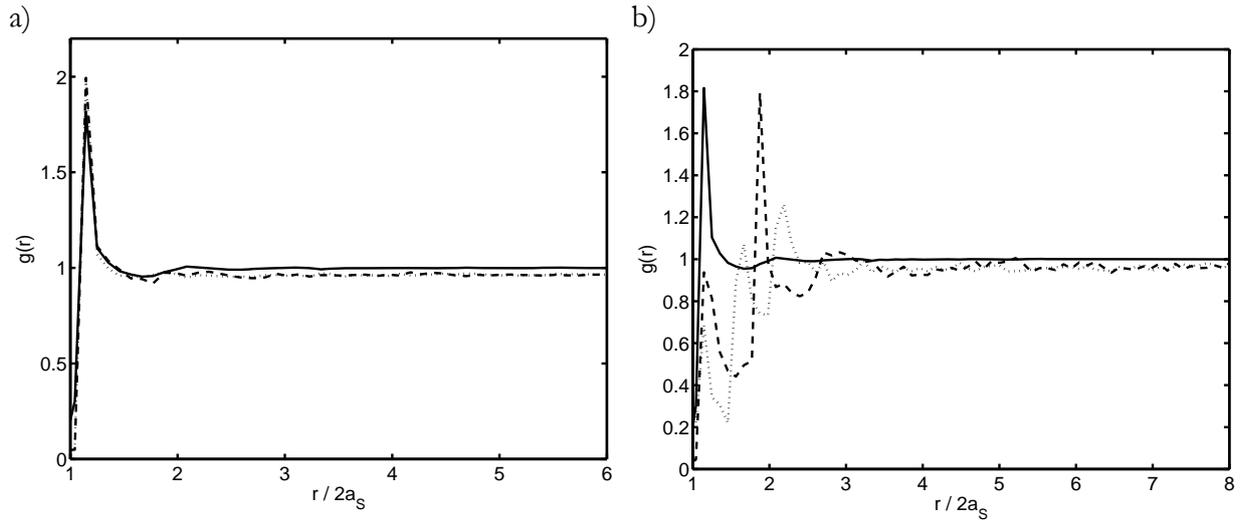


Figure 2-24

Fonction de distribution de paires pour une suspension bidisperse

a) $\phi_L/\phi_S=1/9$ b) $\phi_L/\phi_S=9$

Trait plein: suspension monodisperse ($\phi=10\%$); $\lambda=2$; ----- $\lambda=2.5$

Au niveau de la microstructure, la Figure 2-24 permet d'analyser les modifications de la fonction de corrélation de paires de particules $g(r)$ pour $\lambda=2$ et 2.5 . Pour $\phi_L/\phi_S=1/9$, les petites particules sont majoritaires (Tableau 2-7), donnant lieu à des fonctions de distribution des paires de particules similaires à celle de la suspension monodisperse ($\phi=10\%$) tracée sur le même graphe, avec un pic au voisinage de $r=2a_s$. Par contre, dans le cas $\phi_L/\phi_S=9$, les grosses particules sont dominantes en concentration mais le nombre de particules des deux espèces est comparable. Les fonctions $g(r)$ tracées pour $\lambda=2$ et 2.5 ont chacune trois pics, qui correspondent au rapprochement respectif des couples petite-petite, petite-grosse et grosse-grosse. Pour $\lambda=2$, le rapprochement des grandes particules est dominant alors que pour $\lambda=2.5$, ce sont les rapprochements des particules d'espèce différente qui sont les plus fréquents. Dans les cas bidisperses, on observe que quelques recouvrements ont lieu au cours de la simulation, ce qui explique la légère sous évaluation de $g(r)$ aux grandes distances qui doit converger normalement vers la valeur 1.

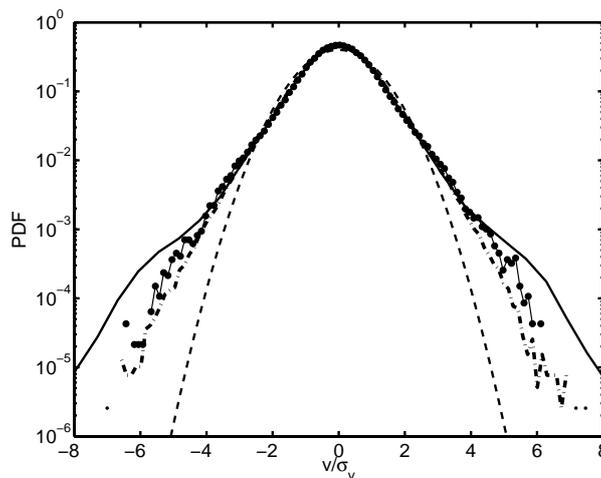


Figure 2-25

Fonction de distribution des fluctuations de vitesse dans une suspension bidisperse ($\phi_L=10\%$)

..... suspension monodisperse. : fonction Gaussienne

Trait plein: $\phi_L/\phi_S=1/9$ - Ligne avec des cercles pleins: $\phi_L/\phi_S=9$

La Figure 2-25 montre la comparaison des fonctions de distribution de vitesse pour des suspensions ayant des rapports ϕ_L/ϕ_S différents. Cette figure illustre que dans les suspensions à faible concentration en petites particules ($\phi_L/\phi_S=9$), il y a conservation d'une forme de distribution de vitesse proche d'une Gaussienne comme cela a été observée pour les suspensions monodisperses à $\phi=10\%$ (ce qui est en accord avec les conclusions tirées sur l'analyse de la microstructure). Dans le cas opposé ($\phi_L/\phi_S=1/9$), la présence de quelques grosses particules parmi les petites favorise l'occurrence plus fréquente d'intenses fluctuations de vitesse. Ces fluctuations de grandes amplitudes sont liées aux interactions avec des grosses particules.

Les Figure 2-26a et b montrent la dépendance des quantités statistiques vis-à-vis du rapport de concentration. Les fluctuations de vitesse ainsi que les coefficients de diffusion des deux espèces augmentent avec l'augmentation du rapport de concentration. Sur ces figures, nous avons ajouté également la comparaison des résultats avec ceux d'une suspension monodisperse ($\phi=10\%$). Pour les faibles (*resp.* élevés) rapports de concentration, le niveau de fluctuations et les coefficients d'auto-diffusion se rapprochent de leur valeur monodisperse pour les petites (*resp.* grosses) particules. Les fluctuations des petites particules, lorsqu'elles sont minoritaires, sont très amplifiées par la présence importante des grosses particules (les fluctuations de vitesse sont presque doublées quand le rapport de concentration ϕ_L/ϕ_S augmente de 1/9 à 9). Chang & Powell (1994) ont trouvé un comportement similaire même quand la suspension est plus concentrée (concentration totale $\phi_t=50\%$). Ces auteurs ont observé un léger minimum dans l'évolution du coefficient d'auto-diffusion en fonction du rapport de concentration quand la quantité de petites particules devient dominante dans la suspension. De plus, nous avons fait figurer sur la Figure 2-26b les valeurs de coefficients de diffusion obtenues par Chang & Powell (1994), en choisissant la composition de suspension la plus proche des conditions de nos simulations (e.g. suspension bidisperse bidimensionnelle avec une concentration surfacique totale de 12%, ce qui est équivalent à une concentration volumique de 8%). Nous avons divisé leurs résultats obtenus pour la direction du gradient par 1.5 (approximation de l'anisotropie de diffusion) pour obtenir des valeurs que l'on peut comparer à nos coefficients d'auto-diffusion dans la direction de la vorticit  (Figure 2-26b).

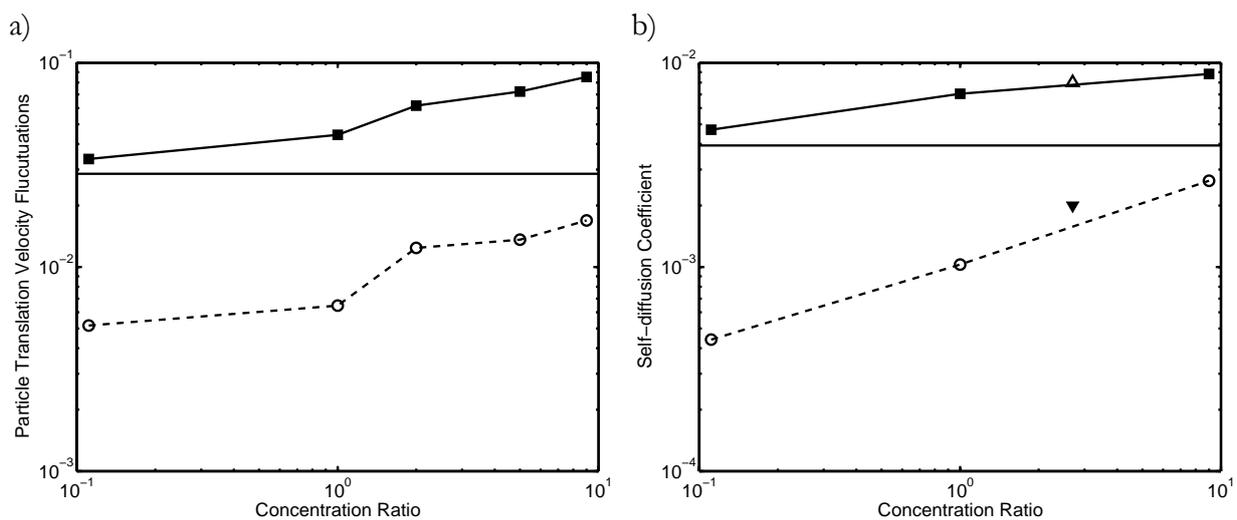


Figure 2-26

Effet du rapport de concentration sur a) les fluctuations de vitesses T_{22} et b) les coefficients d'auto-diffusion D_{22}

($\lambda=2$, $\phi_t=10\%$)

Carrés avec trait plein: petites particules. Cercles avec trait pointillé: grosses particules.

Triangles: simulations de Chang & Powell (1994) - \blacktriangledown : grosses particules - \blacktriangle : petites particules

Traits pleins horizontaux: résultats FCM pour les suspensions monodisperses ($\phi=10\%$).

Nous avons ensuite comparé les fluctuations de vitesse (de translation et de rotation) des deux espèces dans la Figure 2-27. Nous remarquons que le ratio entre fluctuations des grosses particules par rapport aux petites varie peu avec le rapport de concentration ϕ_L/ϕ_S . L'intensité des fluctuations des grosses particules est presque égale à la moitié de celle des petites.

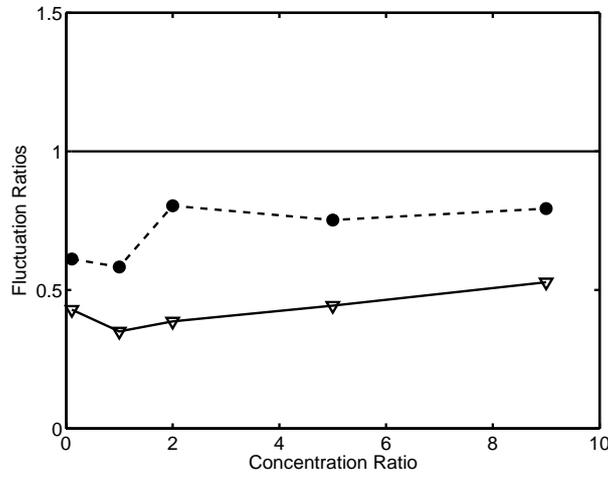


Figure 2-27

Evolution avec le rapport de concentration des fluctuations de vitesse des grosses particules par rapport aux petites
 Triangles avec trait plein: fluctuations de vitesse de rotation w_{33}
 Cercles pleins avec trait pointillé: fluctuations de vitesse de translation T_{22}

Au lieu d'examiner les quantités statistiques séparément pour chaque espèce de particules, il est intéressant de quantifier le comportement macroscopique de la suspension de manière globale et de proposer une définition d'une quantité moyenne représentative. D'un point de vue expérimental, il est presque impossible de mesurer séparément les caractéristiques de chaque espèce. En effet, dans une suspension polydisperse les mesures sont faites sur l'ensemble des particules de différentes tailles et une seule quantité moyenne en est dégagée. Krishnan & Leighton (1995) ont proposé deux définitions du coefficient moyen d'auto-diffusion d'une suspension bidisperse. Le coefficient "global" D_g de diffusion induite par le cisaillement est obtenu à partir de la variance du déplacement de toutes les particules (sans distinction de taille). Il est adimensionné en utilisant le rayon moyen des particules $\langle a \rangle$ défini par l'équation suivante:

$$\langle a \rangle = \frac{a_L \phi_L + a_S \phi_S}{\phi_L + \phi_S}$$

2-63

La Figure 2-28a montre que, pour un rapport de taille λ donné et une concentration totale fixe ($\phi=10\%$) de la suspension, le coefficient de diffusion "global" obtenu à un faible ϕ_L/ϕ_S est plus grand que celui calculé dans le cas monodisperse. Quand ϕ_L/ϕ_S augmente de 1/9 à 9, le coefficient de diffusion est réduit de presque 50%. Ceci suggère que lorsqu'elles sont dominantes, la présence des petites particules parmi les grosses améliore l'auto-diffusion dans toute la suspension. Par contre, quand elles sont minoritaires, leur présence réduit l'agitation et par conséquent l'auto-diffusion. Dans la Figure 2-28b la variation relative du coefficient de diffusion global avec le rapport de taille varie de 18% pour $\phi_L/\phi_S=1$.

a)

b)

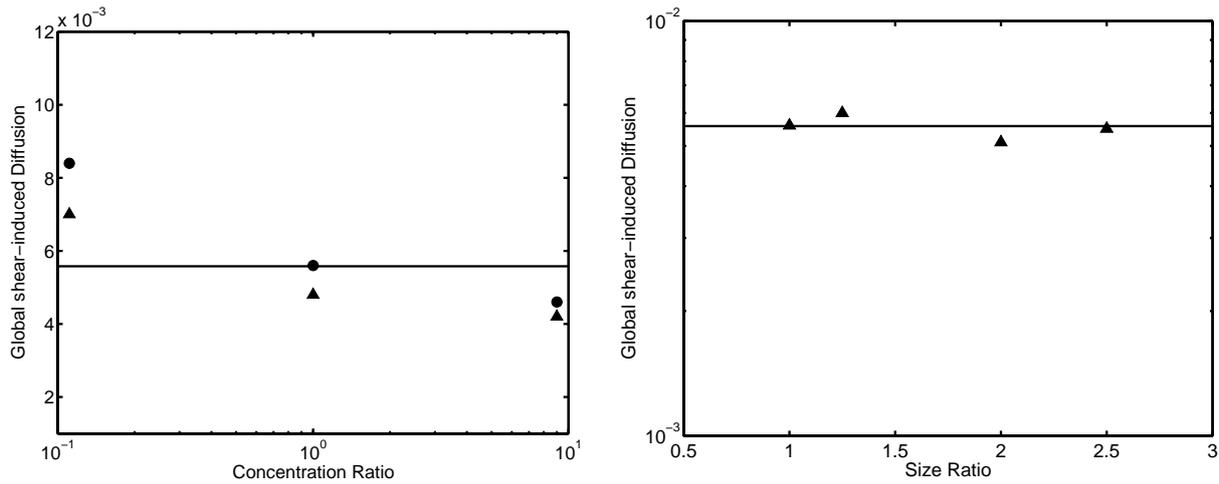


Figure 2-28

Dépendance du coefficient de diffusion global dans la direction du gradient de vitesse en fonction
 a) du rapport de concentration (triangles: $\lambda=2$; cercles pleins: $\lambda=2.5$) et b) du rapport de taille ($\phi_L/\phi_S=1$)
 Trait plein: D_{22} suspension monodisperse (FCM)

On conclut donc que D_g dépend considérablement du rapport de concentration, et dépend légèrement du rapport de taille. Il ne paraît donc pas pertinent de le retenir comme paramètre unique caractérisant une suspension polydisperse. L'autre coefficient "moyen" de diffusion proposé par Krishnan & Leighton (1995) est défini par l'expression suivante

$$\langle D \rangle = \frac{D_g \langle a \rangle^2}{\frac{\phi_L}{\phi_L + \phi_S} D_L(\phi) a_L^2 + \frac{\phi_S}{\phi_L + \phi_S} D_S(\phi) a_S^2}$$

2-64

Le coefficient "moyen" $\langle D \rangle$ est obtenu par comparaison du coefficient de diffusion global $D_g(\phi)$ à un coefficient basé sur la pondération des coefficients de diffusion $D_L(\phi)$ et $D_S(\phi)$ par la proportion volumique que chaque espèce occupe dans la suspension globale.

Nous avons suivi la même méthodologie que les expériences de Krishnan & Leighton (1995) pour la détermination des coefficients de diffusion des petites particules, des grosses particules et du coefficient moyen. En accord avec leurs résultats, nous montrons dans la Figure 2-29, que ce paramètre moyen n'est pas approprié pour décrire les résultats puisque le coefficient moyen varie en fonction du rapport des concentrations. Il ne nous a donc pas été possible de proposer une définition adéquate permettant de donner une mesure représentative de l'auto-diffusion de l'ensemble de la suspension.

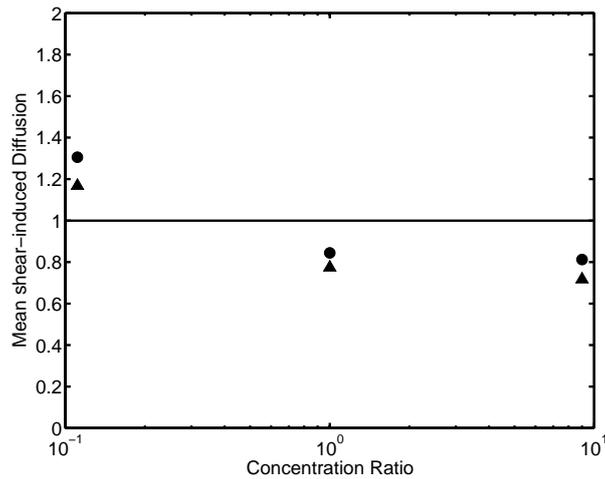


Figure 2-29

Dépendance du coefficient de diffusion moyen (eq. 2-64) en fonction du rapport de concentration
 Triangles: $\lambda=2$; Cercles pleins: $\lambda=2.5$ - Trait plein: D_{22} suspension monodisperse (FCM)

5- Conclusion et perspectives

Dans ce chapitre nous nous sommes attachés à caractériser les quantités macroscopiques et la structure microscopique de suspensions non-colloïdales soumises à un écoulement cisillé en régime de Stokes. La méthode de simulation retenue est la Force Coupling Method. Considérant que les particules ont la même densité que le fluide, nous avons négligé les effets d'inertie et de gravité. Typiquement, les suspensions qui satisfont ces conditions sont constituées de particules micrométriques ($a=O(1-10\mu\text{m})$) suspendues dans un liquide très visqueux ($\nu=O(10^{-4}\text{m}^2\text{s}^{-1})$). En dépit du caractère restrictif de ces hypothèses, de telles suspensions ont une grande importance dans les procédés rencontrés en Génie Chimique. Même si les applications pratiques sont confrontées à des configurations géométriques plus complexes, nous avons choisi la situation simple d'un écoulement de cisaillement pur pour mettre en lumière le rôle des interactions hydrodynamiques sur le comportement global de la suspension. Dans nos simulations, des conditions aux limites périodiques sur les frontières du domaine permettent d'éviter les effets de ségrégation et garantissent l'homogénéité de la suspension permettant ainsi de calculer des statistiques dans une situation modèle. L'origine des interactions des particules est directement liée au transport des particules par l'écoulement porteur non-perturbé : vitesse différentielle en fonction de la position relative des particules dans le cisaillement. Les interactions hydrodynamiques induisent les modifications des positions relatives des centres de particules conduisant la suspension à s'agiter.

Les objectifs de notre travail sont doubles. D'une part, nous avons voulu valider notre méthode de simulation sur une situation où la physique est complexe et la comparer ainsi à d'autres approches numériques ou expérimentales. D'autre part, ces simulations ont été étendues au cas de suspensions bidisperses, ce qui est beaucoup moins courant dans la littérature. Les interactions de champ lointain sont bien reproduites par la FCM. Quand la distance entre les surfaces des particules se réduit fortement, les forces de lubrification et les interactions non

hydrodynamiques deviennent prépondérantes sur le mouvement des particules. C'est le cas par exemple d'une suspension stabilisée où la force d'interaction est principalement répulsive et peut être approchée par une force de type DLVO. La double couche de répulsion électrostatique domine alors les forces attractives de Van der Waals. L'effet de ces forces répulsives sur le comportement global de la suspension a été déjà étudié pour des suspensions modérément concentrées par Da Cunha & Hinch (1996) et Zarraga & Leighton (2001). La dynamique de suspensions dans de telles conditions a aussi été bien documentée dans de nombreuses études expérimentales et numériques (Breedveld et al., 2002; Sierou & Brady, 2004, Drazer et al., 2004).

Après avoir testé la précision de notre méthode numérique sur des systèmes simples (particule isolée et paire de particules), nous avons moyenné dans le temps les quantités relatives aux trajectoires de particules en suspension. Les niveaux de fluctuation de vitesse en translation et en rotation sont anisotropes et croissent d'une façon régulière dans la gamme de concentration étudiée. L'interaction des particules par paires existe légèrement dans des suspensions statiques à cause de l'effet de volume exclu ; elle est accentuée lors de simulations dynamiques sous cisaillement, et sa probabilité d'occurrence augmente avec la concentration. Nous avons trouvé que la distribution spatiale de paires de particules proches du contact est très anisotrope. Cet effet est clairement lié à la force de répulsion qui réduit la formation de paires du côté aval de la particule de référence. Par conséquent, la composante non diagonale de fluctuation de vitesse T_{12} est non nulle suite à cette rupture de symétrie des interactions hydrodynamiques. Les interactions par paires jouent un rôle prépondérant à faible concentration. La forme de la fonction de distribution de fluctuations de vitesse évolue progressivement d'une Gaussienne à une exponentielle étirée quand la concentration diminue. Nous avons observé également que les fonctions d'auto-corrélation ont une boucle négative reliée à l'anti-corrélation des fluctuations de vitesse sur une échelle de temps de l'ordre de $1/\gamma$ montrant que les interactions par paires sont dominantes. Les fluctuations de vitesse restent corrélées pour un temps de l'ordre de $8/\gamma$ avant que l'auto-corrélation de vitesse tend vers zéro. Un régime diffusif induit principalement par les interactions hydrodynamiques résulte de cette perte de corrélation de vitesse. Les coefficients d'auto-diffusion sont déterminés dans les deux directions transverses par deux méthodes distinctes (confortant ainsi la cohérence des résultats). En comparant les valeurs quantitatives de nos coefficients d'auto-diffusion, nous avons trouvé un bon accord avec les études numériques et expérimentales de la littérature. Cette étude sur les suspensions monodisperses a été le sujet d'une publication dans le journal *Chemical Engineering Research and Design* (Abbas et al., 2007) .

Le traitement des effets de lubrification a été validé précisément et permet d'utiliser la méthode FCM pour des suspensions plus concentrées ($\phi=35\%$). La viscosité effective de la suspension est également évaluée dans nos simulations. En prenant en compte l'effet des forces de lubrification par paires de particules, on montre que nos résultats sont en accord soit avec des résultats théoriques pour le régime dilué, soit avec des corrélations classiques lorsque la suspension s'approche du régime dominé par la friction.

Le comportement des suspensions cisillées est plus complexe quand deux espèces différentes sont mélangées. Nous avons étudié les propriétés macroscopiques de ces suspensions bidisperses en faisant varier séparément le rapport de taille et de concentration des deux espèces. Pour un rapport de concentration fixe, nous avons trouvé qu'un rapport de taille croissant entraîne une augmentation (*resp.* diminution) du niveau de fluctuation des petites (*resp.* grosses) particules. Quand le rapport de taille et la concentration totale sont fixes, l'augmentation du nombre de grosses particules entraîne l'augmentation du taux de fluctuation et de la diffusion des deux espèces. Les résultats présentés dans ce chapitre sur les suspensions bidisperses soumises au cisaillement ont abouti, avec une étude menée en parallèle sur les suspensions bidisperses en sédimentation, à la publication d'un article dans le journal *Physics of Fluids* (Abbas et al., 2006).

Nous pouvons conclure que la dynamique d'une suspension cisailée est bien prédite par notre approche numérique, ouvrant de nouvelles perspectives d'études. La FCM est très flexible et nous pouvons envisager de l'implémenter facilement pour la simulation de différentes situations mettant en jeu des forces inter-particulaires. Le mouvement Brownien peut être également modélisé dans la FCM en ajoutant un terme stochastique au mouvement de chaque particule entraînant ainsi un mouvement diffusif. Si les forces inter-particulaires sont principalement attractives, l'agrégation peut avoir lieu et la cinétique de formation d'amas peut être simulée numériquement. Climent et al. (2004) se sont déjà intéressés à la cinétique de formation de chaînes de particules paramagnétiques. L'utilisation de la même approche permettra de tester la stabilité de dispersions colloïdales quand le mouvement Brownien et l'écoulement cisailé sont d'intensité comparable.

Références

- Abbas M., Climent E., Simonin O., Maxey M. R., 2006, "Dynamics of bidisperse suspensions under Stokes flows: Linear shear flow and Sedimentation", *Phys. Fluids* **18**: 121504:1-20
- Abbas M., Climent E., Simonin O., 2007, "Fully coupled simulations of non-colloidal monodisperse sheared suspensions", *ChERD*, **85**, 778-791.
- Acrivos, A., Batchelor, G.K., Hinch, J., Koch, R. and Mauri, D.L., 1992, "The longitudinal shear-induced diffusion of spheres in a dilute suspension", *J. Fluid Mech*, **240**: 651–657.
- Allen, M. P. & Tildesley, D. J., 1987, "Computer Simulations of Liquids". *Oxford University Press*.
- Batchelor, G.K., 1970, "The stress system in a suspension of force free particles", *J. Fluid Mechanics*, **41** (part 3), 545-570.
- Batchelor, G.K. and Green, J.T., 1972a, "The hydrodynamic interaction of two small freely-moving spheres in a linear flow field", *Journal of Fluid Mechanics*, **56**, 375-400.
- Batchelor, G.K. and Green, J.T., 1972b, "The determination of the bulk stress in a suspension of spherical particles to order c^2 ", *J. Fluid Mechanics*, **56**, 401-427.
- Batchelor, G.K., 1977, "The effect of Brownian motion on the bulk stress in a suspension of spherical particles", *J. Fluid Mechanics*, **83**, 97-117.
- Brady, J., and Bossis, G., 1985, "The Rheology of concentrated suspensions of spheres in simple shear flow by numerical simulation", *Journal of Fluid Mechanics*, **155**, 105-129.
- Breedveld, V., Van den Ende, D., Tripathi, A. and Acrivos, A., 1998, "The measurement of the shear-induced particle and fluid tracer diffusivities by a novel method", *J Fluid Mech*, **375**: 297–318.
- Breedveld, V., Van den Ende, D., Bosscher, M., Jongschaap, R.J.J. and Mellema, J., 2001, "Measuring shear-induced self-diffusion in a counter-rotating geometry", *Phys Rev*, **63**: 021403.
- Breedveld, V., van den Ende, D., Bosscher, M., Fongschaap, R.J.J. and Mellema, J., 2002, "Measurement of the full shear-induced self-diffusion tensor of noncolloidal suspensions", *Journal of Chemical Physics*, **116**: 10529–10535.
- Chang, C., and Powell, R., 1993, "Dynamic simulation of bimodal suspensions of hydrodynamically interacting spherical particles," *J. Fluid Mech.* **253**, 1-25.
- Chang, C., and Powell, R., 1994, "Self-diffusion of bimodal suspensions of hydrodynamically interacting spherical particles in shearing flow," *J. Fluid Mech.* **281**, 51-80.
- Climent, E. and Maxey, M.R., 2003, "Numerical simulations of random suspensions at finite Reynolds numbers", *Int. J. of Multiphase Flow*, **29**, 579-601.

