

N° d'ordre : 2398

# THESE

présentée

pour obtenir

**LE TITRE DE DOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE TOULOUSE**

École doctorale : Transferts, dynamique des fluides, énergétique et procédés

Spécialité : Dynamique des fluides

Par M. Mathieu MOREAU

Titre de la thèse Modélisation numérique directe et des grandes échelles des écoulements  
turbulents gaz-particules dans le formalisme eulérien mésoscopique

Soutenue le 21 novembre 2006 devant le jury composé de :

M.	Pierre Comte	Président
MM.	Olivier Simonin	Directeur de thèse
	Pierre Sagaut	Rapporteur
	Luc Vervisch	Rapporteur
	Benoît Bedat	Membre
	Jérôme Hélie	Membre



# Résumé

Une nouvelle approche eulérienne aux grandes échelles (LES) pour simuler un nuage de particules inertielles soumis à une turbulence fluide est présentée. Elle est basée sur le formalisme eulérien mésoscopique (Février et al. (2005)) qui permet de décomposer la vitesse de chaque particule en une partie spatialement corrélée et une partie décorrélée. La dérivation des équations LES particulières comprend deux étapes : une moyenne d'ensemble conditionnée par une réalisation du champ fluide turbulent est suivie d'un filtrage spatial LES classique des équations de transport. En conséquence, les termes à modéliser sont de deux sortes : ceux provenant de la moyenne d'ensemble sont modélisés par analogie avec les fermetures statistiques de la méthode aux moments, alors que l'effet des termes de sous-maille est prédit par des modèles similaires à ceux employés en turbulence monophasique compressible. Les différents modèles sont testés a priori à l'aide de résultats de simulations lagrangiennes pour la phase dispersée couplées à une résolution numérique directe du fluide en turbulence homogène isotrope décroissante. Les nombres de Stokes des écoulements simulés correspondent à des régimes de concentration préférentielle des particules. Le couplage inverse ainsi que les collisions interparticulaires ne sont pas pris en compte. L'interprétation de ces résultats lagrangiens en terme de champs eulériens mésoscopiques nécessite l'emploi d'une procédure de projection. Une projection de type gaussienne, spécialement développée permet de limiter les erreurs spatiales et statistiques. Les champs mésoscopiques sont, tout d'abord analysés en détail : évolution des grandeurs moyennes, spectres de vitesses, champs locaux instantanés. Puis ces champs sont filtrés spatialement. Les tests a priori des modèles de sous-mailles sont effectués et donnent des résultats similaires aux tests effectués en écoulements monophasiques en ce qui concerne le tenseur de sous-maille.

*Mots clés : écoulement turbulent diphasique gaz-particules, modélisation eulérienne des grandes échelles*



# Abstract

The purpose of the paper is to develop a new large eddy simulation (LES) approach for a dispersed phase suspended in a fluid turbulent flow in the framework of the Eulerian modelling for inertial particles. Local instantaneous Eulerian equations for the particles are first written using the Mesoscopic Eulerian Formalism, which accounts for the contribution of an uncorrelated velocity component for inertial particles with relaxation time larger than the Kolmogorov time scale. Then, particle LES equations are obtained by volume filtering of mesoscopic Eulerian equations. In such approach, the particulate flow at larger scales than the filter width is recovered while subgrid effects need to be modelled. Particle eddy-viscosity, scale similarity and mixed subgrid stress (SGS) models derived from fluid compressible turbulence SGS models are presented. Evaluation of the proposed modelling approaches is performed using seven sets of particle Lagrangian results computed from discrete particle simulation (DPS) coupled with fluid direct numerical simulation (DNS) of homogeneous isotropic decaying turbulence. Fluid acts on the particle through the Stokes drag force, two-way coupling and inter-particle collisions are not considered. Simulated Stokes numbers corresponds to preferential concentration regimes. Mesoscopic Eulerian fields are extracted from Lagrangian results by a projection process, which is equivalent to a spatial filter. A specific projector is developed to limit statistical bias and spatial error and is validated. First mesoscopic fields are analysed in detail including correlated velocity power spectra and uncorrelated energy modelling. The mesoscopic fields measured from DPS+DNS are then filtered to obtain large scale fields. A priori evaluation of particle subgrid stress models gives comparable agreement than fluid compressible turbulence tests. The standard Smagorinsky eddy-viscosity model exhibits the smaller correlation coefficients. The scale similarity model shows very good correlation coefficient but strongly underestimates the subgrid dissipation. The mixed model is on the whole superior to pure eddy-viscosity model.

*Keywords : gas-particle turbulent flows, Eulerian LES modelling*



# Remerciements

Le travail présenté dans ce mémoire a été effectué au sein du groupe Ecoulement Et Combustion de l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT UMR CNRS-INPT-UPS 5502), dans le cadre du projet européen Large Eddy Simulation techniques to Simulate and COntrol by design Cyclic variability in Otto cycle engines (LESSCO2, contrat No.NNE5-2001-00495).

En tout premier lieu, je tiens à exprimer ma sincère et profonde reconnaissance envers le professeur Olivier Simonin, ancien directeur du laboratoire IMFT et directeur de thèse, pour la confiance qu'il m'a accordée et pour son soutien sans faille durant ces années de thèse. J'ai apprécié la liberté et l'indépendance dont j'ai bénéficiées.

Je tiens à exprimer toute ma gratitude envers les professeurs Pierre Sagaut et Luc Vervisch de m'avoir fait l'honneur d'accepter d'être rapporteurs de cette thèse. Leurs commentaires et l'attention qu'ils ont portés à mon travail m'ont beaucoup touché. J'espère sincèrement que ce travail débouchera sur des collaborations très fructueuses.

J'adresse mes remerciements au professeur Pierre Comte pour m'avoir fait l'honneur et le plaisir de présider mon jury. Je tiens à exprimer toute ma gratitude aux deux autres membres du jury : Jérôme Hélie dont le stage post-doctoral a mis en place la méthodologie utilisée dans ce travail, et Benoît Bedat qui a géré les relations avec le projet européen LESSCO2.

Je souhaite vivement remercier les différentes personnes avec lesquelles j'ai pu collaborer pendant ma thèse, à l'IMFT (Pascal Fede et Xavier Pialat), à l'ONERA (Philippe Villedieu et Jean Luc Estivalezes), au Cerfacs (Eléonore Riber et Roberto Paoli), chez Siemens (André Kaufmann).

J'exprime mes plus vifs remerciements au professeur Jacques Magnaudet directeur de l'IMFT et Georges Charnay ancien directeur du département EEC.

Je tiens à féliciter les services généraux Cosinus, Informatique, reprographie et bibliothèque, ainsi que Florence Colombies secrétaire du groupe EEC pour leur efficacité et leur disponibilité.

Je remercie très amicalement les relecteurs du manuscrit qui ont, je l'espère, réussi à rendre sa lecture agréable : Pascal Fede, Jean Claude Moreau, Xavier Pialat et Eléonore Riber.





# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>11</b>
<b>Nomenclature</b>	<b>17</b>
<b>1 Génération d'une base de données DNS+DPS</b>	<b>21</b>
1.1 Turbulence du fluide	21
1.1.1 Equations de Navier-Stokes	22
1.1.2 Echelles caractéristiques de la turbulence	22
1.1.3 Turbulence homogène isotrope décroissante de grille	26
1.2 Approche lagrangienne : simulation discrète de particules (DPS)	28
1.2.1 Modélisation des forces agissant sur une particule isolée	28
1.2.2 Physique des écoulements gaz-particules en THI	30
1.3 Mise en œuvre des simulations DNS/DPS	32
1.3.1 Méthodes numériques	32
1.3.2 Simulation numérique directe d'une THI décroissante	33
1.3.3 Méthodologie et coût numérique des calculs diphasiques	34
1.3.4 Description et validation des cas simulés	34
1.4 Conclusion du chapitre	43
<b>2 Approche eulérienne mésoscopique de la phase particulaire</b>	<b>45</b>
2.1 Approches basées sur un filtrage spatial	45
2.1.1 Principe du filtrage spatial	45
2.1.2 Modèle à deux fluides	46
2.1.3 Hypothèse d'équilibre pour $St_K \ll 1$	46
2.1.4 Approches aux grandes échelles	47
2.2 Formalisme Eulérien Mésoscopique	48
2.2.1 Mouvement corrélé et décorrélé des particules	48
2.2.2 Equation de transport de la fonction densité de probabilité	51
2.2.3 Modélisation du terme de collisions inter-particulaires	52

2.2.4	Equation fermée . . . . .	52
2.3	Equations eulériennes mésoscopiques . . . . .	53
2.3.1	Dérivation des équations . . . . .	53
2.3.2	Fermetures . . . . .	54
<b>3</b>	<b>Passage des quantités Lagrangiennes à des quantités Eulériennes mésoscopiques</b>	<b>57</b>
3.1	Consistence avec le formalisme mésoscopique . . . . .	57
3.2	Mesure de grandeurs mésoscopiques . . . . .	57
3.3	Validation et choix de la méthode de projection . . . . .	59
3.3.1	Evaluation théorique des erreurs spatiales liées à la projection . . . . .	59
3.3.2	Cas synthétique 1D . . . . .	60
3.3.3	Cas réel 3D . . . . .	65
3.4	Validation de la mesure des grandeurs mésoscopiques . . . . .	66
3.4.1	Mesure du mouvement décorrélé . . . . .	67
3.4.2	Evaluation quantitative des erreurs . . . . .	70
3.5	Traitement des zones sans particule . . . . .	72
3.6	Conclusion du chapitre . . . . .	74
<b>4</b>	<b>Analyse des champs eulériens mésoscopiques</b>	<b>75</b>
4.1	Evolution des grandeurs moyennes . . . . .	75
4.2	Ségrégation préférentielle . . . . .	79
4.2.1	Evaluation . . . . .	79
4.2.2	Tentative de caractérisation des amas . . . . .	80
4.2.3	Prédiction des zones d'accumulations . . . . .	83
4.3	Spectres des vitesses particulières corrélées . . . . .	86
4.3.1	Description . . . . .	87
4.3.2	Influence de la condition initiale . . . . .	89
4.3.3	Interaction fluide-particule à petite échelle . . . . .	91
4.4	Analyse des spectres des vitesses . . . . .	93
4.4.1	Corrélation des vitesses fluide-particule et effets de la traînée . . . . .	93
4.4.2	Compressibilité du champ de vitesse . . . . .	97
4.4.3	Interprétation de la forme des spectres . . . . .	99
4.4.4	Détermination numérique de $k_p^{tr}$ . . . . .	100
4.5	Test a priori des modélisations du mouvement décorrélé . . . . .	102
4.5.1	Modélisation sans équation de transport supplémentaire . . . . .	103
4.5.2	Modèle de viscosité + équation $\delta\theta_p$ . . . . .	106
4.6	Comparaison de résultats DNS euler-euler et DNS+DPS à faible $Re$ . . . . .	112
4.6.1	Cas à faible nombre de Stokes (cas A1) . . . . .	113

4.6.2	Cas à grand nombre de Stokes (cas A2) . . . . .	115
4.7	Conclusion du chapitre . . . . .	116
<b>5</b>	<b>Approche aux grandes échelles de la phase particulaire</b>	<b>119</b>
5.1	Equations eulériennes mésoscopiques aux grandes échelles . . . . .	119
5.1.1	Séparation des échelles par filtrage . . . . .	119
5.1.2	Equations aux grandes échelles . . . . .	120
5.2	Evaluation a priori en THI . . . . .	121
5.2.1	Méthodologie . . . . .	121
5.2.2	Concentration préférentielle . . . . .	121
5.2.3	Energie décorrélée / énergie de sous-maille . . . . .	121
5.2.4	Energie corrélée filtrée . . . . .	124
5.2.5	Equation de l'énergie décorrélée filtrée . . . . .	127
5.3	Conclusion du chapitre . . . . .	130
<b>6</b>	<b>Modélisations des termes de l'approche LES</b>	<b>133</b>
6.1	Termes filtrés issus de la moyenne d'ensemble . . . . .	133
6.1.1	Tenseur du mouvement décorrélé : $\widehat{\delta R}_{p,ij}$ . . . . .	133
6.1.2	Diffusion par mouvement décorrélé de $\widehat{\delta\theta}_p$ . . . . .	136
6.2	Tenseur de sous-maille : $T_{p,ij}$ . . . . .	138
6.2.1	Stratégies de modélisation . . . . .	138
6.2.2	Modèles . . . . .	139
6.2.3	Tests a priori . . . . .	143
6.3	Diffusion de sous-maille de l'énergie décorrélée . . . . .	148
6.3.1	Modèles . . . . .	148
6.3.2	Tests a priori . . . . .	149
6.4	Production de sous-maille de l'énergie décorrélée . . . . .	151
6.4.1	Modèles . . . . .	151
6.4.2	Tests a priori . . . . .	152
6.5	Conclusion du chapitre . . . . .	155
	<b>Conclusion et perspectives</b>	<b>157</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>160</b>
	<b>Publications</b>	<b>171</b>



# Introduction

## Contexte de l'étude

La présente étude a été financée par le projet européen LESSCO2 (« Large Eddy Simulation techniques to Simulate and COntrol by design Cyclic variability in Otto cycle engines », contrat No. NNE5-2001-00495) qui vise à promouvoir et développer les approches de type simulation des grandes échelles pour le calcul numérique de chambre de combustion de moteurs automobiles. En effet, les grandes échelles de la turbulence sont responsables des variations cycle à cycle de l'écoulement dans la chambre de combustion (mesures expérimentales de Moreau et al. (2005a) par exemple) qui peuvent affecter les rendements énergétiques et écologiques du moteur. Les approches utilisées couramment (de type RANS) ne peuvent pas prédire de telles variations, qui doivent être prises en compte pour le développement de moteurs plus performants. Le projet LESSCO2 regroupe des industries automobiles (BMW, PSA et Renault) et différents laboratoires ou centres de recherche (Consejo Superior de Investigaciones Cientificas CSIC/LITEC, Institut Français du Pétrole, Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse IMFT, Lunds Universitet LTH, Queen's University Belfast QUB et Rheinisch-Westfaelische Technische Hochschule Aachen RWTH), qui travaillent sur des thématiques différentes mais complémentaires. La présente étude réalisée à l'IMFT dans le groupe écoulement et combustion porte sur le développement d'une modélisation eulérienne des grandes échelles d'un nuage de gouttelettes ou de particules en interaction avec un champ fluide turbulent, qui pourra, à terme être utilisée dans le calcul de l'injection de combustible par un spray (moteurs diesel ou à injection directe essence). L'intérêt d'une injection de carburant sous la forme d'une phase liquide dispersée (nuage de gouttelettes) réside dans l'efficacité des transferts massiques, une phase dispersée possédant une grande surface comparativement à son volume. De nombreux autres procédés industriels utilisent cette propriété, on peut, par exemple, citer les réacteurs chimiques de type colonne à bulles (Oey (2005)) le crackage catalytique de pétrole dans des lits fluidisés (Saulnier et al. (2005)).

En se limitant au cas où la phase dispersée est constituée de particules solides, indéformables, sphériques et identiques, il est possible d'établir une classification des écoulements particuliers en fonction de la fraction volumique  $\alpha_p$  et de la fraction massique  $\phi_p$  (tirée de Fede (2004)) :

- $\alpha_p < 10^{-4}$  et  $\phi_p < 10^{-2}$  : le phénomène physique prépondérant est la dispersion des particules par la turbulence. Les particules ne sont pas suffisamment lourdes ou nombreuses pour influencer la phase fluide. L'effet des collisions est, en général, lui aussi négligeable.

- $\alpha_p < 10^{-4}$  et  $\phi_p > 10^{-2}$  : le couplage inverse n'est plus négligeable. L'énergie turbulente du fluide a tendance à diminuer par la présence de la phase dispersée.
- $10^{-4} < \alpha_p < 10^{-1}$  : les collisions inter-particulaires et le transport par la turbulence fluide sont prépondérants.
- $\alpha_p > 10^{-1}$  : la dynamique des particules est pilotée par les collisions. On parle alors de « régime collisionnel » ou d'écoulements « denses ».

La modélisation eulérienne étudiée est adaptée aux régimes « dilués », où la turbulence du fluide est un phénomène dominant du mouvement particulaire ( $\alpha_p < 10^{-1}$ ). Elle peut théoriquement prendre en compte les collisions interparticulaires. L'extension du formalisme utilisé au phénomène de couplage inverse n'est pas encore totalement établie et ne sera pas abordé ici.

### Simulations numériques gaz-particules

La simulation numérique d'écoulements gaz-particules peut être réalisée suivant différentes approches. Simonin (2000) propose une hiérarchie de ces approches (Fig. 1) en fonction de leur applicabilité à une configuration industrielle (approches réservées pour l'instant à des études fondamentales en haut de la figure). Une « vraie » simulation numérique directe d'un écoulement diphasique consiste à résoudre les équations de Navier-Stokes autour de chaque particule et celles des milieux continus à l'intérieur. Cela nécessite des méthodes numériques spécifiques : Ten Cate et al. (2004) utilisent une approche Lattice-Boltzmann et Ranzaniarivelo (2005) une méthode de frontières immergées. Le diamètre des particules est au minimum d'une dizaine de mailles de calcul, si bien que les configurations possibles pour de telles simulations sont actuellement limitées à des écoulements avec quelques dizaines voire centaines de particules.

Si les inclusions sont suffisamment petites (typiquement leur diamètre doit être inférieur à l'échelle de longueur de Kolmogorov), il est possible de traiter séparément les deux phases. Le fluide est alors traité par la simulation eulérienne des équations (exactes ou approchées) de Navier-Stokes, alors que les particules sont suivies individuellement de façon lagrangienne (Discret Particle Simulation ou DPS). Les interactions entre les phases nécessitent l'emploi de lois de transfert fluide-particule (modèles de force, transferts de chaleur/masse) et d'interactions entre les particules (loi de rebond après collision). Deux approches sont utilisées pour simuler numériquement la structure cohérente d'un écoulement turbulent fluide : la simulation numérique directe (DNS) et la simulation des grandes échelles (LES). D'un point de vue théorique, la DNS est la méthode la plus précise, car toutes les échelles turbulentes sont résolues. Le coût numérique de cette approche restreint son domaine d'application à des nombres de Reynolds beaucoup plus faibles que ceux rencontrés dans des configurations industrielles. Cette limitation est en partie levée par l'approche LES, où seules les grandes échelles (les plus énergétiques) de la turbulence sont résolues. L'effet des petites échelles est pris en compte par des modèles de sous-maille. Pour évaluer l'influence des petites échelles de la turbulence fluide sur les statistiques de la phase particulaire, Fede et Simonin (2006) simulent une turbulence homogène isotrope (THI) stationnaire couplée avec deux types de DPS (la seule force agissant sur les particules étant la traînée) : dans le premier cas, la force de traînée est exprimée avec le champ de

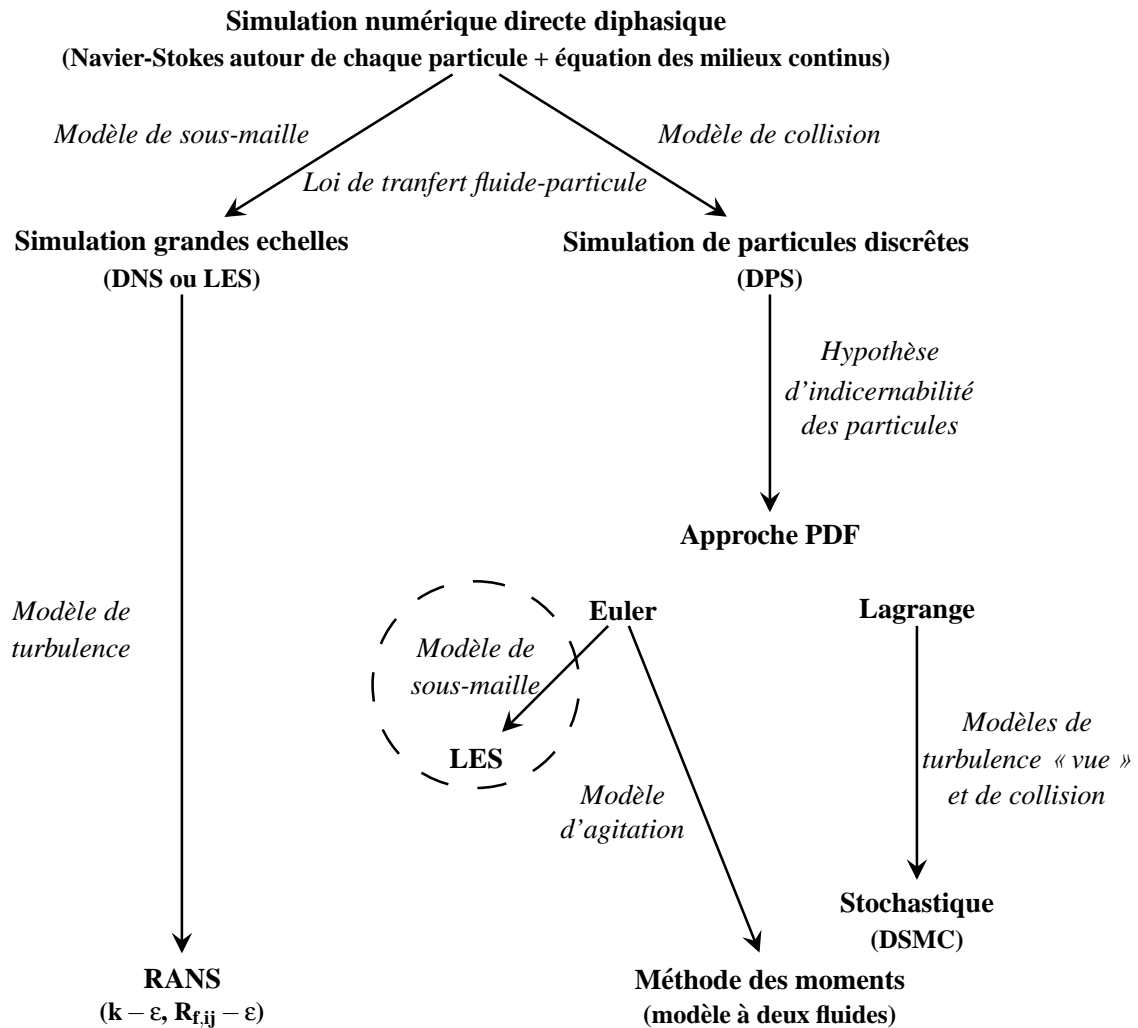


FIG. 1 – Hiérarchie des approches numériques pour la simulation des écoulements gaz-particules (adapté de Simonin (2000)). Le sujet du présent travail est entouré avec une ligne tiretée.

vitesse fluide, alors que, dans le deuxième cas, elle dépend du champ filtré de vitesse fluide où les petites échelles de la turbulence ont été soustraites. Pour des particules suffisamment lourdes (dont le temps de relaxation est supérieur à environ cinq fois le temps caractéristique des petites échelles supprimées du fluide), les statistiques de la phase particulaire, telles que l'énergie cinétique, la dispersion et le paramètre d'accumulation caractérisant la répartition spatiale des particules, sont peu influencées par les petites échelles de la turbulence. Il n'est alors plus obligatoire de résoudre l'ensemble des structures turbulentes dans un calcul diphasique gaz-particules. Une simulation des grandes échelles du fluide est parfaitement justifiée dans ce cas et permet d'obtenir des turbulences plus fortes qu'en DNS. L'applicabilité de l'approche LES à des particules plus légères est une question actuellement ouverte. La proposition et la validation de modélisation des effets des petites échelles du fluide sur les particules est un sujet en plein essor (Vinkovic et al. (2006);

Fede et al. (2006)). Dans l'approche LES/DPS déterministe, telle que décrite précédemment, chaque particule de l'écoulement doit être individuellement simulée. Dans des configurations industrielles, un spray de gouttelles par exemple, le nombre de particules est trop important pour que la LES/DPS soit directement applicable. A l'aide d'une description statistique de la phase particulaire, il est possible de réduire le coût de calcul en suivant des particules numériques représentatives d'un nombre donné de particules plutôt que des particules réelles individuelles. Ce coût demeure toutefois très (trop) élevé en cas de fort couplage entre les deux phases.