- Da Cunha, F. R., and Hinch, E. J., 1996, "Shear-induced dispersion in a dilute suspension of rough spheres". *J. Fluid Mech*, **309**: 211-223
- Dance, S.L., Climent, E., Maxey, M.R., 2004, "Collision barrier effects on the bulk flow in a random suspension", *Physics of Fluids*, **16**, No. 3, 828-831.
- Dance, S.L., and Maxey, M.R., 2003, "Incorporation of lubrication effects into the force-coupling method for particulate two-phase flow", **189**, 212-238.
- Dralter, D.I., and Schowalter, W.R., "Dynamic simulation of suspension of non-Brownian hard-spheres", *Journal of Fluid Mechanics*, **325**, 53-77.
- Drazer, G., Khusid, J.B. and Acrivos, A., 2002, "Deterministic and stochastic behaviour of non-Brownian spheres in sheared suspensions", *J Fluid Mech*, **460**: 307–335.
- Drazer, G., Koplik, J., Khusid, B. and Acrivos, A., 2004, "Microstructure and velocity fluctuations in sheared suspensions", *J Fluid Mech*, **511**: 237–263.
- Durlofsky, J. F. Brady, and G. Bossis, 1987, "Dynamic simulation of hydrodynamically interacting particles," *J. Fluid Mech.* **180**, 21-49.
- Einstein, A., 1906, *Annalen Phys.*, **19**, 298 (et **34**, 594) (dans Brady & Bossis, 1985)
- Glowinski, R., Pan, T.W., Hesla, T.I., and Joseph, D.D., 1999, "A distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows". *Int. J. Multiphase Flow* **25**, 755–794.
- Gondret P. & Petit L., "Dynamic viscosity of macroscopic suspensions of bimodal sized solid spheres" *Journal of Rheology* **41**, 1261-1274 (1997).
- Hu, H.H., 1996, "Direct simulation of flows of solid-liquid mixtures", *Int. J. Multiphase Flows* **22**, 335–352.
- Jeffrey, D., and Onishi, Y., 1984, "Calculation of the resistance and mobility functions for two unequal spheres in low-Reynolds-number flows," *J. Fluid Mech.* **139**, 261-290.
- Kim, S., and Karrila, S.J., 1991, "Microhydrodynamics: Principle and selected applications", *Butterworth-Heinemann, London*.
- Krishnan, G.P., and Leighton, D.T., 1995, "Dynamic viscous resuspension of bidisperse suspensions". *Int. J. Mult. Flows*, **21**, 721-732.
- Kynch, G J., 1959, "The slow motion of two or more spheres through a viscous fluid". *J. Fluid Mech.*, **5**, 193-208.
- Leighton, D. and Acrivos, A., 1986, "Measurement of shear-induced self-diffusion in concentrated suspensions of spheres", *J Fluid Mech*, **177**: 109–131.
- Lin, C.J., Lee, K.J. and Sather, N.F., 1970, "Slow motion of two spheres in a shear field", *Journal of Fluid Mechanics.* **43**, 35-47

- Liu, D., 2004, "Spectral Element/Force coupling method: application to colloidal microdevices and self-assembled particle structures", thèse, *Division of Applied Mathematics, Brown University*.
- Lomholt, S. and Maxey, M.R., 2003 "Force-Coupling Method for particulate two-phase flow. Stokes flow", *Journal of Computational Physics*, **184**, Issue 2, 381-405.
- Marchioro, M. and Acrivos, A., 2001, "Shear-induced particle diffusivities from numerical simulations", *J Fluid Mech*, **443**: 101–128.
- Maxey, M.R. and Patel B.K., 2001, "Localized force representations for particles sedimenting in Stokes flow", *Int. J. of Multiphase Flow*, **27**, 1603-1626.
- Mazur, P., 1987, "Many-sphere hydrodynamic interactions", *Faraday Discuss. Chem. SOC.*, 1987, **83**, 33-46.
- Morris, K.F. and Katyal, B., 2002, "Microstructure from simulated Brownian suspension flows at large shear rate", *Physics of Fluids*, **14**:1910 - 1937
- Pan, T.W., Joseph, D.D., Bai, R., Glowinski, R., Sarin, V., 2002, "Fluidization of 1024 spheres: Simulation and experiment", *J. Fluid Mech.*, **451**, 169–191.
- Patankara, N.A., Singhb, P., Josepha, D.D., Glowinski, R., Pan, T.-W., 2000, "A new formulation of the distributed Lagrange multiplier/ fictitious domain method for particulate flows", *International Journal of Multiphase flows*, **26**, 1509-1524.
- Pesche, R., 1998, "Etude par simulation numérique de la segregation de particules dans une suspension bidisperse", thèse, *Université de Nice-Sophia Antipolis, France*.
- Rouyer, F., Martin, J. and Salin, D., 1999, "Non Gaussian dynamics in quasi-2d non-colloidal suspension", *Phys Rev Lett*, **83**, 1058–1061.
- Shapley, N., Armstrong, R., and Brown, R., 2002 "Laser Doppler Velocimetry measurements of particle velocity fluctuations in a concentrated suspension", *Journal of Rheology*, **46**, 241-272.
- Sierou A. and Brady J.F., "Shear-induced self-diffusion in non-colloidal suspensions", *J. Fluid Mech.*, **506**, 285 (2004).
- Toivakka, M.O., and Eklund, D.E., "Prediction of suspension rheology through particle motion simulation", *Tappi J.*, **79**, 211 _1996.
- Verzicco, R. and Camussi, R., 2001, "Structure function exponents and probability density function of the velocity difference in turbulence", *Physics of Fluids*, **14**: 906–909.
- Wang, Y., Mauri, R., and Acrivos, A., 1996, "Transverse shear-induced liquid and particle tracer diffusivities of a dilute suspension of spheres under a simple shear flow", *J. Fluid Mechanics*, **327**, 255-272.
- Zarraga, I. and Leighton, D., 2001, "Normal stress and diffusion in a dilute suspension of hard spheres undergoing simple shear", *Physics of Fluids*, **14**: 565–577.

Nomenclature of Chapter 3

- a : particle radius.
 a_{ij} : anisotropy coefficients of the tensor T_{ij}
 \mathbf{c} : particle velocity in the phase space
 \mathbf{C} : particle velocity fluctuation in the phase space
 $C(\psi)$: collisional rate of change of ψ
 $C_r(\psi)$: collisional rate of change of ψ for the red particles
 dt : time step
 D/Dt : particular derivative
 d_p : particle diameter
 D_{ij} : self-diffusion tensor
 D_{iso} : self-diffusion coefficient in isotropic suspensions
 e : restitution coefficient
 e_{pw} : restitution coefficient depending on the particle-wall impact velocity
 e_{pp} : restitution coefficient depending on the particle-particle impact velocity
 e_{max} : rebound coefficient for a dry collision (used for e_{pw} and e_{pp})
 e_{ij} : symmetrical part of the velocity gradients in the fluid
 $f(\mathbf{c}, \mathbf{x})$: single velocity distribution function
 $f_0(\mathbf{c}, \mathbf{x})$: Maxwellian velocity distribution function (at equilibrium)
 $f_r(\mathbf{c}, \mathbf{x})$: single velocity distribution function of the red particles
 $f^{(2)}(\mathbf{c}_A, \mathbf{x}_A, \mathbf{c}_B, \mathbf{x}_B)$: pair velocity distribution function
 $f_r^{(2)}(\mathbf{c}_A, \mathbf{x}_A, \mathbf{c}_B, \mathbf{x}_B)$: pair velocity distribution function characterizing the statistics of the red particles
 $f(e)$: probability distribution function of the restitution coefficient
 $f_{gk}(g_k)$: probability density function of the impact velocity
 f_c : collision frequency in ignited state
 f_{cy} : shear-induced collision frequency
 \mathbf{F} : drag force
 \mathbf{g} : relative impact velocity
 g_0 : peak value of the pair probability function at contact
 \mathbf{k} : normal unit vector of colliding particles
 L : width of the cubic simulation domain
 m_p : particle mass
 N : total particle number
 N_c : total number of collisions per unit volume
 n : particle number density
 n_r : density of red particles
 \mathbf{q} : velocity of the gravity center of the colliding particles
 Sc : Schmidt number
 St : Stokes dimensionless number
 St_l : lower limit for the ignited state
 St_q : upper limit of the quenched state
 St_{imp} : Stokes number depending on particle impact velocity
 t : temps
 T : granular temperature
 T_{mod} : model granular temperature based on the assumption of equal normal stresses
 T_{ij} : second order moment of the velocity fluctuations
 \mathbf{u} : fluid velocity field
 $\mathbf{U}_p(\mathbf{x})$: particle ensemble-averaged velocity

$\mathbf{U}_r(\mathbf{x})$: mean velocity of the red particles
 \mathbf{v} : particle instantaneous velocity (in the physical space)
 \mathbf{v}'' : particle velocity fluctuation (in the physical space)
 \mathbf{x} : position in the phase space
 \mathbf{V}_{imp} : particle relative velocity at impact

χ_{ij} : source term of the collisional rate of change of the stress tensor
 ϕ : solid volume fraction or concentration
 ϕ_m : concentration at close packing
 ϕ_{cr} : critical concentration, below which three suspension states may exist
 γ_{ij} : fluid velocity gradient tensor
 γ : shear rate
 λ : anisotropy coefficient
 μ_r : fluid viscosity
 $\mu_{\text{eff}}^{\text{kin}}$: kinetic effective viscosity
 $\mu_{\text{eff}}^{\text{coll}}$: collisional effective viscosity
 μ_s : total effective viscosity
 μ^{kin} : model kinetic viscosity based on the assumption of equal normal stresses
 θ_{ij} : flux term of the collisional rate of change of the stress tensor (collisional stress tensor)
 ρ_p : particle density
 ρ_f : fluid density
 σ_{ij} : total stress tensor
 σ_{ij}^{kin} : kinetic stress tensor
 $\sigma_{ij}^{\text{coll}}$: collisional stress tensor
 τ_p : relaxation time
 τ_c : time between two successive collisions
 $\tau_{c\gamma}$: shear-induced collision time
 ψ : dynamic variable before collision
 ψ' : dynamic variable after collision
 ΔE : energy dissipation due to the inelastic collision between a pair of particles

Chapitre 3 : Sheared suspensions of inertial particles¹

1- Introduction	3-1
2- Theory for agitated suspensions	3-5
2.1 Approximate theory for agitated suspensions	3-6
3- Numerical method	3-12
3.1 Governing equations	3-12
3.2 Numerical model	3-13
3.3 Validation on a binary collision	3-15
3.4 Complementary information on the simulations	3-16
4- Influence of the viscous relaxation time ($e=1$)	3-19
4.1 Particle agitation	3-19
4.2 Velocity distributions	3-21
5- Stokes number effect on the agitation regime	3-22
5.1 Quenched state ($\tau_p \ll \tau_c$)	3-23
5.2 Transition from the quenched to the ignited state	3-24
5.3 Roots of the different states	3-25
5.4 Particle agitation	3-26
6- Stokes number effect on suspension Rheophysics ($e=1$)	3-27
6.1 Diagonal terms of the stress tensors	3-27
6.2 Normal stress difference	3-29
6.3 Shear stress and particulate viscosity	3-33
6.4 Particle self-diffusion	3-36
7- Inelastic collisions	3-46
7.1 Constant restitution coefficient	3-46
7.2 Restitution coefficient depending on the impact velocity	3-50
8- Conclusion & Perspectives	3-53
9- References	3-56

Chapitre 3 : Sheared suspensions of inertial particles

1- Introduction

We aim at investigating the evolution of the suspension rheology, particularly self-diffusion, when the particles have a non-negligible inertia. Inertial particles can have velocities significantly different from the local fluid flow. The slip velocity generates drag forces that do not exist when the motion of neutral particles is exclusively controlled by purely hydrodynamic interactions (Chapter II). Suspensions with finite inertia are investigated in this chapter, in the limit of a vanishingly small Reynolds number. The Brownian motion and gravity effects are neglected. The main dimensionless numbers characterizing the physics of corresponding suspensions are the same as in the previous chapter. The particle inertia is described by the Stokes number ($St=2/9(\rho_p \gamma a^2)/\mu_f$) which evaluates the ratio between the time required by the suspended particles to relax after a sudden local fluctuation of the surrounding flow and the fluid time scale γ^{-1} (ρ_p and a being the particle density and radius respectively, μ_f the fluid viscosity and γ the suspension shear rate). The Reynolds number ($Re=\rho_f a V/\mu_f$) related to a particle moving with a velocity \mathbf{V} compares the inertial to viscous effects in the fluid at the particle microscale (ρ_f being the fluid density). The Brownian agitation is characterized by the Péclet number ($Pe=6\pi\mu_f Va^2/k_B T$) comparing the convective motion of the particles to their thermal agitation energy $k_B T$ (k_B being the Boltzmann constant). The gravity influence \mathbf{g} on the suspension is described by the Archimedes number ($Ar=ga^3\rho_f(\rho_p-\rho_f)/\mu_f^2$) which compares the relative effect of buoyancy and viscous forces.

In the previous chapter, we have shown that when the fluid phase is a liquid, the Stokes number and the Reynolds number are of the same order of magnitude. Heavy particles suspended in a liquid may meanwhile have a finite inertia for an increasing velocity gradient. Most suspensions having finite particle inertia and low fluid inertia are generally of gas-solid type due to high particle to fluid density. An example of the dependence of the dimensionless numbers on the particle size and density in uniformly sheared suspensions ($\gamma=10s^{-1}$ is a typical shear rate of classical applications) is summarized in Figure 3-1. We assumed that the physical properties of the gas are close to the air properties. Horizontal dashed lines limit the common range of particle densities that may be found in engineering applications (ranging from powder of wood coal to uranium particles). Solid lines correspond to dimensionless numbers equal to unity. The Péclet

and Reynolds numbers correspond to vertical lines since they depend only on the particle radius and not on the particle density. The range of particle radius subject to Brownian motions is located on the left of the line $Pe=1$ and non-colloidal particles are on the right. On the left of the line $St=1$, the particle trajectories are weakly influenced by inertia effects, while the suspension may be called inertial suspension on the right of this line. For the line $Re=1$, suspensions standing on the left are described by the Stokes equations (creeping flow), whereas the Navier-Stokes equations have to be used for the fluid motion on the right of this line. The Ar/Re is not shown in this figure because for this range of particle density, the particles are always influenced by gravity. But for simplicity, we chose to neglect the settling of the suspension in order to highlight the effect of shear. In conclusion, we focus on radius and densities of particles standing between the lines $St=1$ and $Re=1$.

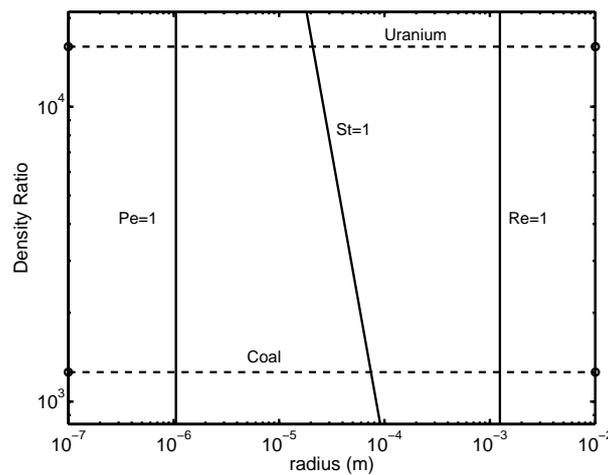


Figure 3-1

Dependence of the dimensionless numbers on the suspension parameters (particle radius and the density ratio ρ_p/ρ_f), the gas considered being the air. Each solid line bounds the regions where the dimensionless numbers are respectively lower or larger than unity.

The motion of the gas phase is considered to be unperturbed by the presence of the particles. In this chapter we simplify the simulations by using the drag force on an isolated particle and the collisions. In the conclusion section, we explain how these simulations may be coupled with the Force Coupling Method.

- *Industrial context*

Many industrial applications are concerned with gas-particle suspensions:

- Solid fuel combustion (pulverized coal combustion and rocket propellant combustion)
- Pneumatic conveying of particles (pharmaceutical, food, coal and mineral powder processing)
- Fluidization (catalytic cracking of intermediate hydrocarbons, polymerization)
- Gas-particle separation (cyclones, electrostatic precipitators, gravity settling and filtration operations)
- Heat transfer applications (cooling of nuclear reactors, solar energy transport using graphite suspension flows)
- Solid dispersion flows (pigment sprays, dust explosions, and nozzle flows).

These phenomena may be also encountered in a natural environment like sand storms, moving sand dunes, aerodynamic ablation leading to cosmic dusts. The optimum design of the

industrial processes and the prediction of natural phenomena require the knowledge of the physics governing these particular flows. Usually, the design of the corresponding engineering configurations is based on empirical models. The aim of this chapter is to make a step forward in developing and validating macroscopic models commonly recommended for gas-solid suspensions. We propose to perform local simulations and the post-processing leads to macroscopic dynamical quantities which can be compared to theoretical predictions.

- *Granular material*

In the limit of high particle inertia ($St \rightarrow \infty$), the suspensions behave like a dry granular material. The mixture is brought about by the granules' random motions which are so reminiscent of the thermal motion of gas molecules that their mean-square velocity is commonly called the "granular temperature".

The dynamics of the granular material is only induced by the collisions and this is precisely described by the kinetic theory. This theory is based on a statistical approach assuming the conservation of the probability density function of the N particle positions and velocities (Chapman and Cowling, 1970). The authors proposed that, when the gas out of equilibrium, the velocity distribution function is a deviated Maxwellian function. The rheology of a dry granular material has been studied in many different works: theoretically (Jenkins and Savage, 1983, Jenkins and Richman, 1985, Lun and Savage, 1987, Garzo 2002, Dufty et al. 2002), experimentally (Hsiau and Hunt 1993, Natarajan et al. 1995, Hsiau and Yang 2001), and numerically (Campbell 1990, Lun and Bent, 1994, Campbell 1997, Clelland and Hrenya 2002, Lutsko et al. 2002...). The momentum transfer and the self-diffusion phenomena depend directly on the granular temperature magnitude. In a sheared granular material, the inelastic collisions are the only dissipation source for the energy injected by the shear; otherwise the granular temperature of the sheared suspension would increase to infinity. It was shown that the sheared particulate phase behaves like a Newtonian fluid.

Based on the kinetic theory, the particle self-diffusion coefficient was expressed in the work of Hsiau and Hunt (1993) in terms of the granular temperature, restitution coefficient, the solid volume fraction, the pair autocorrelation function and the particle radius. This relation can be simply written in terms of the collision time as follows:

$$D = \frac{3}{(1+e)} \tau_c T$$

3-1

By means of molecular dynamic simulations, Campbell (1997) showed that self-diffusion in a sheared granular material can be described by an anisotropic diffusion tensor D_{ij} . He calculated the different diffusion coefficients using both the particle displacement variance and the velocity autocorrelations. He found that all the diffusion coefficients decreased continuously with the concentration and the particle inelasticity. Garzo (2002) determined analytically the coefficients of a tracer diffusion tensor in the frame of the Boltzmann kinetic theory. He emphasized the dependence of the diffusion coefficients on the kinetic stress components instead of the general granular temperature.

- *Effect of a finite relaxation time*

For suspensions with finite particle inertia, the drag force is an additional source of dissipation. While the particles fly randomly in a dry granular material between successive collisions, they are forced to follow the fluid streamlines in a finite time when the drag force is included. Three characteristic time scales are involved in these suspensions, τ_c , τ_p and γ^{-1} . They correspond respectively to the time spent by a given particle to collide with another one, the viscous relaxation time and the time scale related to the shear rate which controls the rate of encounters by shear-induced relative motion.

When the inertia of particles is reduced, the role of the friction with the fluid is enhanced leading to a significant reduction of the kinetic energy of the particles. A dynamical equilibrium sets in balancing the energy injected by the shear and the dissipation induced by the drag. The theoretical background of the flow suspension model is based on the conservation equation of the different kinetic stress components. However, the input of the particle velocity distribution function is essential to determine the collisional rate of change of the stress components. Based on the Grad's development (1949), Jenkins and Richman (1985) used a deviated Maxwellian function for the velocity distribution function in order to calculate explicitly the collisional rate of change of the physical quantities. In the mean time, Sangani et al. (1996) and Boelle et al. (1995) have used the expressions developed by Jenkins and Richman to calculate the granular temperature and the kinetic stresses in the limit of finite particle inertia, with elastic and inelastic collisions. In the same context, models for effective viscosities, based on the granular temperature, the particle relaxation time and the collision time, were introduced by Balzer et al (1995) to realize Eulerian simulations of dense fluidized beds. Nevertheless, none of these studies considered the effect of the finite inertia on the particle mixing, while knowing that the self-diffusion is directly related to the kinetic stress components.

Suspensions with low particle inertia were less investigated because of the difficulty in predicting the correct shape of the velocity distribution function: most particles have small velocity fluctuations. In the limit of dilute suspensions and weak inertia, Tsao and Koch (1995) solved the balance equation for the kinetic stress tensor using the Dirac delta function to calculate the expressions of the collisional rate of change of these components. The underlying assumption is that all colliding particles follow the fluid streamlines with zero velocity fluctuations. The authors considered only perfectly elastic collisions. Following the terminology proposed by Tsao & Koch (1995), "ignited" state for a highly agitated suspension and "quenched" state for weakly agitated particles, we aim at investigating the transition from the quenched to the ignited regime for low to moderately concentrated suspensions.

- Organization of the chapter

The chapter is organized as follows. The theory for agitated suspensions based on the classical kinetic theory, is reminded in section 2. Section 3 contains the description of the numerical method used to achieve the numerical results, and its validation. In sections 4 to 6, we discuss the results for perfectly elastic particles. The drag is then the only dissipative mechanism controlling the macroscopic behavior of the suspension. The simulation results for the granular temperature ($St=1$ to 10 and $\phi=5$ to 30%) are initially compared to the ignited theory prediction in section 4. The distribution of the velocity fluctuations are also shown in this section. For weakly agitated suspensions, the section 5 contains some details recalling the quenched theory which is more appropriate for predicting the statistical behavior in the low inertia regime. The full description of the suspension dynamics (stress and self-diffusion) is discussed in section 6. The components of the Lagrangian self-diffusion tensor are compared to a new theoretical expression developed in this section. Finally, in section 7 we evaluate the relative influence of two dissipative mechanisms, namely the drag force and the inelastic collisions.

2- Theory for agitated suspensions

In a linear flow, the velocity field of the unperturbed fluid flow is simply described by

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \gamma_{ij}$$

3-2

where \mathbf{u} is the fluid velocity and \mathbf{x} indicates the position. γ_{ij} is the shear rate tensor. For a pure shear flow, $\gamma_{12}=\gamma$ is the only component different from zero. The indices are 1 for the flow direction, 2 for the velocity gradient direction and 3 for the spanwise direction (or vorticity direction). γ^{-1} is the characteristic time scale of the flow based on the ambient shear.

We investigate the dynamics of suspensions in the limit of vanishing Reynolds and finite Stokes numbers. They compare respectively the fluid inertial to viscous forces at the particle scale (Re number) and the particle viscous relaxation time to a characteristic time of the flow (St number). The dimensionless numbers are written in a simple shear flow as follows:

$$\text{Re} = \frac{\rho_f \gamma a^2}{\mu_f} \quad \text{St} = \gamma \tau_p = \frac{2 \rho_p}{9 \mu_f} \gamma a^2$$

3-3

where ρ_p and a are the density and particle radius, ρ_f and μ_f are the density and fluid viscosity. As the Stokes number is an indicator of the particle inertia, large values correspond to particles spending a long time to follow the local fluid streamlines. In the limit of small Reynolds numbers, moderate and large Stokes numbers correspond to particles having a high density and a carrying fluid of low viscosity, which is typically the case of solid particles in a gas flow.

We consider the modeling of suspension dynamics with only particle-particle interactions (binary collisions) and particle-fluid interactions (through drag force - isolated particle), neglecting direct hydrodynamic interactions. Hence, the trajectory of a particle is controlled by the time τ_c spent between two consecutive collisions and its ability to recover a trajectory following the local flow streamlines, quantified by the relaxation time τ_p .

$$\tau_p = \frac{m_p}{6\pi\mu_f a} \quad \tau_c = \frac{n}{2f_c}$$

3-4

where m_p is the mass of the particle, n is the particle number density and f_c is the number of collisions occurring per unit of time.

In the absence of gravity and pressure gradient, the force experienced by a particle embedded in the fluid is the drag. The equation of motion of one particle is written by using Newton's second law on an isolated particle:

$$\frac{\mathbf{F}}{m_p} = \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})}{\tau_p}$$

3-5

where \mathbf{v} (*resp.* \mathbf{u}) is the particle (*resp.* fluid) velocity. We neglect hindering effect induced by direct hydrodynamic interactions with neighboring particles. This assumption is valid in the limit of dilute to moderately concentrated suspensions. In the reference paper of Sangani et al. (1996), the direct hydrodynamic interactions were successfully modeled by a corrective function $R_{\text{diss}}(\phi)$ applied to the energy dissipation by the Stokes drag. When using this correction prefactor, it is similar to a reduction of the overall Stokes number of the suspension flow.

While the interparticle distance is continuously reduced by the shear, collisions occur, inducing particle agitation in the suspension. Estimating the level of the particle velocity fluctuations is the keystone of any theoretical approach.

Inertial suspensions $St \rightarrow \infty$

In the limit $St \rightarrow \infty$, the dynamics of nearly elastic particles are similar to those of the molecules in a hard-sphere gas that were traditionally described by a kinetic theory (Chapman and Cowling, 1970). The kinetic theory is based on a statistical approach assuming the conservation of the probability density function of the N particle positions and velocities. The classic Boltzmann equation leads to describe the evolution of the particle velocity distribution function f at one point. The main assumptions required for modeling the behavior of f are that only binary collisions occur (valid for low to moderate volumetric concentration) and that the colliding particles are statistically uncorrelated (no coherent structures in the carrying fluid). This is known as an assumption of "molecular chaos".

Under these approximations, the granular temperature (level of particle velocity fluctuations) of the suspension can be determined from a theory where the overall rheology of the particulate phase is Newtonian. It consists of solving the energy conservation equation which is reduced to a balance between the energy brought by shear and the energy dissipated by inelastic collisions. The value of the granular temperature T was derived by Sangani et al. (1996) and later by Wylie et al. (2002) for nearly elastic particles in the limit of infinite particle inertia

$$\left(\frac{\sqrt{T}}{\gamma a}\right)^2 = \frac{4}{15(1-e)} \left[1 + \frac{\pi}{12} \left(1 + \frac{5}{8\phi g_0}\right)^2\right]$$

3-6

For perfectly elastic particles ($e=1$) and in the limit of high but finite Stokes number, T can be estimated by

$$\frac{\sqrt{T}}{\gamma a} = \frac{16}{15\sqrt{\pi}} St \phi g_0 \left[1 + \frac{\pi}{12} \left(1 + \frac{5}{8\phi g_0}\right)^2\right]$$

3-7

where ϕ and g_0 are respectively the volumetric concentration of the particulate phase and the peak value of the pair probability function at contact.

2.1 Approximate theory for agitated suspensions

We are interested in studying suspensions with a finite particle inertia and inelasticity. The non Newtonian behavior that arises in these typical circumstances can be described using a theory based on Grad's moment. It is based on using an anisotropic Maxwellian function for the velocity distribution in order to obtain differential equations for the stress in the suspension.

Definition of the Probability Density Function

Because the gas velocity is not perturbed by the particle presence, the phase space does not include internal modes of the gas. Therefore, it is related only to the particle positions \mathbf{x} and velocities \mathbf{c} . The dynamic state of the suspension is described by the probability density functions (PDF) of the particle velocity. The single particle velocity distribution function $f(\mathbf{c}, \mathbf{x}, t) d\mathbf{c}$ is the

number density of particles (per unit volume) at position \mathbf{x} and time t with velocities ranging between \mathbf{c} and $\mathbf{c}+d\mathbf{c}$. We are only concern with the steady state of the suspension; therefore statistics are independent of time. \mathbf{c} is the velocity fluctuation resulting from the difference between local velocity \mathbf{c} and ensemble-averaged velocity $\mathbf{U}_p(\mathbf{x})$

$$\mathbf{C} = \mathbf{c} - \mathbf{U}_p(\mathbf{x}) \quad 3-8$$

We consider that particles follow on average the mean shear flow:

$$\frac{\partial U_{p,i}}{\partial x_j} = \gamma_{ij} \quad 3-9$$

The equivalent variables in the physical space are denoted \mathbf{v} for a particle instantaneous velocity and \mathbf{v}'' for its fluctuation. The distribution function in a steady state $f(\mathbf{c}, \mathbf{x}) = f(\mathbf{C})$ allows the determination of the average of any physical quantity through a statistical approach. For instance, the particle number density n , the average particle velocity $\mathbf{U}_p(\mathbf{x})$ and the second order moment of the velocity fluctuations $\langle v_i'' v_j'' \rangle$ can be written as follows:

$$\begin{aligned} n &= \int f(\mathbf{c}, \mathbf{x}) d\mathbf{c} \\ \mathbf{U}_p(\mathbf{x}) &= \frac{1}{n} \int \mathbf{c} f(\mathbf{c}, \mathbf{x}) d\mathbf{c} \\ T_{ij} &= \frac{1}{n} \int C_i C_j f(\mathbf{c}, \mathbf{x}) d\mathbf{c} \end{aligned} \quad 3-10$$

where T_{ij} is the velocity variance leading to the kinetic stress tensor. The average of the velocity fluctuations resulting from this description is null. In the following, we shall use equivalently the notations \mathbf{C} or \mathbf{v}'' to indicate the particle velocity fluctuation, \mathbf{c} or \mathbf{v} for the instantaneous particle velocity, and $\langle C_i C_j \rangle$ or $T_{ij} = \langle v_i'' v_j'' \rangle$ for the velocity fluctuation variance in the physical space.

Modeling the velocity distribution function

An approximate method developed by Grad (1949) is usually adopted to estimate the single particle velocity distribution function f (Jenkins and Richman, 1985). Grad has expanded the velocity distribution function as a series of Hermite polynomial. Neglecting the terms of third and higher order, f may be written as an anisotropic corrected Maxwellian distribution:

$$f(\mathbf{c}, \mathbf{x}) = \left\{ 1 + \frac{1}{2T} a_{ij} \frac{\partial^2}{\partial c_i \partial c_j} \right\} f_0(\mathbf{C}) \quad 3-11$$

where $f_0(\mathbf{C})$ is the isotropic Maxwellian distribution of the velocity fluctuations.

$$f_0(\mathbf{C}) = f_0(\mathbf{c}, \mathbf{x}) = \frac{n}{(2\pi T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\mathbf{C}^2}{2T}\right) \quad 3-12$$

T is the trace of the agitation tensor (variance of the particle velocity fluctuations) $T = T_{ii}/3 = \langle v_i'' v_i'' \rangle / 3$ and it is usually referred as the granular temperature. The anisotropy coefficients a_{ij} can be identified by setting $T_{ij} = \frac{1}{n} \int C_i C_j f(\mathbf{c}) d\mathbf{c}$. This equality leads to

$$a_{ij} = \frac{T_{ij} - T\delta_{ij}}{T}$$

3-13

which indicates that the coefficients a_{ij} are the components of the traceless part of T_{ij}/T . After deriving f_0 and using $a_{ii}=0$, the distribution of velocity fluctuations for a single particle is written as follows:

$$f(\mathbf{C}) = f(\mathbf{c}, \mathbf{x}) = \left\{ 1 + \frac{T_{ij} - T\delta_{ij}}{2T^2} C_i C_j \right\} f_0(\mathbf{C})$$

3-14

The Boltzmann equation

The velocity distribution function is obtained explicitly using a conservation equation similar to the Boltzmann equation for a dense gas (Chapman and Cowling 1970, chap. 16)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (c_i f) + \frac{\partial}{\partial c_i} \left(\frac{c_i - u_i}{\tau_p} f \right) = \frac{\partial_c f}{\partial t}$$

3-15

The influence of the carrying fluid is taken into consideration through the particle acceleration $(\mathbf{c} - \mathbf{u})/\tau_p$. $\partial f/\partial t$ is the change of f due to collisions.

Let $\psi(\mathbf{c})$ be any dynamic variable related to particle motion like momentum or mechanical energy ($m\mathbf{c}$ or $1/2m\mathbf{c}^2$). Its average defined by eq. 3-16 is a function of the position because of the spatial dependence of the velocity distribution function on \mathbf{x} and it is written shortly $\langle \psi \rangle$

$$\langle \psi \rangle = \frac{1}{n} \int \psi(\mathbf{c}) f(\mathbf{c}, \mathbf{x}) d\mathbf{c}$$

3-16

The balance equation for the average $\langle \psi \rangle$ is obtained by multiplying eq. 3-15 with ψ and integrating over the velocity phase space. This procedure is used in the kinetic theory assuming that integrals are convergent, and that $\lim\{\psi(\mathbf{c})/(\mathbf{c}, \mathbf{x})\} = 0$ when any component of \mathbf{c} tends toward infinity. The integrated equation can then be written

$$\frac{\partial}{\partial t} (n \langle \psi \rangle) + \frac{\partial}{\partial x_j} (n \langle c_j \psi \rangle) = n \left\langle \frac{c_i - u_i}{\tau_p} \frac{\partial \psi}{\partial c_j} \right\rangle + C(\psi)$$

3-17

The local temporal variation of $(n \langle \psi \rangle)$ has three origins: the drag force applied by the gas on particles, the flux of particles into the considered volume element and finally the collisions. The influence of collisions on the transport equation is included in the collisional rate of change of the quantity $\langle \psi \rangle$ as following

$$C(\psi) = \int \psi \frac{\partial_c f}{\partial t} d\mathbf{c}$$

3-18

Modeling of the collisional term

The collisional contribution to the right-hand side of eq. 3-17 is expressed in terms of an integral. This was initially used by Enskog for dense gas systems (see Chapman and Cowling 1970, chap. 16). We shall try to explain briefly this approach assuming that the particles are similar to gas molecules.