Le niveau suivant d'approximation consiste à effectuer une décomposition de Reynolds des champs instantanés suivie d'une moyenne sur l'ensemble des réalisations possibles du champ turbulent fluide. Pour le fluide, ces approches sont appelées modélisation RANS (Reynolds Average Navier-Stokes). Les équations de transports sont écrites pour les grandeurs moyennes, ainsi que pour certaines grandeurs statistiques de la turbulence : énergie et dissipation dans les modèles  $k - \varepsilon_f$  ou tenseur des contraintes de Reynolds et dissipation dans les modèles de type  $R_{f,ij} - \varepsilon_f$ . Lorsque les particules sont indiscernables (au moins localement), la phase dispersée suit une description statistique. Les propriétés particulières sont données par une fonction de densité de probabilité (PDF) pour l'ensemble des réalisations de la phase particulaire et de la phase fluide. Pour prendre en compte plus facilement l'influence du fluide sur la phase dispersée, Simonin (1996) propose d'utiliser la PDF jointe fluide-particule qui contient les informations relatives aux particules et au fluide vu par les particules. Cette PDF suit une équation de type Boltzmann. La fermeture de cette équation nécessite de modéliser les fluctuations de vitesse fluide le long des trajectoires des particules par une équation de Langevin par exemple. Le terme de collisions est fermé par un modèle de collision corrélé (par la vitesse fluide) spécifiquement développé pour les écoulements gaz-particules dilués (Laviéville (1997)). Cette équation de type Boltzmann peut être simulée de façon lagrangienne à l'aide d'algorithmes stochastiques (Fede et al. (2002) en THI; Moreau et al. (2003, 2004) en écoulement simplement cisailé). L'approche eulérienne « aux moments » consiste à résoudre les équations de transport des premiers moments de la PDF telles que la densité du nombre de particules, la vitesse moyenne, l'énergie d'agitation,... Ces résolutions lagrangiennes ou eulériennes de l'équation particulaire de type Boltzmann sont couplées avec une approche de type RANS pour le fluide, si bien que les informations relatives aux structures cohérentes de la turbulence fluide ont été perdues par le processus de moyenne sur l'ensemble des réalisations du champ turbulent dans ces simulations.

Une nouvelle approche eulérienne pour le traitement de la phase dispersée, pouvant être couplée à une approche LES du fluide, est développée dans ce mémoire. Comparativement à une description lagrangienne, l'intérêt d'une telle modélisation eulérienne réside dans la facilité d'implantation et de la prise en compte des couplages entre phases (tous les termes de transfert suivent un formalisme eulérien).

### **L'approche eulérienne mésoscopique aux grandes échelles pour la phase dispersée**

Février (2000) introduit le formalisme eulérien mésoscopique pour décrire les statistiques particulières et définit le processus de moyenne sur l'ensemble des réalisations de la phase particulaire conditionnée par



une réalisation donnée du champ turbulent fluide. Selon ce formalisme, la vitesse de chaque particule se compose d'une partie corrélée spatialement aux vitesses des particules proches et d'une partie décorrélée. L'information relative au trajet individuel de chaque particule est perdue par la moyenne d'ensemble conditionnée, mais le comportement collectif des particules (par exemple l'entraînement par une structure turbulente fluide donnée) est conservé. Les statistiques de la phase particulaire sont données par la PDF particulaire conditionnée, qui suit une équation de type Boltzmann. Les équations de transport des quantités eulériennes sont obtenues par intégration de l'équation de type Boltzmann par analogie avec la méthode aux moments. Kaufmann (2004) simule les équations eulériennes mésoscopiques particulières couplées aux équations de Navier-Stokes pour le fluide en turbulence homogène isotrope décroissante. Ces simulations eulériennes sont validées par comparaison avec des résultats lagrangiens obtenus par DNS/DPS (Kaufmann et al. (2006a)). La présente étude se situe dans la suite directe de ces travaux et vise plus particulièrement à étendre l'approche eulérienne mésoscopique au formalisme de la simulation des grandes échelles.

## **Méthodologie et plan du mémoire**

Le plan du mémoire suit le cheminement jusqu'à la validation des modèles de sous-maille de l'approche mésoscopique par des tests a priori sur des champs eulériens obtenus par DNS/DPS. Les différentes étapes qui conduisent à ces tests sont schématisées sur la Fig. 2.

Le chapitre 1 est consacré à l'approche DNS/DPS. Cette approche est utilisée pour générer une base de données lagrangiennes qui sera exploitée par la suite. La configuration de l'écoulement est une THI décroissante.

Les différentes approches eulériennes existantes pouvant être couplées avec une méthode DNS/LES pour le fluide sont présentées dans le deuxième chapitre. L'accent est mis sur l'approche mésoscopique qui permet de modéliser le comportement des particules lourdes étudiées ici.

Le troisième chapitre est dédié à l'interprétation de résultats lagrangiens tels que ceux obtenus au Chap. 1 en terme de champs eulériens mésoscopiques décrits au Chap. 2. La transformation des données lagrangiennes en champ eulérien est effectuée par un processus de projection équivalent à un filtrage volumique. La méthode de projection utilisée est tout d'abord testée sur des cas synthétiques monodimensionnels puis appliquée et validée sur les résultats de simulations DNS/DPS en trois dimensions. Les erreurs dues à la projection sont quantifiées.

Le chapitre 4 se compose de deux parties. Les champs eulériens mésoscopiques obtenus à partir des résultats DNS/DPS sont analysés dans les différents cas de simulation. L'étude comprend l'interprétation des évolutions des grandeurs moyennes, des spectres de vitesses et est complétée par quelques champs locaux instantanés. Dans la deuxième partie, les modélisations des termes relatifs au mouvement décorrélé proposées au Chap. 2 sont évaluées a priori.

L'objet du chapitre 5 est la dérivation des équations mésoscopiques aux grandes échelles par filtrage des équations mésoscopiques. Le filtrage spatial des termes non linéaires fait apparaître des termes de sous-maille. L'importance relative des différents termes est évaluée sur les résultats des simulations DNS/DPS.

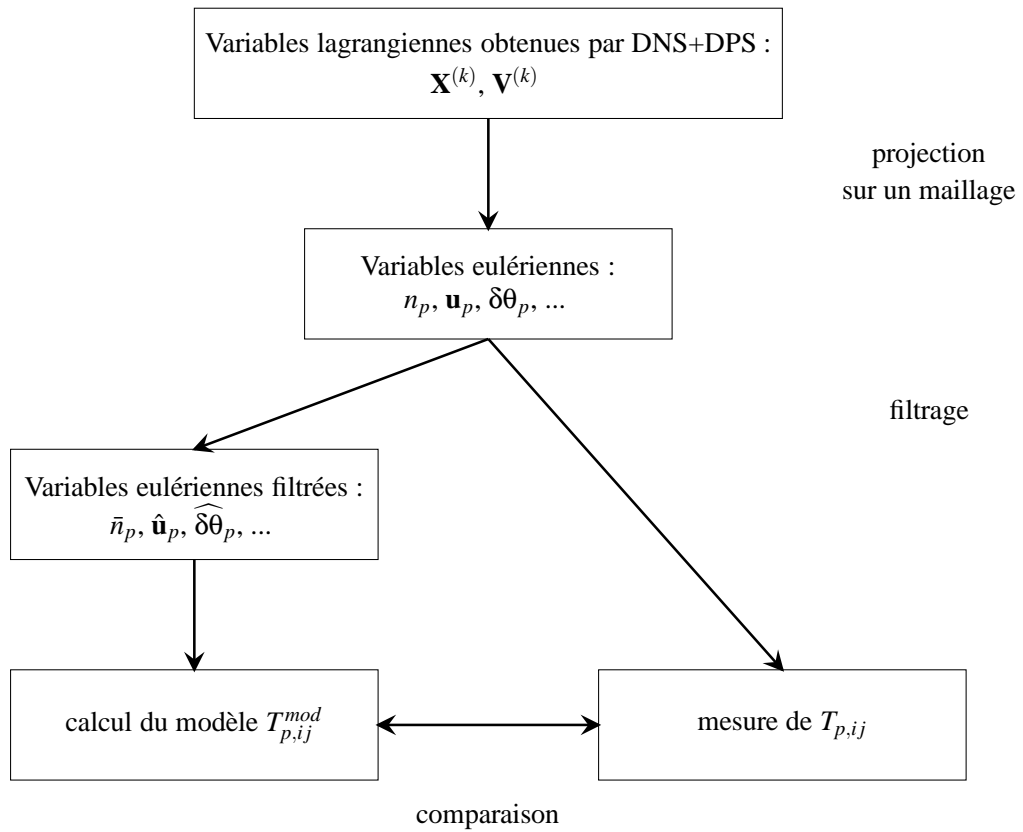


FIG. 2 – Méthodologie des tests a priori pour le tenseur des contraintes de sous-maille des particules  $T_{p,ij}$ .

Le dernier chapitre est consacré à la modélisation des termes de l'approche LES mésoscopique pour la phase dispersée. Les différents modèles sont testés a priori à l'aide des champs mésoscopiques filtrés décrits précédemment.

# Nomenclature

## Lettres latines

$C_{fp}$	Coefficient spectral de corrélation fluide-particule	p. 94
$C_{pc}$	Coefficient spectral de compressibilité de la vitesse particulaire corrélée	p. 98
$E_f$	Spectre de densité d'énergie du fluide	p. 27
$E_p$	Spectre de la vitesse particulaire corrélé	p. 87
$E_p^s$	Spectre de la vitesse particulaire corrélé solénoïdale	p. 97
$E_p^c$	Spectre de la vitesse particulaire corrélé compressible	p. 97
$E_{fp}$	Spectre de la covariance fluide-particulaire	p. 93
$f_p$	Fonction de densité de probabilité des particules conditionnée par une réalisation de la turbulence fluide	p. 51
$g_{pp}$	Fonction d'encombrement	p. 80
$I_f$	Fonction indicatrice des zones de concentration préférentielles	p. 85
$Kn_p$	Nombre adimensionnel de Kundsén particulaire	p. 106
$k_p^{tr}$	Nombre d'onde de transition	p. 99
$L_D$	Longueur du domaine de calcul	p. 34
$L_f^f$	Longueur intégrale longitudinale du fluide	p. 23
$L_f^s$	Longueur intégrale transversale du fluide	p. 23
$L_p$	Longueur intégrale associée au champ $n_p$	p. 80
$l_p$	Longueur caractéristique des variations du champ $n_p$	p. 80
$n_p$	Densité du nombre de particules	p. 53
$N_p$	Nombre total de particules simulées	
$q_f^2$	Energie du fluide	p. 23
$q_{f@p}^2$	Energie du fluide « vu » par les particules	p. 31
$q_{fp}$	Covariance fluide-particule	p. 30
$q_p^2$	Energie moyenne des particules	p. 30
$\tilde{q}_p^2$	Energie corrélée moyenne des particules	p. 50
$q_{p,SGS}$	Energie corrélée de sous-maille	p. 121

$Re_t$	Nombre de Reynolds turbulent	p. 24
$Re_\lambda$	Nombre de Reynolds basé sur la micro-échelle de Taylor	p. 24
$St$	Nombre de Stokes basé sur le temps lagrangien de la turbulence	p. 30
$St_K$	Nombre de Stokes basé sur le temps de Kolmogorov	p. 30
$\mathbf{u}_f$	Champ de vitesse du fluide	p. 22
$\mathbf{u}_{f@p}$	Vitesse du fluide « vu » par les particules	p. 30
$\mathbf{u}_p$	Champ de vitesse corrélée des particules	p. 53
$\mathbf{V}^{(k)}$	Vitesse de la particule $k$	p. 28
$\mathbf{X}^{(k)}$	Position du centre de masse de la particule $k$	p. 28

## Lettres grecques

$\alpha_p$	Fraction volumique de particules	p. 31
$\chi_p$	Rapport entre l'énergie corrélée compressible et l'énergie totale corrélée	p. 98
$\delta q_p^2$	Energie décorrelée moyenne des particules	p. 50
$\delta M_{p,ijkl}$	Tenseur des corrélations quadruples du mouvement non corrélé	p. 53
$\delta Q_{p,ijk}$	Tenseur des corrélations triples du mouvement non corrélé	p. 53
$\delta R_{p,ij}$	Tenseur des corrélations doubles du mouvement non corrélé	p. 53
$\delta \theta_p$	Energie du mouvement non corrélé des particules (RUE)	p. 54
$\delta \mathbf{V}^{(k)}$	Vitesse décorrelée de la particule $k$	p. 49
$\eta_K$	échelle de longueur de Kolmogorov	p. 25
$\lambda_f^f$	micro-échelle de Taylor longitudinale du fluide	p. 24
$\lambda_f^s$	micro-échelle de Taylor transversale du fluide	p. 24
$\phi_p$	Fraction massique de particules	p. 31
$\Pi_p$	Terme de production de sous-maille de $\delta \theta_p$	p. 120
$\rho_f$	Masse volumique du fluide	p. 22
$\rho_p$	Masse volumique des particules	
$\tau_f^t$	Temps turbulent lagrangien	p. 25
$\tau_{f@p}^t$	Temps turbulent lagrangien le long des trajectoires des particules	p. 25
$\tau_f^u$	Temps cinématique de l'échelle de nombre d'onde $k$	p. 96
$\tau_f^<$	Temps caractéristique des échelles de nombre d'onde $> k$	p. 96
$\tau_K$	Temps de Kolmogorov	p. 25
$\tau_p$	Temps de relaxation des particules	p. 29

Les grandeurs qui commencent par "δ" sont relatives au mouvement décorrelé de la phase particulaire.

## Indices et exposants

$f$	relatif à la phase fluide
$p$	relatif aux particules

## Opérateurs

$\{\cdot\}$	Moyenne de quantités lagrangiennes	p. 30
$\bar{\cdot}$	Filtre volumique	p. 120
$\hat{\cdot}$	Filtre volumique de Favre	p. 120
$\langle \cdot \rangle$	Moyenne sur l'ensemble du domaine	p. 23
$\langle \cdot \rangle_p$	Moyenne de Favre sur la phase particulaire	p. 75
$\langle \cdot \rangle_{\hat{p}}$	Moyenne de Favre sur la phase particulaire filtrée	p. 124

## Abréviations

DNS	Simulation numérique directe (direct numerical simulation)
LES	Simulation aux grandes échelles (large eddy simulation)
PDF	Fonction densité de probabilité (probability density function)
RUE	Energie décorrélée (random uncorrelated energy)
RUV	Vitesse décorrélée (random uncorrelated velocity)
THI	Turbulence homogène isotrope



# Chapitre 1

## Génération d'une base de données

### DNS+DPS

Dans l'approche Euler-Lagrange pour les écoulements diphasiques à phase dispersée, le champ fluide turbulent est simulé sur l'ensemble du domaine discrétisé sur un maillage, alors que les particules (positions, vitesses) sont suivies individuellement. Les interactions entre les deux phases sont traitées par des termes d'échanges. Ce type de simulations est classiquement utilisé et a permis d'étudier des phénomènes tels que la dispersion turbulente de particules (Deutsch et Simonin (1991), Elghobashi et Truesdell (1992), Février (2000)), les collisions inter-particulaires (Berlemont et al. (1995), Laviéville (1997), Fede (2004)) ou avec une paroi (Sakiz (1999), Konan et al. (2006)), la modification du champ fluide par la présence de la phase dispersée (Squires et Eaton (1990), Elghobashi et Truesdell (1993), Boivin et al. (1998), Vermorel et al. (2003)), l'évaporation/condensation et les transferts thermiques entre phases (Reveillon et Vervisch (1998), Miller et Bellan (1999), Paoli et al. (2004)) ou bien la déposition de particules en canal (Uijtewaal et Oliemans (1996), Wang et Squires (1996)).

Les approches pour les deux phases sont présentées successivement. A titre d'illustration, la mise en œuvre des simulations diphasiques par DNS/DPS en écoulement turbulent homogène isotrope décroissant constitue la troisième partie de ce chapitre.

#### 1.1 Turbulence du fluide

Dans un premier temps, les équations de Navier-Stokes décrivant l'évolution des quantités fluides sont introduites, puis les échelles caractéristiques sont présentées. Le cas pratique d'une turbulence de grille est enfin décrit.

### 1.1.1 Equations de Navier-Stokes

Le code de simulation numérique utilisé résoud les équations de Navier-Stokes compressibles d'un gaz parfait. Les équations de transport de la masse volumique  $\rho_f$ , de la quantité de mouvement  $\rho_f \mathbf{u}_f$  et de l'énergie totale  $\rho_f e_f^t$  d'un fluide compressible, en l'absence de couplage des particules vers le fluide, s'écrivent :

$$\frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_f u_{f,j}) = 0 \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial \rho_f u_{f,i}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_f u_{f,j} u_{f,i}) = -\frac{\partial P_f}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{f,ij}}{\partial x_j} \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial \rho_f e_f^t}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_f u_{f,j} e_f^t) = -\frac{\partial}{\partial x_j} (u_{f,j} P_f) + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_{f,i} \sigma_{f,ij}) - \frac{\partial \zeta_{f,j}}{\partial x_j} \quad (1.3)$$

Pour un fluide newtonien, le tenseur des contraintes visqueuses  $\sigma_{f,ij}$  est proportionnel à la partie déviatrice du tenseur de cisaillement  $S_{f,ij}$  :

$$\sigma_{f,ij} = \rho_f \nu_f S_{f,ij}^* \quad (1.4)$$

$$S_{f,ij} = \frac{\partial u_{f,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{f,j}}{\partial x_i} \quad (1.5)$$

$$S_{f,ij}^* = S_{f,ij} - \frac{1}{3} S_{f,mm} \delta_{ij} \quad (1.6)$$

où  $\nu_f$  est la viscosité cinématique. Le flux de chaleur  $\zeta_{f,j}$  est obtenu par la loi de Fourier, en fonction du gradient de la température  $\theta_f$  et de la conductivité thermique  $\kappa_f$  :

$$\zeta_{f,j} = -\kappa_f \frac{\partial \theta_f}{\partial x_j} \quad (1.7)$$

Pour fermer ce jeu d'équations, il est nécessaire de spécifier une équation d'état. Dans le cas d'un gaz parfait, la pression  $P_f$ , la masse volumique  $\rho_f$  et la température  $\theta_f$  sont liées par :  $P_f = \rho_f R \theta_f$  avec  $R$  la constante des gaz parfaits. L'énergie massique totale du fluide est la somme des énergies cinétique et interne  $e_f^t = \frac{1}{2} u_{f,i} u_{f,i} + c_V \theta_f$ , où  $c_V$  est la capacité calorifique à volume constant.

Les écoulements étudiés sont isothermes ( $\kappa_f$ ,  $\nu_f$ ,  $c_V$ ,  $R$  sont constants). Pour un nombre de Mach inférieur (rapport des vitesses de convection et du son caractéristiques) à 0,3, l'écoulement peut être considéré comme incompressible :  $\rho_f$  est constant aussi. L'incompressibilité et l'isothermie de l'écoulement permettent de réduire le nombre et la complexité des équations nécessaires, le système (1.1)-(1.3) devient alors

$$\frac{\partial u_{f,j}}{\partial x_j} = 0 \quad (1.8)$$

$$\frac{\partial u_{f,i}}{\partial t} + u_{f,j} \frac{\partial u_{f,i}}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_f} \frac{\partial P_f}{\partial x_i} + \nu_f \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial u_{f,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{f,j}}{\partial x_i} \right) \quad (1.9)$$

### 1.1.2 Echelles caractéristiques de la turbulence

Chassaing (2000) propose la définition suivante de la turbulence : « l'écoulement turbulent est un mode naturel de mouvement de fluides visqueux où des mécanismes internes d'échanges énergétiques assurent,



au sein même de l'écoulement, la création et le maintien de toute une hiérarchie de mouvements chaotiques répartis continuellement sur une large gamme d'échelles macroscopiques. »

Les principales échelles caractéristiques de la turbulence du fluide présentées ici proviennent du Hinze (1975).

La séparation entre le mouvement moyen et le mouvement turbulent est effectué par le processus de moyenne de Reynolds  $\langle \cdot \rangle$ , c'est à dire la moyenne des grandeurs locales, instantanée sur l'ensemble des réalisations possibles d'une expérience identique macroscopiquement. Si l'écoulement est stationnaire (homogène), la moyenne temporelle (spatiale) est équivalente à la moyenne d'ensemble, respectivement. Ceci constitue l'hypothèse d'ergodicité.