As a result of any collision at a location \mathbf{x} within a volume element $d\mathbf{x}$, the velocities \mathbf{c}_A and \mathbf{c}_B of the two colliding particles lie in the ranges $d\mathbf{c}_A$ and $d\mathbf{c}_B$ and the normal unit vector \mathbf{k} lies within the solid angle $d\mathbf{k}$. The property Ψ changes to Ψ' and the collisional rate of change per unit volume is written following Chapman and Cowling (1970) or Jenkins and Richman (1985)

$$C(\Psi_A, \mathbf{x}) = \int_{\mathbf{g} \cdot \mathbf{k} < 0} (\Psi'_A - \Psi_A) f^{(2)}(\mathbf{c}_A, \mathbf{x}, \mathbf{c}_B, \mathbf{x} + d_p \mathbf{k}) d_p^2 |\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}| d\mathbf{k} d\mathbf{c}_A d\mathbf{c}_B \quad 3-19$$

where the centers of particles A and B at impact are located at \mathbf{x} and $\mathbf{x} + d_p \mathbf{k}$, $\mathbf{k} = (\mathbf{x}_B - \mathbf{x}_A) / |\mathbf{x}_B - \mathbf{x}_A|$ and $\mathbf{g} = \mathbf{c}_B - \mathbf{c}_A$ is the relative particle velocity. The condition $\mathbf{g} \cdot \mathbf{k} < 0$ indicates that the integration should be only evaluated for values of \mathbf{k} , \mathbf{c}_A and \mathbf{c}_B where a collision is possible. $f^{(2)}$ is the two-particle probability density function (see eqs. 3-24 and 3-25)

The expression of the collisional rate of change was written by Jenkins and Richman (1985) as follows

$$C(\Psi, \mathbf{x}) = \chi(\Psi) - \frac{\partial}{\partial x_j} \theta_i(\Psi) - \frac{\partial U_{p,i}}{\partial x_j} \theta_i \left(\frac{\partial \Psi}{\partial c_j} \right) \quad 3-20$$

where

$$\chi(\Psi_A, \mathbf{x}) = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{g} \cdot \mathbf{k} < 0} (\Psi'_A + \Psi'_B - \Psi_A - \Psi_B) f^{(2)}(\mathbf{c}_A, \mathbf{x} - d_p \mathbf{k}, \mathbf{c}_B, \mathbf{x}) d_p^2 |\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}| d\mathbf{k} d\mathbf{c}_A d\mathbf{c}_B \quad 3-21$$

According to its definition, χ (called the source term) is null for the collisional invariants ($\chi(\text{cste})$, $\chi(c_i)$ and $\chi(c_i c_j)$ for elastic collisions). $\theta_i(\Psi)$ arises from the dense nature of the suspension (Chapman and Cowling, 1970). It contains the flux of the dynamic quantity exchanged for each collision

$$\theta_i(\Psi_A, \mathbf{x}) = -\frac{d_p}{2} \int_{\mathbf{g} \cdot \mathbf{k} < 0} (\Psi'_A - \Psi_A) k_i \left(1 - \frac{d_p}{2!} k_j \frac{\partial}{\partial x_j} + \dots \right) f^{(2)}(\mathbf{c}_A, \mathbf{x}, \mathbf{c}_B, \mathbf{x} + d_p \mathbf{k}) d_p^2 |\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}| d\mathbf{k} d\mathbf{c}_A d\mathbf{c}_B \quad 3-22$$

The last term in the r.h.s of eq. 3-20 is included when the particle property is a function of \mathbf{C} rather than \mathbf{c} .

In case the suspension reaches the equilibrium, the spatial gradients cancel and the local momentum and energy conservation during collisions are extended to a macroscopic level. $\chi(m_p c_i c_j)$ and $\theta_i(m_p c_j)$ will be replaced in the following by χ_{ij} and θ_{ij} .

$f^{(2)}(\mathbf{c}_A, \mathbf{x}_A, \mathbf{c}_B, \mathbf{x}_B)$ used in eqs. 3-19, 3-21 and 3-22 is the two-particle velocity distribution function. It is the probability to find a pair of particles located in the volume elements $d\mathbf{x}_A$ and $d\mathbf{x}_B$ centered at \mathbf{x}_A and \mathbf{x}_B with respective velocities ranging between \mathbf{c}_A , \mathbf{c}_B and $\mathbf{c}_A + d\mathbf{c}_A$, $\mathbf{c}_B + d\mathbf{c}_B$ in the velocity space. It is a function of velocities and positions of the two particles:

$$f^{(2)}(\mathbf{c}_A, \mathbf{x}_A, \mathbf{c}_B, \mathbf{x}_B) d\mathbf{c}_A d\mathbf{x}_A d\mathbf{c}_B d\mathbf{x}_B \quad 3-23$$

Similarly to all the previous studies based on the kinetic theory and molecular chaos, the assumed distribution functions do not consider the presence of the interstitial fluid between particles which could lead to a local correlation of particle velocities. In the kinetic theory of dilute gases, the velocities and positions of particles are assumed to be completely independent and the pair

distribution function is simply given as the product of the two single particle distribution functions

$$f^{(2)}(\mathbf{c}_A, \mathbf{x}_A, \mathbf{c}_B, \mathbf{x}_B) = f(\mathbf{c}_A, \mathbf{x})f(\mathbf{c}_B, \mathbf{x} + d_p \mathbf{k})$$

3-24

However, in the theory of dense gases, molecules are closer to each others. The presence of neighboring particles should be taken into account. Following Enskog's theory, the relation between the complete pair distribution function at collision and the single particle velocity distribution function becomes:

$$f^{(2)}(\mathbf{c}_A, \mathbf{x}, \mathbf{c}_B, \mathbf{x} + d_p \mathbf{k}) = g_0 f(\mathbf{c}_A, \mathbf{x})f(\mathbf{c}_B, \mathbf{x} + d_p \mathbf{k})$$

3-25

The scalar g_0 is a function of the volumetric concentration of particles, equal to the peak value of the radial distribution function at $r=2a$. In a homogeneous suspension g_0 doesn't depend on position.

The statistical number of collisions per time unit is written in eq. 3-26 such that the center of the first particle lies at \mathbf{x} within a volume element $d\mathbf{x}$, the velocities \mathbf{c}_A , and \mathbf{c}_B of the two particles lie in the ranges $d\mathbf{c}_A$ and $d\mathbf{c}_B$ and \mathbf{k} lies within the solid angle $d\mathbf{k}$

$$f^{(2)}(\mathbf{c}_A, \mathbf{x}, \mathbf{c}_B, \mathbf{x} + d_p \mathbf{k}) d_p^2 |\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}| d\mathbf{k} d\mathbf{c}_A d\mathbf{c}_B d\mathbf{x}$$

3-26

The pair distribution function can be expanded as a Taylor series in the vicinity of \mathbf{x} (Jenkins and Richman, 1985), truncated in a way which can be justified when the spatial gradients of the mean fields are weak

$$f^{(2)}(\mathbf{c}_A, \mathbf{x}, \mathbf{c}_B, \mathbf{x} + d_p \mathbf{k}) = g_0 f(\mathbf{c}_A, \mathbf{x}) \left(f(\mathbf{c}_B, \mathbf{x}) + d_p k_i \frac{\partial f(\mathbf{c}_B, \mathbf{x})}{\partial x_i} \right) + \frac{d_p}{2} k_i \frac{\partial g_0}{\partial x_i} f(\mathbf{c}_A, \mathbf{x}) f(\mathbf{c}_B, \mathbf{x})$$

3-27

Assuming that the concentration is uniform throughout the entire suspension, the last term cancels.

Transport of the velocity moments

The eq. 3-17 is used to describe the transport of any dynamic quantity ψ . The mass (or number density) conservation equation is given by replacing $\psi=1$

$$\frac{Dn}{Dt} = 0$$

3-28

with the total derivative $D/Dt = \partial/\partial t + U_{pj} \partial/\partial x_j$ defined relatively to the ensemble-averaged velocity of the particles \mathbf{U}_p .

The momentum transport equation is obtained for $\psi = m_p c_i$

$$\rho_p \phi \frac{DU_{p,i}}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_j} \sigma_{ij} = -\rho_p \phi \frac{1}{\tau_p} (U_{p,i} - u_i)$$

3-29

This equation shows clearly that at steady state and for a given mean slip between the particle motion and the fluid flow, there is a stress gradient due to dissipation by the fluid. This contribution is absent in purely dry granular material. However, the viscous term vanishes in the particular case of a shear flow where the average motion of the particles follows the mean flow of

the bulk. The stress is homogeneous in the suspension. The stress tensor σ_{ij} is split into kinetic and collisional contributions:

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^{\text{kin}} + \sigma_{ij}^{\text{coll}} \quad \sigma_{ij}^{\text{kin}} = \rho_p \phi T_{ij} \quad \sigma_{ij}^{\text{coll}} = \theta_{ij} \quad 3-30$$

The kinetic stress transport equation is obtained for $\psi = m_p c_i c_j$

$$\rho_p \phi \frac{DT_{ij}}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho_p \phi \langle v''_i v''_j v''_k \rangle + \theta_{ijk} \right) = - \left[\sigma_{ki} \frac{\partial U_{p,j}}{\partial x_k} + \sigma_{kj} \frac{\partial U_{p,i}}{\partial x_k} \right] - \rho_p \phi \frac{2}{\tau_p} T_{ij} + \chi_{ij} \quad 3-31$$

where $\langle (\delta_{ik} c_j + \delta_{jk} c_i) (c_k - u_k) / \tau_p \rangle$ is replaced by $-(2/\tau_p) T_{ij}$. In the case of homogeneous shear flow, the spatial gradients of the fluctuations are considered very small and the transport equation of the kinetic stress becomes

$$\gamma_{jk} \left(T_{ki} + \frac{1}{\rho_p \phi} \theta_{ki} \right) + \gamma_{ik} \left(T_{kj} + \frac{1}{\rho_p \phi} \theta_{kj} \right) + \frac{2}{\tau_p} T_{ij} = \frac{1}{\rho_p \phi} \chi_{ij} \quad 3-32$$

A similar equation has been reported in the work of Boelle et al. (1995) and Sangani et al. (1996). The only difference in Sangani's paper is the dissipation coefficient R_{diss} modeling direct hydrodynamic interactions between neighboring particles. This will be discussed in more details later in §7.

The expressions of χ_{ij} and θ_{ij} were written in terms of T and a_{ij} in the work of Sangani et al. (1996) by integrating equations 3-21 and 3-22 and neglecting the terms that are quadratic or higher order in a_{ij}

$$\chi_{ij} = \rho_p \phi^2 \eta g_0 \left\{ -\frac{48}{5\pi^{1/2} a} T^{3/2} \left[(2-\eta) a_{ij} + \frac{5}{3} (1-\eta) \delta_{ij} \right] + \frac{24}{5} T \left[(3-2\eta) e_{ij} - \left(\eta - \frac{2}{3} \right) e_{kk} \delta_{ij} \right] \right\} \quad 3-33$$

$$\theta_{ij} = \rho_p \phi^2 \eta g_0 \left[4T \left(\delta_{ij} + \frac{2}{5} a_{ij} \right) - \frac{32}{5\pi^{1/2}} a T^{1/2} \left(e_{ij} + \frac{1}{2} e_{kk} \delta_{ij} \right) \right] \quad 3-34$$

where $\eta = (1+e)/2$ is related to the inelasticity effect and $e_{ij} = (\gamma_{ij} + \gamma_{ji})/2$.

Finally, substituting the expressions for χ_{ij} and θ_{ij} in eq. 3-32 and using $a_{ii} = 0$, the components of a_{ij} and the granular temperature T can be determined. A general solution for an arbitrary inhomogeneous shear is difficult to obtain. However, in a simple shear flow the solution was written explicitly in Sangani et al. (1996) for two cases:

- At finite Stokes number and for perfectly elastic collisions:

$$\omega^3 + \omega^2 \left[2\text{St}^{-1} - \frac{1}{6} \text{St} \left(1 + \frac{8}{5} \phi g_0 \right)^2 - \frac{128}{25\pi} \text{St} \phi^2 g_0^2 \right] + \omega \left[\text{St}^{-2} - \frac{256}{25\pi} \phi^2 g_0^2 \right] - \frac{128}{25\pi} \text{St}^{-1} \phi^2 g_0^2 = 0 \quad 3-35$$

where

$$\omega = \frac{24}{5\sqrt{\pi}} \phi g_0 \frac{\sqrt{T}}{\gamma a}$$

3-36

- At finite Stokes number and for inelastic collisions, the complete equation for the root-mean square of the granular temperature is

$$\sum_{k=0}^4 d_k \omega_\eta^k = 0$$

3-37

where the dimensionless quantity ω_η is based on the dimensionless ratio $T^{1/2}/\gamma a$

$$\omega_\eta = \frac{24}{5\sqrt{\pi}} \phi g_0 \eta (2 - \eta) \frac{\sqrt{T}}{\gamma a}$$

The dependence of the solution on the collision inelasticity is indicated by the subscript η . The polynomial coefficients d_k are functions of the dimensionless ratios and do not depend on the shear rate.

$$\begin{aligned} d_4 &= 15(1 - \eta) \\ d_3 &= (48 - 39\eta)St^{-1} \\ d_2 &= 3\left[(17 - 11\eta)\overline{St}^{-2} - \phi^2\alpha\right] - \frac{1}{2}\left(1 + \frac{8}{5}\phi\chi\right)\left\{2\eta + 1 - \frac{8}{5}\phi\chi(9\eta^3 - 24\eta^2 + 7\eta + 5)\right\} \\ d_1 &= 3(2 - \eta)\overline{St}^{-1}\left[3\overline{St}^{-2} - 2\alpha\phi^2 + \frac{4}{5}\phi\chi\left(1 + \frac{8}{5}\phi\chi\right)(1 - \eta)(3\eta + 1)\right] \\ d_0 &= -3\alpha\phi^2\overline{St}^{-2}(2 - \eta) \end{aligned}$$

with

$$\alpha = \frac{384}{25\pi} g_0^2 \eta^2 (2 - \eta)$$

The coefficients leading to the kinetic stress components are the following:

$$a_{22} = a_{33} = -\frac{a_{11}}{2} = -\frac{5(1 - \eta)\omega_\eta + 3(2 - \eta)St^{-1}}{3(2 - \eta)(\omega_\eta + St^{-1})}$$

3-38

$$a_{12} = \frac{1}{2(\omega_\eta + St^{-1})} \left\{ -\left(1 + \frac{8}{5}\phi g_0 \eta\right) a_{22} - (1 + 4\phi g_0 \eta) + \frac{12}{5}\phi g_0 \eta (3 - 2\eta) \right\}$$

Eq. 3-35 indicates that once the shear is imposed to the suspension, the dimensionless granular temperature $T/\gamma^2 a^2$ is a function of the suspension characteristics (Stokes number, concentration and inelasticity) and it doesn't depend on the shear rate magnitude.

3- Numerical method

3.1 Governing equations

In the absence of gravity, fluid turbulence and mutual hydrodynamic interactions, the motion of both the unperturbed sheared flow and the particle ensemble-averaged motion are described by:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \frac{\partial U_{p,i}}{\partial x_j} = \gamma_{ij}$$

The numerical scheme is based on a Discrete Particle Simulation (DPS) method. A single particle experiences the drag as the unique external force. The Lagrangian tracking of each particle is carried out using the following equations with dimensionless quantities:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{1}{St}(\mathbf{v} - \mathbf{u}) \quad \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v} \quad 3-39$$

When two particles come into contact, a rebound occurs with a restitution coefficient e which is the ratio of the normal relative particle velocities before and after collision. A hard-sphere model is used to treat particle collisions. The velocities after rebound are calculated using the following assumptions:

- The collision is binary, which is in agreement with the theoretical assumptions of §2. This assumption is valid for low to moderately concentrated suspensions. The particle rotation is neglected during the collision.
- All the collisions are assumed to be instantaneous. The friction and sliding during the particle contact are neglected.
- Particles do not deform during contact.

For two equal particles colliding with impact velocities \mathbf{v}_A and \mathbf{v}_B , the velocities \mathbf{v}'_A and \mathbf{v}'_B after rebound are given by

$$\mathbf{v}'_A = \mathbf{v}_A - \frac{1}{2}(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})\mathbf{k}(1 + e) \quad \mathbf{v}'_B = \mathbf{v}_B + \frac{1}{2}(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})\mathbf{k}(1 + e) \quad 3-40$$

where \mathbf{k} is the normal unit vector $\mathbf{k} = (\mathbf{x}_B - \mathbf{x}_A) / |\mathbf{x}_B - \mathbf{x}_A|$ and $\mathbf{g} = \mathbf{v}_B - \mathbf{v}_A$ is the relative particle velocity (see Figure 3-2 for definitions).

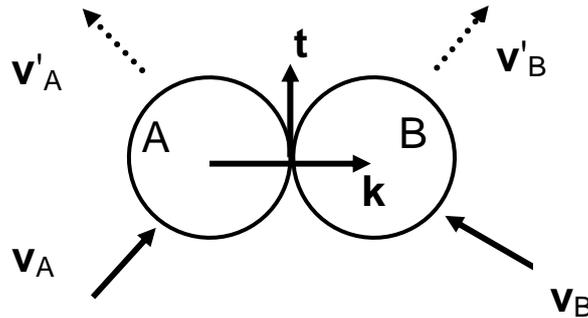


Figure 3-2

Definition of the collision parameters for particles A and B. \mathbf{k} and \mathbf{t} are the normal and tangential unit vectors.

3.2 Numerical model

The simulation model follows the steps of the algorithm sketched in Figure 3-3. At each time step, the particle positions and velocities are integrated from the previous time step. The update of the particle velocities and positions at the next time step t_n can be broadly divided into the following steps:

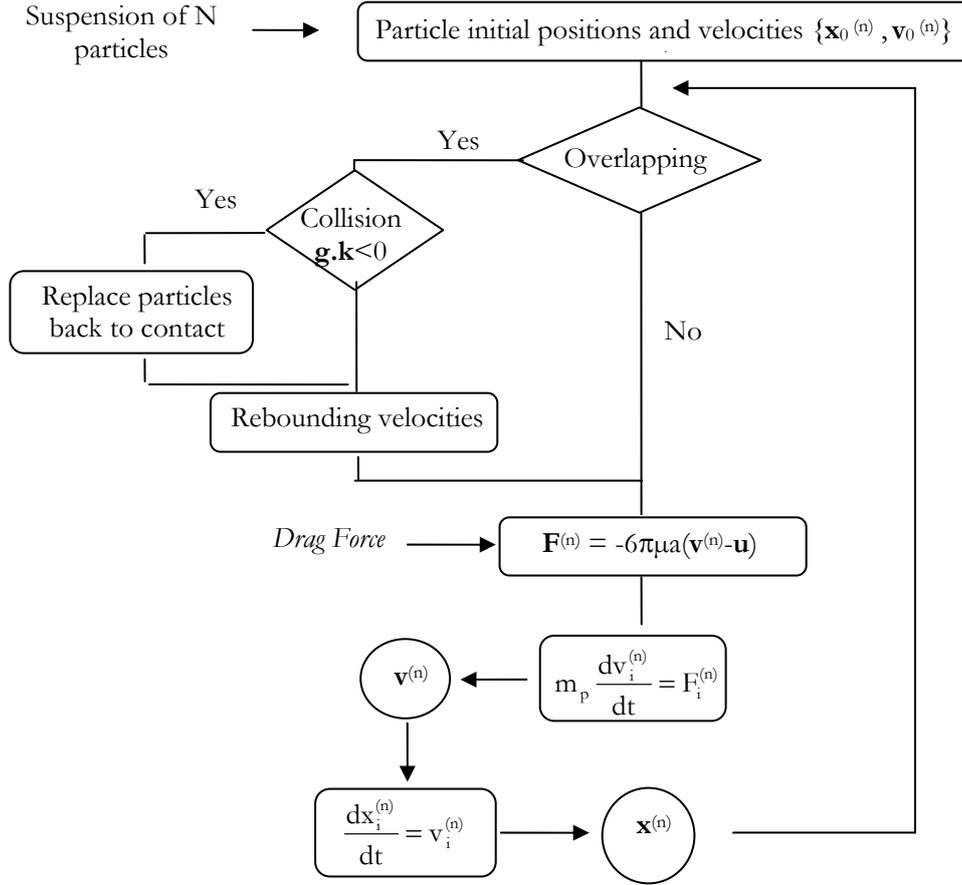
- Detection of all the collisions occurring following the particle displacement of the previous time step dt .
- Evaluation of the velocities for the particles involved in binary collisions.
- Calculating the net force applied on each particle using its new velocity.
- Update of the particle positions.

Concerning the collision detection, we consider that a collision occurs when the distance between the two particle centers is less or equal to their diameter ($|\mathbf{x}_B - \mathbf{x}_A| \leq 2a$). The colliding partners of a given particle are determined through the entire list in the suspension. The number of operations required to detect collisions is then $O(N^2)$ and this method becomes prohibitive for high volume fractions ($\phi > 30\%$ corresponding to 8000 particles). This algorithm has been selected because of its simplicity but there exist more efficient methods dedicated to collision detection when the particle number is high, see for instance the “Particle Neighbor List” method, first introduced by Hopkins and Louge (1991) and Sundaram and Collins (1996).

The selection of an appropriate time step is crucial to detect correctly the collisions. Two different methods are possible:

- Proactive method: this is an event driven method. It consists of calculating, at the time t_n , the collision time dt_c^{AB} (if it exists) for all neighboring particles A and B. The collision of the pair with the smallest dt_c^{AB} is operated first and the clock is advanced to the time $t_n + dt_c^{AB}$ while computing all the other particle trajectories.
- Retroactive method: this is based on using a fixed time step dt . At the instant t_n all the overlapping particle pairs are detected. Then, the time decrement $\delta t < dt$ which allows to move the corresponding particles backward in time to the instant of collision is calculated. The velocities after rebound are determined and the particles are moved again forward in time.

The proactive method (used for example in the simulations of Clelland and Hrenya, 2002) is more appropriate to prevent collision omissions. However, it requires a CPU time twice larger than the retroactive test (Sundaram and Collins, 1996). The retroactive method was used to perform our simulations.


Figure 3-3

Numerical method for simulating inertial suspensions. The index n refers to the particle number.

3.3 Validation on a binary collision

The numerical scheme was first validated on two particles colliding at a 45° angle of incidence (see Figure 3-4). Their trajectories after collision were compared to the analytical solution in the plane of shear (Sundaram and Collins, 1996)

$$x_1^m = \frac{(-1)^{m-1}}{2\sqrt{2}} St \left[\frac{t-1}{St} + (1+2St)(e^{-t/St} - 1) + t(e^{-t/St} + 1) \right]$$

3-41

$$x_2^m = \frac{(-1)^{m-1}}{2\sqrt{2}} \left[1 + St(1 - e^{-t/St}) \right]$$

3-42

In the equations, m refers to the particle number, 1 for the lower and 2 for the upper one (see Figure 3-4). The particle positions and the time t are made respectively dimensionless by the particle radius and the shear rate. Before collision, both particles were following the streamlines of the fluid flow. After collision, the ability of the particles to follow again the fluid streamlines decreases as the particle inertia increases corresponding to high Stokes number. In Figure 3-4, the dashed and solid lines are overlapped showing very good agreement with the analytic solution for any value of St provided that the time step has been properly chosen. It is interesting to note that

when $St < 0.44$, multiple collisions may occur (successive collisions may even occur at $St=1$ when the vertical separation distance at first impact is lower).

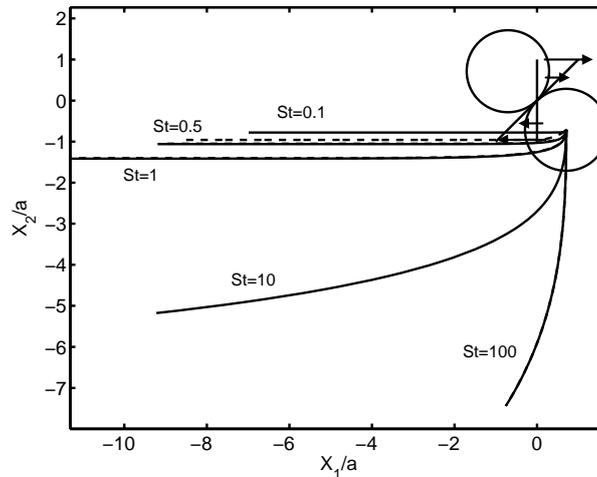


Figure 3-4

Post-collision trajectories of two particles in a shear flow. The trajectory of each particle after collision depends on the Stokes number. Solid and dash lines are respectively the analytical and numerical trajectories.

3.4 Complementary information on the simulations

The simulations are performed in a periodic cubic domain of width L equal to 2π . The particle size is kept constant ($L/a \approx 48$) and various volumetric concentrations of the suspension are investigated when varying the total number of particles (typically 4000 particles correspond to a volumetric solid concentration equal to 15%). Periodic boundary conditions on the three directions of the domain helped preserving the homogeneity of the suspension under shear. When a particle exits the simulation domain from the bottom (resp. upper) boundary, it appears on the opposite side and its velocity should be adjusted by adding (resp. subtracting) the local flow velocity γL . This is equivalent to applying the shear in a dynamic way by means of the Lees-Edward boundary conditions (Allen and Tildesley, 1987). The ratio L/a is not very large in order to prevent the formation of layers populated with particles (Campbell, 1990), and not too small so that each particle may undergo many collisions before reaching the next periodic boundary of the domain. The linear unperturbed equation of the fluid flow satisfies $u_1 = \gamma x_2$ (γ being the shear rate). The velocity and position updates were performed by means of a fourth order Adams-Bashforth integration scheme.

Selection of the time step

The time step was selected using the condition $dt = \min(\tau_p, \tau_c) / 50$. This condition meets the two requirements: the particle trajectories have to recover the streamlines on a time scale τ_p and for highly inertial particles the time scale between consecutive changes of velocity is τ_c . The collision time scale is calculated *a priori* using the theoretical analysis based on the kinetic theory assuming that the suspension is strongly agitated (this is not changed by the Grad's moment method):

$$\tau_c = \frac{a\sqrt{\pi}}{12\phi g_0 \sqrt{T}}$$

3-43

The level of particle agitation T is estimated theoretically using eq. 3-35 or 3-37 once the Stokes number, the concentration and the restitution coefficient are fixed. There is no numerical limitation on the relaxation time τ_p when the particles are highly inertial but attention should be paid in simulations with very low Stokes numbers for avoiding successive collisions (Sundaram and Collins, 1996).

For the selection of the time step in a very dilute suspension, two additional conditions should be satisfied. Firstly, the time step should be much smaller than the time scale based on the velocity fluctuation $a/T^{1/2}$, especially at high particle inertia. Secondly, a particle should experience several collisions before crossing through the entire domain of simulation. The condition

$$\tau_c \ll \frac{L}{\sqrt{T}}$$

3-44

prevents an unrealistic increase of the suspension agitation energy due to the accumulation of $L\gamma$ velocity increments (or decrements) when particles are crossing the bottom (resp. upper) boundary conditions many times without collisions with other particles of the suspension.

Statistical quantities

Many statistical quantities may be computed along the Lagrangian simulations: particle agitation, stress tensors, collision time, fluctuating velocity distribution function.... The kinetic stress tensor for the solid phase is calculated from the second moment of the particle velocity fluctuations as follows

$$T_{ij} = \langle v''_i v''_j \rangle - \langle v''_i \rangle \langle v''_j \rangle$$

3-45

where $\langle \rangle$ is an average formed over all the particles and over the simulation time (discarding the initial transient time to reach a statistical equilibrium). We have checked out that the velocity fluctuation averages $\langle v''_i \rangle \langle v''_j \rangle$ are negligibly small compared to $\langle v''_i v''_j \rangle$ (typically $(\langle v''_i \rangle^2 / \langle v''_i v''_j \rangle) < 10^{-4}$). The level of particle agitation is $T = T_{ii} / 3$ (granular temperature). The collisional stress tensor components are obtained from the impulse $\mathbf{j} = m_p(\mathbf{v}' - \mathbf{v})$ occurring at each collision. The collisional stress by unit volume averaged over the simulation time T_{simul} is given by

$$\theta_{ij} = \frac{2a}{\mathfrak{V} \times T_{\text{simul}}} \sum_{\text{collisions}} m_p (j_i k_j)$$

3-46

where $\mathfrak{V} = (2\pi)^3$ is the volume of the simulated domain. Particles in contact with only $\mathbf{g} \cdot \mathbf{k} < 0$ are considered as collisions. The averages over particles are computed every 10 time steps. The time average is summed up until all averages are converged. The stress tensor is made dimensionless using respectively (γ^{-1}) and (a) as time and length scales $\sigma_{ij} = (\rho_p \phi T_{ij} + \theta_{ij}) / (\rho_p \phi \gamma^2 a^2)$.

The time between successive collisions is calculated using the collision frequency which is computed from the total number of collisions detected during the simulation time T_{simul} . Successive binary collisions occurring for very low Stokes numbers are removed by filtering the high frequency content of the collision time distribution.

The particles are initially randomly seeded within the domain with the local velocity of the fluid. We simulated the suspensions during a time long enough to guarantee the convergence of the statistics. Typically each particle was allowed to experience at least 600 collisions. The most critical restriction was observed on the length of time series required to reach a diffusive behavior for the dispersion of particles (Sierou and Brady, 2004).

The function g_0

The comparison of the statistical quantities with the theoretical expressions requires the knowledge of the function g_0 . This function gives information on particle pairs near contact, and is evaluated using the peak value of the radial distribution function at $r=2a$. It is an increasing function of the solid volume fraction, as collisions are more probable because of numerous neighboring particles. It was expressed by Carnahan and Starling (1969) as following

$$g_0 = \frac{1 + \phi/2}{(1 - \phi)^3} \quad 3-47$$

Another expression used by Lun and Savage (1986) includes the divergence of g_0 when the concentration is near the maximum solid fraction ϕ_m for close packing.

$$g_0 = (1 - \phi/\phi_m)^{-2.5\phi_m} \quad 3-48$$

Both expressions of g_0 differ in highly concentrated suspensions, and they are very close for moderate concentrations (Figure 3-5). All the simulations realized for this study are for suspension concentration less than 30%. To compare the different statistical results with the models, we used for g_0 the expression given by Carnahan and Starling (1969).

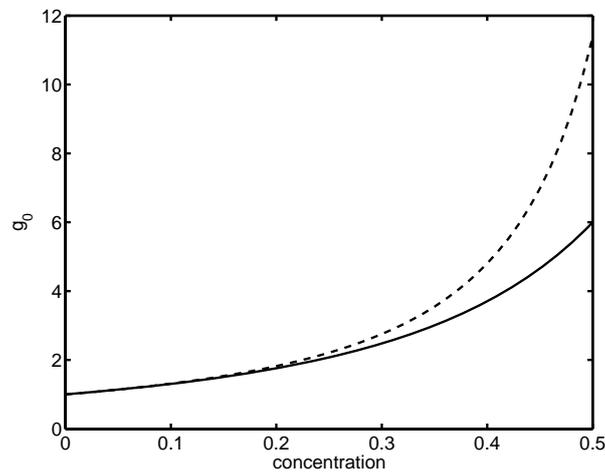


Figure 3-5

Expressions of radial distribution function at $r=2a$ vs. the solid volume fraction. The solid line is for the expression of Carnahan and Starling (1969) (eq. 3-47). The dashed line is for the expression of Lun and Savage (1986) (eq. 3-48) with $\phi_m=0.64$.

4- Influence of the viscous relaxation time ($e=1$)

We aim at investigating the influence of the drag as the only dissipative mechanism (perfectly elastic collisions) on the macroscopic behavior of the suspension when varying the Stokes number. Predicting the particle agitation is the key step to determine the rest of statistical quantities. However, we can identify two asymptotic cases: at very high Stokes numbers, the particle fluctuating energy increases infinitely since there is no dissipation mechanism balancing the energy injected by the shear; at very low Stokes numbers, the particle energy is very low, enduring close interactions are dominant and the role of hydrodynamic interactions and lubrication effects due to the interstitial fluid is the major factor (see Chapter II). Therefore we restricted our simulations to moderate particle inertia (Stokes number varying from $St=1$ to 10). We shall see that the dynamics is extremely rich in this range: different regimes of agitation from quenched to highly agitated suspensions. Tsao and Koch (1995) have shown that for $St>5$ the suspension is always highly agitated and simulations beyond $St=10$ keeps the same physics.

4.1 Particle agitation

The numerical method we used was first validated by testing the temporal response of the suspension to an initial ignited state. This is a test of the macroscopic drag effect on the relaxation of the suspension agitation due to viscous dissipation. Elastic particles ($\phi=15\%$) corresponding to $St=1000$ suspended in a quiescent fluid are initially distributed randomly with a Maxwellian distribution function for the velocity fluctuations. The Figure 3-6 shows the temporal evolution of the particle agitation or granular temperature of the suspension. The agitation would ideally remain constant if dissipation is neglected ($St \rightarrow \infty$ and elastic particle collisions). However, it decreases gradually due to the finite particle inertia and dissipation due to the drag. The temporal evolution of the agitation level T/T_0 computed in the simulations shows the same trend as the theory prediction based on the force balance equation for each particle ($T/T_0 = \exp(-2t/St)$).

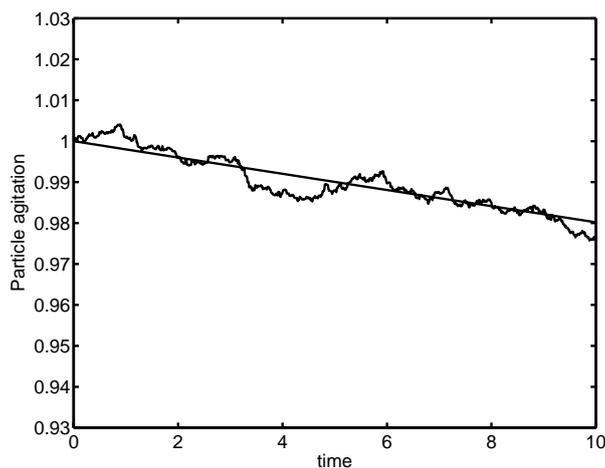


Figure 3-6

Dimensionless particle agitation T/T_0 vs. time in a quiescent fluid.

The initial velocities of the particles are isotropic and follow a normal Gaussian distribution. The straight line is the theoretical prediction ($T/T_0 = \exp(-2t/St)$) corresponding to $St=1000$.

Suspension in a shear flow

We performed numerous simulations for St varying from 1 to 10 and the volumetric concentration ranging between $\phi=5\%$ and 30% . In all the simulations the collisions are perfectly elastic ($e=1$). The results are presented in Figure 3-7 where they are compared to the theoretical predictions obtained with eq. 3-35.

Figure 3-7 shows that for a given concentration, when increasing the Stokes number from 1 to 10, the agitation level is enhanced by 3 orders of magnitude. In the limit of high Stokes numbers, the simulations agree very well with the theory, revealing two different trends at low and high solid volume fractions. In dilute suspensions, the granular temperature decreases with the concentration because of the reduction of the interparticle distance. In dense suspensions, the collision efficiency contributes to maintain the particle agitation level high, even if the mean free path of the particles is reduced.

In the context of moderate to high Stokes numbers, we have verified that the granular temperature obtained by both the kinetic theory and the simulations match very well. This prediction is close to the simplified expression of eq. 3-7. In the limit of very high Stokes numbers, the simulations for high concentrations are delicate. They require a very small time step $O(10^{-4})$ due to the high collision frequency. Moreover, some collisions may be missed since multiple collisions are ignored in the numerical model (particle clustering and short time overlapping may occur). A slight discrepancy is observed on Figure 3-7 for $\phi=30\%$ and $St=5$ or 10 .

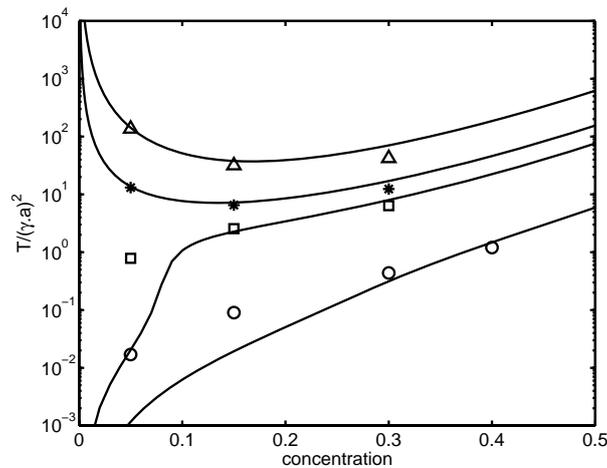


Figure 3-7

Granular temperature vs. the solid volume fraction for different Stokes numbers. Symbols (Δ , $*$, \square , \circ respectively for $St=10, 5, 3.5$ and 1) represents the numerical results and solid lines (from top to bottom $St=10, 5, 3.5$ and 1) corresponds to the theoretical predictions of eq. 3-35.

For small Stokes numbers, the particle agitation increases monotonically with the concentration, but the theoretical prediction is far from being accurate. The discrepancy approaches 2 orders of magnitude when $\phi=5\%$. Figure 3-7 shows clearly that the theory is only valid for strongly agitated suspensions ($T > \gamma^2 a^2$, further called ignited state). A transition (depending on the Stokes number) exists. Below this limit, the theoretical prediction corresponds to a quasi-null agitation while the simulations indicate the existence of a weak but finite suspension agitation (further called quenched state). The same disagreement between theory and simulations has been found in the work of Boelle et al. (1995) for lower Stokes numbers ($St=0.5$).

4.2 Velocity distributions

The analysis of the velocity distribution function is an indicator of the deviation from the presumed Maxwellian distribution function. This is a clue to justify (eq. 3-11) as an input in the kinetic theory of granular flow. However, $f(\mathbf{v}'')$ depends simultaneously on the 3 velocity fluctuation components. Therefore we plot $f(v''_1)$ as an alternative way to show the velocity distribution of the suspension.

At high Stokes numbers, we verified that for each case, $f(v''_1)$ has the shape of the Gaussian function, or equivalently $f(\mathbf{v}'')$ is close to a Maxwellian function. At $St=1$, the velocity distribution function shown in Figure 3-8 does not have the same shape when the concentration is varied. It is close to the Gaussian distribution at $\phi=30\%$, but in the limit of dilute suspensions ($\phi=5\%$) the velocity distribution has a shape significantly different from the theoretical assumption used for ignited suspensions. It is highly peaked around $v''_1=0$ indicating that most of the particles are following the streamlines with a negligible velocity fluctuation. When the solid volume fraction is reduced, the magnitude of the peak at low velocity fluctuations is strongly enhanced. It means that the number of particles with zero velocity fluctuations is increased (quenched state).

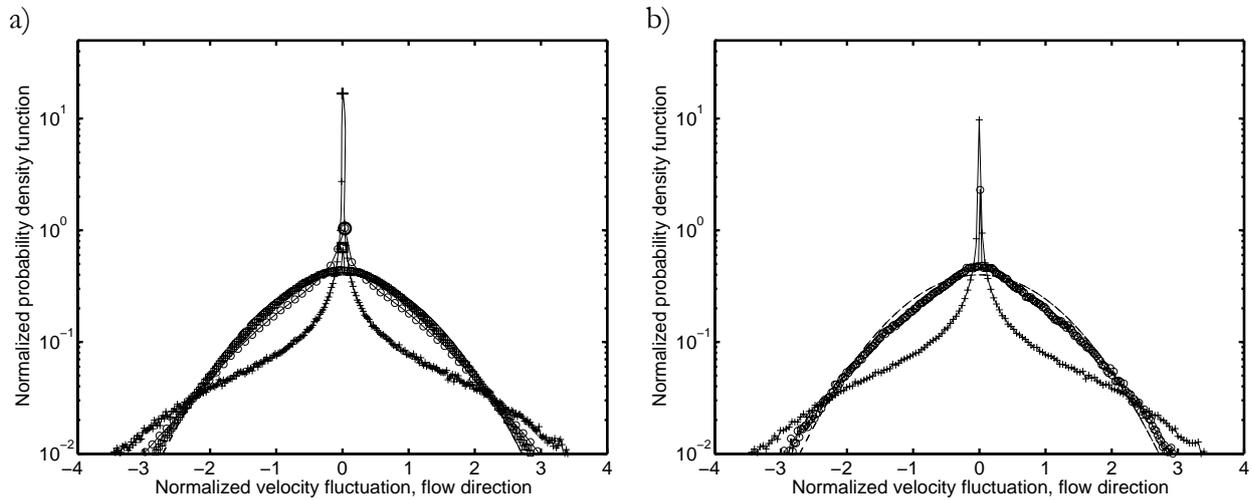


Figure 3-8

Normalized probability density functions vs. velocity fluctuations in the flow direction $f(v''_1/\sqrt{T_{11}})$ where s_1 is the standard deviation of the velocity fluctuations (Gaussian distribution function in dashed line).

- a) $St=1$ and for different volume fractions: +, o, \square corresponds respectively to $\phi=5, 15$ and 30% .
- b) $\phi=5\%$ and for different Stokes numbers: +, o corresponds respectively to $St=1$ and 5 .

The different shapes of the velocity distribution functions indicate that the suspensions we studied may flow under two different regimes. In the limit of low inertia, most particles follow the fluid streamlines leading to a drag dominated regime. Most collisions are shear-induced. In the limit of high inertia, the particles fly randomly with only a slight velocity change between two consecutive collisions. Such a flow regime is collision-dominated where most collisions are driven by the fluctuations of the particle velocity. Each state has been called by Tsao and Koch (1995) "quenched" and "ignited" state, respectively.

5- Stokes number effect on the regime of agitation

While the theory described in § 2 gives an accurate prediction of a certain class of gas-solid flows, it is important to point out its limitations. The theory assumes that interparticle collisions are instantaneous and that particles do not stay in contact for a finite time. This assumption may be violated in suspensions with large particle volume fractions, where gravitational and cohesive forces may lead to enduring contacts. Of course, in this case, the effects of particle inertia may be less important on the dynamics of the suspension. This regime of interaction will not be addressed in our study. Another important consideration at lower particle inertia and volume fractions is that the drag due to viscous effects may dissipate the particle's fluctuating kinetic energy before the collision with a neighboring particle.

As an indicator of the flow regime, from drag to collision dominated, we can analyze the evolution of the time scale ratio τ_p/τ_c (particulate relaxation compared to the typical time between successive collisions). The dominant mechanism has the smallest time scale. The Figure 3-9 shows the ratio τ_p/τ_c for different Stokes numbers and concentrations. The time scale ratio increases with the concentration for a given Stokes number while the collision time is decreasing with the reduction of the interparticle distance and the agitation enhancement. It is clear that when $\tau_p/\tau_c \gg 1$, the simulations and the theory are in good agreement, whereas there is a significant discrepancy when $\tau_p/\tau_c = O(1)$ or lower.

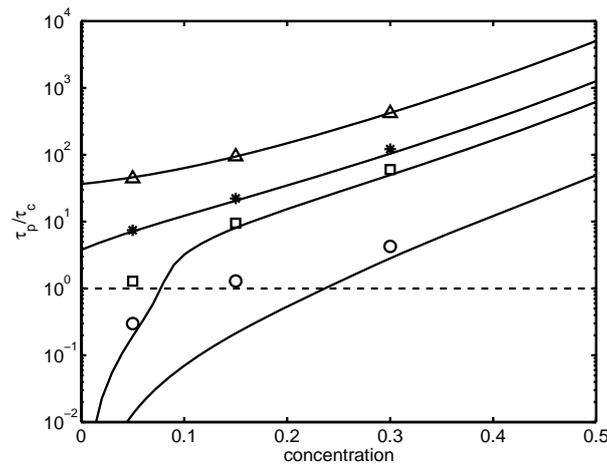


Figure 3-9

The time scale ratio τ_p/τ_c vs. the solid volume fraction for different Stokes numbers. See caption of Figure 3-7 for line styles and symbols. The dashed line corresponds to $\tau_p/\tau_c = 1$.

In the rest of the chapter, we shall term the suspension as highly (resp. weakly) agitated when τ_p/τ_c is large (resp. low). While the Stokes numbers and concentrations are decreasing, the suspension experiences a transition from a collision dominated regime to a drag dominated regime. The theoretical prediction of the suspension behavior cannot be based on an assumption of molecular-chaos.

5.1 Quenched state ($\tau_p \ll \tau_c$)

In the previous section, simulations showed that for low particle agitation levels, the velocity distribution function is highly peaked at $\mathbf{C}=0$, indicating that most of the velocity fluctuations are close to zero. In this case, at a given time, the fraction of particles having velocities significantly different from the fluid velocity is small, leading to a velocity distribution function far from the deviated Maxwellian function. If the computation of the collisional terms (θ_{ij} and χ_{ij}) was not complicated, a suitable method would be to use a velocity distribution function taking into account the particle acceleration due to the drag influence. However, a simpler approach was proposed by Tsao and Koch (1995). A simplified dimensional analysis done by the authors has led to a velocity distribution function in the shear direction $f(C_2)$ such that $f(C_2)=k/|C_2|$ where k is a constant which determination requires a detailed analysis of the shear-induced collisions. Such an assumption is correlated to the existence of a singular highly peaked shape at $\mathbf{C}=0$.

The particle agitation in the quenched state is mainly due to collisions transforming the shear-induced mean motion into fluctuations and it is not null even if the total kinetic energy is conserved for each collision (for $e=1$). Calculating the collision change in the stress tensor $C(c_i c_j)$ requires the determination of the velocity distribution function. Assuming that the colliding particle velocities are equal to the local fluid velocities, the leading order of $C(c_i c_j)$ can be obtained assuming that the velocity distribution is a Dirac delta function ($f(\mathbf{c}, \mathbf{x})=f(\mathbf{C})=n\delta(\mathbf{C})$). A suspension flowing under the quenched regime is generally dilute except for vanishing Stokes numbers where even a concentrated sheared suspension can have a low agitation level. Therefore, the collisional rate of change of the energy can simply be written as

$$C(c_i c_j) = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{g} \cdot \mathbf{k} < 0} \Delta(c_i c_j) f^{(1)}(\mathbf{c}_A, \mathbf{x}_A) f^{(1)}(\mathbf{c}_B, \mathbf{x}_B) (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d_p^2 d\mathbf{k} d\mathbf{c}_A d\mathbf{c}_B \quad 3-49$$

where the total change of energy due to a collision between the two particles A and B is given by $\Delta(c_i c_j) = (c'_{A,i} c'_{A,j} + c'_{B,i} c'_{B,j}) - (c_{A,i} c_{A,j} + c_{B,i} c_{B,j}) = 2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 k_i k_j$. The velocity difference between the two colliding particles is

$$\mathbf{g} = \mathbf{c}_B - \mathbf{c}_A = \mathbf{u}(\mathbf{x}_B) - \mathbf{u}(\mathbf{x}_A) = \gamma(x_{B,2} - x_{A,2}) \mathbf{i}_1 \quad 3-50$$

where \mathbf{i}_1 is the unit vector in the flow direction. Replacing the velocity distribution by the Dirac delta function

$$C(c_i c_j) = \frac{3\phi}{\pi} \int_{\mathbf{g} \cdot \mathbf{k} < 0} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^3 k_i k_j d\mathbf{k} \quad 3-51$$

where $\mathbf{g} \cdot \mathbf{k} = -2k_1 k_2$ if only the shear-induced collisions are considered. The terms of the collisional rate of change of the kinetic stress tensor are integrated over $\mathbf{g} \cdot \mathbf{k} < 0$ and then replaced in the corresponding transport equation leading to the following expressions:

$$T_{11} = \frac{64}{315\pi} St^3 \phi \left[1 + \frac{9\pi}{16} \frac{1}{St} + \frac{2}{St^2} \right] \quad 3-52$$

$$T_{22} = 4T_{33} = \frac{128}{315\pi} St\phi$$

$$T_{12} = -\frac{64}{315\pi} St^2 \phi \left[1 + \frac{9\pi}{16} \frac{1}{St} \right]$$

And the resulting granular temperature is

$$\frac{T}{(\gamma a)^2} = \frac{64}{945\pi} St^3 \phi \left[1 + \frac{9\pi}{16} St^{-1} + \frac{9}{2} St^{-2} \right]$$

5.2 Transition from the quenched to the ignited state

The transition in a dilute suspension from a regime where particles follow the gas motion to a distinct one in which frequent interparticle collisions maintain a large particle velocity variance was examined by Tsao & Koch (1995). A theoretical prediction in the transition state would require the determination of the full velocity distribution function from the Boltzmann equation near a critical point where it is neither close to the Maxwellian nor to the Dirac delta-function. A modified moment method, which takes into account the effects of both variance-driven and shear-induced collisions, may give an approximate solution for the intermediate state between the ignited and quenched states. Indeed the theory for the quenched state takes into consideration exclusively the shear-induced collisions leading to the underestimation of the temperature. In order to account for the variance-driven collisions, the authors have solved the transport equation (eq. 3-32) using for the collisional rate of change the linear superposition of the quenched and the ignited contributions. This can be justified by the fact that in a non-ignited state, most particles have either very large or very small velocity fluctuations compared to γa .

The kinetic stress components are the sum of two distinct contributions (ignited: first term on the r.h.s of the equations and quenched: second term):

$$\frac{T_{11}}{(\gamma a)^2} = \left[\frac{\eta\sqrt{T}St\phi}{\alpha} + \frac{\eta\sqrt{T}St^3\phi}{2\alpha^3} \right] T + \left[\frac{64}{315\pi} \frac{St^3\phi}{\alpha^3} + \frac{4}{35} \frac{St^2\phi}{\alpha^2} + \frac{128}{315\pi} \frac{St\phi}{\alpha} \right]$$

3-53

$$\frac{T_{22}}{(\gamma a)^2} = \left[\frac{\eta\sqrt{T}St\phi}{\alpha} \right] T + \left[\frac{128}{315\pi} \frac{St\phi}{\alpha} \right]$$

$$\frac{T_{33}}{(\gamma a)^2} = \left[\frac{\eta\sqrt{T}St\phi}{\alpha} \right] T + \left[\frac{32}{315\pi} \frac{St\phi}{\alpha} \right]$$

$$\frac{T_{12}}{(\gamma a)^2} = - \left[\frac{\eta\sqrt{T}St^2\phi}{2\alpha^2} \right] T - \left[\frac{64}{315\pi} \frac{St^2\phi}{\alpha^2} + \frac{4}{35} \frac{St\phi}{\alpha} \right]$$

where the constant $\eta=24/5\pi^{1/2}$ and $\alpha=(1+\eta T^{1/2}St\phi)$.

The resulting equation for the granular temperature is

$$d_0 T^2 + d_1 T^{3/2} + d_2 T + d_3 T^{1/2} + d_4 = 0$$

3-54

$$\begin{aligned} d_0 &= -6\eta^2 St^2 \phi^2 & d_1 &= \eta (St^3 \phi - 12St\phi) & d_2 &= \frac{576}{315\pi} \eta^2 St^3 \phi^3 - 6 \\ d_3 &= 2\eta \left(\frac{576}{315\pi} St^2 \phi^2 + \frac{4}{35} St^3 \phi^2 \right) & d_4 &= \frac{128}{315\pi} St^3 \phi + \frac{8}{35} St^2 \phi + \frac{576}{315\pi} St\phi \end{aligned}$$

There exist many roots to this equation which will be discussed in the next sections. But one should expect that for suspensions with high agitation level, the ignited contribution to the collisional rate of change is dominant and then the solution reaches the theoretical prediction of the ignited regime. For low agitation level, the shear-induced contribution to the collisions is dominant and the solution selects the quenched state approximation.

5.3 Roots of the different states

Obviously, the solutions of all the equations of granular temperature are physically acceptable only if they are real and positive, since they should represent the particle velocity variance.

In the limit $\phi \ll 1$, $St \gg 1$, the ignited state equation may be simplified because the last term (zeroth order) in eq. 3-35 can be neglected and the non-zero real solution of the equation was written by Sangani et al. (1996) as follows

$$\frac{\sqrt{T}}{\gamma a} = \frac{5\sqrt{\pi}}{288} \frac{St}{\phi g_0} \left[\xi + \sqrt{\xi^2 + \beta^2} \right]$$

3-55

where

$$\xi = \left(1 + \frac{8}{5} \phi g_0 \right)^2 + \frac{768}{25\pi} \phi^2 g_0^2 - \frac{12}{St^2} \quad \beta = 144 \left[\frac{256}{25\pi} \frac{\phi^2 g_0^2}{St^2} - \frac{1}{St^4} \right]$$

When $St^3 \phi \ll 1$ (keeping $\phi \ll 1$, $St \gg 1$), Tsao and Koch have shown that the transition equation 3-55 has three real positive roots. The highest root $T/\gamma^2 a^2 \sim O(St^2/\phi^2)$ has the same leading order as the ignited solution. The lowest one $T/\gamma^2 a^2 \sim O(St^3 \phi)$ corresponds to the leading order of the quenched state solution. And the third root that corresponds to an unstable state which may lead to a final ignited or quenched state depending on the initial conditions of the suspension.

For $St \sim O(1)$, Sangani et al. (1996) and Tsao & Koch (1995) explored the critical conditions leading either to the ignited or quenched states as a function of the Stokes number and concentration. We give only a short summary of their results. When the concentration is higher than $\phi_{cr} = 0.058$, eq. 3-35. has for all Stokes numbers three roots: one real positive and two complex ones, the suspension is ignited. For $\phi < \phi_{cr}$, the equation may have three real positive roots if $St_i < St < St_q$. St_i (resp. St_q) is the lower (resp. upper) limit for the ignited state (resp. quenched) state to exist. The highest of the roots corresponds to the ignited state and the lowest to the quenched state. The third root is intermediate between the two states, it is unstable and the final steady state depends on the initial conditions of the suspension. The passage from the quenched solution to the ignited one at ϕ_{cr} is very sharp.

The exact determination of St_i and St_q depends on the equations they used to predict the granular temperature (there are slight differences between the two studies). For $\phi \rightarrow 0$, $St_i \approx 4.9$ and it decreases with concentration. For St_q the authors have found different relations $\phi St_q^2 = 0.96$, $\phi St_q^3 = 3.23$ and $\phi St_q^3 = 1.5$. The first two predictions of St_q are theoretical and depend on the maximum order in their expansion of the velocity distribution function used in the collisional rate of change. The last one is obtained by the simulations of Tsao and Koch (1995) based on Lagrangian tracking.

5.4 Particle agitation

The numerical results for the particle agitation are shown again in Figure 3-10 where they are compared to the suitable theory for each regime. A very good agreement between our simulations and the ignited state theory (eq. 3-35) has already been discussed for suspensions with high particle agitation. At low concentration and low Stokes numbers, the results are compared to the quenched theory prediction. Comparing Figure 3-7 and Figure 3-10, it is clear that the prediction based on the quenched theory is much closer to the simulation results than the ignited regime assumption (especially for $St=1$ and $\phi=5\%$). The remaining discrepancy between the simulations and the quenched theory may be inferred to the underestimation of the collisional change in the stress tensor. Indeed, the quenched theory considers only the shear-induced collisions and neglects the existence of the additional variance-driven collisions. These events are not frequent but contribute to keep a moderate level of agitation for $St=3.5$ and $\phi=5\%$. In the limit of low Stokes numbers, the transitional and quenched evolution curves are nearly superposed when the variance-driven contribution is negligible.

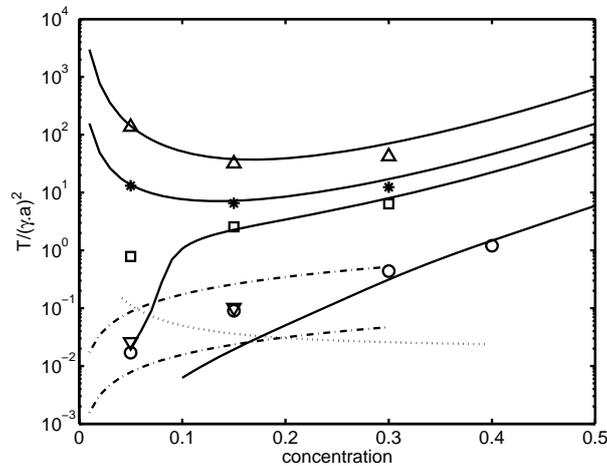


Figure 3-10

Suspension agitation $T/(\gamma a)^2$, vs. the solid volume fraction for different Stokes numbers.

Symbols (Δ , $*$, \square , \circ respectively for $St=10$, 5 , 3.5 and 1) represent the numerical results and solid lines (from top to bottom $St=10$, 5 , 3.5 and 1) correspond to the theoretical predictions of eq.3-35.

∇ $St=1$ with the modified boundary condition in the flow direction

The dashed-dotted lines correspond to the quenched state (the lower and upper curves are respectively for $St=1$ and 3.5). The dotted line is the limit where the particulate relaxation time τ_p is equal to the shear induced collision time

$$\tau_{c\gamma} = \pi/16\phi\gamma.$$

In Figure 3-10, the solid lines correspond to the theoretical prediction based on the ignited state. The thin solid line is the limit corresponding to equal relaxation and collision times. Below this limiting curve, the quenched state theory is the best prediction of the simulation results and above this line the ignited theory is the most accurate to predict the particle agitation.

In the limit of weakly agitated suspensions, a steady organization of the microstructure may occur during the simulations, leading to an underestimation of the particle agitation (Tsao and Koch, 1995). Because of periodic boundary conditions, particles avoid each other after few collisions which have deflected their relative trajectories. New simulations (∇ symbols in Figure 3-10) where the particles have been reintroduced randomly on the inlet boundary of the simulation domain are included in the figure. We repeated the simulations for $St=1$, $\phi=5$ and 15% while keeping the same periodic boundary conditions in the shear and spanwise directions (x_1 and x_3). In the flow direction, the particles leaving the simulation box at the position $(2\pi, x_2,$

x_3) were re-introduced on the opposite side at $(0, 2\pi p^{1/2}, x_3)$ where p is a random number uniformly distributed between 0 and 1. The selection of this new random position x_2 induces a higher probability for the particle to be re-introduced in the upper part of the box where the sheared flow velocity is larger. This preserves the proper local flux of particles throughout the inlet boundary. The particle extra-agitation in these new simulations was always lower than 30% of the usual simulations.

While the particle agitation predicted by the quenched theory is fairly close to the simulations, the prediction of the collision time given by the kinetic theory (eq. 3-43) and using the quenched particle agitation is much smaller than the collision time resulting from the simulations (dotted-dashed lines in Figure 3-11). In this regime, a much more accurate prediction is the typical collision time obtained from the shear-induced collision frequency $f_{c\gamma}$ given by

$$f_{c\gamma} = \frac{4}{3}(2a)^3 \gamma n^2$$

3-56

The resulting shear-induced collision time is then $\tau_{c\gamma} = \pi / (16\phi\gamma)$.

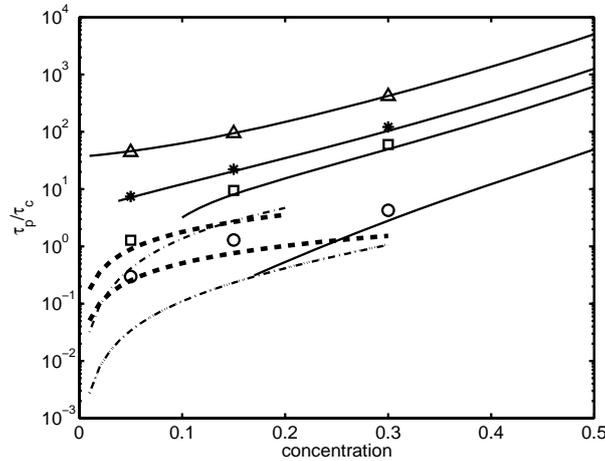


Figure 3-11

The time scale ratio τ_p / τ_c vs. the solid volume fraction for different Stokes numbers. For caption see Figure 3-10. The thick dashed line is calculated using $\tau_{c\gamma}$ (bottom for $St=1$ and top for $St=3.5$).

6- Stokes number effect on suspension Rheophysics ($e=1$)

The suspension rheophysics is investigated in this section: statistics of momentum transfer and particle self-diffusion. The first mechanism is quantified by the stress developed in the suspension and the second by particle random displacements in the diffusive regime. Since all the rheological quantities are direct functions of the granular temperature, we emphasize particularly the different predictions based on ignited or quenched state assumptions.

6.1 Diagonal terms of the stress tensors

The stress in a suspension is a measure of momentum transfer. In a suspension of solid particles, the momentum transfer is related to two distinct contributions: kinetic (transfer based on the transport of momentum by the moving particles) or collisional (transfer based on collisions of the particles of the suspension) as it was explained in §2. The sketch in Figure 3-12 illustrates the different momentum transfer processes through a given fictive wall \mathbf{y} . The kinetic momentum

transfer σ_{ij}^{kin} is due to the particle crossing through y , whereas the collisional momentum transfer σ_{ij}^{coll} is due to collisions on the surface y .