La vitesse  $\mathbf{u}_f(\mathbf{x}, t)$  se décompose en une vitesse moyenne  $\mathbf{U}_f(\mathbf{x}, t)$  et une partie fluctuante  $\mathbf{u}'_f(\mathbf{x}, t)$ , telle que  $\langle \mathbf{u}'_f \rangle = 0$ . L'énergie turbulente est définie comme,

$$q_f^2(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \langle u'_{f,i}(\mathbf{x}, t) u'_{f,i}(\mathbf{x}, t) \rangle \quad (1.10)$$

La vitesse caractéristique de la turbulence est  $u'_f = \sqrt{\frac{2}{3} q_f^2}$ . L'étude est limitée au cas d'une turbulence homogène (invariance des grandeurs statistiques par translation). Par abus de notation, l'exposant « . ' » sera oublié par la suite et  $\mathbf{u}_f$  désignera la vitesse turbulente. Le tenseur de corrélations spatiales eulériennes des vitesses du fluide en deux points (séparés du vecteur  $\mathbf{r}$ ) est défini par :

$$\mathcal{R}_{f,ij}^E(\mathbf{r}, t) = \frac{\langle u_{f,i}(\mathbf{x}, t) u_{f,i}(\mathbf{x} + \mathbf{r}, t) \rangle}{2q_f^2(t)} \quad (1.11)$$

En configuration isotrope (invariance par rotation), ce tenseur peut être exprimé en terme des fonctions scalaires eulériennes d'autocorrélation longitudinale  $f(r, t)$  et transversale  $g(r, t)$  du fluide :

$$f(r, t) = \frac{\langle u_{f,1}(\mathbf{x}, t) u_{f,1}(\mathbf{x} + r\mathbf{e}_1, t) \rangle}{2q_f^2(t)} \quad (1.12)$$

$$g(r, t) = \frac{\langle u_{f,1}(\mathbf{x}, t) u_{f,1}(\mathbf{x} + r\mathbf{e}_2, t) \rangle}{2q_f^2(t)} \quad (1.13)$$

$$\mathcal{R}_{f,ij}^E(\mathbf{r}, t) = g(r, t) \delta_{ij} + \frac{f(r, t) - g(r, t)}{r^2} r_i r_j \quad (1.14)$$

où  $e_i$  est une base orthonormée de l'espace et  $r = |\mathbf{r}|$ . L'incompressibilité du fluide permet d'exprimer  $g(r, t)$  en fonction de  $f(r, t)$  (Howarth et Karman (1938)) :

$$g(r, t) = f(r, t) + \frac{r}{2} \frac{df}{dr} \Big|_{r,t} \quad (1.15)$$

Les échelles de longueur intégrales longitudinale  $L_f^f$  et transversale  $L_f^g$  du fluide sont définies par :

$$L_f^f(t) = \int_0^\infty f(r, t) dr \quad (1.16)$$

$$L_f^g(t) = \int_0^\infty g(r, t) dr \quad (1.17)$$

et représentent la distance nécessaire entre deux points pour que les vitesses en ces deux points ne soient plus corrélées. Ces longueurs caractérisent les grandes échelles de la turbulence. Les meso-échelles de longueur (ou échelles de Taylor) sont définies par :

$$\lambda_f^f(t) = \left( -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} \Big|_{r=0,t} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (1.18)$$

$$\lambda_f^g(t) = \left( -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 g}{\partial r^2} \Big|_{r=0,t} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (1.19)$$

La relation de Howarth et Karman (1938) en écoulement incompressible isotrope permet de relier les échelles longitudinales et transversales :

$$\frac{L_f^f}{L_f^g} = 2 \quad (1.20)$$

$$\frac{\lambda_f^f}{\lambda_f^g} = \sqrt{2} \quad (1.21)$$

Toutes les relations précédentes reposent sur une description cinématique de l'écoulement et l'utilisation d'arguments principalement géométriques. L'équation d'évolution de l'énergie turbulente moyenne est obtenue en multipliant l'équation (1.9) par la vitesse fluante et en la moyennant. En l'absence de gradients moyens, elle s'écrit

$$\frac{dq_f^2}{dt} = -\varepsilon_f \quad (1.22)$$

où le taux de dissipation de l'énergie turbulente  $\varepsilon_f$  est :

$$\varepsilon_f = \frac{\nu_f}{2} \left\langle \left( \frac{\partial u_{f,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{f,j}}{\partial x_i} \right)^2 \right\rangle \quad (1.23)$$

Sans l'adjonction de terme spécifique de forçage dans l'éq. (1.9), l'énergie cinétique d'une turbulence homogène et isotrope (THI) décroît sous l'action de la dissipation visqueuse. Grâce à l'hypothèse d'isotropie,  $\varepsilon_f$  peut être exprimée en fonction des échelles de Taylor qui sont parfois qualifiées d'échelles de dissipation, car leur mesure permet de déterminer le taux de dissipation.

$$\lambda_f^g = \sqrt{\frac{15\nu_f u_f'^2}{\varepsilon_f}} \quad (1.24)$$

La longueur intégrale  $L_f^f$  peut aussi être reliée aux grandeurs macroscopiques, mais seulement de manière approchée, par :

$$L_f^f \approx \frac{(u_f')^3}{\varepsilon_f} \quad (1.25)$$

A l'aide de ces différentes échelles de longueur, deux nombres de Reynolds, qui caractérisent les effets inertiels par rapport au effets visqueux, sont introduits :

$$Re_t = \frac{L_f^f u_f'}{\nu_f} \quad (1.26)$$

$$Re_\lambda = \frac{\lambda_f^g u_f'}{\nu_f} \quad (1.27)$$

$Re_t$  est basé sur l'échelle intégrale, et  $Re_\lambda$  sur la meso-échelle transversale de Taylor.

Schématiquement, l'écoulement est constitué de tourbillons dont la plus grande taille  $L_f^f$  est fonction des conditions de production de la turbulence.  $L_f^f$  et  $u_f'$  déterminent le taux de dissipation de l'énergie turbulente  $\varepsilon_f$ . Cette énergie est transférée vers les plus petites structures tourbillonnaires de l'écoulement caractérisées par les échelles de Kolmogorov (1941) (Tennekes et Lumley (1972)). Le transfert d'énergie entre les échelles de tailles différentes s'accompagne aussi d'une dissipation d'énergie. Si la séparation entre les grandes et les plus petites échelles est suffisante, le mouvement des petites échelles dépend seulement du taux de dissipation et de la viscosité cinématique. Avec ces paramètres, les échelles de longueur, temps et de vitesse des plus petites échelles sont :

$$\eta_K = \left( \frac{v_f^3}{\varepsilon_f} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (1.28)$$

$$\tau_K = \left( \frac{v_f}{\varepsilon_f} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.29)$$

$$\nu_K = (v_f \varepsilon_f)^{\frac{1}{4}} \quad (1.30)$$

Le nombre de Reynolds basé sur ces échelles vaut 1. Le rapport de longueur entre la plus grande échelle ( $\approx L_f^f$ ) et la plus petite échelle vaut  $\frac{L_f^f}{\eta_K} = Re_t^{\frac{3}{4}}$ . Cela indique que la séparation entre les grandes échelles et la plus petite échelle augmente avec le Reynolds. La principale différence entre deux écoulements possédant la même longueur intégrale mais des Reynolds différents est la taille des plus petits tourbillons. La condition de séparation d'échelles revient à  $Re_t^{\frac{3}{4}} \gg 1$ . La dissipation visqueuse intervenant à petite échelle, il peut exister une sous-zone inertielle, où le spectre d'énergie turbulente ne dépend plus de  $v_f$  mais uniquement de  $\varepsilon_f$  (si  $Re_t^{\frac{3}{8}} \gg 1$ , selon Hinze (1975)). L'énergie cinétique d'un tourbillon de taille  $1/k$  est alors  $\propto k \varepsilon_f^{\frac{2}{3}} k^{-\frac{5}{3}}$ .

Le temps intégral eulérien  $T_f^E$  est défini à l'aide des corrélations eulériennes de vitesse en un point, en deux temps et peut être évalué par :

$$T_f^E = \frac{L_f^f}{u_f'} \approx \frac{q_f^2}{\varepsilon_f} \quad (1.31)$$

et représente le temps de passage d'une structure de taille  $L_f^f$ . Le temps de dissipation de l'énergie turbulente est

$$T_{\varepsilon_f} = \frac{q_f^2}{\varepsilon_f} \quad (1.32)$$

Toutes les échelles précédentes sont définies dans le formalisme eulérien. On peut de façon similaire introduire les corrélations de vitesses en fonction du temps le long des trajectoires des particules fluides. Une particule fluide est un volume de fluide plus petit que l'échelle de Kolmogorov qui se déplace à la vitesse du fluide. Le temps lagrangien de la turbulence  $\tau_f^l$  représente le temps nécessaire pour que la vitesse d'une particule fluide se décorrèle (c'est aussi un temps intégral). Haworth et Pope (1986), en modélisant l'incrément lagrangien de vitesse fluide par une équation de Langevin, et l'évaluent selon :

$$\tau_f^l = \frac{q_f^2}{\beta_1 \varepsilon} \quad (1.33)$$

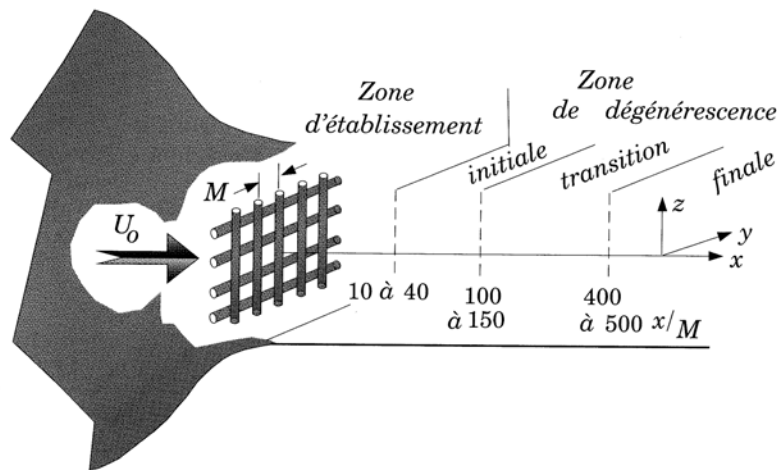


FIG. 1.1 – Configuration expérimentale de turbulence de grille (tiré de Chassaing (2000)).

où le coefficient  $\beta_1$  est proche de 2 en THI. En THI forcée, Haworth et Pope (1986) modélisent l'incrément de vitesses d'une particule par une équation de Langevin équivalente à un modèle eulérien de turbulence de type Rotta (Pope (1994)), la conservation de l'énergie fluide impose alors la valeur  $\beta_1 = 2,075$ .

### 1.1.3 Turbulence homogène isotrope décroissante de grille

Expérimentalement, la façon la plus répandue pour générer une turbulence homogène isotrope consiste à faire passer un fluide à travers une grille (Fig. 1.1). La grille plane est, généralement, constituée de barreaux identiques séparés d'une distance  $M$ . La vitesse moyenne au centre de l'écoulement est noté  $U_0$ .

Selon l'hypothèse de Taylor, la situation expérimentale de turbulence de grille fournit une représentation spatiale des évolutions temporelles de toute propriété statistique de la THI dans le repère en translation à la vitesse  $U_0$ . Cette hypothèse n'est valable qu'au centre de la veine fluide et revient à supposer que la turbulence n'est pas altérée par son transport à la vitesse moyenne  $U_0$ . Cette hypothèse est valable lorsque les fluctuations de vitesses sont négligeables devant la vitesse de convection ( $u'_f \ll U_0$ ). Typiquement, l'intensité d'une turbulence ( $u'_f/U_0$ ) générée par une grille est d'environ 3% à 5%, ce qui justifie (en première approximation) l'utilisation de l'hypothèse de Taylor dans cette configuration.

En l'absence de gradient de vitesse moyenne, l'évolution de l'énergie cinétique turbulente moyenne suit l'éq. (1.22) dans le repère en translation.  $q_f^2$  décroît avec la distance à la grille ( $= U_0 t$ ). La nature de la turbulence dépend de la distance à la grille. Jusqu'à une longueur  $x/M = 10$  ou  $40$ , l'écoulement reste fortement marqué par les inhomogénéités de la traversée de la grille (zone d'établissement). Au delà (zone de dégénérescence), la turbulence peut être considérée comme homogène et isotrope (moins de 5% d'écarts sur l'agitation moyenne suivant les directions longitudinales et transversales et relation de Howarth et Karman donnée par l'éq. 1.15 satisfaite). De plus, la PDF des vitesses est gaussienne, alors que la PDF des dérivés spatiales de la fluctuation de vitesse présente des écart à la loi normale qui peuvent être quantifiés par les

facteurs de dissymétrie  $S_{\dot{u}_f}$  et d'aplatissement  $F_{\dot{u}_f}$  de cette PDF,

$$S_{\dot{u}_f} = \frac{\langle \left( \frac{\partial u_{f,1}}{\partial x_1} \right)^3 \rangle}{\langle \left( \frac{\partial u_{f,1}}{\partial x_1} \right)^2 \rangle^{\frac{3}{2}}} \quad (1.34)$$

$$F_{\dot{u}_f} = \frac{\langle \left( \frac{\partial u_{f,1}}{\partial x_1} \right)^4 \rangle}{\langle \left( \frac{\partial u_{f,1}}{\partial x_1} \right)^2 \rangle^2} \quad (1.35)$$

Les mesures expérimentales donnent  $S_{\dot{u}_f} \approx -0,4$  ou  $-0,7$  et  $F_{\dot{u}_f} \approx 3,3$  à  $4$  en turbulence développée. En THI décroissante, les seuls mécanismes pouvant faire évoluer les propriétés énergétiques de la turbulence sont la dissipation par viscosité et le transfert d'énergie entre les différentes classes de tourbillons. Les équations évolutions de l'énergie turbulente  $q_f^2$  et du spectre d'énergie turbulente,

$$E_f(k) = \frac{1}{2} \iiint u_{f,i}^{TF}(\mathbf{k}) u_{f,i}^{TF*}(\mathbf{k}) \delta(|\mathbf{k}| - k) d\mathbf{k} \quad (1.36)$$

(où  $TF$  est l'opérateur transformé de Fourier, l'indice  $*$  indique le complexe conjugué,  $\delta$  est le symbole de Kronecker et est remplacée par une fonction chapeau de largeur  $1/(2\Delta x)$  dans la pratique) sont

$$\frac{\partial E_f(k,t)}{\partial t} = T_f(k,t) - 2\nu_f k^2 E_f(k,t) \quad (1.37)$$

où  $T_f(k,t)$  est le terme de transfert d'énergie entre les différents nombres d'onde.

La zone de dégénérescence de la turbulence est subdivisée en trois régions (Fig. 1.1) : zones initiale, de transition et finale. Dans la phase initiale, la diminution de  $q_f^2$  est principalement déterminée par la décroissance des grandes échelles énergétiques (Hinze (1975)). Théoriquement, l'énergie turbulente doit évoluer selon :

$$q_f^2 \propto t^{-1} \quad (1.38)$$

Les mesures expérimentales donnent une décroissance de l'énergie légèrement plus rapide dans cette zone (par exemple Comte-Bellot et Corrsin (1966) :  $q_f^2 \propto t^{-1.25}$  cité par Chassaing (2000)). Dans la phase finale de la turbulence de grille, les effets de transferts inertiels peuvent être négligés devant les effets visqueux (Hinze (1975)) et

$$q_f^2 \propto t^{-\frac{5}{2}} \quad (1.39)$$

Dans la zone de transition entre les phases initiale et finale, aucune des simplifications proposées du phénomène de turbulence ne sont applicables ce qui limite les possibilités de développements analytiques. De nombreux autres résultats existent sur la turbulence de grille, telles que les évolutions des longueurs ou temps caractéristiques. Ces points ne sont pas abordés, le but de ce paragraphe étant simplement de donner une idée des résultats attendus dans les simulations de THI décroissante présentés à la section 1.3.

## 1.2 Approche lagrangienne : simulation discrète de particules (DPS)

Dans l'approche DPS, un ensemble de  $N_p$  particules est avancé dans le temps. Chaque particule  $k$  suit sa trajectoire individuelle  $\mathbf{X}^{(k)}(t)$  avec sa propre vitesse  $\mathbf{V}^{(k)}(t)$ . Position et vitesse sont données par le système d'équations différentielles :

$$\frac{d\mathbf{X}^{(k)}}{dt} = \mathbf{V}^{(k)}(t) \quad (1.40)$$

$$m_p \frac{d\mathbf{V}^{(k)}}{dt} = \mathbf{F}_p^{(k)} \quad (1.41)$$

$m_p$  est la masse d'une particule. Dans cette étude, seul le cas de particules sphériques, mono-disperses est considéré : dans un écoulement toutes les particules ont le même diamètre  $d_p$  et la même masse volumique  $\rho_p$ . De façon plus précise,  $\mathbf{X}^{(k)}(t)$  est la position du centre de masse de la particule  $k$ .

### 1.2.1 Modélisation des forces agissant sur une particule isolée

Les premiers travaux décrivant les forces gouvernant le mouvement d'une particule isolée datent du 19<sup>ème</sup> siècle. Stokes (1851) étudie alors les efforts de traînée exercés par un fluide laminaire sur des sphères. Par la suite de nombreux travaux ont permis d'étendre ces résultats à la prise en compte de forces non hydrodynamiques tel que la gravité (Boussinesq (1885); Basset (1888); Oseen (1927)) et aux écoulements instationnaires et turbulents (Tchen (1947)). Les équations présentées proviennent des travaux de Maxey et Riley (1983) et de Gatignol (1983).

Les particules considérées sont sphériques, indéformables et caractérisées par un diamètre  $d_p$  et une masse volumique  $\rho_p$  constantes. En notant  $\mathbf{X}^{(k)}(t)$  et  $\mathbf{V}^{(k)}(t)$  la position et la vitesse de la  $k$ -particule, les équations régissant le mouvement de la particule considérée s'écrivent :

$$\frac{d\mathbf{X}^{(k)}(t)}{dt} = \mathbf{V}^{(k)}(t) \quad (1.42)$$

$$\begin{aligned} \rho_p \frac{\pi d_p^3}{6} \frac{d\mathbf{V}^{(k)}(t)}{dt} &= - \int_{S_p} (-P_f \delta_{ij} + \sigma_{f,ij}) n_{f,j} dS \\ &= \mathbf{F}_{p,i}^{n.p.} + \mathbf{F}_{p,i}^{p.} \end{aligned} \quad (1.43)$$

où l'opérateur  $d/dt$  désigne la dérivée temporelle le long de la trajectoire de la particule,  $S_p$  est la surface de la particule et  $\mathbf{n}_f$  est la normale sortante à la surface  $S_p$ . La force qui s'exerce sur la particule est décomposée en deux contributions distinctes : la force  $\mathbf{F}_{p,i}^{n.p.}$  qui s'appliquerait dans le cas d'une particule fluide et une contribution  $\mathbf{F}_{p,i}^{p.}$  due à la perturbation du champ de vitesse par la présence de la particule solide.

Selon Maxey et Riley (1983), dans l'hypothèse d'un diamètre particulaire beaucoup plus petit que l'échelle de Kolmogorov ( $d_p \leq \eta_K$ ),  $\mathbf{F}_{p,i}^{n.p.}$  s'écrit :

$$\mathbf{F}_{p,i}^{n.p.} = \frac{\pi d_p^3}{6} [(\rho_p - \rho_f) \mathbf{g} + \rho_f \frac{D}{Dt} \mathbf{u}_{f@p}] \quad (1.44)$$

où  $\mathbf{g}$  est la gravité,  $D/Dt$  est la dérivée en suivant un élément fluide non perturbé par la présence de la particule et  $\mathbf{u}_{f@p}$  est le champ de vitesse du fluide localement non perturbé par la présence de la particule. On parle aussi de vitesse du fluide « vue » par la particule.  $\mathbf{F}_p^{n.p.}$  inclue la poussée d'Archimède et les effets de gradient de pression et de viscosité.  $\mathbf{u}_{f@p}$  est la vitesse du fluide non perturbée par la présence de la particule et suit les équations de Navier-Stokes.

En faisant l'hypothèse supplémentaire d'un très petit nombre de Reynolds particulaire  $Re_p$ ,

$$Re_p = \frac{d_p |\mathbf{V}^{(k)} - \mathbf{u}_{f@p}|}{\nu_f} \ll 1 \quad (1.45)$$

la contribution  $\mathbf{F}_p^{p.}$  prend la forme suivante :

$$\mathbf{F}_p^{p.} = \frac{\pi d_p^3}{6} \left[ \frac{18\rho_f \nu_f}{d_p^2} (\mathbf{u}_{f@p} - \mathbf{V}^{(k)}) + \frac{\rho_f}{2} \frac{d}{dt} (\mathbf{u}_{f@p} - \mathbf{V}^{(k)}) + \frac{9\rho_f}{d_p} \sqrt{\frac{\nu_f}{\pi}} \int_{-\infty}^t \frac{d}{d\tau} (\mathbf{u}_{f@p} - \mathbf{V}^{(k)}) \frac{d\tau}{\sqrt{t-\tau}} \right] \quad (1.46)$$

Le premier terme du membre de droite représente le terme de traînée et est liée aux effets de pression et aux contraintes visqueuses. Le deuxième terme, la force de masse ajoutée a pour origine les accélérations de la particule qui entraînent une partie du fluide environnant. Le dernier terme est la force de Basset qui fait intervenir l'histoire des accélérations passées.

Gatignol (1983), indépendamment de Maxey et Riley (1983), étend les expressions de  $\mathbf{F}_p^{n.p.}$  et  $\mathbf{F}_p^{p.}$  pour une particule d'un diamètre du même ordre de grandeur que les plus petites échelles de l'écoulement non-perturbé par la présence de la particule ce qui permet de faire apparaître la force de Faxen liée à l'in-homogénéité du champ  $\mathbf{u}_{f@p}$  à l'échelle de la particule. De plus, l'expression de la force de traînée a été étendue semi-empiriquement par Schiller et Nauman (1935) et Clift et al. (1978) pour des Reynolds particulaires quelconques.

Dans cette étude, on se placera dans le cas où  $d_p \leq \eta_K$  et  $Re_p \ll 1$ . De plus, la masse volumique des particules sera beaucoup plus grande que celle du fluide porteur ( $\rho_p \gg \rho_f$ ). Cela permet de conserver seulement les forces de traînée et de gravité dans les équations (1.44) et (1.46) (Kim et al. (1998)). Seuls des écoulements isotropes sont étudiés, c'est pourquoi la gravité n'est pas prise en compte. Sous ses hypothèses, la force  $\mathbf{F}_p$  qui s'exerce sur les particules ayant une vitesse  $\mathbf{V}^{(k)}$  est :

$$\mathbf{F}_p = -\frac{m_p}{\tau_p} (\mathbf{V}^{(k)} - \mathbf{u}_{f@p}) \text{ avec } \tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\nu_f} \quad (1.47)$$

$\tau_p$  est le temps de relaxation des particules et représente le temps nécessaire à une particule pour atteindre sa vitesse terminale. Les équations Lagrangiennes qui régissent le mouvement d'une particule isolée sont alors :

$$\frac{d\mathbf{X}^{(k)}(t)}{dt} = \mathbf{V}^{(k)}(t) \quad (1.48)$$

$$\frac{d\mathbf{V}, i^{(k)}(t)}{dt} = -\frac{1}{\tau_p} (\mathbf{V}^{(k)} - \mathbf{u}_{f@p}) \quad (1.49)$$

Il peut être complexe d'évaluer la vitesse non perturbée  $\mathbf{u}_{f@p}$  si le couplage inverse (modification de la vitesse du fluide par la phase dispersée) est pris en compte (Vermorel et al. (2003)). Dans la présente étude, ce

phénomène n'est pas pris en compte si bien que la vitesse du fluide « vu » par les particules est parfaitement définie et est calculée par interpolation du champ de vitesse fluide à la position  $\mathbf{X}^{(k)}$  :

$$\mathbf{u}_{f@p} = \mathbf{u}_f(\mathbf{X}^{(k)}, t) \quad (1.50)$$

### 1.2.2 Physique des écoulements gaz-particules en THI

Le nombre adimensionnel de Stokes caractérise la capacité des particules à suivre les variations de l'écoulement fluide, il est défini comme le rapport du temps de relaxation des particules par rapport à un temps caractéristique de la turbulence. Classiquement, ce temps est, soit le temps lagrangien  $\tau_f^t$ , soit le temps de Kolmogorov  $\tau_K$ , les nombres de Stokes correspondants sont :

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_f^t} \quad (1.51)$$

$$St_K = \frac{\tau_p}{\tau_K} \quad (1.52)$$

Si le nombre de Stokes est petit, les particules réagissent rapidement aux variations du fluide. S'il est grand, les particules ne sont pas sensibles à la turbulence.

#### Théorie de Tchen-Hinze en régime stationnaire et modification de Deutsch-Simonin

En THI stationnaire, la relation d'équilibre de Tchen-Hinze (Tchen (1947), Hinze (1975)) permet, sous certaines hypothèses, de relier l'énergie d'agitation des particules  $q_p^2$ ,

$$q_p^2 = \frac{1}{2} \{ \mathbf{V}^{(k)} \cdot \mathbf{V}^{(k)} \} \quad (1.53)$$

où  $\{.\}$  est la moyenne de quantités lagrangiennes sur l'ensemble du domaine,

$$\{ \Phi^{(k)} \} = \frac{1}{N_p} \sum_{k=1}^{N_p} \Phi^{(k)} \quad (1.54)$$

à l'énergie turbulente du fluide  $q_f^2$  selon :

$$q_{fp} = 2q_f^2 \frac{1}{1 + St} \quad (1.55)$$

$$2q_p^2 = q_{fp} \quad (1.56)$$

où la covariance fluide-particule  $q_{fp}$  est définie par :

$$q_{fp} = \{ \mathbf{V}^{(k)} \cdot \mathbf{u}_f(\mathbf{X}_p^{(k)}) \} \quad (1.57)$$

Les hypothèses permettant d'obtenir les relations (1.55)-(1.56) sont : celles permettant de considérer seulement la traînée de Stokes comme force extérieure agissant sur les particules ( $d_p < \eta_K$ ,  $Re_p \ll 1$ ), et une hypothèse supplémentaire : « durant son mouvement, la particule est toujours environnée des mêmes éléments



fluides. » Cette hypothèse de non glissement relatif est vérifiée à la condition d'une très faible vitesse relative particule-fluide  $\mathbf{V}^{(k)} - \mathbf{u}_f$  (de l'ordre de  $\eta_K/\tau_K$  d'après Hinze (1975)).

Deutsch et Simonin (1991), Deutsch (1992) ne supposent plus que chaque particule suit le même élément fluide et introduisent l'énergie du fluide « vu »  $q_{f@p}^2$  et la fonction d'autocorrélation lagrangienne du fluide le long de la trajectoire de la particule,

$$q_{f@p}^2 = \frac{1}{2} \{u_{f@p,i} u_{f@p,i}\} \quad (1.58)$$

$$\mathcal{R}_{f@p,ij}^L(\tau, \mathbf{X}_p(t), t) = u_{f@p,i}(\mathbf{X}_p(t), t) u_{f@p,i}(\mathbf{X}_p(t + \tau), t + \tau) \quad (1.59)$$

Le temps lagrangien de la turbulence le long de la trajectoire des particules  $\tau_{f@p}^t$  est défini par l'intégrale de  $\mathcal{R}_{f,ij}^L(t)$ . L'extension de la théorie de Tchen-Hinze relie  $q_{f@p}^2$  à l'énergie des particules selon :

$$q_{fp} = 2q_{f@p}^2 \frac{\tau_{f@p}^t}{\tau_{f@p}^t + \tau_p} \quad (1.60)$$

$$2q_p^2 = q_{fp} \quad (1.61)$$

Cela conduit à la définition d'un nouveau nombre de Stokes  $St' = \tau_p/\tau_{f@p}^t$ . Asymptotiquement,  $\tau_{f@p}^t$  tend vers le temps lagrangien du fluide  $\tau_f^t$  pour des particules légères ( $St \rightarrow 0$ , cas limite du traceur) et vers le temps eulérien de la turbulence  $T_f^E$  pour des particules lourdes (particule immobile dans la turbulence). Toutefois l'évolution de  $\tau_{f@p}^t$  en fonction du nombre de Stokes n'est pas monotone (Février (2000)). Les grandeurs  $q_{f@p}^2$  et  $\tau_{f@p}^t$  étant a priori inconnues, le modèle de Tchen-Hinze (éq. 1.55-1.56) peut fournir une première évaluation de  $q_p^2$ .

Par ailleurs, la prise en compte de Reynolds particulaire est assurée par l'introduction d'un temps de traîné moyen (Deutsch et Simonin (1991)).

### Phénomènes physiques liés au comportement collectif des particules

De nombreux phénomènes physiques interviennent dans les écoulements à phase dispersée. Les fractions volumique et massique moyennes de particules  $\langle \alpha_p \rangle$  et  $\langle \phi_p \rangle$  sont définies par :

$$\langle \alpha_p \rangle = \frac{N_p \frac{1}{6} \pi d_p^3}{\Delta x^3} \quad (1.62)$$

$$\langle \phi_p \rangle = \langle \alpha_p \rangle \frac{\rho_p}{\rho_f} \quad (1.63)$$

où  $N_p$  est le nombre total de particules dans le domaine. Lorsque  $\alpha_p > 10^{-3}$ , les collisions inter-particulaires doivent être prises en compte. En écoulement fluide anisotrope, le rôle principal des collisions est la redistribution des contraintes d'où une réduction de l'anisotropie pour la phase particulaire. En THI, des collisions élastiques (qui conservent l'énergie des particules) peuvent avoir un effet sur le temps lagrangien de la turbulence du fluide « vue »  $\tau_{f@p}^t$ , d'où une modification de l'énergie moyenne des particules (Laviéville (1997)).

Par l'intermédiaire de la force de traînée, les particules sont agitées par le fluide. Le principe de conservation

de l'énergie impose que les particules prélèvent ou transmettent le même montant total d'énergie au fluide, mais pas forcément aux mêmes échelles. Considérons l'énergie totale des particules par unité de volume,

$$\langle \alpha_p \rangle \rho_p q_p^2 \quad (1.64)$$

ainsi que l'énergie totale du fluide par unité de volume,

$$(1 - \langle \alpha_p \rangle) \rho_f q_f^2 \quad (1.65)$$

Pour un faible chargement volumique ( $\langle \alpha_p \rangle \ll 1$ ), le rapport entre les énergies des particules et du fluide peut être évalué à l'aide de l'équilibre de Tchen-Hinze et vaut :

$$\langle \phi_p \rangle \frac{1}{1 + St} \quad (1.66)$$

Si la fraction massique  $\langle \phi_p \rangle$  est faible, alors les particules n'ont pas suffisamment d'énergie pour influencer la phase fluide, le couplage inverse devient négligeable. Cette analyse suppose que les particules étaient agitées par la turbulence. Dans le cas d'un très grand nombre de Stokes, les particules ne sont plus agitées et se comportent comme des obstacles au milieu du fluide (Ferrante et Elghobashi (2003)).

Vu les faibles fractions volumiques considérées ( $\alpha_p < 10^{-6}$ ), il est possible de négliger les collisions inter-particulaires. Le couplage inverse n'est lui aussi pas pris en compte.

## 1.3 Mise en œuvre des simulations DNS/DPS

### 1.3.1 Méthodes numériques

Les simulations Euler-Lagrange ont été réalisées avec le code de simulation numérique NTMIX3D diphasique développé par le Centre de Recherche en Combustion Turbulente dont fait parti l'IMFT, ainsi que le Cerfacs, l'EM2C et l'Institut Français du Pétrole. Ce code résoud directement les équations de Navier-Stokes compressibles pour le fluide dans une formulation adimensionnelle qui fait apparaître le nombre de Reynolds acoustique,

$$Re_{ac} = \frac{c_{ref} L_{ref}}{\nu_{ref}} \quad (1.67)$$

basé sur la vitesse du son  $c_{ref}$ , une longueur et une viscosité de référence.

La simulation numérique directe nécessite des méthodes numériques d'ordre élevé, avec un minimum de viscosité numérique. La discrétisation des équations continues suit la méthode des différences finies sur un maillage cartésien. les dérivées spatiales sont obtenus par un schéma compact d'ordre 6 dit « quasi-spectral » (Lele (1992)). L'intégration temporelle est effectuée par un schéma explicite Runge-Kutta d'ordre 3. En ce qui concerne la partie Lagrangienne du code, la vitesse du fluide vue par chaque particule est obtenue par interpolation par des polynômes de Lagrange à l'ordre 4, tandis que l'avancement en temps est assuré par un Runge-Kutta d'ordre 3 comme pour le fluide. Les équations sont résolues sous forme adimensionnelle. Le pas de temps est déterminé par trois critères classiques de stabilité : le nombre de

Fourier pour la partie diffusive du fluide et deux nombres de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) pour la partie convective, l'un associé au fluide et l'autre aux particules. NTMIX3D est totalement parallélisé avec MPI suivant une méthode de décomposition de domaine.

Son noyau numérique a été validé par Boughanem et Trouvé (1996) pour sa partie monophasique, et par de nombreuses études en écoulements diphasiques (Albrecht (2001), Vermorel et al. (2003), Paoli et al. (2004)). Aucune modification du code de calcul NTMIX3D n'a été apportée dans cette étude. Seule la partie post-traitement des résultats de simulations est adaptée pour l'analyse des résultats particulières en terme de champs eulériens mésoscopiques (Chap. 3).

### 1.3.2 Simulation numérique directe d'une THI décroissante

Le champ initial suit le spectre d'énergie de Passot et Pouquet (1987). Ce spectre dépend de deux paramètres : la vitesse rms  $u'_f$  et le nombre d'onde le plus énergétique  $k_e$  :

$$E_f(k) = \frac{16u_f'^2}{k_e} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left[ \frac{k}{k_e} \right]^4 \exp \left[ -2 \left( \frac{k}{k_e} \right)^2 \right] \quad (1.68)$$

La distribution de l'énergie est indépendante du nombre de Reynolds et l'essentiel de l'énergie est concentré autour de  $k_e$ , les petites échelles sont pratiquement inexistantes. Ce type de spectre initial est satisfaisant pour des simulations à faible nombre de Reynolds ( $Re_t < 100$ , Boughanem et Trouvé (1996)). Pour des  $Re_t$  plus importants, le spectre de Von Karman (voir Hinze (1975)) permet une initialisation « plus physique » en distribuant une partie de l'énergie à des échelles plus petites.

Un temps d'adaptation des champs ainsi initialisés par un spectre synthétique est nécessaire, car la turbulence générée ne vérifie pas l'équation de conservation de la quantité de mouvement, ni l'équilibre du spectre d'énergie (au sens de Kolmogorov). Le délai est d'environ un temps turbulent (Boughanem et Trouvé (1996)). Le temps turbulent caractéristique est le temps de retournement des grandes échelles ( $L_f^f/u'_f$ ).

Les équations de Navier-Stokes sont résolues par des méthodes numériques adéquates. Cette simulation directe implique des contraintes en terme de maillage et de pas de temps. Toutes les échelles générées doivent être résolues, le nombre de grandes échelles présentes dans le domaine doit être suffisant pour que l'écoulement n'ait pas de direction privilégiée (isotropie), ce qui impose

$$\eta_K \geq C_2 \Delta x \quad (1.69)$$

$$L_f^s \leq \frac{L_D}{C_1} \quad (1.70)$$

où  $C_1 \approx 8$  et  $C_2 \approx 1/2$  pour le code de calcul utilisé (Boughanem et Trouvé (1996)). Le rapport de ces deux critères donne la limite supérieure du nombre de Reynolds turbulent, qu'il est possible de résoudre par la simulation directe sur un maillage régulier comportant  $(NX)^3$  nœuds :

$$Re_t \leq \left( \frac{NX}{C_1 C_2} \right)^{\frac{4}{3}} \quad (1.71)$$

étape	machine	nombre de processeurs	temps total (en heures)
calcul fluide	IBM SP4	1	< 10
calcul diphasique	IBM SP4	64	1100
création des champs eulériens	IBM SP4	64	90
tests des modèles	PC intel 1,8 GHz	1	1,5

TAB. 1.1 – Coûts numériques des différentes étapes d’un cas de calcul (maillage  $64^3$ ,  $8 \cdot 10^7$  particules, 10 instants sauvegardés).

Ainsi limitées par la puissance de stockage et de calcul des ordinateurs actuels, la simulation numérique directe ne peut traiter que des écoulements à faible nombre de Reynolds. Pour un maillage  $64^3$ , le Reynolds turbulent maximum est de 40,3 à titre d’information.

### 1.3.3 Méthodologie et coût numérique des calculs diphasiques

Le domaine de calcul est cubique de côté  $L_D = 2\pi$ , le maillage cartésien, régulier est constitué de  $64^3$  nœuds. Les conditions aux limites sont périodiques. L’écoulement est turbulent, homogène, isotrope et décroissant.

Un premier calcul monophasique est effectué. Lorsque la turbulence est établie, les particules sont introduites dans le système. La simulation diphasique Euler-Lagrange est effectuée sur plusieurs processeurs en parallèle. Les champs fluide et particules sont sauvegardés tous les demi-temps de retournement des grandes échelles (temps calculé à l’injection des particules). Le post-traitement a lieu en deux temps : obtention des champs eulériens à partir des résultats lagrangiens de particules puis tests a priori des différents modèles eulériens. Le tableau 1.1 regroupe les différents temps et coûts de calcul typiques des différentes étapes d’une simulation avec 80 millions de particules. La taille des fichiers de résultats lagrangiens est à peu près de 10 Go par instant de simulation sauvegardé. Ces fichiers ont donc été effacés après le posttraitement de chaque cas de simulation. Les champs eulériens particuliers pèsent quant à eux 10 Mo et ont été conservés. Les calculs ont été effectués sur la machine scalaire de l’IDRIS, le centre de calcul du CNRS.

### 1.3.4 Description et validation des cas simulés

#### Champs turbulents

Les simulations numériques directes ont été réalisés en suivant la méthodologie du paragraphe 1.3.2 pour deux écoulement turbulents différents (Tab. 1.2). Le cas A correspond à un très petit nombre de Reynolds, alors que le nombre de Reynolds du cas B est maximum pour une DNS compte tenu de la résolution du maillage ( $64^3$  nœuds). Lorsque la turbulence est pleinement développée (après environ un temps de retournement des grandes échelles), les particules sont injectées dans la turbulence à un temps  $t' = 4,233$  pour le cas A et  $t' = 5,889$  pour le cas B en variables adimensionnées. Ces instants sont notés  $t_0$ , par la suite les évolutions temporelles seront exprimées en fonction de  $t = t' - t_0$ .

quantité	cas A	cas B
Nombre de Reynolds acoustique $Re_{ac}$	200	608
Vitesse RMS initiale $u'_f$	0,1	0,1
Longueur d'onde du spectre de Passot-Pouquet $L_e$	2,2	2

TAB. 1.2 – Paramètre numérique,  $NX = 64$ ,  $L_D = 2\pi$

quantité	équation	cas A	cas B
$Re_t$	(1.26)	13,6	40,2
$q_f^2$	(1.10)	0,00937	0,0107
$\varepsilon_f$	(1.23)	0,0108	$7,51 \cdot 10^{-4}$
$u'_f$	$= \sqrt{\frac{2}{3}q_f^2}$	0,0790	0,0845
$L_f^f$	(1.16) ou (1.25)	0,861 ou 0,458	0,781 ou 0,804
$L_f^g$	(1.17)	0,455	0,364
$\lambda_f^f$	(1.18)	0,97	0,74
$\lambda_f^g$	(1.19)	0,70	0,55
$\eta_K$	(1.28)	0,104	0,0493
$T_f^E$	$= L_f^f / u'_f$	10,8	9,51
$\tau_K$	(1.29)	2,15	1,48
$\tau_f^t$	(1.33)	4,19	6,88

TAB. 1.3 – Caractéristiques de la turbulence à l'instant de l'introduction des particules (variables adimensionnelles)

Les caractéristiques de la turbulence à l'injection des particules sont reportées dans le tableau 1.3. Les longueurs intégrales et les échelles de Taylor ont été mesurées à partir des fonction d'autocorrélations eulériennes longitudinale et transversale du fluide  $f$  et  $g$ . L'évaluation de l'échelle intégrale  $L_f^f$  à partir de  $q_f^2$  et  $\varepsilon_f$  donne un résultat similaire pour le cas B. Par contre pour le cas A, le modèle sous-estime la longueur intégrale de quasiment 50%. Cet écart est dû au très faible nombre de Reynolds de l'écoulement A ( $Re_t = 13,6$ , basé sur la longueur intégrale mesuré avec les fonctions d'autocorrélation, éq. 1.16). On peut remarquer que les échelles de Taylor sont peu différentes des échelles intégrales, cela est caractéristique des écoulements à faible nombre de Reynolds où même les plus grandes échelles contribuent de manière non négligeable à la dissipation totale de l'énergie. Ces échelles de Taylor ne seront pas réutilisées par la suite. Les spectres d'énergie cinétique turbulente à cet instant sont présentés sur la Fig. 1.2. Dans les deux cas, le plus grand nombre d'onde simulé est supérieur à l'inverse de l'échelle de longueur de Kolmogorov. L'essentiel de l'énergie turbulente est contenu dans les plus grandes échelles et le niveau du spectre diminue très vite aux grands nombres d'onde. Le nombre de Reynolds des écoulements simulés étant faible, il n'existe pas de séparation entre les échelles énergétiques et les échelles où la dissipation visqueuse a lieu. C'est pourquoi le spectre d'énergie turbulente ne présente pas de zone inertielle ( $E_f(k) \propto k^{-\frac{5}{3}}$ ).

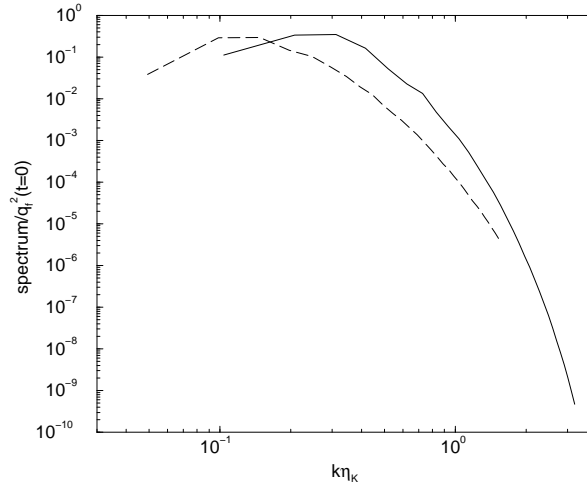


FIG. 1.2 – Spectre de l'énergie cinétique du fluide à l'instant  $t = 0$ . Ligne continue : cas A ; ligne pointillée : cas B.

La comparaison des fonctions d'autocorrélation transversale  $g(r)$  mesurées ou évaluées avec la relation de Howarth et Karman permet d'évaluer l'isotropie de la turbulence simulée (Fig. 1.3). Dans le cas B, la relation de Howarth et Karman prédit bien la fonction  $g(r)$ . Alors que dans le cas A, les deux courbes sont superposées seulement pour  $r < 0, 2L_D$ .

La fonction densité de probabilité des vitesses fluides suit une distribution gaussienne (Fig. 1.4) à l'instant d'injection des particules  $t = 0$ . Les facteurs de dissymétrie et d'aplatissement sont en accord avec les mesures expérimentales :  $S_{\dot{u}_f}$  est de -0,55 et -0,54 et  $F_{\dot{u}_f}$  vaut 4,1 et 3,6 dans les cas A et B à  $t = 0$ .

L'évolution temporelle des longueurs intégrales et de Kolmogorov est indiqué sur la Fig. 1.5a. Les deux critères de résolution spatiale de la turbulence (éq. 1.69 et 1.70) sont satisfaits à chaque instant de simulation. L'échelle intégrale diminue avec le temps, alors que l'échelle de Kolmogorov suit une évolution contraire, d'où une décroissance uniforme du nombre de Reynolds turbulent  $Re_t$  (Fig. 1.5b). En fin de simulation, les Reynolds considérés sont très faibles (4,78 et 11,9 dans les cas A et B). Pour des critères de temps de calcul lié à la résolution de la phase particulaire (un nombre minimum de particules par cellule de calcul est nécessaire pour mesurer les champs eulériens mésoscopiques), il n'a pas été possible de simuler des turbulences plus fortes qui auraient nécessitées l'utilisation d'un maillage plus fin.