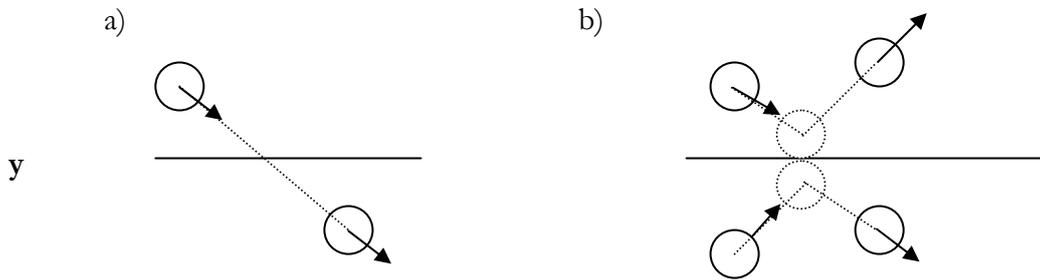


Figure 3-12
Illustration of a) kinetic and b) collisional fluxes through a plane y

First, the procedure used to compute the kinetic and collisional stress tensor components was validated in a sheared flow for a moderate Stokes number ($St=5$) and for inelastic collisions ($e=0.8$). In Figure 3-13, the numerical results are found to be in agreement with the theoretical predictions of T_{ij} and θ_{ij} based on the granular temperature of eq. 3-37. The theoretical prediction is no longer valid in the limit of low concentrations where a sudden drop down occurs. We verified that our numerical results are also in good agreement with the simulation results of Boelle et al. (1995) obtained under the same suspension conditions but with a different numerical code.

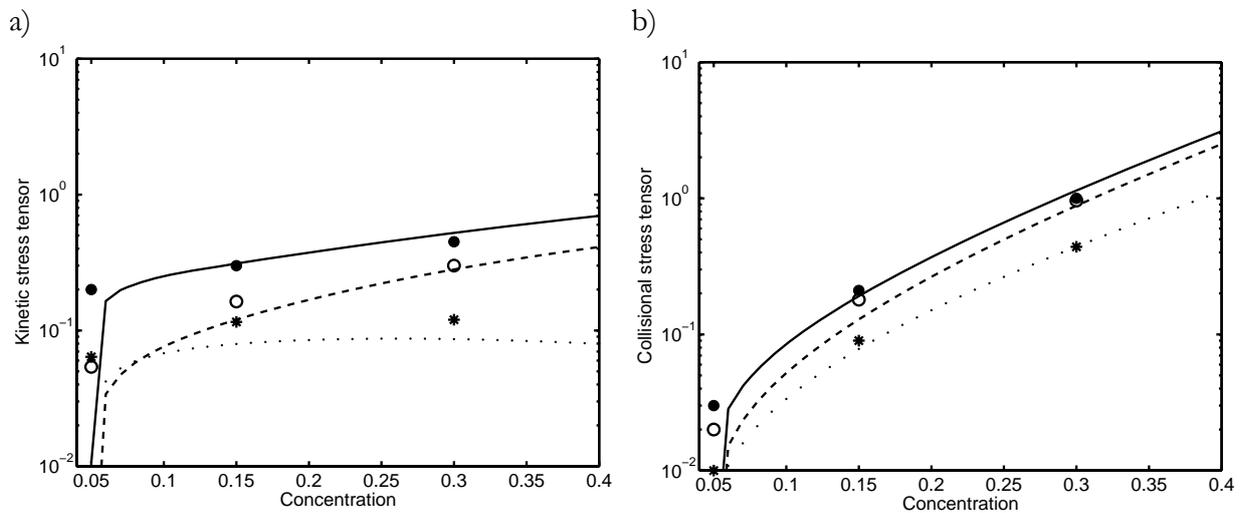


Figure 3-13

a) Kinetic $T_{ij}/(\gamma a)^2$ and b) Collisional $\theta_{ij}/\rho_p \phi (\gamma a)^2$ stress tensor components vs. the solid volume fraction at $St=5$ and $e=0.8$ in a shear flow. The symbols stand for the numerical results and the lines for the theoretical predictions of §2. Filled circles and solid line: T_{11} ; empty circles and dashed line: $T_{22}=T_{33}$; stars and dotted line: T_{12} .

Then, the normal stress components were calculated for the same simulation sets presented in the previous section ($St=1-10$ and $\phi=5-30\%$ and $e=1$). The kinetic and collisional components are shown in Figure 3-14 a-f and are compared to the same theories as for the particle agitation. We see that the most accurate theory for predicting the granular temperature leads to a better prediction of the particulate stress in the suspension. However, the theoretical collisional stress components were not calculated in the quenched regime, since most quenched suspensions are

dilute and the collisional contributions to the momentum transfer are negligible according to Jenkins and Richman (1985).

The behavior of the kinetic and collisional stress components is different. The collisional stress components always increase with concentration, due to the increasing collision frequency no matter what the suspension state is. For the kinetic stress components, they increase monotonically with the concentration in the limit of low Stokes numbers, whereas they show a local minimum in the limit of high inertia (for $\phi \approx 15\%$). For a dilute and highly inertial suspension, the kinetic stress is dominant, since the particles may travel relatively long distances between collisions. The transfer of particle properties like momentum and energy by collisions is negligible compared to their transport by the particle motion. More concentrated suspensions behave like a dry granular material, where most of the momentum and energy transfer is related to collisions.

6.2 Normal stress difference

The shear flow generates in the solid-phase a stress anisotropy which is the deviation of the normal stresses from the total granular temperature. The stress redistribution between the different directions occurs mainly by collisions, tending to reduce the suspension anisotropy. Indeed, the collisions do not dissipate energy when the restitution coefficient $e=1$, but their main role consists in transferring the momentum in the suspension. Rearranging the components of the collisional rate of change of the kinetic stress tensor gives

$$\theta_{ij} = (1+e)\rho_p \phi^2 g_0 \left\{ \left(2T - \frac{4}{5} d_p \sqrt{\frac{T}{\pi}} e_{kk} \right) \delta_{ij} + \frac{4}{5} (T_{ij} - T\delta_{ij}) - \frac{8}{5} d_p \sqrt{\frac{T}{\pi}} e_{ij} \right\} \quad 3-57$$

$$\chi_{ij} = (1+e)\rho_p \phi^2 g_0 \left\{ \left[\frac{2(e-1)}{3} \frac{T}{\phi g_0} - \frac{2}{5} (3e-1) T e_{kk} \right] \delta_{ij} - \frac{1}{5} \frac{(3-e)}{\phi g_0} \frac{T_{ij} - T\delta_{ij}}{\tau_c} + \frac{12}{5} (2-e) T e_{ij} \right\} \quad 3-58$$

we can figure out that even when $e=1$ and $\gamma=0$ (elastic collisions in a quiescent fluid), the collisional momentum transfer is not zero as long as there is a finite particle agitation and an anisotropy between the kinetic stress terms.

At a given Stokes number, when the concentration increases the influence of the collisional momentum transfer overcomes the drag contribution (eq. 3-32). The redistribution of the fluctuations is enhanced and the difference between the normal stresses decreases. Figure 3-15 shows the evolution of the normal kinetic stresses with concentration for different particle inertia. The kinetic stress in the flow direction is always dominant since it is produced by the mean shear flow. It transfers energy to the other components through the term χ_{11} . The other normal kinetic stresses arise only from the collision contribution since there is no mean flow in those directions. They are purely induced by the redistribution due to collisions (through χ_{22} and χ_{33}). Hence they are more closely related to the drag effect.

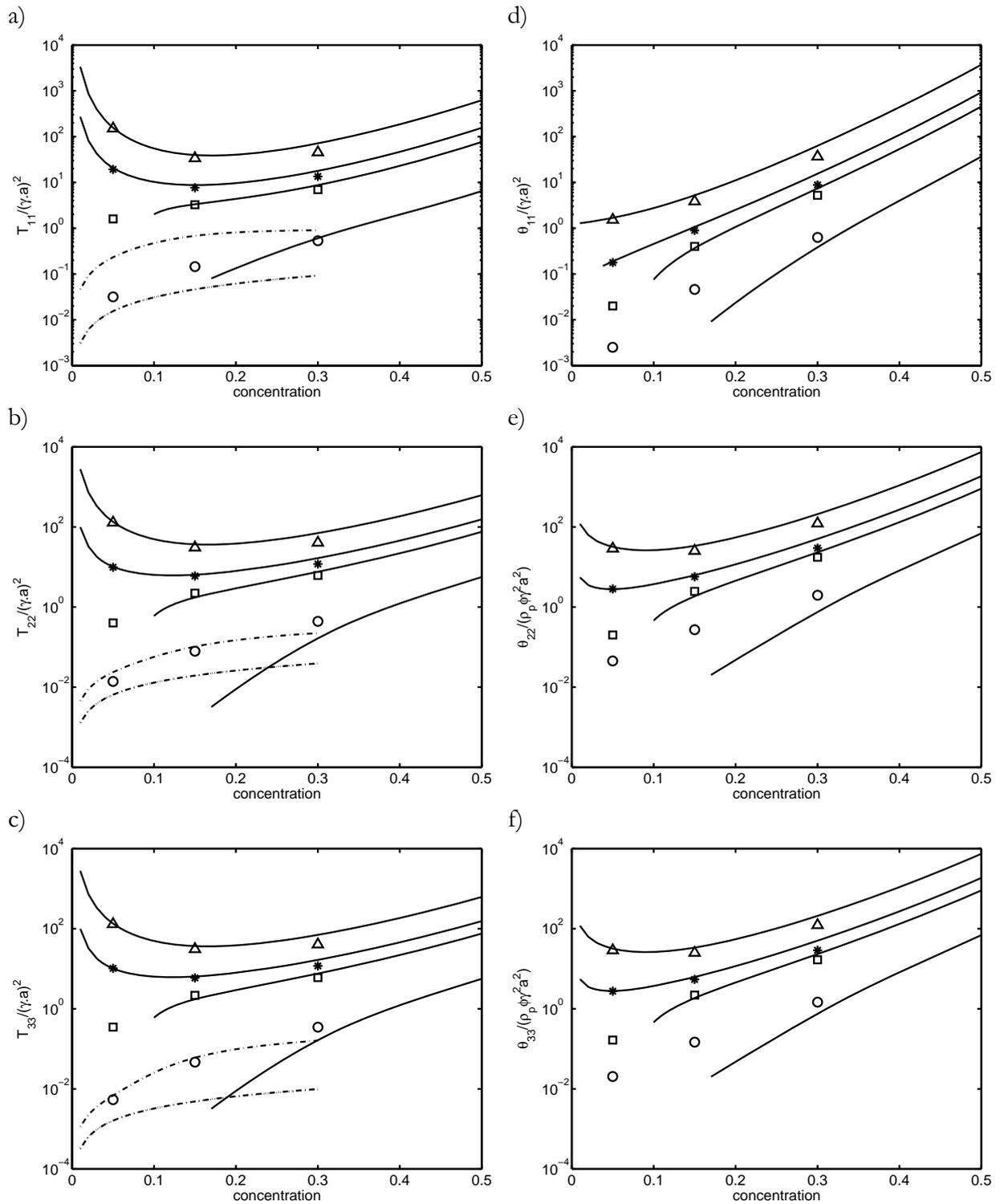


Figure 3-14

Diagonal components of the Kinetic stress tensor a) b) c) and Collisional stress tensor d) e) f) vs. the solid volume fraction for different Stokes numbers. For caption see Figure 3-10.

The anisotropy is stronger when the drag is dominant in the suspension. Figure 3-15a shows that for $St=1$ the anisotropy in the dilute suspension is very close to the quenched theory prediction, but when the concentration increases the anisotropy obtained in the simulations decreases although the quenched theory predicts a nearly constant value of anisotropy. At the same Stokes number, the simulations show a smaller anisotropy than predicted by the ignited theory when the concentration increases. This is due to the neglect of the terms of $O(a_{ij}^2)$ in the collisional terms θ_{ij} and χ_{ij} (eqs. 3-21, 3-22), which leads to an enhancement of the contribution of drag forces (important at $St=1$). The global effect is an increase of the anisotropy.

At higher particle inertia, the anisotropy is reduced. The agreement between simulations and theory is very good for $St=5$, where the drag influence on the calculation of each kinetic stress component is not important. The kinetic stress is quasi-isotropic when ϕ approaches 30%. For $St=10$, the anisotropy is very small for all the concentrations, and the agreement between simulations and theory is less obvious. The same trend was observed by Sangani et al. 1996.

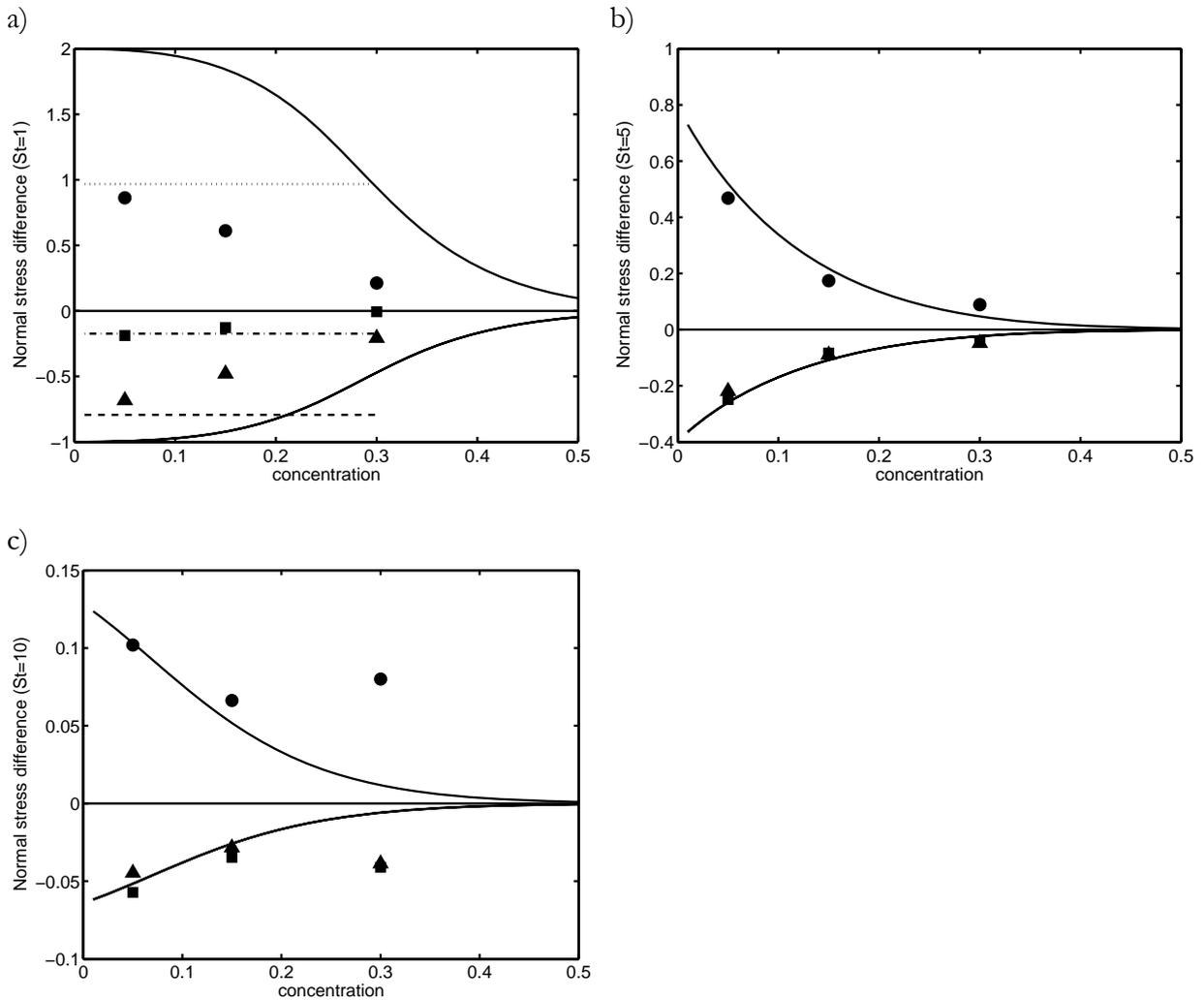


Figure 3-15

Normal stress difference $(T_{ij}-T\delta_{ij})/T$ vs. the solid volume fractions for a) $St=1$ b) $St=5$ and c) $St=10$. Symbols correspond to the numerical results (filled circles, triangles and squares are respectively for the flow, shear and spanwise directions).

The solid lines correspond to the theoretical predictions of §2. The positive values being in the flow direction (T_{11}) and the negative ones in the shear and spanwise directions (T_{22} and T_{33}). The dotted, dashed and dotted-dashed lines corresponds respectively to the flow, shear and spanwise directions predicted by the quenched theory for weakly agitated.

It is of interest to analyze the anisotropy in terms of the dimensionless time scale ratio τ_p/τ_c . It is then possible to gather all the results in the same graph for all the Stokes numbers. The kinetic stress components obtained in an ignited regime can be rewritten in terms of one anisotropy coefficient λ such that:

$$T_{11} = T(1 + 2\lambda) \quad T_{22} = T_{33} = T(1 - \lambda) \tag{3-59}$$

where λ is a function of the time scale ratio and the particle inelasticity.

$$\lambda = \frac{1 + \xi_c (\tau_p / \tau_c)}{1 + \frac{1}{2} \sigma_c (\tau_p / \tau_c)} \tag{3-60}$$

where

$$\xi_c = \frac{1}{6}(1 + e)(1 - e) \quad \sigma_c = \frac{1}{5}(1 + e)(3 - e)$$

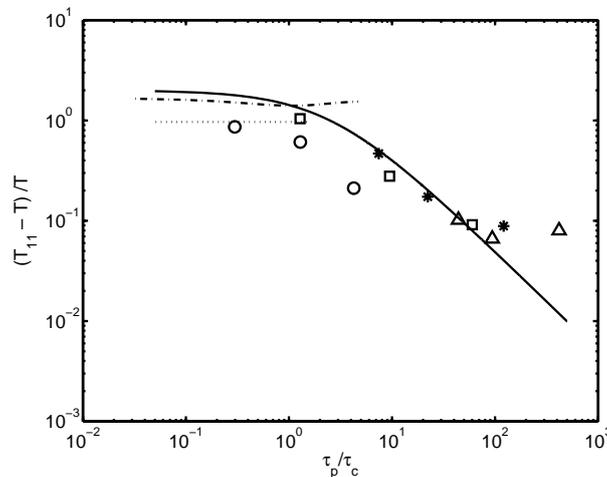


Figure 3-16

Anisotropy in the flow direction $2\lambda=(T_{11}-T)/T$ vs. τ_p/τ_c . The solid line corresponds to the approximate theory of §2, the dotted and dotted-dashed lines represent the prediction based on the quenched theory respectively for $St=1$ and $St=3.5$. Symbols Δ , $*$, \square , \circ correspond respectively to the simulations for $St=10$, 5 , 3.5 and 1 .

Figure 3-16 is a plot of the anisotropy coefficient in the flow direction. The trend is clearly a strong decrease when $\tau_p > \tau_c$ (collision effects are dominant on the drag contribution). The simulation results are generally in good agreement with the theoretical predictions especially in agitated suspensions. The anisotropy coefficients for weakly agitated regime ($St=1$) are closer to the quenched theory prediction.

Under the ignited theory assumptions, the normal collisional stress components can be written in terms of the same anisotropy coefficient

$$\frac{\theta_{11}}{\rho_p \phi} = (1 + e)\phi g_0 T \left(2 + \frac{8}{5} \lambda \right) \quad \frac{\theta_{22}}{\rho_p \phi} = \frac{\theta_{33}}{\rho_p \phi} = (1 + e)\phi g_0 T \left(2 - \frac{4}{5} \lambda \right) \tag{3-61}$$

Hence, the anisotropy of the collisional stress is slightly smaller than the kinetic stress ($4\lambda/5$).

The resulting normal stress difference in the solid-phase induces a deviation from the rheology of a Newtonian fluid. The normal stress differences

$$\frac{\sigma_{11} - \sigma_{22}}{\sigma} = \frac{\sigma_{11} - \sigma_{33}}{\sigma} = \lambda \frac{3 + \frac{12}{5}(1+e)\phi g_0}{1 + 2(1+e)\phi g_0}$$

3-62

are equal when the ignited theory is written according to the first order in a_{ij} (eq 3-11). Tsao & Koch (1995) have included in the calculations of χ_{ij} the terms of $O(a_{ij}^2)$ and they obtained a more rigorous theoretical expression for the kinetic stress components in the limit of dilute suspensions and inertial particles ($St > 5$). They found that the normal stress difference between the shear and the spanwise directions ($\sigma_{22} - \sigma_{33}$) is nearly 14 times less than the normal stress difference between the flow and the other directions ($\sigma_{11} - \sigma_{22}$ or $\sigma_{11} - \sigma_{33}$). Hence, assuming equality of the normal stress difference in the above equation is not misleading.

The normal stress difference is proportional to the anisotropy coefficient. At large Stokes numbers, the normal stress difference decreases with concentration, which is in agreement with the classical behavior of dry granular flows (Sangani et al. 1996, Walton and Braun 1986, ...). The trend is opposite for suspensions where the hydrodynamic interactions are dominant, increasing the concentration induces a scatter between the normal components of the stresses.

6.3 Shear stress and particulate viscosity

The Figure 3-17 shows the kinetic and collisional shear stress evolution with concentration for various Stokes numbers. At a given concentration, the shear stress increases with the particle inertia. The shear stress components have the same behavior as the normal stresses when the Stokes numbers and concentration are varied. The agreement is good with the theoretical prediction when adequately chosen (ignited or quenched regime). The theoretical collisional stresses are not plotted in the limit of weakly agitated suspensions because it has been neglected in the quenched theory.

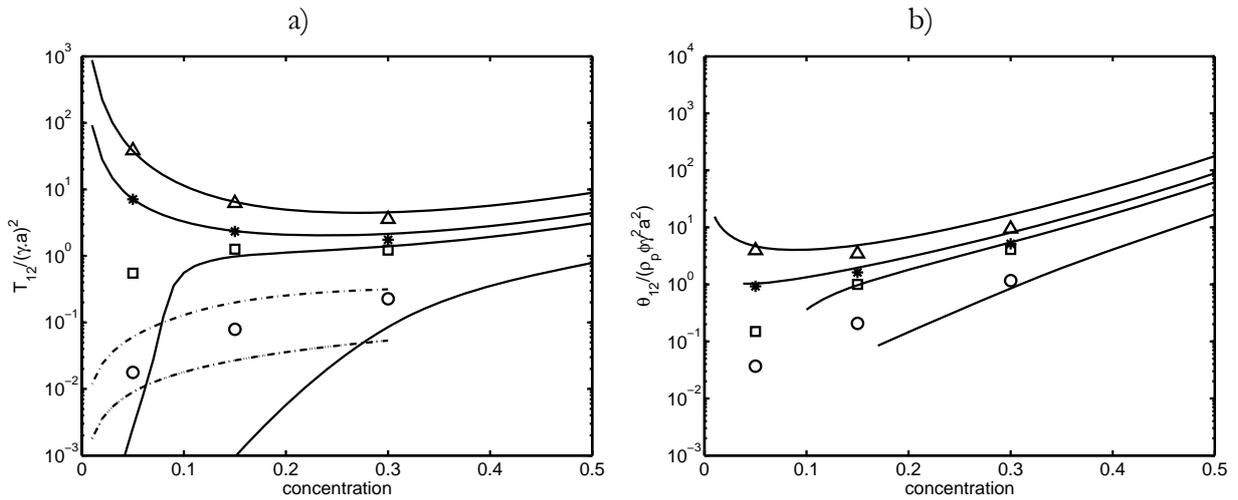


Figure 3-17

Kinetic (a) and Collisional (b) shear stress vs. the solid volume fraction for different Stokes numbers. Symbols (Δ , $*$, \square , \circ respectively for $St=10, 5, 3.5$ and 1) represents the numerical results and solid lines (from top to bottom $St=10, 5, 3.5$ and 1) corresponds to the theoretical predictions of eq. 3-7. The dashed-dotted lines correspond to the quenched state (the lower and upper curves are respectively for $St=1$ and 3.5).

The solid phase viscosity can be calculated from the two shear stress contributions experienced in a simple shear flow. The kinetic contribution can be interpreted as a kinetic viscosity $\gamma\mu_s^{\text{kin}} = -\rho_p\phi T_{12}$. Rearranging T_{12} (eq. 3-38) and replacing η by $(1+e)/2$, the expression of the kinetic viscosity can be written in terms of the different time scales and the anisotropy coefficient as follows

$$\frac{\mu_s^{\text{kin}}}{\rho_p\phi\gamma a^2} = \frac{T}{\gamma^2 a^2} \left(\frac{2}{\gamma\tau_p} + \frac{\sigma_c}{\gamma\tau_c} \right)^{-1} \left\{ (1 + \phi g_0 \phi_c) - \lambda \left(1 + \frac{8}{5} \phi g_0 \frac{1+e}{2} \right) \right\}$$

3-63

where ϕ_c and σ_c are defined in the kinetic theory by

$$\phi_c = \frac{2}{5}(1+e)(3e-1) \quad \sigma_c = \frac{1}{5}(1+e)(3-e)$$

All the theoretical predictions used in the previous figures were obtained by solving the complete set of the kinetic stress transport equations. When the particulate flow in engineering configurations (fluidized beds, channel flows...) has to be predicted, the equations of motion are written in a simpler and more practical form. Often, Eulerian models are developed, based on the additional assumption of equality of the normal stresses (called gradient Boussinesq assumption)

$$T_{ij} = T - \mu^{\text{kin}} \gamma_{ij}$$

3-64

where μ^{kin} is a model of the solid phase viscosity. The four detailed equations (eq. 3-32) of the complete system reduce in a simple shear flow, to only two equations: one for the granular temperature and another one for the shear stress:

$$2\gamma(\rho_p\phi T_{12} + \theta_{12}) + \frac{2}{\tau_p} \rho_p\phi 3T = \chi_{kk}$$

3-65

$$\gamma(\rho_p\phi T + \frac{1}{3}\theta_{kk}) + \frac{2}{\tau_p} \rho_p\phi T_{12} = \chi_{12}$$

3-66

The root-mean square of the granular temperature T_{mod} corresponding to this model satisfies a polynomial equation as follows

$$t = \frac{1}{\gamma\tau_c} = \frac{12\phi g_0}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{T_{\text{mod}}}}{\gamma a} \quad \sum_{k=0}^3 c_k t^k = 0$$

3-67

where the coefficients of this equation are

$$\begin{aligned} c_3 &= (1-e^2)\sigma_c \\ c_2 &= \frac{2}{St}(1-e^2) + \frac{6}{St}\sigma_c \\ c_1 &= \frac{12}{St^2} + 2(1 + \phi g_0 \phi_c) \left(1 + \frac{4}{5} \phi g_0 (1+e) \right) - \frac{192}{5\pi} \phi^2 g_0^2 (1+e)\sigma_c \\ c_0 &= -\frac{384}{5\pi} \phi^2 g_0^2 (1+e) \frac{1}{St} \end{aligned}$$

Eq. 3-64 leads to the relation 3-68 between the kinetic viscosity and the granular temperature. This expression was directly included in the numerical modeling of engineering applications (simulations of fluidized beds: Balzer et al., 1995)

$$\frac{\mu^{\text{kin}}}{\rho_p \phi \gamma a^2} = \frac{T_{\text{mod}}}{\gamma^2 a^2} \left(\frac{2}{\gamma \tau_p} + \frac{\sigma_c}{\gamma \tau_c} \right)^{-1} (1 + \phi g_0 \phi_c)$$

3-68

The expression of the effective kinetic viscosity is similar to the kinetic viscosity model μ^{kin} with an additional contribution coming from the non-zero anisotropy term, provided that the temperature T is replaced by T_{mod} . It is clear from Figure 3-18 that the model predicts a good viscosity in the highly agitated suspensions where the collisional regime is dominant, the anisotropy is weak (this is in agreement with the assumption 3-64).

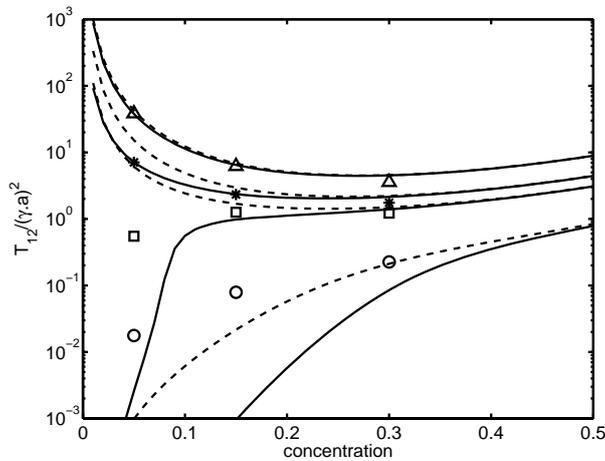


Figure 3-18

Comparison between the particulate kinetic viscosity obtained by solving the complete kinetic stress transport equations (solid lines) and the kinetic viscosity obtained by the model with the gradient Boussinesq assumption (dashed lines).

Lines from top to bottom correspond respectively to $St=10, 5, 3.5$ and 1 .

Symbols ($\Delta, *, \square, \circ$ respectively for $St=10, 5, 3.5$ and 1)

The solid phase collisional viscosity arising from the collisional shear stress is written as

$$\frac{\mu_s^{\text{coll}}}{\rho_p \phi \gamma a^2} = \frac{4}{5} \phi g_0 (1 + e) \left(\frac{\mu_{\text{eff}}^{\text{kin}}}{\rho_p \phi \gamma a^2} + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{T}}{\gamma a} \right)$$

3-69

A total suspension viscosity may be deduced by summing both kinetic and collisional contributions:

$$\mu_s = \mu_s^{\text{kin}} + \mu_s^{\text{coll}}$$

3-70

Equations 3-63 and 3-69 indicate that both the kinetic and collisional contributions to the viscosity do not depend directly on the shear rate magnitude, but indirectly through the particle agitation generated by particle encounters due to shear. The weight of each contribution evolves with concentration. In the dilute limit, the kinetic viscosity is very high, because the momentum transfer occurring during fluctuations of highly agitated particles is very large. The role of collisions appears in both contributions through the product ϕg_0 , which increases sharply for dense suspensions. Figure 3-19a shows the evolution of the total particulate viscosity for $St=5$

and 10 corresponding to inertial suspensions. We can see that in concentrated suspensions the kinetic viscosity alone is far away from describing the total suspension viscosity, the contribution of the collisions becoming dominant at high concentration. It is not intuitive to predict that a highly inertial suspension ($St=10$) has the same total viscosity whether the solid volume fraction is low (5%) or high (40%). In the Figure 3-19b, we plot the evolution of the total suspension viscosity for all the simulations in dilute and moderately concentrated suspensions. It is important to note that the trend at low concentration is very different for ignited or quenched suspensions.