L'énergie turbulente diminue logiquement avec le temps (Fig. 1.6a). A la fin des simulations, elle représente 16,7% et 20,3% de l'énergie turbulente à l'instant d'injection des particules dans les cas A et B, respectivement. La décroissance temporelle de  $q_f^2$  est compatible avec une loi en  $t^{-\frac{5}{2}}$  caractéristique d'une THI à faible nombre de Reynolds turbulent où les effets de transport inertiel inter-échelle d'énergie sont faibles (voir paragraphe 1.1.3). L'objectif de ce travail est l'analyse de champs eulériens particulaires. Cette analyse utilise les schémas numériques du code NTMIX3D pour mesurer les différents termes des équations de transports mésoscopiques. L'un des seuls moyens de s'assurer de la validité de ses mesures est de vérifier que les différents termes ferment les équations de transport, c'est à dire que la somme des termes de gauche est égale

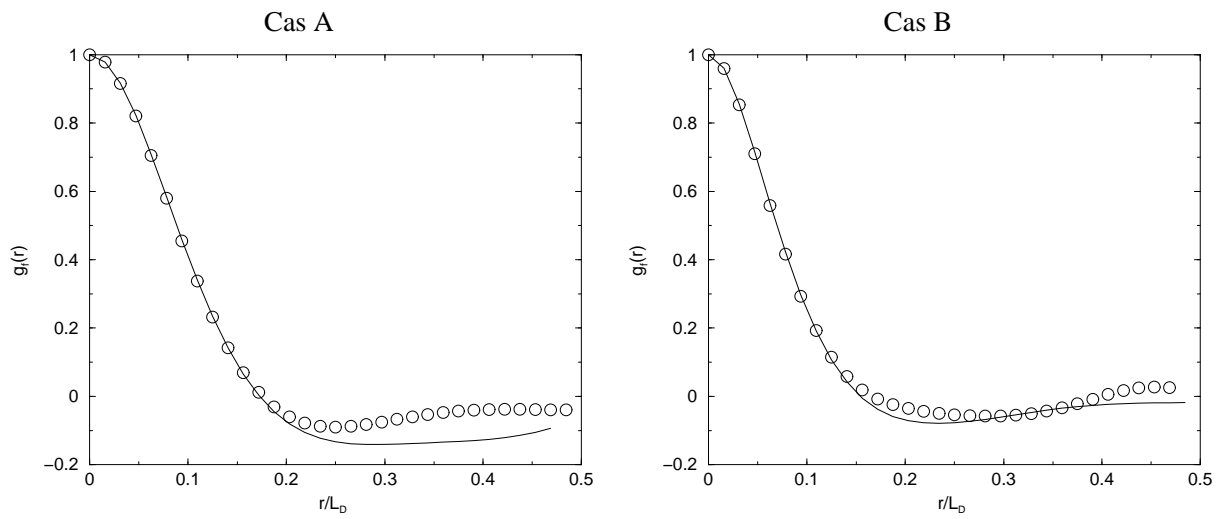


FIG. 1.3 – Comparaison des fonctions d'autocorrélation transversale  $g(r)$  mesurées (cercles) et obtenues par la relation de Howarth et Karman (éq. 1.15) avec la fonction d'autocorrélation longitudinale mesurée  $f(r)$  (lignes) à l'instant d'injection des particules  $t = 0$ .

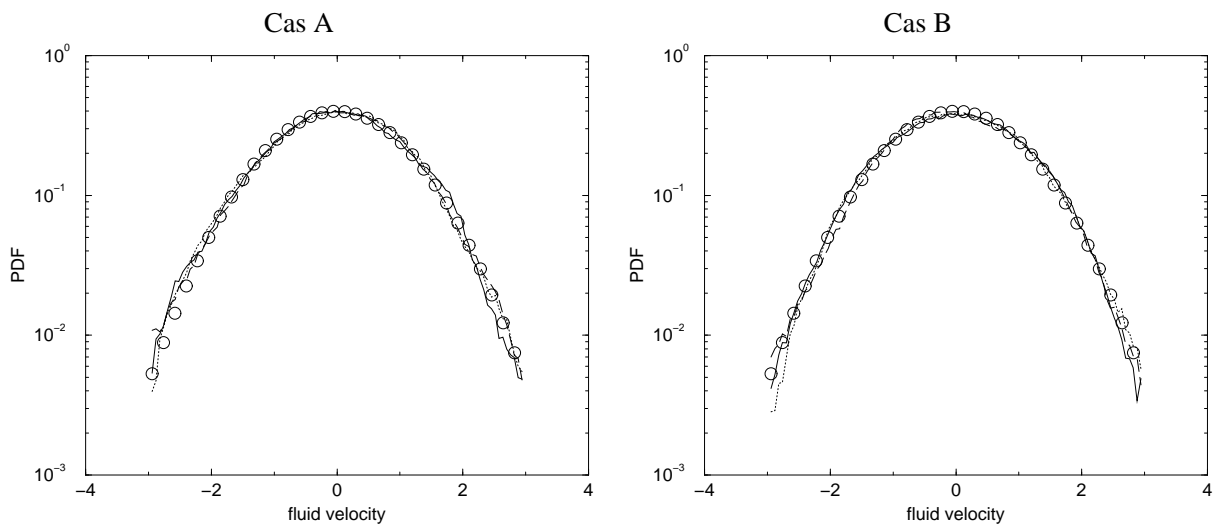


FIG. 1.4 – PDF des vitesses du fluide ( $u_{f,1}$  : ligne continue ;  $u_{f,2}$  ligne pointillée ;  $u_{f,2}$  ligne tiretée) normalisées par la variance. Gaussienne de même écart-type à l'instant d'injection des particules  $t = 0$ .

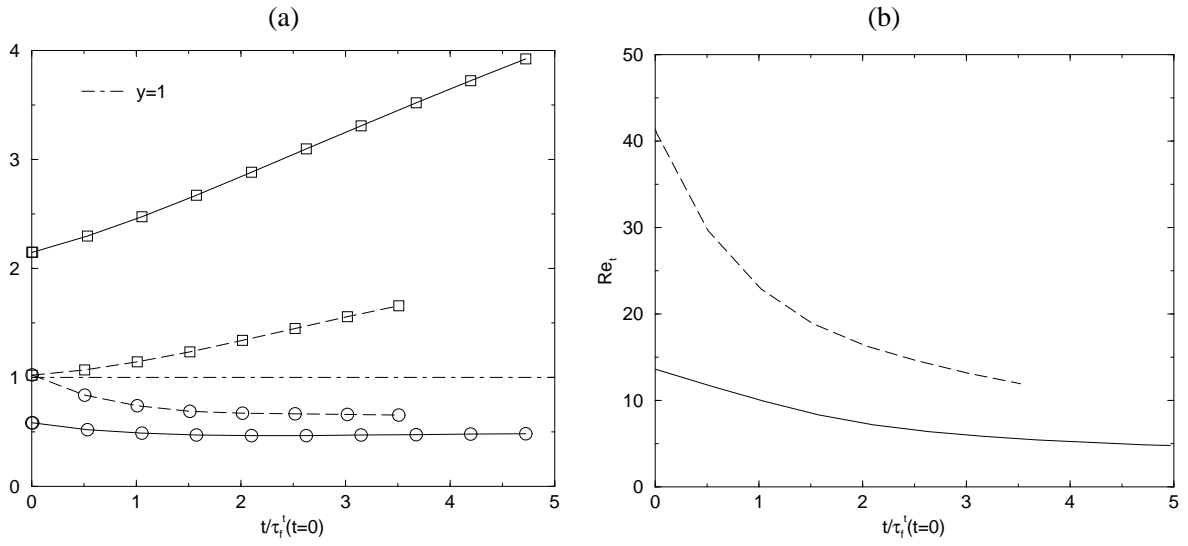


FIG. 1.5 – (a) Evolution des longueurs turbulentes caractéristiques : échelle intégrale longitudinale (éq. 1.25) divisée par  $L_D/C_1$  ( $\circ$ ) et échelle de Kolmogorov (éq. 1.28) divisée par  $C_2\Delta x$  ( $\square$ ). Ligne continue : cas A ; ligne pointillée : cas B.  $C_1 = 8$  ;  $C_2 = 1/2$ . (b) Evolution du Reynolds turbulent ( $Re_t = (L_f^f/\eta_K)^{4/3}$ ).  $L_f^f$  est calculée par l'équation (1.25) et  $\eta_K$  par l'équation (1.28). Ligne continue : cas A ; ligne pointillée : cas B.

à la somme des termes de droite. Afin d'évaluer la « justesse » des méthodes numériques employées, les deux termes du bilan de l'énergie turbulente moyenne  $q_f^2$  en THI (éq. 1.22) sont présentés sur la figure 1.6b. En THI non forcée, l'énergie turbulente du fluide diminue continuellement sous l'effet de la viscosité. Pour les deux écoulements, l'équation bilan de  $q_f^2$  est correctement fermée avec des erreurs relatives moyennes de 2% et 1%. La fermeture du bilan moyen de l'énergie turbulente est un élément (parmi d'autres, voir Boughanem et Trouvé (1996) pour la validation complète de la partie fluide du code NTMIX3D) permettant aussi de valider la résolution des équations de Navier-Stokes.



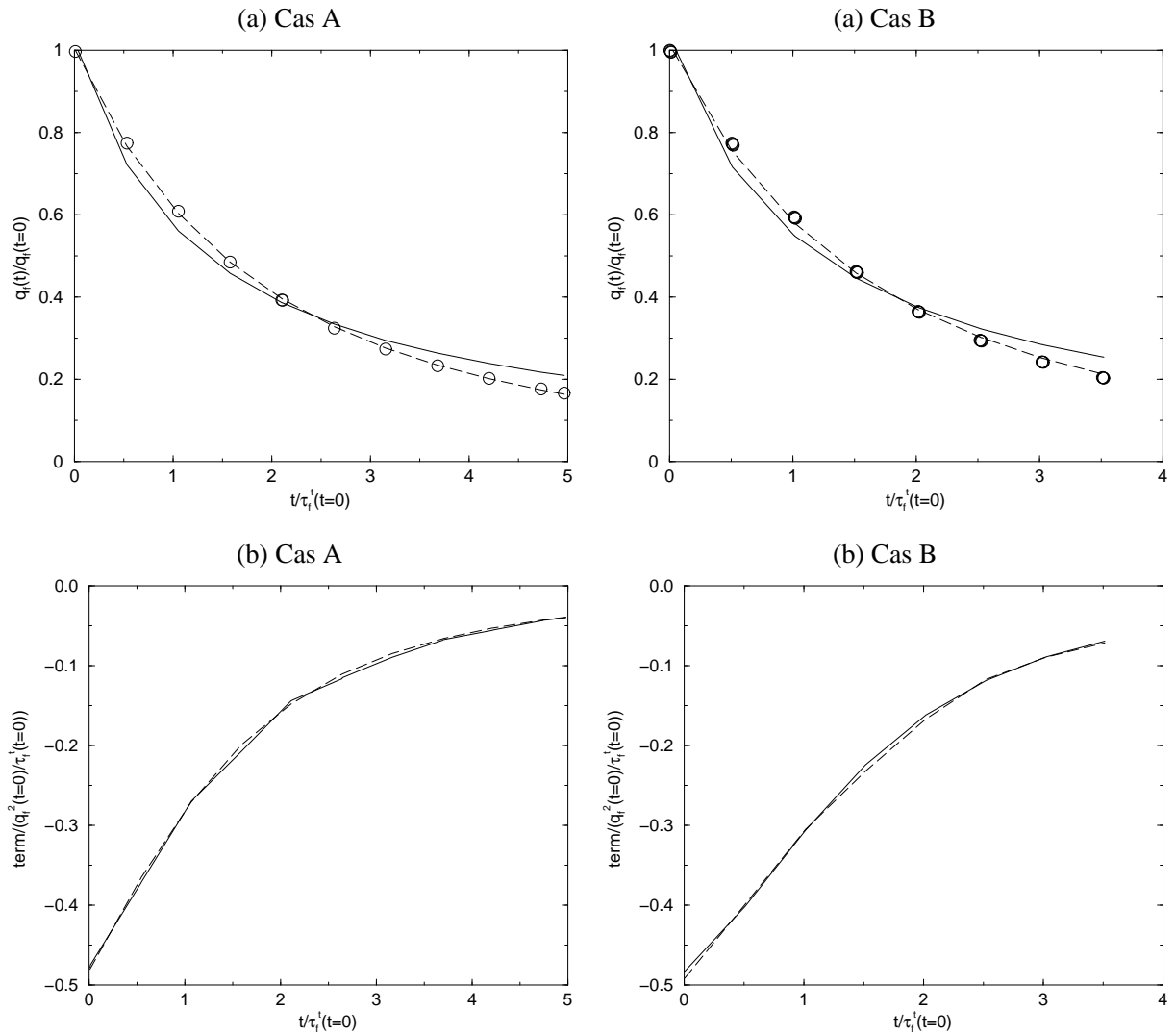


FIG. 1.6 – (a) Evolution temporelle de l'énergie turbulente  $q_f^2$  (cercles). Comparaison avec les lois d'évolution en puissance du temps  $t$  :  $(a+bt)^{-1}$  (ligne continue) et  $(a+bt)^{-5/2}$  (ligne tiretée). Les coefficients  $a$  et  $b$  sont obtenus par régression. (b) Bilan d'énergie cinétique turbulente (éq. 1.22). Ligne continue :  $\frac{dq_f^2}{dt}$  ; ligne pointillée :  $-\varepsilon_f$ .

Cas	initialisation	$\tau_p$	$St = \frac{\tau_p}{\tau_f^t}$	$St_K = \frac{\tau_p}{\tau_K}$	$N_p$
A1	$\mathbf{V} = \mathbf{u}_f$	0,367	0,042	0,17	$10^7$
A2	$\mathbf{V} = \mathbf{u}_f$	4,67	1,1	2,2	$10^7$
A2'	$\mathbf{V} = \mathbf{u}_f$	4,67	1,1	2,2	$8.10^7$
B1	$\mathbf{V} = \mathbf{u}_f$	1,46	0,21	1	$8.10^7$
B2	$\mathbf{V} = \mathbf{u}_f$	3,22	0,47	2,2	$8.10^7$
B3	$\mathbf{V} = \mathbf{u}_f$	7,58	1,1	5,1	$8.10^7$
B3b	$\mathbf{V} = \mathbf{0}$	7,58	1,1	5,1	$10^7$
$B_\infty$	$\mathbf{V} = \mathbf{u}_f$	$\infty$	$\infty$	$\infty$	$10^7$

TAB. 1.4 – Caractéristiques de la phase particulaire à l’injection des particules

### Caractéristiques de la phase particulaire

Les simulations diphasiques ont été réalisées pour les deux champs turbulents (notés A et B) avec différents types de particules caractérisées par leur nombre de Stokes (A1, A2, B1, . . . ,  $B_\infty$ , voir Tab. 1.4). Les différents  $St$  ont été obtenus en variant la masse volumique particulaire  $\rho_p$  (changement du temps de relaxation  $\tau_p$ ). Un régime de concentration préférentielle est attendu dans tous les cas de simulations.

Les cas à faible nombre de Reynolds (A1 et A2) ont servi à la validation des simulations à deux fluides par comparaison avec les résultats obtenus par simulation lagrangienne (Kaufmann et al. (2006b)). L’effet du nombre de particules simulées sur les résultats sera évalué par comparaison des cas A2 et A2'. Les cas B2 et B3 sont équivalents au cas A2 selon que  $St_K$  ou  $St$  est conservé pour le Reynolds plus important. Les temps de dissipation  $\tau_f^t$  et de Kolmogorov augmentent avec le temps (Fig. 1.7). Toutefois, les échelles turbulentes de temps n’évoluant pas dans les mêmes proportions pour les deux turbulences, l’effet du nombre de Reynolds sur l’écoulement particulaire pour un Stokes initial donné sera difficilement quantifiable. Le Stokes des différents cas simulés diminuent avec le temps (Fig. 1.8). A la fin des simulations des cas A et B (après 5 et 3,5 temps turbulent des macro-échelles initiaux  $\tau_f^t(t=0)$ ), les nombres de Stokes basés sur l’échelle de Kolmogorov  $St_K$ , respectivement  $St$  sont 0,29 et 0,37, respectivement 0,49 et 0,7 fois le nombre de Stokes initial.

Deux types d’initialisation sont testés pour les cas à  $Re_t = 40,2$ . Les particules sont initialisées avec la vitesse du fluide à leur position (cas B3) ou au repos (cas B3b). Quelque soit l’initialisation, le champ initial de vitesse particulaire est continu. Le cas  $B_\infty$  est le cas limite de particules évoluant dans le vide sans aucune interaction extérieure ou entre elles. Dans tous ces cas de simulations, le Reynolds particulaire est inférieur à 0,05 (Tab. 1.5), ce qui justifie l’utilisation d’un modèle de traînée de Stokes.

Le nombre de particules simulées est choisi suffisamment grand pour obtenir une convergence statistique des champs eulériens obtenus à partir des résultats de simulations lagrangiennes (voir Chap. 3).

En l’absence de collisions interparticulaires inélastiques, l’équation bilan de l’énergie d’agitation des particules  $q_p^2$  s’obtient en multipliant l’équation de mouvement d’une particule (équ.1.41) par la vitesse de

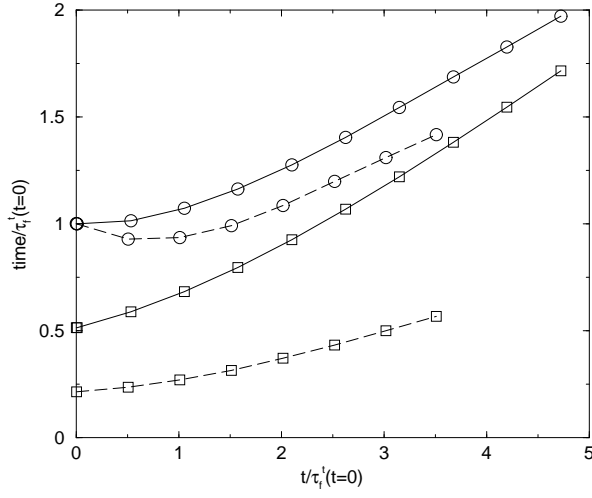


FIG. 1.7 – évolution des temps turbulents caractéristiques : temps Lagrangien  $\tau_f^t$  (éq. 1.33) (○) et échelle de temps de Kolmogorov (éq. 1.29) (□). Ligne continue : cas A ; ligne pointillée : cas B.

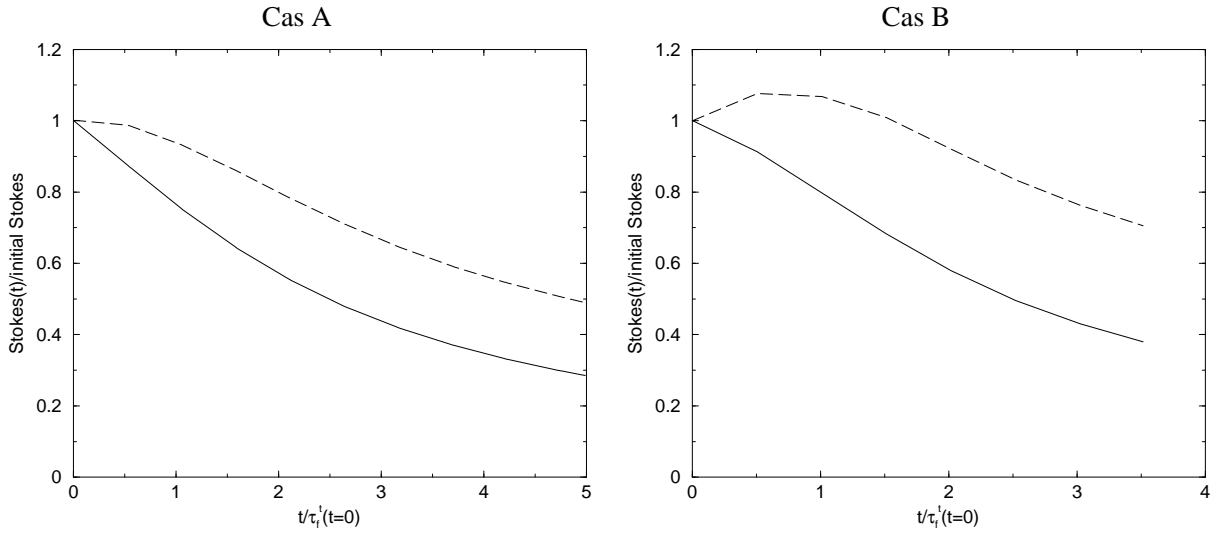


FIG. 1.8 – Evolution temporelle des nombres de Stokes pendant la simulation.  $St_K/St_K(t=0)$  : ligne continue ;  $St/St(t=0)$  : ligne pontillée.

Cas	A1	A2	B1	B2	B3	B3b	B $\infty$
$Re_p$	$7,6 \cdot 10^{-4}$	$5,0 \cdot 10^{-2}$	$< 2 \cdot 10^{-2}$	$1,7 \cdot 10^{-2}$	$2,5 \cdot 10^{-2}$	$4,1 \cdot 10^{-2}$	$4,6 \cdot 10^{-2}$

TAB. 1.5 – Valeurs maximales du nombre de Reynolds particulaire  $Re_p$  (éq. 1.45) moyen (sur l'ensemble des particules) atteintes durant les différentes simulations.

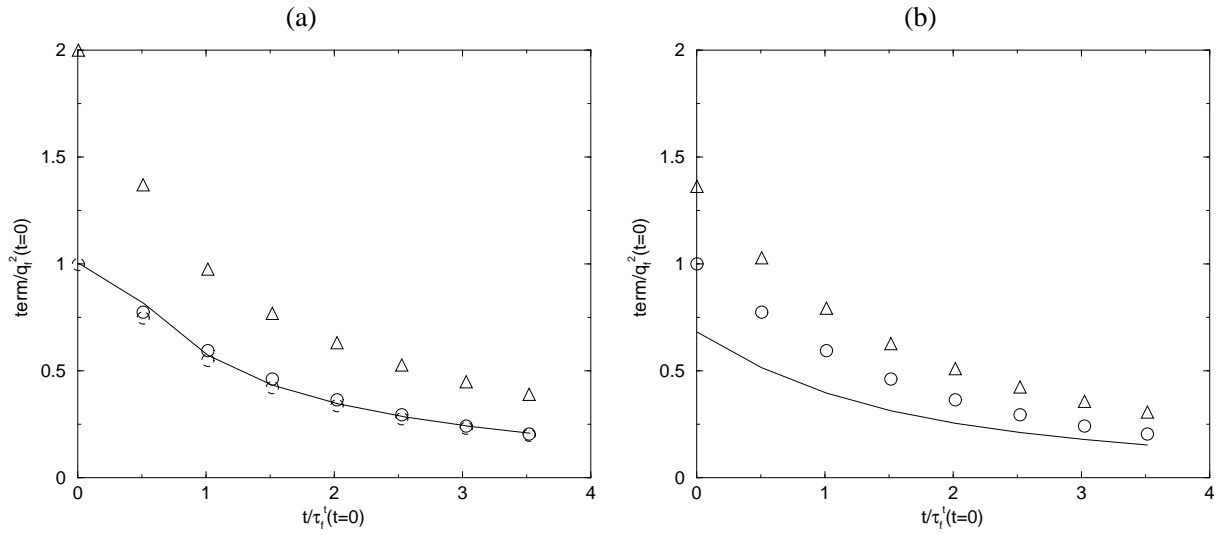


FIG. 1.9 – (a) évolution temporelle des grandeurs macroscopiques : ligne continue : énergie des particules  $q_p^2$  ; cercles : énergie turbulente  $q_f^2$  ; cercles en pointillés : énergie du fluide vu par les particules  $q_{f@p}^2$  ; triangles : covariance fluide-particule  $q_{fp}$ . (b) Prédiction du modèle de Tchen-Hinze modifié (éq. 1.61 et 1.61), où  $q_{f@p}^2$  et  $\tau_{f@p}^i$  sont approximés par  $q_f^2$  et  $\tau_f^i$  (éq. 1.33). Cas B2.

la particule et en la moyennant sur l'ensemble de la phase particulaire. L'énergie cinétique moyenne des particules évolue suivant :

$$\frac{dq_p^2}{dt} = -\frac{1}{\tau_p}(2q_p^2 - q_{fp}) \quad (1.72)$$

L'évolution des énergies turbulentes et particulaires et de la covariance fluide-particule est présentée pour le cas de simulation B2 (Fig 1.9a). A l'initialisation, la vitesse de chaque particule est égale à la vitesse du fluide à la position de la particule ( $q_p^2 = q_{f@p}^2 = 2q_{fp}$ ). De plus les particules sont réparties de manière aléatoire dans le domaine de calcul, l'énergie du fluide vue par les particules  $q_{f@p}^2$  est bien égal à l'énergie turbulente moyenne  $q_f^2$ . Malgré les effets de concentration préférentielle, la valeur de  $q_{f@p}^2$  reste proche de  $q_f^2$  durant l'ensemble de la simulation (-9% maximum). Ceci est en accord avec les résultats en THI forcée de Février (2000), où l'écart entre  $q_{f@p}^2$  et  $q_f^2$  était au maximum de  $\pm 7\%$  selon le nombre de Stokes des particules. L'énergie turbulente du fluide décroît, ce qui entraîne la décroissance de la covariance et de l'énergie des particules  $q_p^2$ . Dans un équilibre de type Tchen-Hinze de la phase particulaire avec la turbulence,  $q_{fp} = 2q_p^2$ , ce qui est bien le cas des calculs initialisés avec  $\mathbf{V}^{(k)}(0) = \mathbf{u}_f(\mathbf{X}^{(k)}(0), 0)$ , mais l'énergie cinétique des particules à l'équilibre vaut  $\frac{1}{1+S}q_{f@p}^2$  selon le modèle de Tchen-Hinze modifié. Dans tous les cas simulés, les particules sont initialement hors équilibre. Les prédictions du modèle d'équilibre dans le cas B2 sont présentées sur la Fig. 1.9b. Les valeurs de  $q_p^2$  et  $q_{fp}$  prédites suivent la même évolution temporelle que les valeurs mesurées : elles diminuent. Dans le cas B2,  $q_p^2 \approx q_f^2$  durant toute la simulation, alors que le modèle à l'équilibre prédit  $q_p^2 = 0,75q_f^2$  en fin de simulation. La phase particulaire reste donc hors équilibre de Tchen-Hinze durant toute la simulation. Ce comportement est sûrement dû à la décroissance de la turbulence simulée : les particules dont le temps de relaxation  $\tau_p (= 0,47\tau_f^i, \text{ à } t = 0, \text{ cas B2})$  est comparable au temps

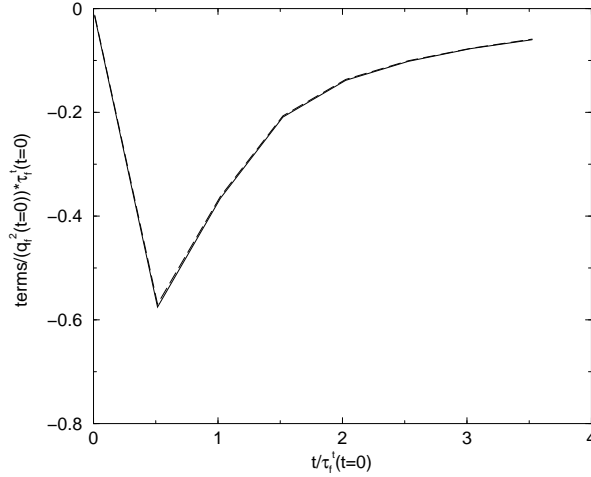


FIG. 1.10 – Bilan d'énergie d'énergie totale particulaire (éq. 1.72). Ligne continue :  $\frac{dq_p^2}{dt}$  ; ligne pointillée :  $\frac{1}{\tau_p}(2q_p^2 - q_f p)$ . Cas B2.

de décroissance de la turbulence  $T_{e_f}$  ( $\approx 2\tau_f^t$ ), n'ont pas le temps nécessaire pour s'adapter à la turbulence. Dans le cas de particules beaucoup plus légères, ( $\tau_p \ll \tau_f^t$ , c'est à dire  $St \ll 1$ ), on peut s'attendre à une meilleure performance du modèle d'équilibre dans une THI décroissante. L'analyse de ces champs eulériens reposera entre autre sur les calculs des différents termes intervenant dans les équations bilans eulériennes particulaires. Il est donc important de vérifier la fermeture des bilans sur les quantités lagrangiennes. Le bilan d'énergie particulaire moyenne  $q_p^2$  (éq. 1.72) est présenté sur la figure 1.10b. Les deux termes de cette équation ne faisant pas intervenir de dérivée spatiale, il est plus facile de fermer ce bilan que celui de l'énergie turbulente  $q_f^2$ . L'erreur relative moyenne est très faible ( $\approx 1\%$ ). On considérera par la suite que les simulations DNS+DPS sont validées.

## 1.4 Conclusion du chapitre

L'approche Euler-Lagrange pour la simulation d'écoulements turbulents diphasiques à phase dispersée est un outil adaptée pour la simulation de petites particules ( $d_p/\eta_K < 1$ ) en interaction avec un champ turbulent. La seule force agissant sur les particules est la traînée ( $\rho_p/\rho_f \gg 1$ ) prise sous la forme d'une traînée de Stokes ( $Re_p \ll 1$ ). Les phénomènes physiques de transfert de quantité de mouvement des particules vers le fluide et de collisions inter-particulaires ne sont pas pris en compte dans l'étude. L'écoulement fluide est caractérisé par un nombre de Reynolds, et l'entraînement des particules par la turbulence par un nombre de Stokes.

Des simulations en turbulence homogène isotrope décroissante sont effectuées pour deux nombres de Reynolds différents (cas A :  $Re_t = 13,6$  et cas B :  $Re_t = 40,2$ ) et plusieurs nombres de Stokes (cas A avec  $St_K = 0,17$  et  $2,2$  et cas B avec  $St_K = 1, 2,2$  et  $5,1$  initialement) pour générer une banque de données de résultats lagrangiens. Des cas annexes ont aussi réalisés pour tester l'influence du nombre de particules

simulées (A2'), la condition initiale de vitesse particulaire (B3b) et l'influence de la force traînée ( $B_{\infty}$ ).

## Chapitre 2

# Approche eulérienne mésoscopique de la phase particulaire

le formalisme eulérien Plusieurs types d'approches eulériennes particulières pouvant être couplés avec une méthode DNS/LES pour le traitement du fluide sont possibles. Les équations eulériennes peuvent être obtenues par filtrage volumique d'une réalisation de l'écoulement diphasique. Ces approches sont efficaces pour des particules légères ( $St_K < 1$ ) qui suivent l'écoulement du fluide (paragraphe 2.1). Des particules plus lourdes présentent un mouvement en partie décorrélé. Pour prendre en compte ce phénomène, Février (2000) introduit le formalisme eulérien mésoscopique (paragraphe 2.2). Les équations eulériennes qui en découlent, sont ensuite filtrées (paragraphe 5.1). Enfin, des modélisations des termes de sous-maillages sont proposés (paragraphe 6.2).

### 2.1 Approches basées sur un filtrage spatial

#### 2.1.1 Principe du filtrage spatial

La grandeur filtrée  $\bar{\phi}$  est obtenue par convolution de la variable  $\phi$  avec un filtre spatial  $G_{\Delta_F}$  sur l'ensemble du domaine de calcul :

$$\bar{\phi} = \int G_{\Delta_F}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\phi(\mathbf{x}')d\mathbf{x}' \quad (2.1)$$

où la longueur caractéristique du filtre est  $\Delta_F$ . Le processus de filtrage est linéaire et commute avec les dérivations spatiale et temporelle :

$$\overline{\phi + A\psi} = \bar{\phi} + A\bar{\psi} \quad (2.2)$$

$$\overline{\frac{\partial \phi}{\partial t}} = \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t} \quad (2.3)$$

$$\overline{\frac{\partial \phi}{\partial x_i}} = \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x_i} \quad (2.4)$$

Afin d'assurer la propriété  $\bar{A} = A$  où  $A$  est une variable ne dépendant pas de la position  $\mathbf{x}$ , le noyau du filtre  $G_{\Delta_F}$  doit satisfaire  $\int G_{\Delta_F}(\mathbf{x})d\mathbf{x} = 1$ . La moyenne d'une grandeur est ainsi conservée par le filtrage. La variation de  $\phi$  à une échelle inférieure à  $\Delta_F$  est  $\phi' = \phi - \bar{\phi}$ . Si la plus petite échelle de variation de  $\phi$  (l'échelle de Kolmogorov  $\eta_K$  si  $\phi = \mathbf{u}_f$ ) est beaucoup plus grande que  $\Delta_F$ , alors  $\phi'$  est nulle. Plus précisément, dans le cas général (hors filtre chapeau dans l'espace spectral),  $G_{\Delta_F}$  n'est pas local dans l'espace spectral. En conséquence,  $\Phi^{TF}(\mathbf{k}) \neq \bar{\Phi}^{TF}(\mathbf{k})$  pour  $|\mathbf{k}| \geq \frac{2\pi}{\Delta_F}$ , si bien que  $\Phi^{TF}(\mathbf{k}) \neq 0$  pour  $|\mathbf{k}| > \frac{2\pi}{\Delta_F}$ . Il n'existe alors pas de séparation entre les grandes échelles et les échelles de sous-maille.

et l'on parle alors de séparation totale des échelles de variations. Dans le cas contraire, le filtrage des termes non-linéaires des équations feront apparaître des termes de sous-maille.

### 2.1.2 Modèle à deux fluides

Cette approche a été initialement développée pour traiter des écoulements liquides chargés en bulles microscopiques par Druzhinin et Elghobashi (1998). Les équations de la phase dispersée du modèle à deux fluides sont obtenues en filtrant les équations du mouvement d'une inclusion (bulle ou particule) isolée sur une échelle de longueur  $\Delta_F = l$ . Cette longueur  $l$  doit être supérieure au diamètre des particules  $d_p$  pour que la moyenne ait un sens, et inférieure à la plus petite échelle de longueur caractéristique du champ de vitesse particulaire afin que la vitesse particulaire dans le volume de filtrage soit unique. Druzhinin et Elghobashi (1999) évaluent cette longueur  $l$  comme étant de l'ordre de la plus petite échelle de l'écoulement fluide  $\eta_K$ . Les équations de conservation de la densité du nombre de particules  $n_p$  et de la vitesse instantanée de la phase particulaire  $u_p$  sont :

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} n_p u_{p,j} = 0 \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial u_{p,i}}{\partial t} + u_{p,j} \frac{\partial}{\partial x_j} u_{p,i} = -\frac{1}{\tau_p} (u_{p,i} - u_{f,i}) \quad (2.6)$$

où  $\mathbf{u}_f$  est la vitesse du fluide obtenue par les équations de Navier-Stokes (avec un terme supplémentaire dû à la traînée en cas de prise en compte du couplage inverse). L'hypothèse fondamentale nécessaire dans la dérivation de l'éq. (2.6) est l'unicité du champ de vitesse des particules  $\mathbf{u}_p$  à l'échelle de longueur  $l$ .

### 2.1.3 Hypothèse d'équilibre pour $St_K \ll 1$

Une solution analytique de l'équation (2.6) peut être obtenue pour des particules ayant un temps de relaxation très inférieur au temps de Kolmogorov ( $St_K \ll 1$ ), le champ de vitesse de la phase particulaire en fonction de grandeurs du fluide telles que le champ de vitesse et ses dérivées spatiales et temporelle (Maxey (1987)) :

$$u_{p,i} = u_{f,i} - \tau_p \frac{D u_{f,i}}{Dt} + O(St_K^2) \quad (2.7)$$

où  $D/Dt$  représente la dérivée le long des trajectoires des particules fluide  $D/Dt = \partial/\partial t + u_{f,j}\partial/\partial x_j$ . La densité du nombre de particules est calculée avec l'équation (2.5). Sans couplage inverse,  $\mathbf{u}_f$  est donnée



par les équations de Navier-Stokes. Cette approche a été validé en THI et en écoulement de canal pour des petits temps de relaxation des particules (Rani et Balachandar (2003)). Lorsque le temps de traînée augmente, l'erreur augmente (Rani et Balachandar (2004)). L'équation (2.7) est étendue à l'ordre supérieur en  $St_K$  par Druzhinin (1995). Ferry et Balachandar (2001) inclue des forces supplémentaires telles que les effets de masse ajoutée, les forces de portance et d'histoire. Les simulations numériques ou les développements théoriques utilisant l'hypothèse d'équilibre ont permis de prédire la ségrégation préférentielle des particules en THI avec ou sans gravité (Maxey (1987)) et d'étudier les effets du couplage inverse sur le fluide (Druzhinin et Elghobashi (1999)).

#### 2.1.4 Approches aux grandes échelles

L'hypothèse d'équilibre a récemment été adaptée dans un formalisme aux grandes échelles pour les écoulements gaz-particules (Shotorban et Balachandar (2006)). L'échelle caractéristique du filtre LES est supérieure à l'échelle de Kolmogorov  $\eta_K$  et inférieure à la taille des grandes échelles de la turbulence ( $\eta_K < \Delta_F < L_f^g$ ). Le champ de vitesses des particules à grande échelle  $\bar{\mathbf{u}}_p$  est obtenu par filtrage volumique des éq. (2.5) et (2.7) :

$$\bar{u}_{p,i} = \bar{u}_{f,i} - \tau_p \left( \frac{\bar{D}\bar{u}_{f,i}}{\bar{D}t} + \frac{\partial}{\partial x_j} T_{f,ij} \right) \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial \bar{n}_p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{n}_p \bar{u}_{p,j}) = - \frac{\partial}{\partial x_j} q_j \quad (2.9)$$

où  $q_j$  est le flux de sous-maille de particules,  $\bar{D}/\bar{D}t = \partial/\partial t + \bar{u}_{f,j}\partial/\partial x_j$ ,  $\bar{\mathbf{u}}_f$  est le champ de vitesse fluide à grande échelle et  $T_{f,ij}$  le tenseur de sous-maille du fluide :

$$T_{f,ij} = \overline{u_{f,i}u_{f,j}} - \bar{u}_{f,i}\bar{u}_{f,j} \quad (2.10)$$

Cette approche basée sur l'hypothèse d'équilibre ne peut être valable que pour des nombres de Stokes très petits devant l'unité.

Une approche de type LES à deux fluides différente et sans limitation sur le nombre de Stokes est proposée par Pandya et Mashayek (2002). Une réalisation de la phase particulaire constituée de  $N_p$  particules est décrite dans l'espace des phases (position  $\mathbf{x}$ , vitesse  $\mathbf{c}_p$ ) par la densité  $W_p^{N_p}(\mathbf{x}, \mathbf{c}_p, t)$ ,

$$W_p^{N_p}(\mathbf{x}, \mathbf{c}_p, t) = \sum_{k=1, N_p} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}^{(k)}(t)) \delta(\mathbf{c}_p - \mathbf{V}^{(k)}(t)) \quad (2.11)$$

Cette fonction suit une équation cinétique (Reeks (1992)). Cette équation d'évolution est filtrée spatialement. Le terme de sous-maille de l'équation cinétique filtrée est modélisé par analogie avec l'approche de type RANS proposée par Reeks (1992) en écoulement gaz-particule et basée sur la méthode d'interaction directe de l'histoire lagrangienne (LHDI). Le modèle de sous-maille proposé dépend des corrélations temporelles eulériennes de vitesses du fluide et nécessite la résolution de neuf équations différentielles du deuxième ordre en temps et non linéaires en espace additionnelles. Les équations sur les grandeurs eulériennes particulières sont obtenues en prenant les moments de l'équation d'évolution de  $W_p^{N_p}$ . A ce jour et à la connaissance de l'auteur, aucun résultat obtenu par cette approche n'a été publié.

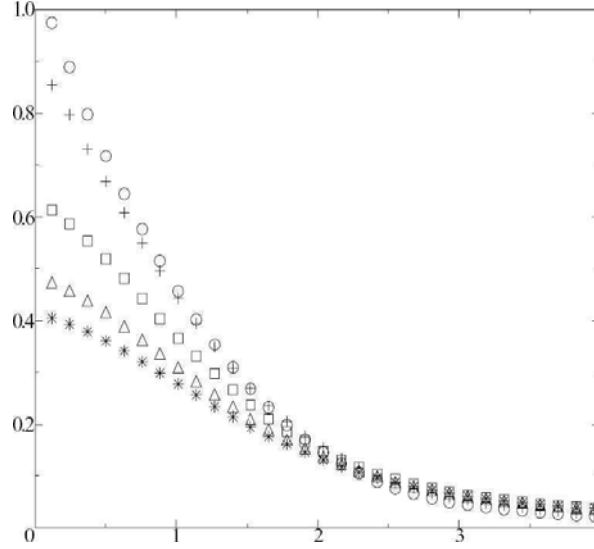


FIG. 2.1 – Influence de l’inertie des particules sur la fonction d’autocorrélation spatiale longitudinale eulérienne ( $\mathcal{R}_{p,ii}^E(r_i)$ , éq. 2.12) en THI stationnaire (tiré de Février (2000))

## 2.2 Formalisme Eulérien Mésoscopique

### 2.2.1 Mouvement corrélé et décorrélé des particules

Février (2000) étudie les corrélations eulériennes en deux points d’un nuage de particules traité par une approche lagrangienne en turbulence homogène, isotrope et stationnaire.

$$\mathcal{R}_{p,ij}^E(\mathbf{r}, t) = \frac{\{V_i(\mathbf{x}, t)V_j(\mathbf{x} + \mathbf{r}, t)\}}{2q_p^2} \quad (2.12)$$

Cette corrélation eulérienne des vitesses lagrangiennes varie pour les différents nombres de Stokes considérés (Fig. 2.1). Pour des petits nombres de Stokes, cette corrélation est proche d’une forme exponentielle (similaire aux corrélations eulériennes longitudinales du fluide). Pour des particules plus lourdes,

$$\lim_{r_i \rightarrow 0} \mathcal{R}_{p,ii}^E(r_i) < 1 \quad (2.13)$$

Des particules très proches possèdent des vitesses très différentes : le champ de vitesse des particules n’est pas continu. Cet effet augmente avec l’inertie (le nombre de Stokes) des particules. Toutefois, en dehors de cette singularité initiale, la corrélation des vitesses en deux points est continue, ce qui suggère l’existence d’un mouvement d’ensemble des particules.

Physiquement, les particules ne répondent pas immédiatement aux variations du champ fluide, mais avec un temps de retard de l’ordre de  $\tau_p$ . Ainsi, des particules provenant de différentes régions de l’écoulement (par exemple éjectées de tourbillons distincts) peuvent se retrouver très proches et pourtant posséder des vitesses très différentes. Pour prendre en compte ce phénomène, Février et al. (2005) introduit le Formalisme Eulérien Mésoscopique qui suppose que la vitesse lagrangienne de chaque particule se compose d’une partie

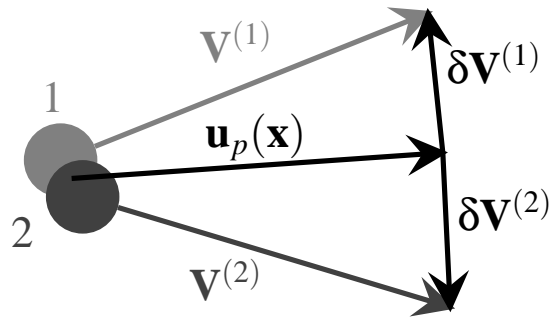


FIG. 2.2 – Décomposition du mouvement des particules en parties corrélée et décorrélée.