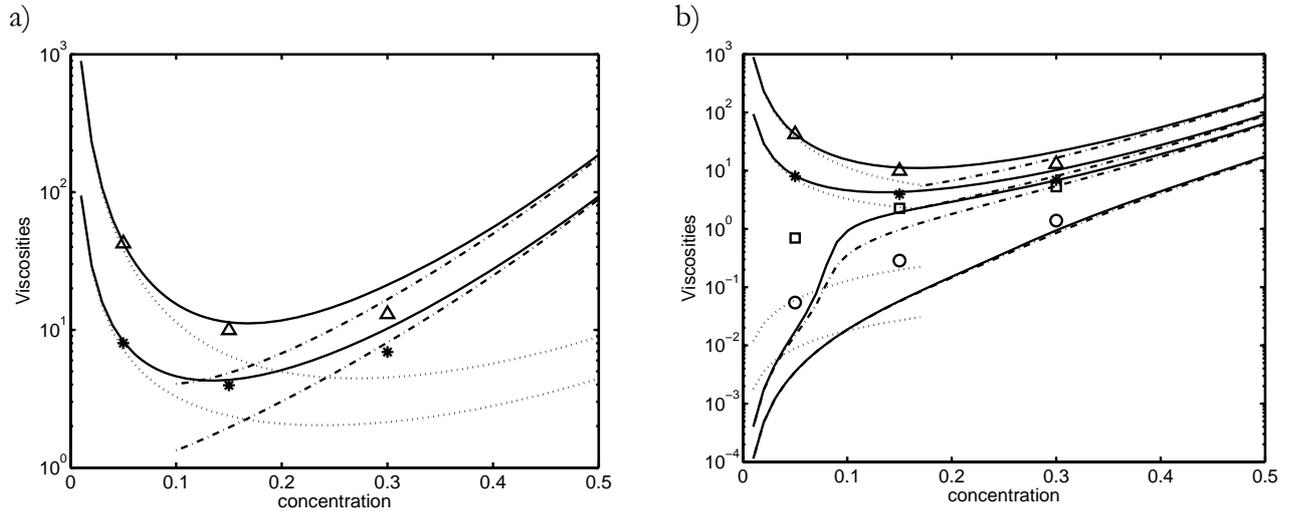


Figure 3-19

Total viscosities vs. concentration.

- a) The upper solid line and triangles correspond to $St=10$. The lower solid line and stars correspond to $St=5$.
 b) Idem figure a) supplemented with squares ($St=3.5$) and circles ($St=1$).

Dashed and dotted lines correspond respectively to the collisional (θ_{12}) and kinetic ($\rho_p \phi T_{12}$) contributions to the total viscosity.

6.4 Particle self-diffusion

Another important macroscopic quantity is the self-diffusion coefficient. It is strongly related to the flow regime of the suspension and is a relevant measure of mass transport in a number of practical applications.

While many recent works studied the inelasticity effect on the particle self-diffusion coefficient (Campbell (1997), Lutsko et al. (2002), Dufty et al (2002), Garzo (2002)), little attention was paid to the drag influence on this phenomenon. Laviéville et al. (1995) have determined theoretically the Eulerian particle self-diffusion coefficient (D_{iso}). They considered only agitated, dilute and isotropic suspensions using the deviated Maxwellian function for the velocity distribution function. The authors found that, similarly to the diffusion in a granular material, the diffusion coefficient is proportional to the granular temperature. However, the prefactor coefficient depends on both the collision and relaxation time scales.

$$D_{\text{iso}} = \left[\frac{1}{\tau_p} + \frac{2(1+e)}{3} \frac{1}{2\tau_c} \right]^{-1} T$$

3-71

Similarly to a dry granular material (Garzo, 2002), the self-diffusion tensor is expected to be anisotropic in sheared inertial suspensions. Following the method of Laviéville et al., we present in this chapter a theoretical prediction to self-diffusion tensor of particles having a finite inertia, valid from dilute to dense suspensions undergoing shear flow, as a function of the kinetic stress components as an equivalent to the granular temperature.

Self-diffusion Model

Relating the dispersion of solids to the flow properties is a longstanding problem of Fluid Mechanics and Chemical Engineering. The dispersion of a passive scalar in a turbulent flow was first studied by Taylor in 1921. The dispersion of solid particles was described by Chapman and Cowling (1970) by using the kinetic theory. The Lagrangian dispersion of non colliding inertial particles in a turbulent fluid was successfully investigated by Tchen (1947), Hinze (1975) and Gouesbet (1984). Other studies considered the Eulerian dispersion of colliding particles in a turbulent flow (Laviéville et al., 1995). One major result of those successive investigations is that the dispersion coefficient is proportional to the product of a kinetic fluctuating energy of the colliding particles (or related to the fluid agitation if collisions are neglected) and to a characteristic time scale. In recent years, many works focused on the influence of inelasticity on the self-diffusion within a dry granular material. Campbell (1997) and Lutsko et al. (2002) have used molecular dynamics simulations to characterize the influence of the restitution coefficient on dispersion. Dufty et al. (2002) have used a method based on non-equilibrium statistical mechanics to analyze the effect of inelasticity on the diffusion of impurities through fluid molecules. Similarly to Garzo (2002), he used a perturbation of the Boltzmann kinetic equation to study the effect of the restitution coefficient, mass and size ratio on bidisperse shear-induced self-diffusion.

In the present work, we are investigating the Lagrangian dispersion within dense sheared suspensions. Our results shall be compared to Eulerian predictions, following the method used by Laviéville et al. 1995. Additionally, we take into account the effect of the drag experienced by the particles. The Eulerian approach consists in considering that the suspension particles are all similar in nature (self-diffusion) but that some of these particles are labeled in some way (color coded for instance). Let $n_r(\mathbf{x})$ be the mean number density of red particles in the suspension. If the red particles are statistically distributed throughout the domain n_r would be independent of the position. Otherwise, n_r may have a spatial gradient even though the overall mean number density n of all particles is constant (i.e., there is no net flux of particles).

$\mathbf{U}_r(\mathbf{x})$ is the red particle mean velocity. It could be a function of the position while the local concentration and velocity of the particles may vary. A specific distribution function $f_r(\mathbf{c}, \mathbf{x})$ in the velocity and position phase spaces allows the determination of the average of any required quantity for red particles through a statistical approach such that

$$n_r(\mathbf{x}) \langle \psi \rangle_r = \int \psi f_r(\mathbf{c}, \mathbf{x}) d\mathbf{c}$$

3-72

We assume that f_r can be written as a function of the mixture velocity distribution function at equilibrium $f_0(\mathbf{c}, \mathbf{x})$. Following the "one temperature" model proposed by Chapman and Cowling

(1970), and for similar particles in a homogeneous suspension (the red and blue particles do not differ except in color), f_0 is based on the temperature of the mixture T and the ensemble-averaged velocity $\mathbf{U}_p(\mathbf{x})$. We write $f_r(\mathbf{c}, \mathbf{x})$ in terms of the equilibrium velocity distribution function $f_0(\mathbf{c}, \mathbf{x})$ using a second order expansion:

$$f_r(\mathbf{c}, \mathbf{x}) = \Lambda_r \left\{ 1 + b_i \frac{\partial}{\partial c_i} + \frac{b_{ij}}{2} \frac{\partial^2}{\partial c_i \partial c_j} \right\} f_0(\mathbf{c}, \mathbf{x}) \quad 3-73$$

The coefficients are identified by setting at a particular location \mathbf{x} , the expressions of the red particle number density $n_r(\mathbf{x})$, mean drift velocity ($\mathbf{U}_r(\mathbf{x}) - \mathbf{U}_p(\mathbf{x})$) and kinetic stress

$$\int f_r(\mathbf{c}, \mathbf{x}) d\mathbf{c} = n_r(\mathbf{x}) \quad \int C_i f_r(\mathbf{c}, \mathbf{x}) d\mathbf{c} = n_r(\mathbf{x}) (\mathbf{U}_{r,i}(\mathbf{x}) - \mathbf{U}_{p,i}(\mathbf{x})) \quad \int C_i C_j f_r(\mathbf{c}, \mathbf{x}) d\mathbf{c} = n_r(\mathbf{x}) T_{ij} \quad 3-74$$

where $\mathbf{U}_p(\mathbf{x})$ and T_{ij} are respectively the mean velocity and kinetic stress tensor of the mixture. Therefore, identifying the coefficients leads to

$$\Lambda_r = \frac{n_r(\mathbf{x})}{n} \quad b_i = -(\mathbf{U}_{r,i}(\mathbf{x}) - \mathbf{U}_{p,i}(\mathbf{x})) \quad b_{ij} = T_{ij} - T\delta_{ij} \quad 3-75$$

Hence, the single distribution function of the red particles has the same anisotropy coefficient ($a_{ij} = b_{ij}$) up to the second order as the single distribution function of the mixture $f(\mathbf{c}, \mathbf{x})$. The additional non-zero anisotropy coefficient (b_i) at the first order is a direct result of the drift velocity between the red and all the particles. Finally, $f_r(\mathbf{c}, \mathbf{x})$ is written:

$$f_r(\mathbf{c}, \mathbf{x}) = \frac{n_r(\mathbf{x})}{n} \left\{ 1 + \frac{\mathbf{U}_{r,i}(\mathbf{x}) - \mathbf{U}_{p,i}(\mathbf{x})}{T} C_i + \frac{T_{ij} - T\delta_{ij}}{2T^2} C_i C_j \right\} f_0(\mathbf{c}, \mathbf{x}) \quad 3-76$$

The sum of the red and blue particle distributions should be equal to the velocity distribution function of the mixture $f(\mathbf{c}, \mathbf{x})$.

The transport equation governing the mean red particle drift velocity can be derived by multiplying the equivalent Boltzmann equation by c_i and then integrating the velocity space phase over the red particles. The resulting momentum balance equation is:

$$\frac{\partial}{\partial t} (n_r(\mathbf{x}) \langle c_i \rangle_r) + \frac{\partial}{\partial x_j} n_r(\mathbf{x}) \langle c_i c_j \rangle_r = n_r(\mathbf{x}) \left\langle \frac{c_i - u_i}{\tau_p} \right\rangle_r + C_r(c_i) \quad 3-77$$

The temporal derivation cancels in a steady state suspensions. The momentum change due to the drag can be written in terms of the drift velocity for a relaxation time τ_p as

$$n_r(\mathbf{x}) \left\langle \frac{c_i - u_i}{\tau_p} \right\rangle_r = -\frac{n_r(\mathbf{x})}{\tau_p} (\mathbf{U}_{r,i}(\mathbf{x}) - \mathbf{U}_{p,i}(\mathbf{x})) \quad 3-78$$

The flux of momentum is calculated by replacing the velocity \mathbf{c} by the local fluctuation $\mathbf{c} - \mathbf{U}_p(\mathbf{x})$ and mean mixture velocity. Then averaging over the red particles, it gives:

$$n_r(\mathbf{x}) \langle c_i c_j \rangle_r = n_r(\mathbf{x}) \left\{ \langle C_i C_j \rangle + U_{p,j} (\mathbf{U}_{r,i} - \mathbf{U}_{p,i}) + U_{p,i} (\mathbf{U}_{r,j} - \mathbf{U}_{p,j}) + U_{p,i} U_{p,j} \right\} \quad 3-79$$

where the notations \mathbf{U}_r and \mathbf{U}_p are for $\mathbf{U}_r(\mathbf{x})$ and $\mathbf{U}_p(\mathbf{x})$ for the sake of brevity.

The kinetic stress flux in a simple homogeneous shear flow reduces to the transport of the red particles in the direction of the ensemble velocity gradient

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(n_r(\mathbf{x}) \langle c_i c_j \rangle_r \right) = n_r(\mathbf{x}) U_{r,j} \frac{\partial U_{p,i}}{\partial x_j} + \langle C_i C_j \rangle \frac{\partial}{\partial x_j} n_r(\mathbf{x})$$

3-80

This equality is a consequence of assuming that:

- The mean flow and the red particle concentration gradient are orthogonal ($U_{p,j} \partial n_r(\mathbf{x}) / \partial x_j = 0$)
- The velocity gradient of the red particles and the flow direction are orthogonal ($U_{p,j} \partial U_{r,i} / \partial x_j = 0$), knowing that in homogeneous shear flow leads in general to the equation ($\partial(U_{p,i} U_{p,j}) / \partial x_j = 0$)

The last contribution to the balance equation is the collisional contribution $C_r(c_i)$ of the red particles. Following the same steps as for $C(\psi)$, the rate of change of a quantity ψ for the red particles $C_r(\psi)$ is calculated using a new pair distribution function $f_r^{(2)}$ instead of $f^{(2)}$

$$C_r(\psi_A) = \int_{\mathbf{g} \cdot \mathbf{k} < 0} (\psi'_A - \psi_A) f_r^{(2)}(\mathbf{c}_A, \mathbf{x}_A, \mathbf{c}_B, \mathbf{x}_B) |\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}| d_p^2 d\mathbf{k} d\mathbf{c}_A d\mathbf{c}_B$$

3-81

$f_r^{(2)}(\mathbf{c}_A, \mathbf{x}_A, \mathbf{c}_B, \mathbf{x}_B)$ being the pair distribution function which characterizes the statistics of the red particles colliding with the others (red or not). $f_r^{(2)}$ can be written for dense suspensions following the development of Jenkins and Richmann (1985):

$$f_r^{(2)}(\mathbf{c}_A, \mathbf{x}, \mathbf{c}_B, \mathbf{x} + d_p \mathbf{k}) = g_0 f_r(\mathbf{c}_A, \mathbf{x}) \left(f(\mathbf{c}_B, \mathbf{x}) + d_p k_m \frac{\partial f(\mathbf{c}_B, \mathbf{x})}{\partial x_m} \right)$$

3-82

That can be rearranged to give the sum of the mixture pair distribution function and an additional contribution due to the drift between the red particles and the suspension.

$$f_r^{(2)}(\mathbf{c}_A, \mathbf{x}, \mathbf{c}_B, \mathbf{x} + d_p \mathbf{k}) = \frac{n_r(\mathbf{x})}{n} f^{(2)}(\mathbf{c}_A, \mathbf{x}, \mathbf{c}_B, \mathbf{x} + d_p \mathbf{k}) - g_0 \frac{n_r(\mathbf{x})}{n} \frac{(U_{r,i} - U_{p,i})}{T} C_i f_0(\mathbf{c}_A, \mathbf{x}) \left(f(\mathbf{c}_B, \mathbf{x}) + d_p k_m \frac{\partial f(\mathbf{c}_B, \mathbf{x})}{\partial x_m} \right)$$

3-83

Hence, the resulting collisional rate of change of ψ at a location \mathbf{x} is nothing else than the sum of the mixture collisional rate of change multiplied by the fraction of the red particles and an additional contribution due to the drift velocity at that point.

$$C_r(\psi) = \frac{n_r(\mathbf{x})}{n} C(\psi) + \delta C_r(\psi)$$

3-84

The collisional rate of change of the mixture momentum $C(c_i)$ is zero because of the conservation of the local momentum during collisions when the suspension is homogeneous. However, the collisional contribution reduces to $\delta C_r(c_i)$ which is a direct consequence of the drift velocity. $\delta C_r(c_i)$ comes from the second part of the red particle pair distribution function. It is written for ψ as follows:

$$\delta C_r(\psi_A) = g_0 \frac{n_r(\mathbf{x})}{n} \frac{1}{T} \int_{\mathbf{g} \cdot \mathbf{k} < 0} (\psi'_A - \psi_A) (U_{r,i} - U_{p,i}) C_{A,i} f_{0A} \left\{ f(\mathbf{c}_B, \mathbf{x}) + d_p k_m \frac{\partial f(\mathbf{c}_B, \mathbf{x})}{\partial x_m} \right\} d_p^2 |\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}| d\mathbf{k} d\mathbf{c}_A d\mathbf{c}_B$$

3-85

where $f_{0A} = f_0(\mathbf{c}, \mathbf{x})$ stands for the isotropic probability of finding a velocity \mathbf{c}_A at the location \mathbf{x} . To perform the integration, a suitable exchange of variables $\mathbf{g} = \mathbf{c}_B - \mathbf{c}_A$ and $\mathbf{q} = (\mathbf{c}_A + \mathbf{c}_B)/2$ is introduced and the integration is then performed on $d\mathbf{g}d\mathbf{q} = d\mathbf{c}_A d\mathbf{c}_B$ for $\mathbf{g} \cdot \mathbf{k} < 0$. This gives:

$$\delta C_r(c_i) = -n_r(\mathbf{x}) \frac{\zeta}{\tau_c} \delta_{ik} (U_{r,k} - U_{p,k}) + n_r(\mathbf{x}) \frac{24}{5} \phi g_0 \Pi_{ijkm} \frac{(1+e)}{2} \frac{\partial U_{p,j}}{\partial x_m} (U_{r,k} - U_{p,k})$$

3-86

$$\zeta = \frac{2(1+e)}{3} \frac{1}{2} \quad \Pi_{ijkm} = \begin{cases} 1 & \text{for } i = j = k = m \\ 1/3 & \text{for 2 different pairs of equal indices} \\ 0 & \text{in other cases} \end{cases}$$

The first part of the collisional contribution depends on the particle agitation through the collision time (or collision frequency). It is the same as the expression obtained by Laviéville (1995) for an isotropic flow (when skipping the turbulence effect in their study). The second part is mainly related to dense suspensions flowing under shear.

Finally, the balance equation is

$$\begin{aligned} T_{ij} \frac{\partial n_r(\mathbf{x})}{\partial x_j} = & -\frac{n_r(\mathbf{x})}{\tau_p} (U_{r,i} - U_{p,i}) \\ & - n_r(\mathbf{x}) \left\{ \frac{\partial U_{p,i}}{\partial x_k} - \frac{24}{5} \phi g_0 \Pi_{ijkm} \frac{(1+e)}{2} \frac{\partial U_{p,j}}{\partial x_m} \right\} (U_{r,k} - U_{p,k}) \\ & - n_r(\mathbf{x}) \frac{\zeta}{\tau_c} \delta_{ik} (U_{r,k} - U_{p,k}) \end{aligned}$$

3-87

The flux of red particles is controlled by three time scales: the relaxation time, the time between successive collisions, and the time scale of approaching particles due to shear. It can be simply written as the product of a frequency tensor and the drift velocity as follows:

$$T_{ij} \frac{\partial n_r(\mathbf{x})}{\partial x_j} = -n_r(\mathbf{x}) A_{ik} (U_{r,k} - U_{p,k})$$

3-88

This expression is written in a way equivalent to the classical form of Fick's law but it leads to a tensor of diffusion coefficients instead of one scalar coefficient obtained under the assumption of isotropy.

$$D_{kj} = (A^{-1})_{ki} T_{ij}$$

3-89

where

$$A_{ik} = \left[\frac{1}{\tau_p} \delta_{ik} + \frac{\zeta}{\tau_c} \delta_{ik} + \left\{ \frac{\partial U_{p,i}}{\partial x_k} - \frac{24}{5} \phi g_0 \frac{(1+e)}{2} \frac{\partial U_{p,j}}{\partial x_m} \Pi_{ijkm} \right\} \right]$$

3-90

Writing the matrix A_{ik} for a general shear is complicate. Hence, we shall write it for the pure linear shear flow where the shear rate $\partial U_1 / \partial x_2 = \gamma$ is the only non-zero component. The matrix A has the following form

$$A_{ik} = \begin{bmatrix} \varphi_a & \varphi_c & 0 \\ \varphi_b & \varphi_a & 0 \\ 0 & 0 & \varphi_a \end{bmatrix}$$

3-91

The coefficients are

$$\varphi_a = \frac{1}{\tau_p} + \frac{2}{3} \frac{(1+e)}{2} \frac{1}{\tau_c} \quad \varphi_b = -\left(\frac{8}{5} \phi g_0 \frac{(1+e)}{2}\right) \gamma \quad \varphi_c = \left(1 - \frac{8}{5} \phi g_0 \frac{(1+e)}{2}\right) \gamma$$

The inverse of the matrix A is defined only if the determinant $\varphi_a^2 - \varphi_b \varphi_c$ is different from zero and the diffusion tensor is written as

$$D = \frac{1}{\varphi_a^2 - \varphi_b \varphi_c} \begin{bmatrix} \varphi_a & -\varphi_c & 0 \\ -\varphi_b & \varphi_a & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\varphi_a^2 - \varphi_b \varphi_c}{\varphi_a} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & 0 \\ T_{12} & T_{22} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{bmatrix}$$

3-92

The diffusion tensor is not isotropic neither diagonal in the reference axes. The self-diffusion coefficients depend in each direction on different kinetic stress components. Moreover, the shear flow induces the existence of negative non-zero cross flow diffusion coefficients D_{12} and D_{21} which are usually not equal neither null if the shear is different from zero. In the normal directions, the self-diffusion coefficients are the following:

$$D_{11} = \frac{\varphi_a}{\varphi_a^2 - \varphi_b \varphi_c} \left(T_{11} - \frac{\varphi_c}{\varphi_a} T_{12} \right)$$

3-93

$$D_{22} = \frac{\varphi_a}{\varphi_a^2 - \varphi_b \varphi_c} \left(T_{22} - \frac{\varphi_b}{\varphi_a} T_{12} \right)$$

$$D_{33} = \frac{1}{\varphi_a} T_{33}$$

Some particular cases of particle self-diffusion in a suspension can be discussed:

- $\gamma=0$: Without the shear contribution to the diffusion, the matrix D becomes diagonal in the reference axes. The matrix is diagonal and isotropic and the diffusion coefficients are proportional to the normal stresses similarly to the prediction obtained by Laviéville et al (1995) in an isotropic flow

$$D_{iso} = \left[\frac{1}{\tau_p} + \frac{2}{3} \frac{(1+e)}{2} \frac{1}{\tau_c} \right]^{-1} T$$

3-94

The authors have found a strict proportionality between the self-diffusion and the particle temperature (instead of one of the normal component of the kinetic stress tensor). The coefficient of proportionality (or equivalently $1/\varphi_a$) depends only on the particle relaxation time, the inelasticity and the collision time.

We can notice that in a shear flow, the self-diffusion in the spanwise direction D_{33} is the only component that remains proportional to the kinetic stress T_{33} with the same coefficient of proportionality ($1/\varphi_a$).

- $\phi \rightarrow 0$: In a dilute suspension φ_b cancels out but not φ_c . Similarly to D_{33} , D_{22} becomes also proportional to T_{22} with $1/\varphi_a$ as a multiplying prefactor. The coefficient D_{11} is always larger, containing an additional non-zero shear contribution.

- $St \rightarrow \infty$ or $\phi \gg 1$: In the case of highly inertial particles, or moderate to high suspension concentrations, the self-diffusion coefficients are nearly proportional to the collision time scale. This behavior is similar to the classical diffusion predicted by the kinetic theory with an additional coefficient due to the effect of inelastic collisions.

$$D_{\alpha\alpha} \approx \left(\frac{2e+1}{3} \right)^{-1} \tau_c T_{\alpha\alpha}$$

3-95

When the concentration increases, the evolution of the terms in the diffusion tensor is not intuitive. It is a competition between the different contributions of the collision time and the normal kinetic stresses.

- $St \rightarrow 0$: In the limit of dilute and weakly inertial suspensions, the effect of a short relaxation time is dominant and $D_{\alpha\alpha} \approx \tau_p T_{\alpha\alpha}$. It is more complicated to predict the diffusion behavior in concentrated suspensions due to the significant contributions of the other terms.

Simulation results

When simulating the suspension flow in a Lagrangian framework, there are several equivalent ways to compute the self-diffusion coefficients, using either the time integral of the Lagrangian velocity autocorrelation function or the long time behavior of the mean-square displacement. In this work, we selected the method based on the time evolution of the mean-square displacement.

$$\frac{D_{ij}}{\gamma a^2} = \frac{1}{2} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} \langle (x_i(t) - x_i(0))(x_j(t) - x_j(0)) \rangle$$

3-96

where $\mathbf{x}(0)$ are the initial particle positions.

The first step to verify the accuracy of the diffusion model is to perform an *a priori* test. For a given Stokes number and suspension concentration, the self-diffusion coefficients are calculated (eq. 3-93) using the simulation results for the kinetic stress tensor, the granular temperature and the corresponding collision time (τ_c or τ_γ depending on the suspension state). The values of the model are then compared to the diffusion coefficients directly obtained by the simulations.

The Figure 3-20 shows a comparison between the calculated diffusion coefficients and the simulation results (for a similar simulation set: St is ranging between 1 and 10 and ϕ varies from 5% to 30%). An excellent agreement is observed for most cases, revealing the validity of the self-diffusion model derived in this work. However, for weakly agitated suspensions, the agreement between the simulations and the theoretical calculations is less satisfactory. This is mainly due to the assumption of a deviated Maxwellian velocity distribution, which is not exact in the weak

agitation regime. Nevertheless, the *a priori* calculations in this limit show a much better agreement with the simulation results than the *a posteriori* calculations (see Figure 3-21). Hence, as it will be discussed later, the accurate predictions for the self-diffusion coefficients depends more on the accurate prediction of the kinetic stress components than on the shape of the velocity distribution.

Similarly to the particle agitation, the strength of diffusion increases with the particle inertia. At low drag effects, the inertial particles diffuse more efficiently in a dilute suspension where the particle agitation is large and the interparticle distance is wide enough to allow a longer particle mean free path. Increasing the concentration leads to less self-diffusion. However, the weakly inertial particles diffuse hardly in a low concentration suspension where they often follow the fluid streamlines. In this regime, diffusion is more efficient when ϕ increases since the particles are subject to a larger number of collisions. The self-diffusion in the flow direction is not shown here. It is more complicated to determine D_{11} and D_{12} numerically due to the coupling in the flow direction between the fluctuations leading to diffusion and convection induced by the mean flow when particles are crossing the streamlines.

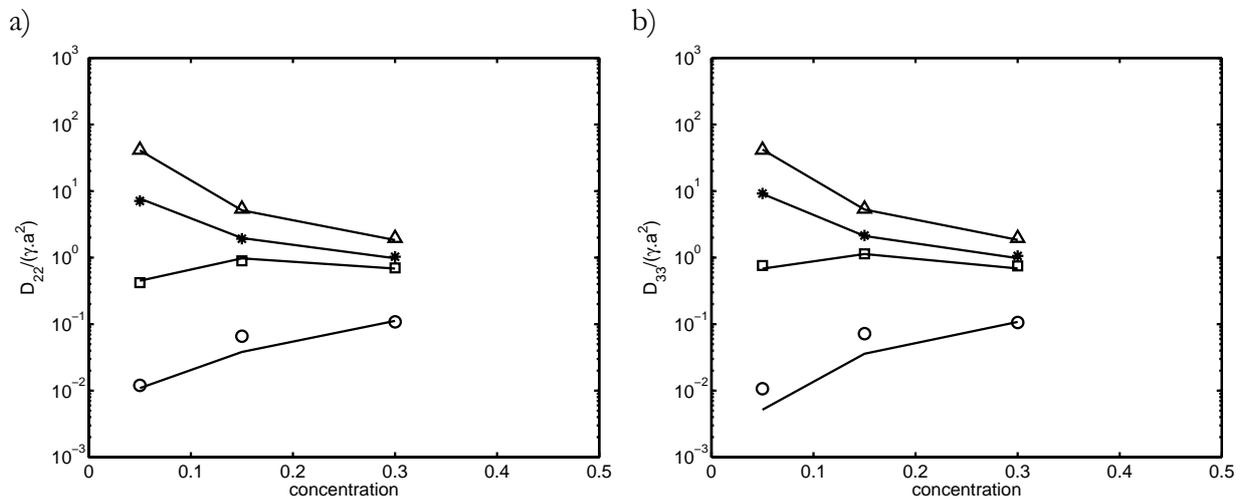


Figure 3-20

Shear-induced self-diffusion coefficients (*A priori* test, solid lines) in the a) shear and b) spanwise directions vs. the concentration for different Stokes numbers.

Symbols for the simulation results, Δ , $*$, \square , \circ correspond respectively to $St=10, 5, 3.5$ and 1 .

The predictions of the model are now validated provided that the granular temperature is adequately estimated. We want to make a step forward by using a complete theoretical prediction of the self-diffusion in a sheared suspension without any adjustable parameter (kinetic stress tensors and granular temperature are predicted directly by the model). The Figure 3-21 shows the theoretical evolution of the self-diffusion coefficients with concentration in both shear and spanwise directions. The theoretical expressions for the kinetic stresses and collision times correspond to the most suitable prediction of the suspension state (quenched or ignited).

As we expected, the diffusion coefficients in both shear and spanwise directions are in agreement with the theoretical prediction while the kinetic stresses and the collision time are well predicted (in the regime of strong inertia of the particles). For these suspensions, the self-diffusion of particles is decreasing with the concentration. In the limit of weakly agitated suspensions the theoretical self-diffusion coefficients are significantly underestimated. However, despite this quantitative discrepancy, the diffusion prediction using the kinetic stress given by the quenched theory is much closer to the numerical results than the value obtained with the ignited theory. Comparing Figure 3-20 and Figure 3-21, we may conclude that this discrepancy comes,

not only from the assumption concerning the velocity distribution function shape, but more likely from the poor prediction of the kinetic stress components given by the quenched theory.

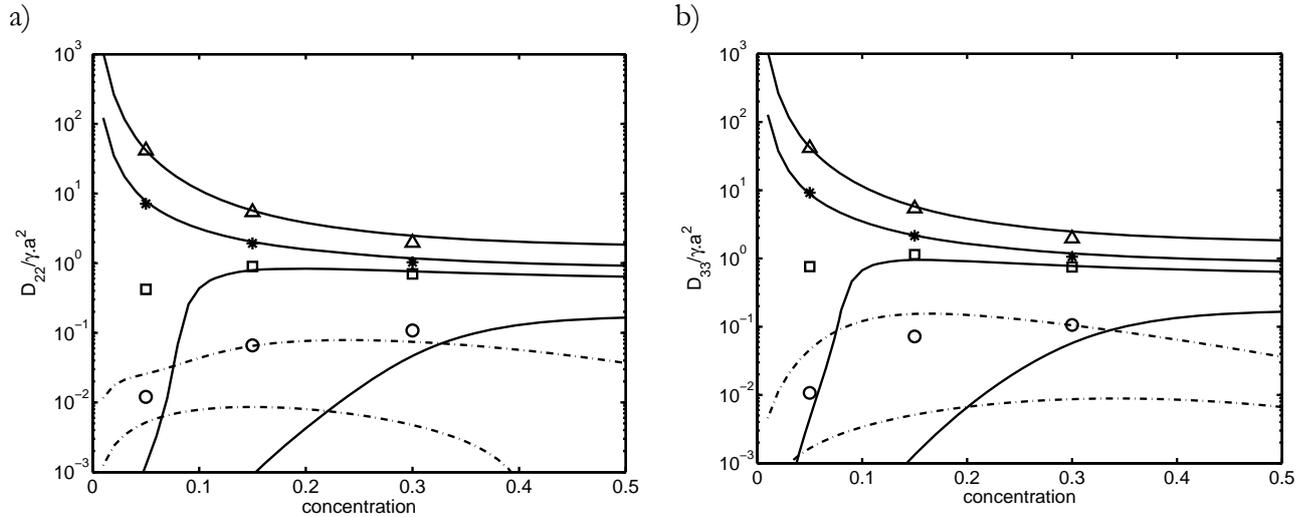


Figure 3-21

Self-diffusion coefficients in the shear a) and spanwise b) directions vs. the concentration for different Stokes numbers.

Symbols (Δ , $*$, \square , \circ respectively for $St=10, 5, 3.5$ and 1) represents the numerical results and solid lines (from top to bottom $St=10, 5, 3.5$ and 1) corresponds to the theoretical predictions with the ignited state. The dashed-dotted lines correspond to the stresses calculated from the transition state (eq. 3-54) (the lower and upper curves are respectively for $St=1$ and 3.5).

D_{22} is compared in Figure 3-22a to the self-diffusion coefficient D_{iso} assuming that the suspension is isotropic (eq. 3-94 with $T=T_{mod}$, eq. 3-67). As expected, when the suspension anisotropy is large (low ϕ and St), D_{22} is far from D_{iso} and they match when the anisotropy tends toward zero. The comparison between the self-diffusion in the shear and spanwise directions (calculated from the ignited theory) is shown in Figure 3-22b together with the simulation results. D_{22}/D_{33} has not a monotonous evolution with the Stokes number, but it is always smaller than unity. This means that the particles diffuse easier in the spanwise than in the shear direction. D_{22}/D_{33} is very close to 1 at $St=10$ where the suspension anisotropy was shown to be small. At $\phi=15$ and 30% most coefficient ratios resulting from the simulations are in agreement with the theory.

At low Stokes number and moderately concentrated suspensions ($\phi=15$ and 30%), the anisotropy ratio D_{22}/D_{33} resulting from the simulations are in good agreement with the theory. However, we cannot conclude on the discrepancy between the simulation results and the theory at lower concentrations ($\phi=5\%$), where the theoretical diffusion coefficients D_{22} and D_{33} are poorly estimated by the theoretical prediction.

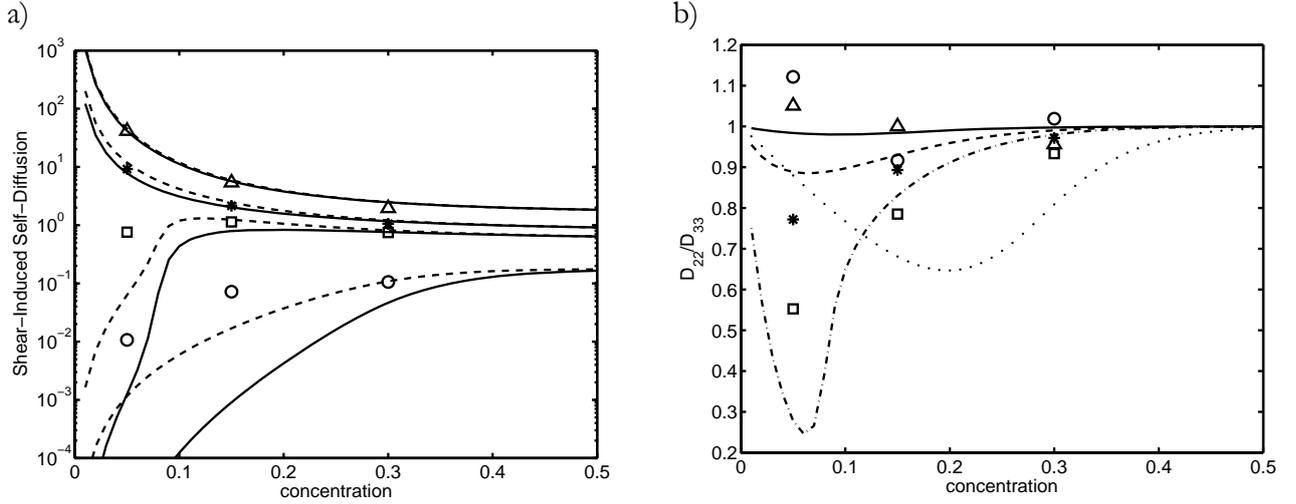


Figure 3-22

a) Evolution of $D_{22}/\gamma a^2$ vs. concentration (solid lines) compared to the diffusion coefficient assuming negligible suspension anisotropy D_{iso} (dashed lines) for different Stokes numbers (from top to bottom St=10, 5, 3.5 and 1). Symbols are for the same simulations as in b)

b) The anisotropy of diffusion D_{22}/D_{33} vs. concentration. Δ and solid line: St=10, * and dashed line: St=5, \square and dashed-dotted line: St=3.5, \circ and dotted line: St=1 (Symbols for simulations and lines for the theoretical predictions).

Finally, it is interesting to compare the behavior of both the self-diffusion coefficients and kinetic viscosity in the suspension. They are both proportional to the particle agitation. At high particle inertia, $D_{\alpha\alpha}$ and μ_s^{kin} are decreasing together with the suspension concentration down to a certain limit. Above this critical concentration, the additional term due to the collision effects ϕg_0 contributes to a slight increase of μ_s^{kin} for moderate to high concentrations while the diffusion coefficient keeps decreasing slowly.

The Schmidt number compares the ability of the suspension to diffuse momentum (viscosity) to its ability to disperse the particles (self-diffusion). It is given by the following expression:

$$Sc = \frac{\mu_s^{\text{kin}} / \rho_p \phi \gamma^2 a^2}{D_{22} / \gamma a^2}$$

3-97

Equation 3-97 expresses the Schmidt number as a function of the effective kinetic viscosity and the self-diffusion coefficient in the shear direction. The choice of μ_s^{kin} instead of μ_s^{coll} or μ_s makes the definition of the Schmidt number easily comparable to the Prandtl number used to characterize the heat transfer efficiency (no collisional effects).

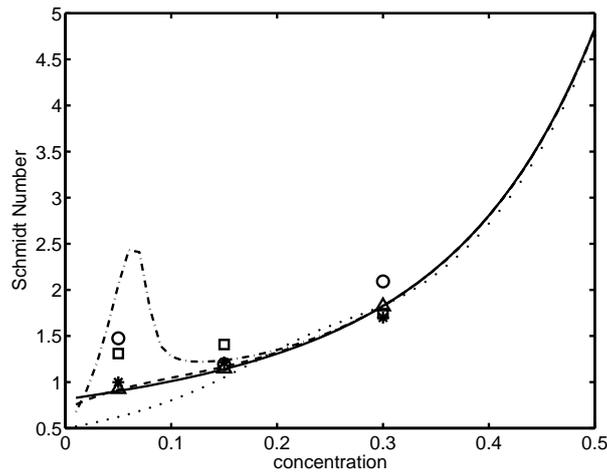


Figure 3-23

Schmidt number vs. concentration for different Stokes numbers. For caption see Figure 3-22b

The Figure 3-23 shows the evolution of the Schmidt number with concentration (eq. 3-97) for different Stokes numbers. The Schmidt number is $O(1)$ indicating that in our configurations of simulation, both diffusive processes are of similar magnitude. There is a slight dominance of the momentum diffusion over the mass diffusion which is increasing with concentration. The Schmidt number decreases with the particle inertia at low concentrations, but for moderate to high concentrations ($\phi > 15\%$), it is almost independent of the particle inertia, which is agreed by the good match of the simulations and the theoretical predictions. In the limit of high Stokes numbers, the Schmidt number behaves like $(1 + \phi g_0 \phi_c)$ which tends toward infinity for concentrate suspensions approaching the close-packing (the suspension is almost jammed but the transfer of momentum is still possible).

7- Inelastic collisions

The restitution coefficient is the ratio of the normal component of the velocity after collision to the normal component immediately before the impact. Perfectly elastic collisions occur with a restitution coefficient strictly equal to one. In reality, there exist many physical mechanisms (hydrodynamic interactions, film drainage, surface forces and plastic deformation of the particles) that modify the velocity of colliding particles significantly before and after impact on a length scale of the same order or shorter than the particle radius. This was shown by different works (Joseph et al. (2001), Yang and Hunt (2006) for solid spheres in glycerol and Legendre et al. 2005 for drops in water ...). As stated before, the influence of dissipation due to inelastic effects on the macroscopic behavior of an agitated granular material (without drag) was investigated in many works (Campbell (1997), Lutsko et al. (2002) ...). The purpose of this section is to evaluate the relative influence of both dissipation mechanisms when included simultaneously. Firstly, we assume a constant inelasticity and secondly the restitution coefficient shall depend on the instantaneous impact velocity. This is a simplified approach for including direct hydrodynamic interactions between approaching particles.

7.1 Constant restitution coefficient

A restitution coefficient lower than 1 (even slightly, $1 - \epsilon \ll 1$), reduces considerably the agitation level of the suspension. In a dry granular material where drag forces are neglected, the

dissipation due to inelastic effects is the only dissipative mechanism. Therefore the equilibrium state is achieved under the balance of shear induced agitation due to collisions and inelastic dissipation.

The energy dissipation due to the inelastic collision between two particles A and B for a single binary collision is

$$\Delta E = -\frac{m_p}{4} (1 - e^2) (\mathbf{v}_A - \mathbf{v}_B)^2$$

3-98

The global energy dissipation due to inelasticity over the whole suspension can be calculated by summing the redistribution of the normal kinetic stress tensor due to collisions (eq 3-58)

$$\chi(\text{mc}^2) = \chi_{kk} = -(1 - e^2) \rho_p \phi \frac{T}{\tau_c}$$

3-99

which corresponds to the averaged energy loss for each collision multiplied by the collision frequency.

When the collision inelasticity is supplemented with a second energy dissipation mechanism, the agitation level in the suspension is even lower. The main goal of this section is not to investigate extensively the respective influence of e , St and ϕ on the behavior of the suspension but to evaluate how the results of the previous sections may be modified by inelasticity. Moreover, the existence and the range of parameters leading to quenched or ignited state will be compared to the reference case of perfectly elastic particles. Then we performed some simulations by decreasing the restitution coefficient for a fixed St and ϕ .

At $St=5$ and $\phi=15\%$, the suspension is ignited for purely elastic collisions. When the restitution coefficient decreases from 1 to 0.5, the particle agitation decreases roughly by an order of magnitude (see Figure 3-25a). The kinetic fluctuating energy becomes even lower than the agitation level predicted by the quenched theory for $St=5$, $\phi=15\%$ and $e=1$ if we would assume a PDF of the particle velocity fluctuations close to a Dirac delta function. However the quenched theory cannot be applied in this context of simulations because the velocity distribution is still very close to a Maxwellian function (see Figure 3-24) and it is far away from the Dirac delta function. In the case of a suspension with $St=1$ and $\phi=5\%$, the velocity variance is almost independent of the collision inelasticity and is fairly well predicted by the theory using the quenched state with $e=1$.

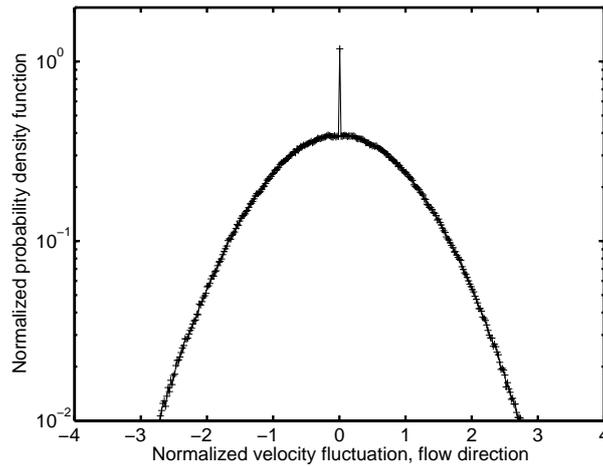


Figure 3-24

Normalized Probability density function $f(v''_1/\sqrt{T_{11}})$ of the velocity fluctuations in the flow direction in a suspension with $St=5$, $\phi=15\%$ and $e=0.5$. The symbols + to the PDF obtained in the simulation and it is compared to the normalized Gaussian distribution (dashed line).

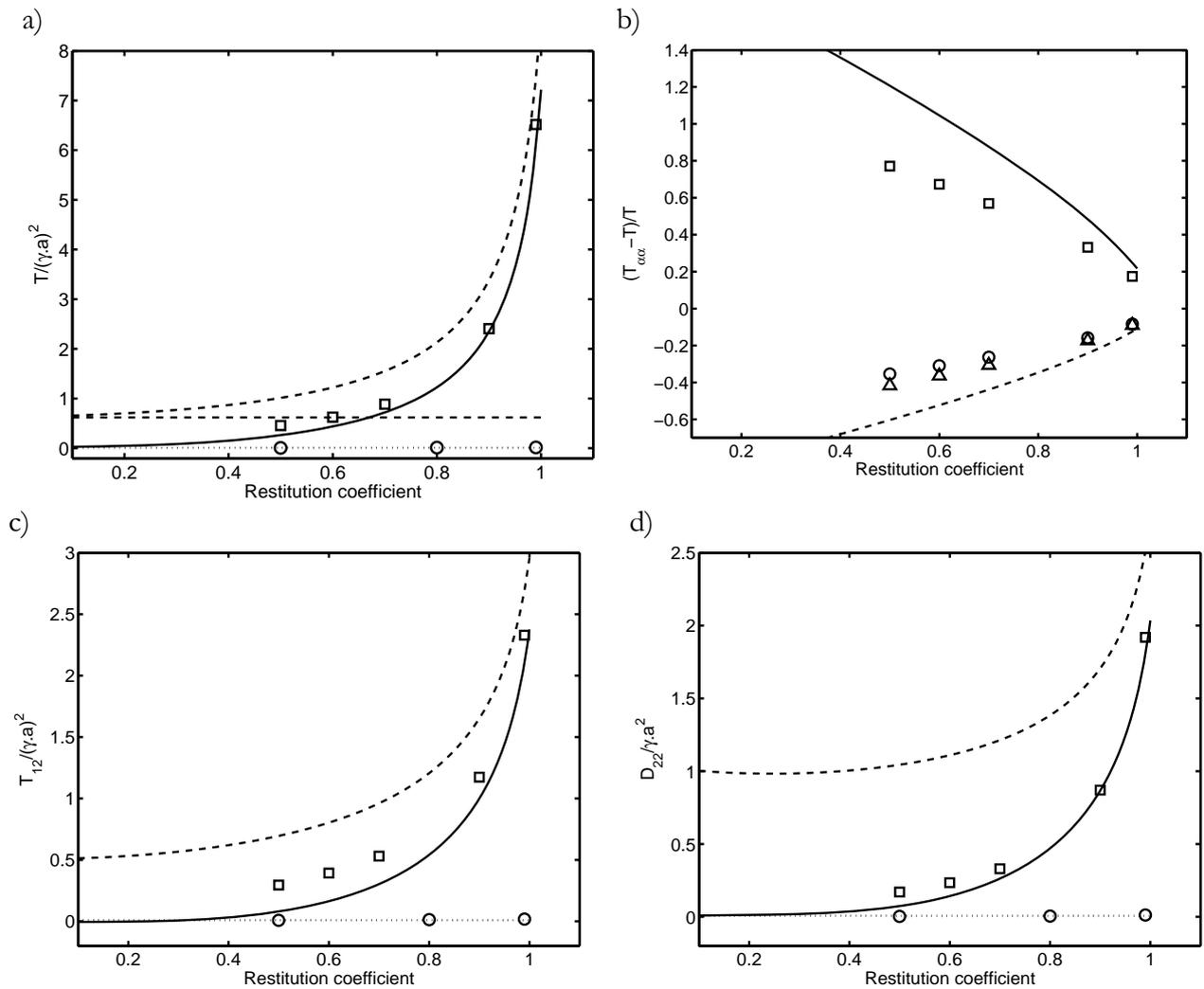


Figure 3-25

a) Granular temperature, b) Kinetic stress tensor anisotropy, c) Kinetic shear stress and d) shear-induced self-diffusion coefficients in the shear direction vs. the restitution coefficient.

In figures a, c and d: circles stand for the simulations $\{St=1, \phi=5\%$ and the dotted lines correspond to the quenched theory; squares for $\{St=5, \phi=15\%$ and the solid line for the ignited theory.

The dashed lines are obtained assuming a negligible anisotropy (Γ_{mod} , μ^{kin} and D_{iso}).

In figure b, the solid line and squares stand for anisotropy in the flow direction and the circles, triangles and dashed line stand for the anisotropy in the shear and spanwise directions.

Figure 3-26 shows the evolution of the granular temperature as a function of the energy dissipation ratio between collisions and the drag $(\tau_p/\tau_c)(1-e^2)/2$ for $St=5$. The ratio $(\tau_p/\tau_c)(1-e^2)/2$ compares the typical rate of energy dissipation due to the drag $1/\tau_p$ to the energy loss during inelastic collisions $(1-e^2)/2\tau_c$. The simulations have been performed with different restitution coefficients ranging from 1 to 0.5. It is compared to the prediction of the theory based on an ignited state. The shape of this curve is not intuitive because τ_c varies with the particle agitation leading to a non-monotonic evolution of the dissipation ratio when the restitution coefficient decreases. The simulation results and the theory agree for $e>0.9$; the dominant contribution to the dissipation is due to the drag while $(\tau_p/\tau_c)(1-e^2)/2$ is less than 1. For $e<0.9$, the dissipation summed on all the inelastic particle collisions becomes dominant. The dissipation ratio starts to decrease for $e<0.6$, indicating that if the ignited theory is still valid in such low restitution coefficient limit, the drag overcomes the dissipation by inelastic collisions at low particle agitation. The simulations performed for $e>0.5$ show a continuous granular temperature decrease even after the transition from the drag dominated regime to a collision dominated regime. The numerical collision time used for Figure 3-26 is calculated using eq. 3.42 where the T is replaced by the values obtained in the simulations.

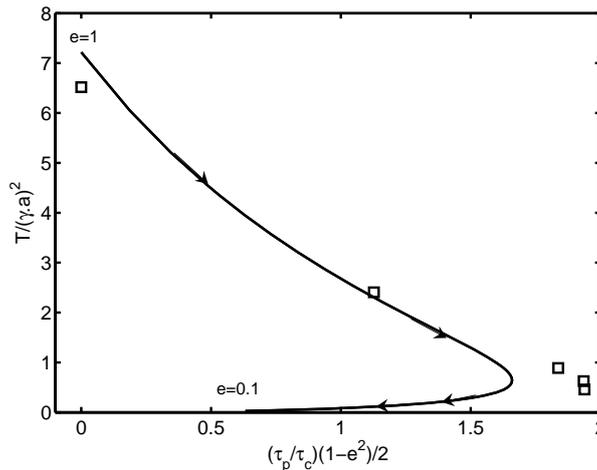


Figure 3-26

Granular temperature vs. the energy dissipation ratio (inelasticity/drag dissipations) for $St=5$ and $\phi=15\%$

The solid line is obtained from the ignited theory (eq. 3-37). The arrows indicate the path corresponding to a reduction of the restitution coefficient from 1 to 0.1. The squares corresponds to the simulations with $e=1, 0.9, 0.7, 0.6, 0.5$ from top to bottom.

The discrepancy observed on the dissipation ratio between theory and simulations at low restitution coefficients agrees with the limitation of applying the ignited theory for weakly agitated systems. It is mainly related in this case to the particle clustering effect. This phenomenon has been often observed in sheared inelastic granular materials. The clusters show a preferential orientation along the compression axis ($3\pi/4$ from the flow direction). This is the direction where shear-induced collisions are the most frequent due to the pure straining motion of the imposed shear flow (Hopkins and Louge 1991, Alam and Luding 2006).

7.2 Restitution coefficient depending on the impact velocity

The energy dissipation due to the direct hydrodynamic interactions (flow modification when two particles are approaching before collision) was not considered in this study, neither in the models nor in the simulations. However, the damping of impact velocities due to the fluid film drainage between approaching particles may have a considerable effect on the macroscopic behavior of the suspension. Sangani et al. (1996) have included the lubrication effects in their simulations in a simplified way. The particle trajectories are calculated using a mean drag law $F_i = -6\pi\mu a R_{\text{diss}}(v_i - \gamma_{ij} x_j)$. R_{diss} is an effective drag coefficient of a sphere moving in a fixed bed of particles, it increases with the concentration and when the cut-off distance of the lubrication forces is reduced (this prevents the divergence of lubrication forces and allows contact in a finite time). The authors have shown that this method leads to accurate estimates of various averaged quantities for $St \geq 3$ even if the detailed hydrodynamic interactions in the simulations are ignored.

We try here to take into account the direct hydrodynamic effects, following the model of Legendre et al. (2005). We include the damping effects of the fluid drainage in an equivalent restitution coefficient depending on the particle impact velocities. The authors have proposed a correlation for the restitution coefficient corresponding to a particle-wall collision as follows:

$$e_{\text{pw}} = e_{\text{max}} \exp\left(-\frac{\beta}{St_{\text{imp}}}\right)$$

3-100

where β was found to be 35 when fitting with the different experimental data carried out by Joseph et al. (2001) and Richard and Quéré (2000). The Stokes number St_{imp} is based on the relative impact velocity V_{imp} (unperturbed by the interstitial fluid). Neglecting the fluid density compared to the particle density St_{imp} can be written as follows

$$St_{\text{imp}} = \frac{m}{6\pi\mu a^2} V_{\text{imp}}$$

3-101

e_{max} is the rebound coefficient between particles for a dry collision, and it is equal to one for perfectly elastic particles without surface effects. Yang and Hunt (2006) have found that for particle-particle collisions, the evolution of the restitution coefficient follow the same trend as for particle-wall collisions, provided that a Stokes number based on a reduced particle mass and radius m^* and a^* is used. For particle-wall collision $m^*=m_p$ and $a^*=a$, but for collisions of identical particles $m^*=m_p/2$ and $a^*=a/2$. In this case, β should then be replaced by $\beta/2$ for particle-particle collisions.

Since the restitution coefficient e_{pp} depends on each individual collision, a statistical description of the suspension requires the determination of the restitution coefficient distribution function $f(e_{\text{pp}})$. The velocity distribution is assumed to be simply the isotropic Maxwellian function ($f(\mathbf{c}, \mathbf{x}) = f_0(\mathbf{c}, \mathbf{x})$). The relation between the restitution coefficient and the impact velocity can be written as follows

$$e_{pp} = e_{\max} \exp\left(-\frac{V_L}{V_{\text{imp}}}\right)$$

3-102

where V_L and V_{imp}

$$V_L = \frac{\beta}{2} \frac{a}{\tau_p} \quad \text{St}_{\text{imp}} = \tau_p \frac{V_{\text{imp}}}{a}$$

The impact velocity distribution function is determined from the number of collisions occurring in the suspension per unit of time, which is obtained by integrating the particle-pair velocity distribution function over all the possible collisions:

$$N_c(\mathbf{x}) = \int_{\mathbf{g} \cdot \mathbf{k} < 0} f^{(2)}(\mathbf{c}_A, \mathbf{x}, \mathbf{c}_B, \mathbf{x} + d_p \mathbf{k})(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d_p^2 d\mathbf{k} d\mathbf{c}_A d\mathbf{c}_B$$

3-103

$f^{(2)}$ is replaced considering that the suspension is dilute. The integrals are calculated over the variables $\mathbf{g} = \mathbf{c}_B - \mathbf{c}_A$ and $\mathbf{q} = (\mathbf{c}_A + \mathbf{c}_B)/2$. The scalar product $\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}$ represents the impact velocity projected on the normal direction \mathbf{k} and it is written g_k . The distribution function of g_k can be determined from the probability of g_k to happen in the suspension.

$$f_{g_k}(g_k) dg_k = \frac{dN_c}{N_c}$$

3-104

$f(e_{pp})$ is then directly deduced from f_{g_k}

$$f_{g_k}(g_k) dg_k = f_{g_k}(g_k(e_{pp})) \frac{dg_k}{de_{pp}} de_{pp} = f(e_{pp}) de_{pp}$$

3-105

provided that f_{g_k} be integrated from $-\infty$ to 0 and $f(e_{pp})$ from 0 to 1. Finally we obtain the distribution function for the restitution coefficient as

$$f(e_{pp}) = -\frac{1}{8T^* e_{pp} (\ln e_{pp})^3} \exp\left(-\frac{1}{16T^* (\ln e_{pp})^2}\right)$$

3-106

where $T^* = T/V_L^2$

All the simulations shown previously were performed with a constant shear-induced Stokes number and particle inelasticity for each suspension. We didn't try to scan the suspension behavior for all the possible combinations of ϕ and St_γ , but just aim at investigating the influence of a simplified model of direct hydrodynamic effects.

The simulations performed for a non constant restitution coefficient may be characterized by two different Stokes numbers: one macroscopic Stokes number based on the drag force and shear $St_\gamma = \tau_p \gamma$ and a distribution of St_{imp} depending on the impact velocities of the collisions. The choice of the time step is not obvious in such simulations, because we cannot predict precisely the particle agitation which controls the collision time. *A posteriori*, we verified that the collision time resulting from the simulations is in accordance with the time step. We verified that the time step is significantly lower than both τ_p and τ_c . The lowest shear-based Stokes number chosen for such simulations was $St=10$ (this corresponds to experiments with rebounding velocities of significant magnitude).

Figure 3-27 shows $f(e_{pp})$ for different Stokes numbers ($St_\gamma=10, 20, 50$ and 100). There is a qualitative agreement between the simulation and the theoretical distribution functions despite all the assumptions of the theory. The mean restitution coefficient is obtained from

$$\langle e_{pp} \rangle = \int_0^1 e_{pp} f(e_{pp}) de_{pp}$$

3-107

While St_γ increases, $\langle e_{pp} \rangle$ tends to the asymptotic value of 1.

Figure 3-28 shows the evolution with St_γ of the granular temperature and shear kinetic stress in suspensions with $\phi=15\%$ and a restitution coefficient depending on the impact velocity e_{pp} of colliding particles (e_{max} is fixed to 1). On the one hand, the numerical agitation levels are compared to the theoretical prediction (eq. 3-37) using for each suspension the corresponding St_γ and $e=\langle e_{pp} \rangle$. On the other hand, both values are compared to the numerical simulation performed for the particular case of $St_\gamma=20$ and $e=\langle e_{pp} \rangle=0.7$. The good agreement between the corresponding values indicates that it is possible to simulate suspensions while modeling the direct hydrodynamic effects by an equivalent restitution coefficient.

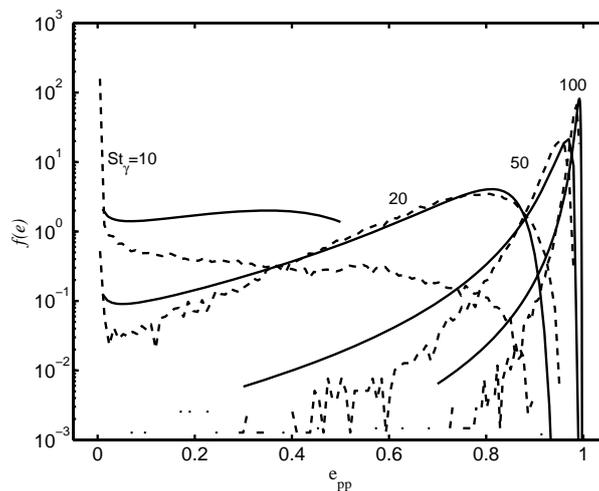


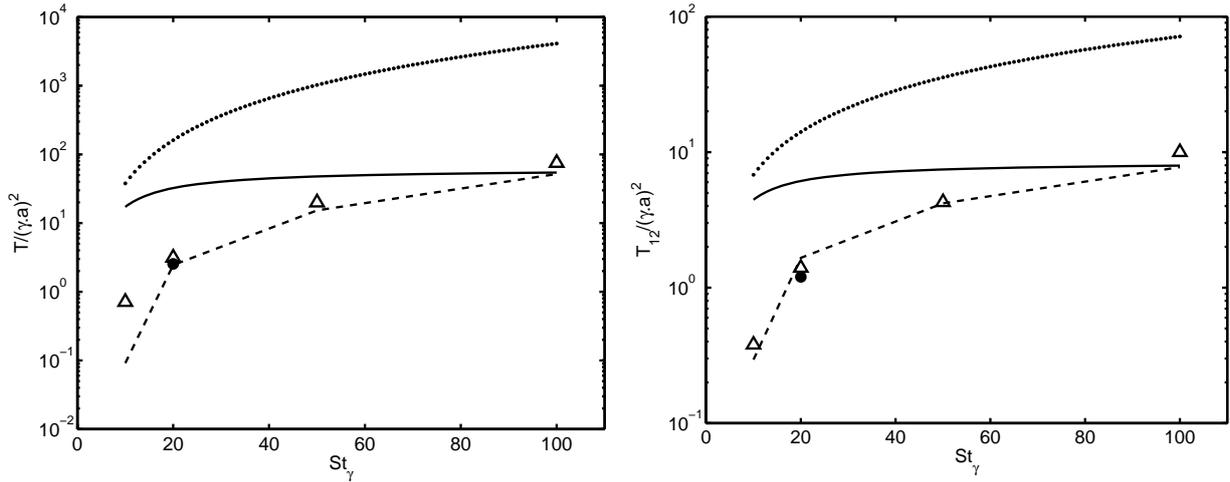
Figure 3-27

Probability density functions of the restitution coefficient depending on the impact velocities.

The shear-based particle Stokes number varies from left to right $St_\gamma=10, 20, 50$ and 100 . The solid smooth lines are predicted from eq. 3-106 and the dashed lines are the simulation results.

The agitation is considerably below the level predicted for perfectly elastic particles, which increases infinitely in the limit $St \rightarrow \infty$. For the lowest St_γ , the agitation in the suspension is very low ($\Gamma=O(\gamma^2 a^2)$) like in the quenched state where most of the particles follow the fluid streamlines and the collisions are mainly induced by the shear. At high macroscopic Stokes numbers St_γ , the particle agitation tends toward the curve obtained for a constant restitution coefficient $e=0.98$, calculated without hydrodynamic effects.

Persistent particle clusters were observed in movies of the simulations at weakly agitated suspensions (for example $St_\gamma=20$). The occurrence of clusters is mainly due to high particle decelerations after collisions. The long-time correlation between particle velocities induces an anomalous diffusive behavior of the suspension.


Figure 3-28

a) Granular temperature and b) shear kinetic stress vs. the shear-based Stokes number St_γ .

All the suspensions have the same concentration $\phi=15\%$. The triangles correspond to simulations with a restitution coefficient e_{pp} based on the impact velocity. The filled circle corresponds to the simulation performed with $St_\gamma=20$ and $e=0.7$ (fixed).