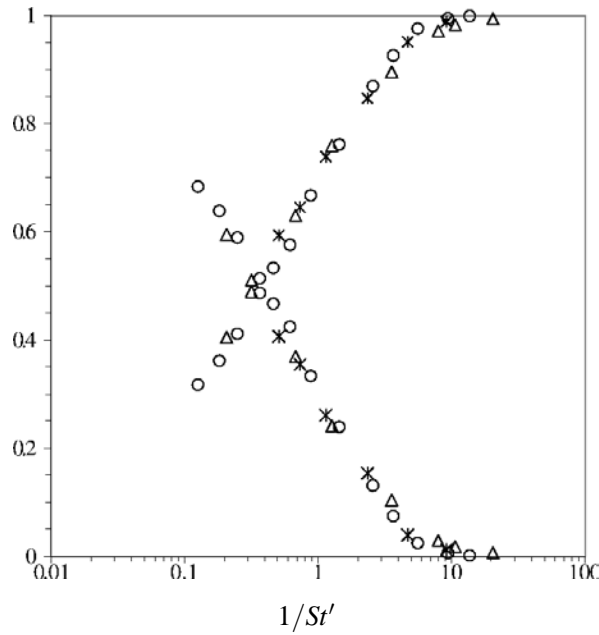


FIG. 2.3 – Evolution des fractions énergies corrélée et décorrélée des particules avec l'inertie des particules pour plusieurs nombres de Reynolds turbulents en THI stationnaire (tiré de Février (2000))

spatialement corrélée  $\mathbf{u}_p$  et d'une partie décorrélée propre à chaque particule  $\delta\mathbf{V}^{(k)}$  (Fig. 2.2) :

$$\mathbf{V}^{(k)}(t) = \mathbf{u}_p(\mathbf{X}^{(k)}(t), t) + \delta\mathbf{V}^{(k)} \quad (2.14)$$

$\delta\mathbf{V}^{(k)}$  est la vitesse décorrélée (en anglais : Random Uncorrelated Velocity ou RUV (Kaufmann et al. (2006b))<sup>1</sup>. Ces quantités sont obtenues par une moyenne sur l'ensemble des réalisations de la phase parti-

<sup>1</sup>Cette composante de la vitesse particulaire a précédemment été appelée vitesse quasi-brownienne (Février (2000); Kaufmann et al. (2002)) et Random Uncorrelated Motion (Février et al. (2005)). L'expression mouvement brownien fait référence à un mouvement aléatoire, irrégulier et sporadique. La vitesse non corrélée d'une particule donnée n'étant pas irrégulière (en l'absence de collisions inter-particulaire), la dénomination « vitesse quasi-brownienne » a été abandonnée.

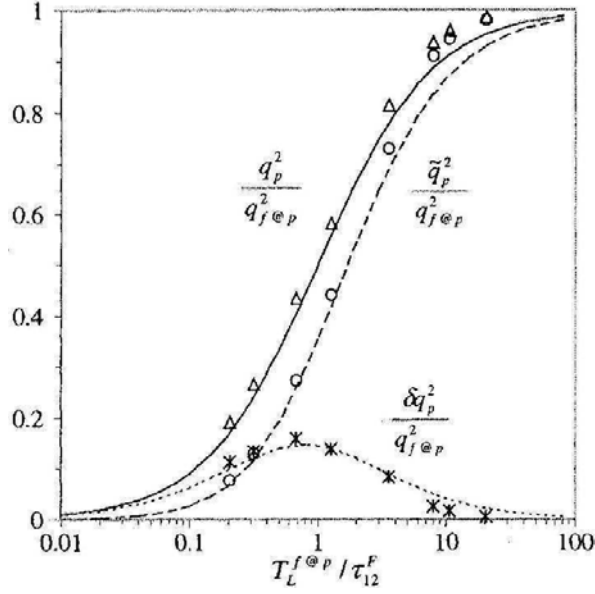


FIG. 2.4 – Evolution des énergies totale, corrélée et décorrélée des particules avec l'inertie des particules pour plusieurs nombres de Reynolds turbulents en THI stationnaire. Ligne continu : modèle de Tchen-Hinze modifié sur  $q_p^2$  (éq. 1.61). Lignes pointillée : modèle de Février sur l'énergie corrélée et décorrélée (éq. 2.19-2.20) (tiré de Février (2000)).

culaire conditionnée par une réalisation donnée  $\mathcal{H}_f$  du champ turbulent fluide (notée  $\langle \cdot | \mathcal{H}_f \rangle$ ) :

$$\langle \mathbf{V}^{(k)} | \mathcal{H}_f \rangle = \mathbf{u}_p(\mathbf{X}^{(k)}(t), t) \quad (2.15)$$

$$\langle \delta \mathbf{V}^{(k)} | \mathcal{H}_f \rangle = 0 \quad (2.16)$$

Février (2000) introduit ainsi le Formalisme Eulérien Mésoscopique pour prendre en compte de manière explicite cette décomposition de la vitesse particulaire. Les hypothèses de base de ce formalisme sont :

1. Le champ eulérien de vitesse corrélé  $\mathbf{u}_p(\mathbf{x}, t)$  est continu.
2. Les vitesses  $\delta \mathbf{V}$  de deux particules différentes ne sont pas corrélées.
3. La vitesse  $\delta \mathbf{V}^{(k)}$  d'une particule n'est pas corrélée spatialement au champ instantané de vitesses du fluide,  $\langle u_f \delta \mathbf{V}^{(k)} | \mathcal{H}_f \rangle = u_f \langle \delta \mathbf{V}^{(k)} | \mathcal{H}_f \rangle = 0$ .
4. La vitesse  $\delta \mathbf{V}^{(k)}$  d'une particule n'est pas corrélée spatialement au champ instantané de vitesses corrélé  $\mathbf{u}_p(\mathbf{x}, t)$ ,  $\langle u_p \delta \mathbf{V}^{(k)} | \mathcal{H}_f \rangle = u_p \langle \delta \mathbf{V}^{(k)} | \mathcal{H}_f \rangle = 0$ .

Les moyennes de l'énergie corrélée  $\tilde{q}_p^2$  et décorrélée  $\delta q_p^2$  sont définies à l'aide des vitesses lagrangiennes correspondantes :

$$\tilde{q}_p^2 = \frac{1}{2} \{ \mathbf{u}_p(\mathbf{X}^{(k)}) \cdot \mathbf{u}_p(\mathbf{X}^{(k)}) \} \quad (2.17)$$

$$\delta q_p^2 = \frac{1}{2} \{ \delta \mathbf{V}^{(k)} \cdot \delta \mathbf{V}^{(k)} \} \quad (2.18)$$

Février (2000) les évalue à l'aide des corrélations eulériennes de vitesses lagrangiennes. Pour de faible nombre de Stokes (jusqu'au cas limite du traceur passif), l'énergie est principalement sous forme corrélée

(Fig. 2.3). Lorsque l'inertie des particules augmente, l'énergie des particules devient plus décorrélée. Des comportements similaires sont observés pour des écoulements turbulents gaz-particules en canal aussi bien par des résultats de simulations numériques (Vance et al. (2006)) que par des mesures expérimentales (Khalitov et Longmire (2003)).

En THI stationnaire, Février (2000) propose, en utilisant l'extension de la théorie de Tchen-Hinze (paragraphe 1.2.2), le modèle semi-empirique suivant :

$$\tilde{q}_p^2 = q_{f@p}^2 \left( \frac{\tau_{fp}^t}{\tau_{f@p}^t + \tau_p} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (2.19)$$

$$\delta q_p^2 = q_{f@p}^2 \left[ \frac{\tau_{f@p}^t}{\tau_{f@p}^t + \tau_p} - \left( \frac{\tau_{f@p}^t}{\tau_{f@p}^t + \tau_p} \right)^{\frac{3}{2}} \right] \quad (2.20)$$

où  $\tau_{f@p}^t$  est le temps lagrangien de la turbulence du fluide le long de la trajectoire des particules.

## 2.2.2 Equation de transport de la fonction densité de probabilité

Février et al. (2005) propose d'utiliser une moyenne d'ensemble sur les réalisations de la phase particulaire conditionnée par une réalisation  $H_f$  du champ fluide turbulent. Une telle procédure conduit à définir la fonction densité de probabilité (PDF) de la phase dispersé pour une réalisation du fluide  $f_p(\mathbf{c}_p, \mathbf{x}, t, H_f)$  :

$$f_p(\mathbf{c}_p, \mathbf{x}, t, H_f) = \lim_{\mathcal{N}_p \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{\mathcal{N}_p} \sum_{\mathcal{N}_p} W_p^{N_p}(\mathbf{x}, \mathbf{c}_p, t) \right) \quad (2.21)$$

où  $\mathcal{N}_p$  est le nombre de réalisations différentes de la phase particulaire pour la réalisation fluide  $H_f$ . Des réalisations particulières différentes sont simplement obtenues en modifiant légèrement les conditions initiales position-vitesse tout en conservant les mêmes grandeurs statistiques. Le nombre probable de particules qui à l'instant  $t$  ont un centre de masse compris dans le volume  $[x_i, x_i + dx_i]$  avec une vitesse comprise dans  $[c_{p,i}, c_{p,i} + dc_{p,i}]$  est  $f_p(\mathbf{c}_p, \mathbf{x}, t, H_f) dc_{p,i} dx_i$ . L'évolution de cette pdf suit l'équation de type Boltzmann :

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} f_p}_I + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} c_{p,j} f_p}_{II} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial c_{p,j}} \frac{F_{p,j}}{m_p} f_p}_{III} = \underbrace{\left( \frac{\partial}{\partial t} f_p \right)_{coll}}_{IV} \quad (2.22)$$

L'évolution de la densité de particules dans un volume élémentaire de l'espace des phases  $(\mathbf{x}, \mathbf{c}_p)$  (terme *I*) est due à la convection (terme *II*), à l'influence des forces extérieures  $\mathbf{F}_p$  (terme *III*) et aux collisions (terme *IV*). Pour fermer l'équation (2.22), un modèle de force et de collision est nécessaire.

Sous les hypothèses du paragraphe 1.2.1, la seule force  $\mathbf{F}_p$  qui s'exerce sur les particules ayant une vitesse  $\mathbf{c}_p$  est :

$$\mathbf{F}_p = -\frac{m_p}{\tau_p} (\mathbf{c}_p - \mathbf{u}_{f@p}) \text{ avec } \tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu_f} \quad (2.23)$$

$\tau_p$  est le temps de relaxation des particules donné par Stokes (1851) (éq. 1.47).

### 2.2.3 Modélisation du terme de collisions inter-particulaires

Par analogie avec la théorie cinétique des gaz (Bird (1976)), en considérant que les collisions sont binaires et instantanées (collision de sphère dures), l'opérateur de collision peut s'écrire en fonction de la PDF en deux points  $f_{pp}(\mathbf{c}_p, \mathbf{c}'_p, \mathbf{x}, \mathbf{x}', t)$ . Dans le cas de collisions élastiques, cet opérateur est (Laviéville (1997)) :

$$\left(\frac{\partial f_p}{\partial t}\right)_{coll} = \int_{(\mathbf{g}, \mathbf{k} > 0)} (\mathbf{g}\mathbf{k}) [f_{pp}(\mathbf{c}_p^*, \mathbf{c}'_p^*, \mathbf{x}, \mathbf{x} + d_p \mathbf{k}, t) - f_{pp}(\mathbf{c}_p, \mathbf{c}'_p, \mathbf{x}, \mathbf{x} + d_p \mathbf{k}, t)] d\mathbf{k} d\mathbf{c}'_p \quad (2.24)$$

avec  $\mathbf{k}$  le paramètre d'impact, c'est à dire le vecteur unitaire entre les centres des deux particules et  $\mathbf{g}$  la vitesse relative  $\mathbf{g} = \mathbf{c}_p - \mathbf{c}'_p$ . L'intégration porte sur l'ensemble des particules qui se rapprochent ( $\mathbf{g}, \mathbf{k} > 0$ ).  $\mathbf{c}_p^*$  et  $\mathbf{c}'_p^*$  sont les vitesses post-collisionnelles.

Un modèle pour les vitesses particulières post-collisionnelles est nécessaire. Walton (1988) propose un modèle à trois coefficients caractéristiques des particules : les coefficients de restitution normale, de restitution tangentielle, et de friction.

La PDF en deux points  $f_{pp}$  peut être fermée par une hypothèse de chaos moléculaire issue de la théorie des gaz raréfiés. Cette fermeture suppose que les particules qui entrent en collision ont une vitesse fluctuante (par rapport à la moyenne  $(\mathbf{c}_p + \mathbf{c}'_p)/2$ ) décorrélée. Cette hypothèse est en accord avec le Formalisme Eulérien Mésoscopique (Février (2000)) : les centres des particules entrant en collision sont distantes de  $d_p$ , les particules partagent donc la même vitesse corrélée, leurs vitesses totales diffèrent de la vitesse décorrélée aléatoire.

En supposant que la forme de la pdf des vitesses décorrélée est donné par un développement de Grad (1939) autour d'une maxwellienne (Simonin et al. (2002)), le temps de collision  $\tau_p^K$  vaut alors :

$$\tau_p^K = \left[ 4n_p d_p^2 \sqrt{\frac{2}{3}} \pi \delta \theta_p \right]^{-1} \quad (2.25)$$

Si la fraction volumique de particule ( $\propto n_p d_p^3$ ) est petite, l'effet des collisions est négligeable. La prise en compte de collision inter-particulaire dans le formalisme eulérien mésoscopique ne présente a priori pas de difficultés majeures. La fraction volumique est, toutefois, choisie suffisamment petite pour pouvoir les négliger.

$$\left(\frac{\partial f_p}{\partial t}\right)_{coll} = 0 \quad (2.26)$$

La raison pratique de ce choix est la non-prise en compte des collisions par le code de calcul utilisé.

### 2.2.4 Equation fermée

L'équation (2.22) est maintenant fermée et devient :

$$\frac{\partial}{\partial t} f_p + \frac{\partial}{\partial x_j} c_{p,j} f_p = \frac{\partial}{\partial c_{p,j}} \left[ \frac{c_{p,j} - u_{f@p,j}}{\tau_p} f_p \right] \quad (2.27)$$

Cette équation peut être résolue par une approche lagrangienne (voir Chap 1 en configuration homogène et isotrope. Une méthode alternative est la résolution des équations eulériennes des différents moments de la PDF  $f_p$  (Kaufmann et al. (2006b)).

## 2.3 Equations eulériennes mésoscopiques

### 2.3.1 Dérivation des équations

Les différentes grandeurs mésoscopiques telles que la densité de particules  $n_p$ , la vitesse corrélée  $\mathbf{u}_p$ , et les corrélations de vitesses décorrélées aux ordres 2, 3 et 4 (respectivement  $\delta R_{p,ij}$ ,  $\delta S_{p,ijk}$  et  $\delta Q_{p,ijk}$ ) sont obtenus en multipliant la pdf  $f_p$  par une fonction choisie des vitesses possibles des particules  $\Psi(\mathbf{c}_p)$  et en intégrant sur l'ensemble des vitesses  $\mathbf{c}_p$ .

$$n_p = \int f_p(\mathbf{c}_p, \mathbf{x}, t) d\mathbf{c}_{p,m} \quad (2.28)$$

$$n_p u_{p,i} = \int c_{p,i} f_p(\mathbf{c}_p, \mathbf{x}, t) d\mathbf{c}_{p,m} \quad (2.29)$$

$$n_p \delta R_{p,ij} = \int (c_{p,i} - u_{p,i})(c_{p,j} - u_{p,j}) f_p(\mathbf{c}_p, \mathbf{x}, t) d\mathbf{c}_{p,m} \quad (2.30)$$

$$n_p \delta Q_{p,ijk} = \int (c_{p,i} - u_{p,i})(c_{p,j} - u_{p,j})(c_{p,k} - u_{p,k}) f_p(\mathbf{c}_p, \mathbf{x}, t) d\mathbf{c}_{p,m} \quad (2.31)$$

$$n_p \delta M_{p,ijkl} = \int (c_{p,i} - u_{p,i})(c_{p,j} - u_{p,j})(c_{p,k} - u_{p,k})(c_{p,l} - u_{p,l}) f_p(\mathbf{c}_p, \mathbf{x}, t) d\mathbf{c}_{p,m} \quad (2.32)$$

Les équations de transport sont obtenues par intégration de l'équation (2.27) en supposant que  $\Psi(\mathbf{c}_p) f_p$  est fini et tend vers zéro lorsque une des composantes de  $\mathbf{c}_p$  tend vers l'infini.

$$\frac{\partial}{\partial t} n_p + \frac{\partial}{\partial x_m} n_p u_{p,m} = 0 \quad (2.33)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_p u_{p,i} + \frac{\partial}{\partial x_m} n_p u_{p,m} u_{p,i} = -\frac{n_p}{\tau_p} (u_{p,i} - u_{f@p,i}) - \frac{\partial}{\partial x_m} n_p \delta R_{p,im} \quad (2.34)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} n_p \delta R_{p,ij} + \frac{\partial}{\partial x_m} n_p u_{p,m} \delta R_{p,ij} &= -n_p \delta R_{p,mj} \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_m} - n_p \delta R_{p,im} \frac{\partial u_{p,j}}{\partial x_m} \\ &\quad - 2 \frac{n_p}{\tau_p} \delta R_{p,ij} - \frac{\partial}{\partial x_m} n_p \delta Q_{p,ijm} \end{aligned} \quad (2.35)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} n_p \delta Q_{p,ijk} + \frac{\partial}{\partial x_m} n_p u_{p,m} \delta Q_{p,ijk} &= -n_p \delta Q_{p,mjk} \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_m} - n_p \delta Q_{p,imk} \frac{\partial u_{p,j}}{\partial x_m} - n_p \delta Q_{p,ijm} \frac{\partial u_{p,k}}{\partial x_m} \\ &\quad + \delta R_{p,jk} \frac{\partial}{\partial x_m} n_p \delta R_{p,im} + \delta R_{p,ik} \frac{\partial}{\partial x_m} n_p \delta R_{p,jm} + \delta R_{p,ij} \frac{\partial}{\partial x_m} n_p \delta R_{p,km} \\ &\quad - 3 \frac{n_p}{\tau_p} \delta Q_{p,ijk} - \frac{\partial}{\partial x_m} n_p \delta M_{p,ijkm} \end{aligned} \quad (2.36)$$

Les équations à l'ordre  $n$  feront intervenir des corrélations à l'ordre supérieur  $n+1$  qui devront être modélisées. Il convient donc de se limiter à un certain ordre. Cette approche reposant sur une moyenne d'ensemble est similaire à la modélisation de type RANS à deux fluides (Simonin (1996)).

### 2.3.2 Fermetures

Simonin et al. (2002) et Kaufmann et al. (2006b) proposent différents types de fermeture des équations eulériennes mésoscopiques. Elles sont présentées dans la suite, du plus coûteux au plus rapide en terme de temps de calcul.

#### Modèle au second ordre

Les 6 équations de transports des corrélations doubles  $\delta R_{p,ij}$  sont résolues. Les corrélations du troisième ordre doivent être modélisées. Un modèle analytique est obtenu en supposant les corrélations triples à l'équilibre, et en négligeant l'effet des termes de déformation :

$$3 \frac{n_p}{\tau_p} \delta Q_{p,ijk} = \delta R_{p,jk} \frac{\partial}{\partial x_m} n_p \delta R_{p,im} + \delta R_{p,ik} \frac{\partial}{\partial x_m} n_p \delta R_{p,jm} + \delta R_{p,ij} \frac{\partial}{\partial x_m} n_p \delta R_{p,km} - \frac{\partial}{\partial x_m} n_p \delta M_{p,ijkm} \quad (2.37)$$

Le flux « turbulent » est évalué en supposant que le moment d'ordre 4 se réduit à sa valeur gaussienne (Sakiz (1999)) :

$$\delta Q_{p,ijkm} = \delta R_{p,ij} \delta R_{p,km} + \delta R_{p,ik} \delta R_{p,jm} + \delta R_{p,im} \delta R_{p,jk} \quad (2.38)$$

Le modèle obtenu est similaire à la forme obtenue par Hanjalic et Launder (1972). Le terme de corrélation triple de l'équation (2.35) est modélisé par :

$$\frac{\partial}{\partial x_k} n_p \delta Q_{p,ijk} = \frac{\tau_p}{3} \frac{\partial}{\partial x_k} [n_p (\delta R_{p,km} \frac{\partial}{\partial x_m} \delta R_{p,ij} + \delta R_{p,jm} \frac{\partial}{\partial x_m} \delta R_{p,ik} + \delta R_{p,im} \frac{\partial}{\partial x_m} \delta R_{p,jk})] \quad (2.39)$$

La modélisation des termes triples est ainsi justifiée sur la base de l'équation d'évolution des corrélations triples. Toutefois, ce modèle faisant intervenir 27 termes, il peut être simplifié pour des raisons pratiques.

#### Modèle de viscosité + équation $\delta \theta_p$

On introduit l'énergie du mouvement non corrélée comme la moitié de la trace du tenseur  $\delta R_{p,ij}$  :

$$\delta \theta_p = \frac{1}{2} \delta R_{p,mm} \quad (2.40)$$

L'équation de transport de la quantité de mouvement devient :

$$\frac{\partial}{\partial t} n_p u_{p,i} + \frac{\partial}{\partial x_m} n_p u_{p,m} u_{p,i} = - \frac{n_p}{\tau_p} (u_{p,i} - u_{f@p,i}) - \frac{\partial}{\partial x_m} \frac{2}{3} n_p \delta \theta_p - \frac{\partial}{\partial x_m} n_p \delta R_{p,im}^* \quad (2.41)$$

où  $\delta R_{p,ij}^*$  est la partie déviatrice du tenseur  $\delta R_{p,ij}$ . Ce terme est modélisé par une hypothèse d'équilibre des contraintes doubles :

$$\delta R_{p,ij}^* = - \frac{\tau_p}{2} [\delta R_{p,im} \frac{\partial u_{p,j}}{\partial x_m} + \delta R_{p,jm} \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_m} - \frac{2}{3} \delta R_{p,km} \frac{\partial u_{p,k}}{\partial x_m} \delta_{ij}] \quad (2.42)$$



En supposant que  $\delta R_{p,ij}$  est quasi-sphérique, on obtient un modèle de viscosité pour  $\delta R_{p,ij}^*$  :

$$\delta R_{p,ij}^* = -\nu_{RUV} \left[ \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{p,j}}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_{p,k}}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] \quad (2.43)$$

Avec une viscosité des vitesses non corrélées égale à :

$$\nu_{RUV} = \frac{\tau_p}{3} \delta \theta_p \quad (2.44)$$

L'énergie des vitesses non corrélée est déterminée par une équation de transport (somme sur les indices  $i$  et  $j$ ) :

$$\frac{\partial}{\partial t} n_p \delta \theta_p + \frac{\partial}{\partial x_j} n_p u_{p,j} \delta \theta_p = -n_p \left[ \frac{2}{3} \delta \theta_p \delta_{ij} + \delta R_{p,ij}^* \right] \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j} - 2 \frac{n_p}{\tau_p} \delta \theta_p - \frac{\partial}{\partial x_j} n_p \delta Q'_{p,j} \quad (2.45)$$

où  $\delta Q'_{p,j}$  est la moitié du tenseur des corrélations triples de vitesses décorréelées contracté :  $\delta Q'_{p,j} = \frac{1}{2} \delta Q_{p,ij}$ .