The dashed line is obtained from eq. 3-37 using St_γ and $e=\langle e_{pp} \rangle$. The solid and dotted line correspond to the theoretical prediction for $e=0.98$ and $e=1$, respectively.

8- Conclusion & Perspectives

In this chapter, we focused on the influence of finite particle inertia on the rheophysical behavior of a sheared suspension (agitation, stress tensors, effective viscosity and self-diffusion). We assumed that gravity, Brownian motion and fluid inertia effects were negligible. The suspension inertia was characterized by a macroscopic Stokes number which is the ratio of the characteristic times of the drag force and shear. Hindering effects induced by direct hydrodynamic interactions between neighboring particles were also neglected but may be easily modeled by an effective drag coefficient (Sangani et al., 1996).

First, we investigated the influence of the Stokes drag as the only dissipation mechanism on the macroscopic behavior of suspensions with perfectly elastic particles. The simulations were restricted to the moderate particle inertia. The simulations performed for $St=1$ to 10 showed that in this range of moderate particle inertia the suspension dynamics was extremely rich evolving from a quenched to a highly agitated regime. The most relevant macroscopic measure of the flow regime is the particle velocity variance (also called granular temperature) induced by the shear. It has been predicted theoretically in some former works from the equilibrium between the energy injected by the shear, dissipated by the drag and transferred by the collisions (Tsao & Koch 1995, Sangani et al. 1996, Boelle et al. 1995).

For a fixed concentration, the granular temperature of the suspension is considerably increasing with the particle inertia. The simulation results were compared systematically to the appropriate theory since the velocity distribution function varies strongly with the particle inertia. For a highly inertial solid phase, the velocity distributions were found to follow a deviated Maxwellian shape, leading to an excellent agreement between the simulations and the theory based on an ignited state (Jenkins & Richman 1985, Tsao & Koch 1995, Sangani et al. 1996) which is an extension of the classical kinetic theory (Chapman & Cowling, 1970). In that case, the flow regime is collision-dominated. However, for low particle inertia and dilute suspensions, the

velocity distributions were highly peaked at small velocity fluctuations, indicating that most collisions were shear-induced. In this limit, the granular temperature was found to follow the so-called quenched theory developed by Tsao & Koch (1995) based on a Dirac delta function assumption for the velocity distribution. A general solution could be envisaged as a combination of the two theories (Dirac delta function and deviated Maxwellian function) with a varying coefficient modeling the respective contribution of each distribution. This coefficient would be adapted depending on the concentration and the Stokes number of the suspension.

The suspension rheophysics was characterized through the statistics of momentum transfer and particle self-diffusion which were respectively quantified by the stress developed in the suspension and the random displacements of the particles.

Both kinetic and collisional contributions to the stress were computed in the normal and shear directions. The appropriate theory for predicting the granular temperature leads to the most accurate prediction of the particulate stress in the suspension. All the stress contributions were found to increase with concentration in the quenched regime. However, in the limit of high inertia, the collisional stress showed the same trend whereas a local minimum (for $\phi \approx 15\%$) was observed for the kinetic stress. The high anisotropy found in the quenched regime (the normal stress difference $(T_{11}-T)/T \approx 1$) decreased strongly when the collision effects become dominant on the drag contribution. Concentrated suspensions were found to always behave as a granular material where most of the momentum transfer occurs by collisions. The effective viscosity deduced from the shear stress contributions was compared to a viscosity model commonly used in the modeling of gas-solid suspension flows applied in commercial softwares for engineering applications. The agreement was very good in the highly agitated suspensions where the weak anisotropy assumption is satisfied. But this model may be flawed for quenched regime of sheared suspensions.

For characterizing mass transport, we have investigated the Lagrangian dispersion of particles within sheared homogeneous suspensions. We compared our results to a new Eulerian prediction based on the method proposed by Laviéville et al. (1995). In addition to the classical kinetic theory predictions for the self-diffusion, the drag effects were taken into account in this work. The self-diffusion tensor was determined as a function of the different characteristic time scales of the flow configuration. The accuracy of the self-diffusion model was verified by a priori tests. An excellent agreement is observed for most cases, revealing the validity of the self-diffusion model introduced in our work. Then the simulation results were also compared to the complete theoretical prediction of the self-diffusion calculated without any adjustable parameter. Similarly to the particle agitation, the self-diffusion was also shown to depend strongly on the flow regime. The self-diffusion coefficients in both the shear and spanwise directions are in agreement with the theoretical prediction while the kinetic stresses and the collision time were also very well predicted (at highly inertial suspensions). The Schmidt number comparing the kinetic viscosity and the self-diffusion coefficient is $O(1)$ indicating that both momentum and mass diffusivity are of the same magnitude.

The sensibility of the results to inelasticity was evaluated by performing simulations with constant particle inertia and decreasing the restitution coefficient. A significant modification of the macroscopic behavior of highly inertial particles appeared when the restitution coefficient decreased from 1 to 0.5 (for $St=5$, the particle agitation was decreased roughly by an order of magnitude) whereas no significant variation were observed for weakly inertial particles.

Finally, we tried to take into account the direct hydrodynamic effects (which play an important role on the suspension dynamics in the limit of low particle inertia, Sangani et al.,

1996) by modeling the damping effect of the fluid drainage in an equivalent restitution coefficient depending on the particle impact velocities, following the model proposed by Legendre et al. (2005). Preliminary simulations performed showed promising perspectives.

9- References

- Allen M.P. and Tildesley D.J., 1987, "Computer simulations of liquid ", *Oxford University Press*, Oxford, UK.
- Balzer G., Boelle, A., Simonin, O., 1995, "Eulerian Gas-Solid Flow Modelling of Dense Fluidized Bed", *Fluidization VIII, Proc. International Symposium of the Engineering Foundation*, J.F. Large and C. Laguérie (Editors): pp 409-418.
- Boelle, A., Balzer, G., Simonin, O., 1995, "Second-Order Prediction of the Particle-Phase Stress Tensor of Inelastic Spheres in Simple Shear Dense Suspensions", *Gas-Particle Flows-1995, ASME FED*, **228**, pp 9-18.
- Campbell, C.S., 1990, "Rapid granular flows", *Annual Review of Fluid Mechanics*, **22**:57-92.
- Campbell, C.S., 1997, "Self-diffusion in granular shear flows", *J. Fluid Mech.*, **348**, 85-101
- Carnahan, N. F. and Starling, k. E. 1969 "Equation of state for non-attracting rigid spheres" *J. Chem. Phys.* **51**, 635-636.
- Chapman S. and Cowling T. 1970 "The mathematical theory of Non-Uniform Gases", 3rd Edition, Cambridge University Press.
- Clelland R. and Hrenya C.M. 2002, "Simulations of a binary-sized mixture of inelastic grains in rapid shear flow", *Physical Review E*, **65**, 031301-1:9.
- Dufty W., Brey J., Lutsko J., 2002 "Diffusion in a granular fluid. I-Theory", *Physical Review*, **65**, 051303:1-14.
- Garzo, V., 2002, "Tracer diffusion in granular shear flows", *Physical Review*, **66**, 021308:1-11.
- Grad, H. 1949 "On the kinetic theory of rarified gas. Commun. Pure Appl. Mths 2, 331-407.
- Gouesbet G., Berlemont A. and Picart A., 1984; "Dispersion of discrete particles by continuous turbulent motions", *Physics of Fluids*, **27**, n°4, pp 827-837.
- He, J., Simonin, O., 1993, "Non-Equilibrium Prediction of the Particle-Phase Stress Tensor in Vertical Pneumatic Conveying", *Gas-Solid Flows-1993, ASME FED*, **166**: 253-263.
- Hinze J.O., 1959, "Turbulence", McGraw-Hill Book Company, New York.
- Hopkins M., and Louge M., 1991, "Inelastic microstructure in rapid granular flows of smooth disks", *Physics of Fluids A*, **3**, N°1, 47-57
- Hsiau, S.S., Hunt, M. L., 1992, "Shear-induced particle diffusion and longitudinal velocity fluctuations in a granular-flow mixing layer", *J. Fluid Mech.*, **251**, 299-313
- Hsiau, S.S., and Hunt, M.L., 1993, "Kinetic theory analysis of flow-induced particle diffusion and thermal conduction in granular material flows", *J. Fluid Mechanics*, **115**, 541-548
- Hsiau, S.S. and Yang, Wen-Lung, 2002, "Stresses and transport phenomena in sheared granular flows with different wall conditions", *Physics of Fluid*, **14** n°2, 612-621.
- Jenkins, J.T., and Richman, M.W., 1985, "Grad's 13-Moment system for a dense gas of inelastic spheres", *Archive Rational Mechanics and Analysis*, **87**, 355-377.
- Jenkins J., and Savage, S., 1983, "A theory for the rapid flow of identical, smooth, nearly elastic, spherical particles", *J. Fluid Mech.*, **130**: 187-202.

- Joseph, G.G., Zenit R., Hunt, M.L., Rosenwinkel, A.M., 2001, "Particle-wall collision in a viscous fluid", *J. Fluid Mechanics*, **433**, 329-346.
- Laviéville J., Deutsch E., and Simonin O., 1995, "Large eddy simulation of interactions between colliding particles and a homogeneous isotropic turbulence field", *Gas Solid Flows*, ASME FED **288**: 347-357
- Lun, C.K.K., and Savage, S.B., 1986, "The effects of an impact velocity dependent coefficient of restitution on stresses developed by Sheared Granular Materials", *Acta Mechanica*, **63**, 15-44.
- Lun, C.K.K. and Savage, S.B., 1987 "A simple kinetic theory for granular flow of rough, inelastic, spherical particles", *Trans. ASME E: J. Appl. Mech.* **54**: 47-53.
- Lun and Bent, 1994, "Numerical simulation of inelastic frictional spheres in simple shear flow", *J. Fluid Mech.*, **258**: 335-353.
- Lutsko J., Brey J., and Dufty W., "Diffusion in a granular fluid. II. Simulation", 2002, *Physical review*, **65**, 051304:1-10
- Natarajan, V.V., Hunt, M.L., and Taylor, E.D., 1995, "Local measurements of velocity fluctuations and diffusion coefficients for a granular material flow", *J. Fluid Mechanics*, **304**, 1-25.
- Richard, D., Quéré, D., 2000, "Bouncing water drops", *Europhysics Letters*, **50**(6), 769-775.
- Sangani, A., Mo, G., Tsao, H., and Koch, D., 1996, "Simple shear flows of dense gas-solid suspensions at finite Stokes numbers", *J. of Fluid Mechanics*, **313**, 109-341
- Sierou A. and Brady J.F., 2004, "Shear-induced self-diffusion in non-colloidal suspensions", *J. Fluid Mech.*, **506**, 285.
- Sundaram, S. and Collins, L., 1996, "Numerical considerations in simulating a turbulent suspension finite-volume particles", *J. of Computational Physics*, **124**, 337-350
- Tchen C.M., 1947, "Mean value and correlation problems connected with the motion of small particles suspended in a turbulent fluid", *Ph.D. University of Delft*, The Hague.
- Tsao, H., and Koch, D.L., 1995, "Simple shear flows of dilute gas-solid suspensions", *J. of Fluid Mechanics*, **296**, 211-245.
- Wylie, J., Koch D., Ladd A., 2003, "Rheology of suspensions with high particle inertia and moderate fluid inertia", *J. of Fluid Mechanics*, **480**, 95-118.
- Walton, O.R., & Braun, R.L., 1986, "Stress calculations for assemblies of inelastic spheres in uniform shear", *Acta Mechanica*, **63**, 73-96. (in Sangani et al. 1996)
- Yang, F.L. and Hunt, M.L., 2006, "Dynamics of particle-particle collisions in a viscous liquid", *Physics of Fluids*, **18**, 121506:1-11.

Chapitre 4 : Conclusion & Perspectives

Ce travail de recherche a abordé différents aspects du comportement macroscopique de l'écoulement d'une suspension cisailée de particules sphériques. Nous nous sommes restreints à des écoulements diphasiques où l'inertie du fluide est négligeable et où les particules ne sont pas soumises aux effets d'agitation Brownienne et de gravité. On peut dégager deux grandes familles de suspension selon le mécanisme d'interaction dominant caractérisé par le nombre de Stokes (rapport du temps de relaxation visqueux des particules comparées à l'échelle de temps de l'écoulement porteur):

- Petit nombre de Stokes: il s'agit de suspensions de particules solides micrométriques $O(1-100\mu\text{m})$ dans un fluide très visqueux. La dynamique de ces suspensions est contrôlée par les interactions hydrodynamiques.
- Nombre de Stokes modéré et grand: il s'agit de particules solides micrométriques $O(100\mu\text{m})$ en suspension dans un gaz. L'effet de la gravité n'est pas considéré. La dynamique des interactions dans ce cas est contrôlée par les collisions inter-particulaires et par la force de traînée de Stokes.

L'écoulement porteur est un cisaillement pur permettant de représenter une situation fondamentale rencontrée localement dans un écoulement plus complexe. Les particules solides ont initialement la même vitesse locale que le fluide. Le rapprochement des particules entraîne leur interaction conduisant la suspension à acquérir une certaine énergie d'agitation se superposant au mouvement moyen du fluide (il n'y a donc pas de glissement moyen entre les phases). L'approche que nous avons sélectionnée est celle de simulations locales permettant de restituer la complexité physique des différents mécanismes d'interactions. Ces simulations de type Euler-Lagrange ont permis de suivre la dynamique locale des particules et d'évaluer les quantités macroscopiques relevant de la rhéologie des suspensions: agitation, tenseur des contraintes, dissipation, corrélation de vitesse, viscosité de suspension, auto-diffusion...

Nous avons tout d'abord abordé le cas $St \ll 1$. L'objectif du Chapitre II était de mettre en place, valider et exploiter une modélisation adéquate des interactions hydrodynamiques à l'aide de la méthode « Force Coupling Method ». En premier lieu, nous avons validé la méthode de simulation sur des situations déjà décrites par des solutions analytiques (solution exacte pour une ou deux particules), numériques (Stokesian Dynamics) ou expérimentales (mesure des propriétés

rhéologiques et de transport). L'évolution des quantités macroscopiques dans des suspensions monodisperses modérément concentrées ($\phi=1-20\%$) a été étudiée en fonction de la fraction volumique en particules solides. En régime dilué, la dynamique est contrôlée par les interactions de paires de particules. Les résultats sont alors en bon accord avec les prédictions théoriques. Quand la fraction volumique de solide augmente, les interactions multi-corps deviennent plus fréquentes. Ceci se traduit par un changement de forme des distributions de vitesses. De plus les fluctuations de vitesse deviennent plus intenses et la perte de corrélation temporelle plus rapide. On observe alors que le coefficient d'auto-diffusion des particules induit par le cisaillement augmente avec la concentration. L'organisation de la microstructure induite par le cisaillement a été également caractérisée à l'aide de la fonction de probabilité de paires. L'amélioration des effets de lubrification pour les paires de particules très proches a permis d'utiliser la FCM pour simuler des suspensions de concentration allant jusqu'à 35%. Ceci s'est avéré décisif pour quantifier la dépendance de la viscosité effective de la suspension en fonction des interactions hydrodynamiques directes entre les particules. Pour le cas des suspensions monodisperses, nous avons obtenu un très bon accord entre nos résultats et ceux d'études numériques ou expérimentales de la littérature. Ces résultats figurent également dans le travail Abbas et al. (2007).

Nous avons ensuite étendu le modèle aux cas de suspensions constituées d'un mélange de deux espèces de particules de taille différente. Nous avons alors présenté de nouveaux résultats sur l'évolution des quantités physiques moyennées en fonction du rapport de taille et du rapport de concentration des deux espèces (pour une fraction volumique totale constante). D'une part, un rapport de taille croissant pour un rapport de concentration fixe, entraîne une augmentation (*resp.* diminution) du niveau de fluctuation des petites (*resp.* grosses) particules. D'autre part, une augmentation du nombre de grosses particules pour un rapport de taille fixe entraîne l'augmentation du taux de fluctuation et de la diffusion des deux espèces. L'étude sur les suspensions bidisperses a contribué à la publication de l'article Abbas et al. (2006).

Dans le chapitre III, nous avons étudié le comportement de suspensions de particules inertielles. Le schéma numérique utilisé pour cette étude prend en compte uniquement l'effet de la traînée et des collisions sur le mouvement des particules. Nous avons mis en évidence la forte dépendance des propriétés de la suspension en fonction du nombre de Stokes. En faisant varier le nombre de Stokes basé sur le cisaillement de 1 à 10, la suspension évolue d'un état faiblement agité à un état fortement agité (augmentation de l'agitation des particules de trois ordres de grandeur). Afin de confronter nos résultats numériques aux prédictions théoriques, deux modèles issus de la théorie cinétique des milieux granulaires adaptés aux nombres de Stokes modérés ont été utilisés. Un pré-requis important de cette prédiction théorique est la forme de la fonction de distribution des vitesses appropriée : Maxwellienne anisotrope pour les suspensions très agitées et fonction Dirac pour les suspensions à agitation faible. Nous avons montré qu'en choisissant une approche théorique adaptée à l'état de la suspension, on prédit mieux l'agitation des particules et par conséquent on obtient aussi une meilleure prédiction des contraintes cinétiques et collisionnelles ainsi que du coefficient d'auto-diffusion de la phase solide. Une nouvelle théorie pour la diffusion Lagrangienne a été développée dans ce chapitre, puis validée par les simulations. Les résultats sur la viscosité effective et sur les coefficients de diffusion ont été également comparés avec les modèles basés sur une faible anisotropie, utilisés couramment pour les écoulements de type gaz/solide. A la limite entre les deux régimes d'agitation, les deux théories sont incapables de restituer les résultats numériques (comme par exemple le cas $\{St=3.5, \phi=5\%$ }, voir figures du chapitre III). Pour de telles suspensions, une solution analytique intermédiaire pourrait être proposée pour prédire le régime de transition entre les deux états d'agitation de la suspension. Cette prédiction serait basée sur la combinaison de la fonction Maxwellienne anisotrope et de la fonction Dirac, pondérées par un coefficient qui s'adapterait la contribution

respective de chaque distribution. Ce coefficient serait alors fonction du nombre de Stokes, de la concentration et du coefficient de restitution des particules.

Pour les deux types de suspension, les informations sur les statistiques peuvent être rassemblées dans un modèle macroscopique qui assimile le comportement de la suspension à celui d'un fluide équivalent aux propriétés rhéologiques particulières. Le transport de masse au sein de ce fluide est caractérisé par un tenseur de coefficients d'auto-diffusion des particules. Nos simulations numériques pour chaque type de suspension ont fourni les composantes de ce tenseur dans la direction du gradient de vitesse et de la vorticit .

La Figure 4-1 montre l' volution du coefficient d'auto-diffusion dans la direction du gradient de vitesse. Cette figure contient les r sultats des simulations des deux types de suspensions  tudi es dans le document ($St \ll 1$, Chapitre II et St fini, Chapitre III). Pour les grands nombres de Stokes, le coefficient d'auto-diffusion diminue avec la concentration. Par contre, lorsque le nombre de Stokes est faible ou nul, les coefficients de diffusion ont des  volutions croissantes en fonction de la fraction volumique. Le comportement de D_{33} est similaire   celui de D_{22} . Nous avons observ  dans tous les cas une diminution de l'anisotropie du tenseur d'auto-diffusion avec l'augmentation de la fraction volumique du solide ($|D_{22}/D_{33}| \rightarrow 1$).

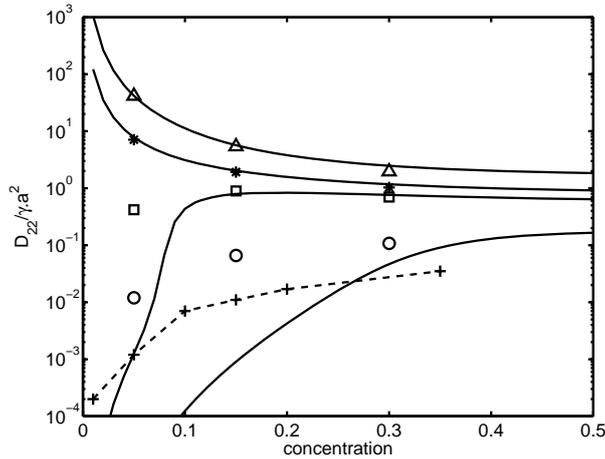


Figure 4-1

Comparaison du transport de masse (coefficient d'auto-diffusion dans la direction du gradient de vitesse) pour $St \ll 1$ et St fini.

Symboles (Δ , $*$, \square , \circ respectivement for $St=10, 5, 3.5$ and 1): simulations (chapitre III)

Traits pleins (du plus haut au plus bas $St=10, 5, 3.5$ and 1): pr diction th orique de l' tat agit  (chapitre III)

+ avec traits pointill s: suspensions avec interactions hydrodynamiques (chapitre II)

Le transfert de quantit  de mouvement dans le fluide  quivalent peut  tre d crit par une viscosit  effective du m lange. Cette viscosit  est calcul e   partir des contraintes tangentielles provenant de la superposition de tous les effets: les Stresslets, les dip les produits par les forces inter-particulaires (lubrification) et les contraintes cin tiques et collisionnelles dans la phase solide. La viscosit  effective r sultante s' crit:

$$\frac{\mu_{\text{eff}}}{\mu_f} - 1 = \frac{5}{2} \phi + K\phi^2 - \frac{1}{L^3 \gamma \mu_f} \sum_{(m,n)} F_i^{(mn)} (Y_j^{(m)} - Y_j^{(n)}) + \frac{9}{2} St \phi \left(\frac{T_{12}}{(\gamma a)^2} + \frac{\theta_{12}}{\rho_p \phi (\gamma a)^2} \right)$$

4-1

L' quation 4-1 nous permet de calculer la viscosit  du fluide  quivalent quelque soit l'inertie des particules. En l'absence d'interactions hydrodynamiques directes, les trois premiers termes de l' quation 4-1 sont absents. Dans la limite de particule d'inertie n gligeable, le dernier terme est

négligeable. Tout ceci est synthétisé sur le même graphe (Figure 4-2). Dans les suspensions inertielles faiblement agitées, la viscosité effective est presque égale à la viscosité du fluide, donc le transfert de la quantité de mouvement a lieu essentiellement à travers le fluide. Pour la limite $St \gg 1$, la valeur de la viscosité équivalente est augmentée de presque trois ordres de grandeur. Dans ce régime et pour une fraction volumique du solide inférieure à la valeur critique ϕ_{cr} (qui dépend du nombre de Stokes, Figure 4-2), la viscosité effective chute subitement et devient égale à celle du fluide en rejoignant le comportement de l'état faiblement agité. Le calcul de la valeur de ϕ_{cr} est expliqué dans le §5-3 du chapitre III. Par ailleurs, la Figure 4-2 permet d'identifier un résultat qui n'est pas du tout intuitif : le transfert de quantité de mouvement induit par les interactions hydrodynamiques est supérieur à celui qui existe dans une suspension faiblement inertielle, pour des concentrations allant jusqu'à 35%.

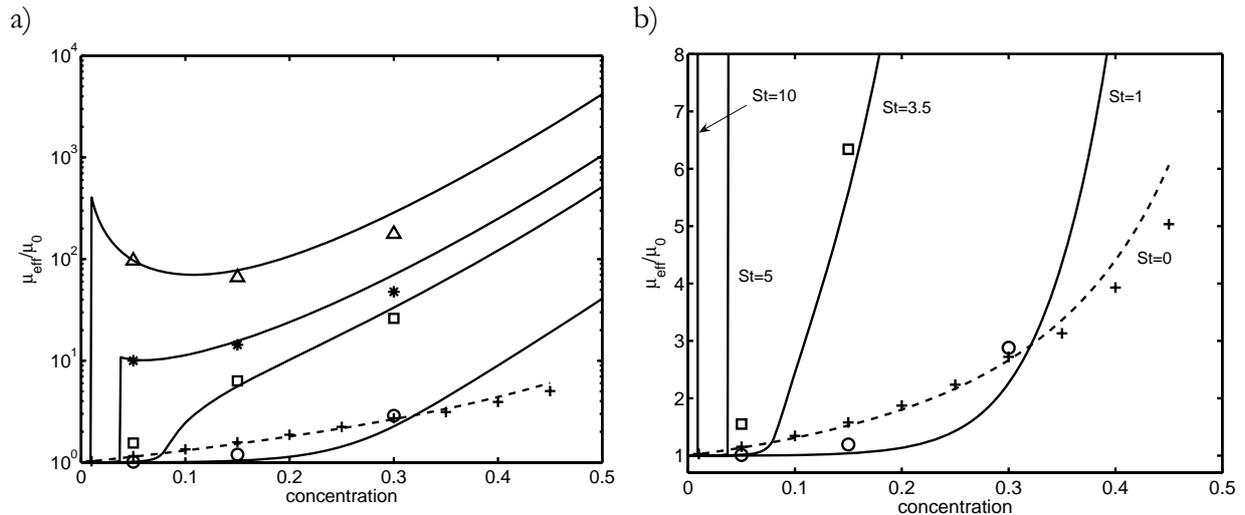


Figure 4-2

Comparaison de la viscosité effective du fluide équivalent pour $St \ll 1$ et St fini.
Pour la légende voir Figure 4-1

Les propriétés rhéologiques effectives (viscosité, diffusion) des suspensions faiblement inertielles sont du même ordre de grandeur que celles de suspensions où l'inertie des particules a été complètement négligée. L'effet de la dissipation d'énergie due aux interactions hydrodynamiques directes n'est donc plus négligeable si on la compare à celle des collisions et de la traînée. Pour prendre en compte l'effet des interactions hydrodynamiques dans une suspension inertielle, nous avons tout d'abord proposé une modélisation simplifiée. On change le coefficient de restitution que l'on fait alors dépendre des vitesses d'impact des particules (corrélation proposée par Legendre et al., 2005). Cette modélisation très simple aboutit à des résultats prometteurs.

Pour aller plus loin et restituer exactement l'effet des interactions hydrodynamiques directes entre les particules, nous avons utilisé la Force Coupling Method moyennant quelques modifications au niveau de l'algorithme de la méthode. En effet, la FCM est conçue pour résoudre efficacement le problème de mobilité (calcul des vitesses, les forces étant imposées) dans le cas où une relation linéaire assure la correspondance entre les forces et les vitesses (limite des petits nombres de Reynolds et de Stokes). Par contre dans le cas de suspensions inertielles, les forces ne sont plus reliées directement aux vitesses mais aux accélérations des particules par le principe fondamental de la dynamique. Ainsi pour chaque configuration de positions et de vitesses de particules, il faut résoudre un problème de résistance: on connaît les positions et les vitesses des particules au début du pas de temps, et il faut déterminer les forces qui s'appliquent sur chacune d'elles afin de déterminer l'accélération respective de chaque particule. Les nouvelles vitesses sont ensuite calculées par intégration des équations de trajectoire. Lorsque les particules

sont loin les unes des autres, c'est la traînée de Stokes qui agit seulement mais lorsque les particules sont proches (effet de concentration ou bien interactions proches d'une collision) les interactions hydrodynamiques couplent les trajectoires des particules considérées.

Pour résoudre le problème de résistance, nous avons mis en place un algorithme itératif à l'aide d'un schéma de type gradient conjugué. L'augmentation du nombre de particules avec la concentration rend difficile la convergence simultanée de toutes les forces même si l'on utilise le résultat du pas de temps précédent comme condition initiale (vitesses et positions). Un exemple de résultats pour une simulation bidimensionnelle est proposé sur la Figure 4-3 où l'on voit clairement que les vitesses et les forces ne sont pas colinéaires du fait des interactions hydrodynamiques entre les particules les plus proches. Nous avons effectué plusieurs tests qui montrent que les résultats sont cohérents à faible concentration mais que le problème de convergence est bien d'ordre numérique (multiplicité des inconnues et raideur des interactions hydrodynamiques proches du contact).

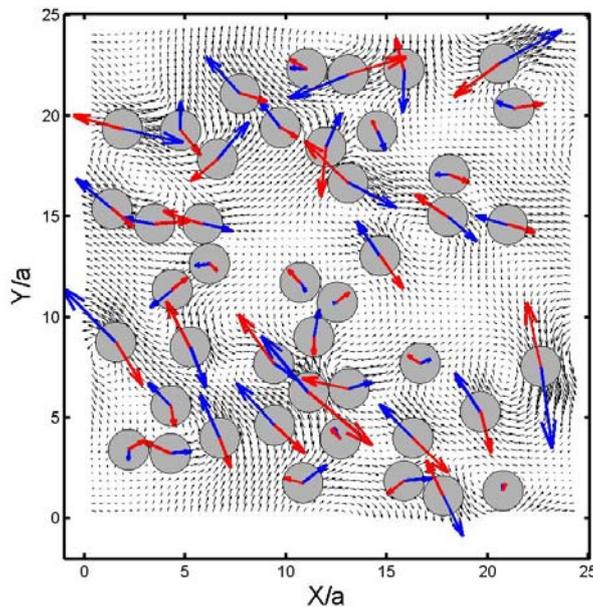


Figure 4-3

Résultat du calcul du problème de résistance utilisant la FCM.
 Concentration surfacique $\phi_a=24\%$. Distribution initiale aléatoire. Maillage 64^3
 Vecteurs bleus: vitesses ; Vecteurs rouges: forces

L'amélioration de cette méthode pour effectuer le calcul sur un nombre plus grand de particules est nécessaire si on envisage de simuler la dynamique d'un écoulement complexe (lit fluidisé solide/liquide par exemple) où les interactions hydrodynamiques directes peuvent avoir leur importance même pour des particules inertielles.

A plus long terme, on peut dégager des perspectives concernant la simulation et la modélisation théorique de suspensions plus proches de la réalité. Il nous faudrait poursuivre l'étude du comportement de suspensions bidisperses voire polydisperses mais aussi des formes de particules non-sphériques. Les interactions avec des parois sont aussi au cœur des limitations actuelles des modélisations macroscopiques. Enfin, la prise en compte simultanée des interactions hydrodynamiques directes dans des écoulements complexes tels que les écoulements turbulents ouvrent des configurations d'études plus proches des écoulements réels de suspensions inertielles (Verberg & Koch, 2006).

Références

Abbas M., Climent E., Simonin O., Maxey M. R., 2006, "Dynamics of bidisperse suspensions under Stokes flows: Linear shear flow and Sedimentation", *Phys. Fluids* **18**: 121504:1-20

Abbas M., Climent E., Simonin O., 2007, «Fully coupled simulations of non-colloidal monodisperse sheared suspensions», *ChERD*, **85**, 778-791.

Verberg, R., and Koch D., 2006, "Rheology of particle suspensions with low to moderate fluid inertia at finite particle inertia", *Phys. of Fluids*, **18**, 083303:1-18.