Le flux d'agitation par le mouvement décorréelée est modélisé par une diffusion similaire à la loi de Fick pour la température (Simonin (1996)) :

$$\delta Q'_{p,j} = -\kappa_{RUV} \frac{\partial}{\partial x_j} \delta \theta_p \quad (2.46)$$

Le coefficient de diffusion  $\kappa_{RUV}$  peut être calculé par analogie avec l'approche RANS à deux fluides :

$$\kappa_{RUV} = \frac{5}{3} n_p \tau_p \delta \theta_p \quad (2.47)$$

### Modèle de pression isentropique

En écoulement monophasique compressible, une compression conduit à une augmentation de la température. Ce comportement peut être adapté à la phase particulaire, où une compression isentropique va faire augmenter l'énergie décorréelée dans les régions de concentration préférentielle. En partant d'une équation simplifiée de  $\delta \theta_p$  et en utilisant la conservation du nombre de particules, Kaufmann (2004) propose le modèle suivant pour  $\delta \theta_p$  :

$$\delta \theta_p = A n_p^{\frac{2}{3}} \quad (2.48)$$

où le coefficient  $A$  peut être déterminé en THI par le modèle semi-empirique de Février et al. (2005). Le modèle de pression isentropique permet de se dispenser de résoudre une équation de transport pour l'énergie décorréelée.



## Chapitre 3

# Passage des quantités Lagrangiennes à des quantités Eulériennes mésoscopiques

### 3.1 Consistence avec le formalisme mésoscopique

La modélisation eulérienne présentée dans le chapitre 2 a été obtenue par une moyenne d'ensemble sur toutes les réalisations de la phase particulaire possible pour une réalisation du champ turbulent fluide. Dans la présente étude, les influences inter-particulaires (directement par les collisions ou par l'intermédiaire d'une modification du champ fluide par la présence des particules) sont négligées. Dans ces conditions, simuler une réalisation comportant un grand nombre de particules est équivalent à simuler un grand nombre de réalisations à une seule particule :

$$W_p^{N_p}(\mathbf{x}, \mathbf{c}_p, t) = \sum_{N_p} W_p^1(\mathbf{x}, \mathbf{c}_p, t) \quad (3.1)$$

En conséquence, une moyenne « locale » (c'est à dire en chaque point) des grandeurs lagrangiennes d'un grand nombre de particules est équivalent à la moyenne conditionnée par une réalisation du fluide. Malheureusement, numériquement la moyenne locale doit avoir une certaine épaisseur. Les grandeurs mésoscopiques seront donc obtenues par une méthode de projection basée sur un filtrage volumique des grandeurs lagrangiennes.

### 3.2 Mesure de grandeurs mésoscopiques

Les résultats de simulations lagrangiennes ne donnent accès qu'à une approximation de la pdf particulaire  $f_p$  sous la forme d'une somme de dirac :

$$f_p(\mathbf{c}_p, \mathbf{x}, t) \approx \sum_{k=1}^{N_p} \delta(\mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{x}) \delta(\mathbf{V}^{(k)} - \mathbf{c}_p) \quad (3.2)$$

	Volume de controle	Fonction poids	Longueur caracteristique
Projection	$V_c$	$w(\mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{Q})$	$2\sigma$
Boîte	$(\Delta_P)^3$	1	$\Delta_P$
Boîte large	$(2\Delta_P)^3$	1	$2\Delta_P$
Volumique	$(\Delta_P)^3$	$\prod_{i=1}^3 (2 - 2\frac{ X_i^{(k)} - Q_i^{(k)} }{\Delta_P/2})$	$\frac{\Delta_P}{\sqrt{2}}$
Volumique large	$(2\Delta_P)^3$	$\frac{1}{2^3} \prod_{i=1}^3 (1 - \frac{ X_i^{(k)} - Q_i^{(k)} }{\Delta_P})$	$\sqrt{2}\Delta_P$
Gaussien	$(2\Delta_P)^3$	$\frac{(2\Delta_P)^3}{\text{erf}(\sqrt{6})^3} (\frac{6}{\pi\Delta_P^2})^{\frac{3}{2}} \exp(-\frac{6 \mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{Q} ^2}{\Delta_P^2})$	$(1 - \frac{2\sqrt{6}e^{-6}}{\sqrt{\pi}\text{erf}(\sqrt{6})})\Delta_P \approx \Delta_P$

TAB. 3.1 – Définition des projections en 3D.  $\Delta_P$  est la taille caractéristique du maillage de projection

Les grandeurs mésoscopiques tels que la densité du nombre de particules  $n_p$ , la vitesse corrélée  $\mathbf{u}_p$  et l'énergie décorrélée sont définies par les moments de la pdf particulaire  $f_p$  pour une réalisation du champ fluide donnée. Le nombre  $N_p$  de particules étant limité, la pdf  $f_p$  mesurée n'est pas significative en chaque point. Les équations précédentes doit être moyennée spatialement (filtrée) pour obtenir des champs eulériens. Les grandeurs Lagrangiennes (position, vitesses) d'un grand nombre de particules obtenus par DPS sont projetés sur un maillage régulier (de taille de cellule  $\Delta_P$ ). Un volume de contrôle  $V_c$  est défini autour de chaque nœud du maillage (de position  $\mathbf{Q}$ ).  $V_c$  doit être plus petit que l'échelle spatiale de variation des grandeurs mésoscopique, mais aussi suffisamment grand pour avoir assez de particules pour effectuer la moyenne. Les champs mésoscopiques tel que la densité de particules  $n_p$ , la vitesse corrélée  $\mathbf{u}_p$  sont mesurés par :

$$\tilde{n}_p(\mathbf{Q}, t) = \frac{1}{V_c} \sum_k w(\mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{Q}) \quad (3.3)$$

$$\tilde{n}_p(\mathbf{Q}, t) \tilde{u}_{p,i}(\mathbf{Q}, t) = \frac{1}{V_c} \sum_k w(\mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{Q}) V_i^{(k)} \quad (3.4)$$

où  $w(\mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{Q})$  est une fonction poids. Le tableau 3.1 présente les définitions de plusieurs procédures de projection. Pour obtenir les grandeurs mésosocopiques, les quantités lagrangiennes dans le volume de contrôle  $V_c$  autour de  $\mathbf{Q}$  peuvent être simplement sommées (projections boîte et boîte large) ou bien pondérées en fonction de la position de la particule relativement au nœud (projections volumique, volumique large et gaussienne). Pour assurer la conservation globale (c'est à dire pour un nombre infini de particules) des moyennes des grandeurs par projection, l'intégrale des noyaux de projection vaut 1. Les projections boîte, boîte large et volumique large conservent en plus la moyenne quelque soit le nombre ou la répartition des particules (conservation locale). Les formes des projecteurs boîte, volumique et gaussien en une dimension sont présentées sur la figure 3.1. Les projecteurs présentés sont précis à l'ordre 2 en espace (Schmidt (in press)) et il est possible de définir des projecteurs d'ordre plus élevé, toutefois ces projecteurs d'ordre élevé n'ont pas été étudié pour 2 raisons. Premièrement, la fonction poid  $w(\mathbf{X} - \mathbf{Q})$  doit changer de signe, ce qui peut conduire à des densités négatives de particules. Secondement, ces projecteurs sont plus sensibles aux erreurs statistiques. Dans cette étude axée sur les écoulements homogènes isotropes, il semble logique de ne s'intéresser qu'à des projecteurs homogènes et isotropes. Toutefois à cause de la répartition inhomogène

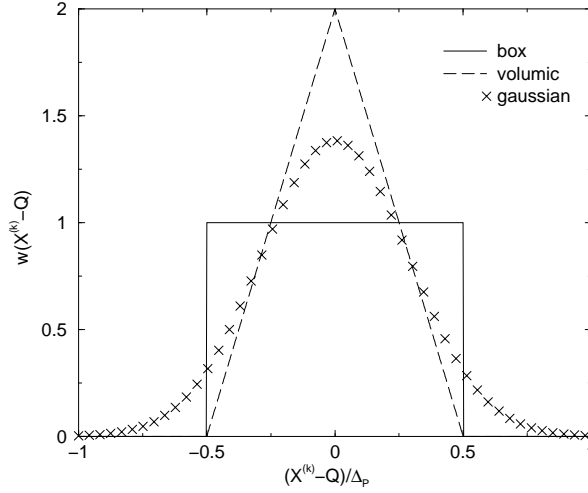


FIG. 3.1 – Fonctions poids des differentes projections en 1D.

des particules, il aurait pu être efficace d'utiliser des projections plus complexes.

### 3.3 Validation et choix de la méthode de projection

Dans un premier temps, l'erreur spatiale associée à chaque projecteur est analytiquement déterminée. Ensuite, les différentes projections du tableau 3.1 sont testées sur un cas synthétique en une dimension<sup>1</sup>. Cette étude est complétée par des validations au niveau des spectres d'énergie corrélés sur un cas réel.

#### 3.3.1 Evaluation théorique des erreurs spatiales liées à la projection

Considérons une fonction continue  $g$  (de  $\mathbb{R}$  dans  $\mathbb{R}$ ) de valeur connue à l'emplacement  $X^{(k)}$  des  $N_p$  particules. La grandeur projetée  $\tilde{g}_N$  au point  $Q$  du maillage est :

$$\tilde{g}_N(Q) = \frac{1}{V_c} \sum_{k=1}^{N_p} w(X^{(k)} - Q)g(X^{(k)}) \quad (3.5)$$

De plus,  $g$  varie en espace et donc aucune valeur  $g(X^{(k)})$  ne correspond exactement à  $g(Q)$ . Une erreur spatiale a lieu à cause de la distance entre chaque particule et le point du maillage  $Q$  et de la variation spatiale de  $g$ .

Dans les calculs réels, le nombre fini de particules induit une erreur statistique. Pour s'affranchir de cette erreur et isoler l'erreur spatiale, on considère le cas d'un nombre infini de particules et on réécrit l'équation (3.5) comme une intégrale sur le volume autour du nœud  $Q$  (Schmidt (in press)) :

$$\tilde{g}(Q) = \frac{1}{V_c} \int w(X - Q)g(X)dX \quad (3.6)$$

<sup>1</sup>D'autres projections ont aussi été testées et ont été écartées : une projection de type boîte dans l'espace spectral conduisait à des densités de particules négatives. Une projection adaptée du filtre elliptique de Germano (1986) avec reconstruction du champ non filtré n'était pas assez robuste pour les cas à trop faible densité de particules.

En considérant que la fonction  $g$  est continue et que toutes ses dérivées le sont aussi (fonction  $C_\infty$ ),  $g(\mathbf{X})$  peut être estimé par une série de Taylor :

$$g(X) = g(Q) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n g}{\partial x_i^n} \right|_Q (X - Q)^n \quad (3.7)$$

En introduisant cette expression dans l'équation (3.6), on obtient :

$$\tilde{g}(Q) = g(Q) \frac{1}{V_c} \int w(X - Q) dX + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n g}{\partial x_i^n} \right|_Q \frac{1}{V_c} \int w(X - Q) (X - Q)^n dX \quad (3.8)$$

La conservation de la grandeur moyenne par projection implique que :

$$\frac{1}{V_c} \int w(X - Q) dX = 1 \quad (3.9)$$

Les fonctions poids considérées étant symétriques,

$$\tilde{g}(Q) = g(Q) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} \right|_Q \frac{1}{V_c} \frac{1}{V_c} \int w(X - Q) (X - Q)^2 dX + \sum_{n=4}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n g}{\partial x^n} \right|_Q \frac{1}{V_c} \int w(X - Q) (X - Q)^n dX \quad (3.10)$$

L'erreur spatiale associée aux projecteurs du tableau 3.1 est, en première approximation,  $\int w(X - Q) (X - Q)^2 dX$  qui est homogène à une longueur au carré. Un résultat similaire est obtenu en trois dimensions. L'erreur spatiale (ou bien la longueur caractéristique) des différentes projections est évaluée par le double de l'écart-type  $\sigma$  de la fonction poids :

$$\sigma^2 = \frac{1}{V_c} \int_{V_c} |\mathbf{X} - \mathbf{Q}|^2 w(\mathbf{X} - \mathbf{Q}) dX_1 dX_2 dX_3 \quad (3.11)$$

Les différentes projections peuvent alors être classées selon leur erreur spatiale :

$$\text{Boîte large} > \text{Volumique large} > \text{Boîte} \approx \text{Gaussien} > \text{Volumique} \quad (3.12)$$

Les projections volumique, gaussienne et boîte permettront de limiter les erreurs spatiales, toutefois le volume de contrôle des projections volumique et boîte étant plus petit que celles des autres projections, elles seront plus sensibles à l'erreur statistique due au nombre limité de particules dans ce volume de contrôle.

### 3.3.2 Cas synthétique 1D

Des particules sont distribuées aléatoirement dans un domaine 1D constitué de  $NX$  nœuds espacés de  $\Delta_p$ . Le nombre moyen de particules par cellule est  $N_p = \langle n_p \rangle \Delta_p$ . La distribution de particules est projetée sur le maillage (éq. 3.3) pour obtenir la densité mésoscopique du nombre de particules. La conservation des grandeurs moyennes par les projections gaussienne et volumique est évaluée sur la moyenne du nombre de particules par cellule  $\langle \tilde{n}_p \rangle \Delta_p$  (Fig. 3.2). L'erreur commise diminue quand le nombre de particules augmente. On peut facilement montrer que cette erreur est supprimée si les particules sont régulièrement espacées. Cette erreur est ainsi due à la répartition inhomogène (aléatoire) des particules dans chaque cellule. Le volume de contrôle associé à la projection étant plus grand, l'erreur statistique commise est moins importante

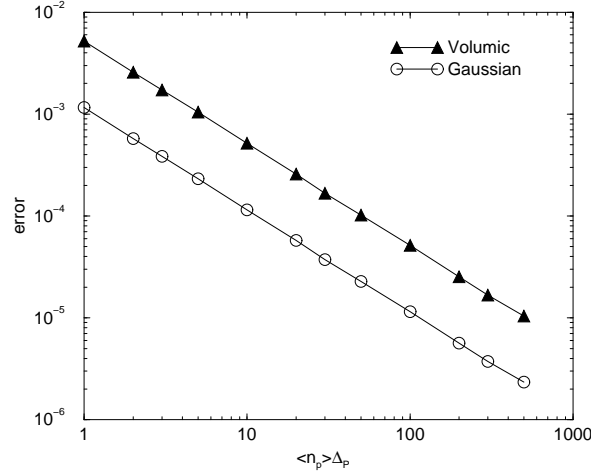


FIG. 3.2 – Erreur sur la densité moyenne du nombre de particules ( $error = (\langle \bar{n}_p \rangle - \langle n_p \rangle)^2 / \langle n_p \rangle^2$ ) pour le cas synthétique 1D.

qu'avec la projection volumique.

On attribue à chaque particule une vitesse  $V^{(k)}$  :

$$V^{(k)} = u_p(X^{(k)}) \quad (3.13)$$

où  $u_p$  est un champ continu. Le champ de vitesse  $u_p$  suit un spectre de Passot-Pouquet défini par 32 modes (éq. 1.68, avec  $u'_f = 1$  et  $k_e = 5$ ). Un tel spectre n'attribue que très peu d'énergie aux petites échelles et la détection des petites échelles sera ainsi plus difficile<sup>2</sup>.

Les quantités lagrangiennes sont projetées pour les différentes projections sur les  $NX$  nœuds du maillage 1D. Pour pouvoir identifier  $\tilde{u}_p$  et  $u_p$ , la projection ne doit pas altérer le champ continu ( $\tilde{u}_p \approx u_p$ ). La différence entre le champ projeté et le champ continu est évaluée par l'erreur quadratique :

$$Error(\phi) = \frac{\langle (\phi(Q) - \tilde{u}_p(Q))^2 \rangle}{\langle \tilde{u}_p(Q)^2 \rangle} \quad (3.14)$$

Les mêmes quantités lagrangiennes sont projetées avec les différentes méthodes. Pour atteindre la convergence statistique, on effectue une moyenne sur 5000 réalisations différentes des champs de positions  $X^k$  et de vitesse  $u_p$ . Cette procédure est répétée pour différentes densités moyennes du nombre de particules (de une à mille particules par cellule en moyenne). La figure 3.3 montre l'évolution de l'erreur en fonction du nombre de particules pour les différentes projections. L'erreur diminue quand la densité de particules augmente, mais même pour les densités les plus élevées une erreur systématique et indépendante du nombre de particules est commise. Pour plus de 10 particules par cellule, l'erreur est la plus faible pour la projection volumique suivi de la gaussienne à égalité avec la boîte suivies de la volumique large et enfin de la boîte large. On retrouve la classification des projecteurs en fonction de leur longueur caractéristique (Tab. 3.1).

<sup>2</sup>Des tests réalisés avec un spectre en  $k^{-\frac{5}{3}}$  donnent des résultats qualitativement comparables.

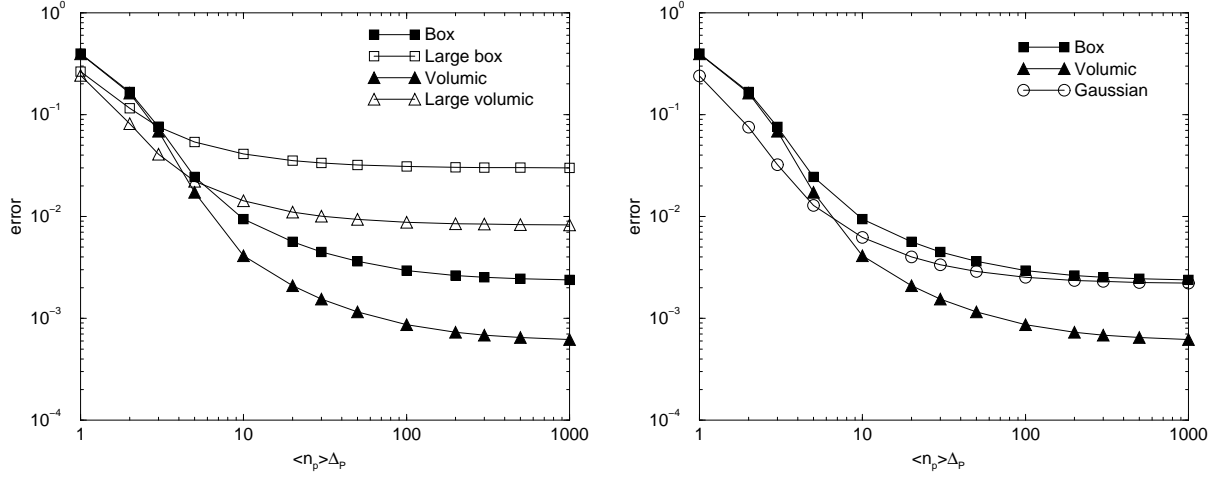


FIG. 3.3 – Erreur sur la vitesse obtenue par projection. Cas synthétique 1D.

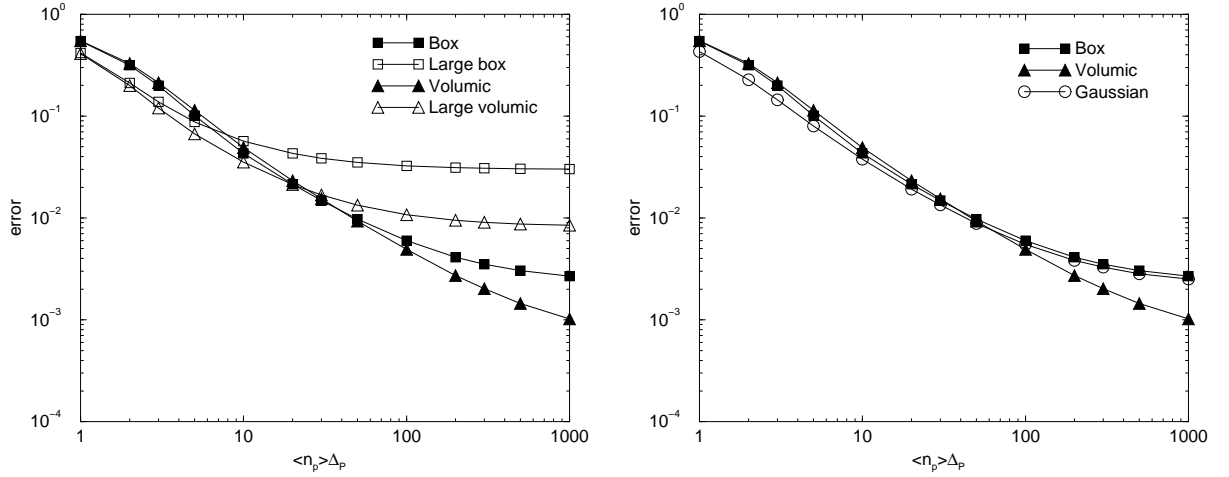


FIG. 3.4 – Erreur sur la vitesse obtenue par projection. Cas synthétique 1D. Les vitesses des particules possèdent une partie bruitée (éq. 3.13).

De telles projections sont équivalentes à des procédures de filtrage des échelles plus petites que le volume de contrôle (Boivin et al. (2000)), ce qui limite les gradients de vitesses et induit ainsi une erreur spatiale.

A la vitesse précédente des particules, on ajoute un bruit blanc gaussien aléatoire  $\delta V^{(k)}$  pour mimer le mouvement décorrélé des particules. La vitesse  $V^{(k)}$  de chaque particule devient :

$$V^{(k)} = u_p(X^{(k)}) + \delta V^{(k)} \quad (3.15)$$

L'énergie imposée du bruit est de 30% de l'énergie du champ continu  $u_p$ . Cela correspond approximativement au maximum de l'énergie décorrélé mesurée par Février (2000) en turbulence homogène isotrope stationnaire (Fig. 2.4). L'opérateur de projection étant linéaire, le champ de filtré est la somme d'une contribution  $\tilde{u}_p$  du champ corrélé  $u_p$  et d'une contribution du champ décorrélé  $\delta V^{(k)}$  (notée  $\tilde{\delta v}$ ). En plus du critère précédent sur l'erreur spatiale, la projection doit être capable d'éliminer le bruit ( $\tilde{\delta v} \ll \tilde{u}_p$ ). La figure 3.4



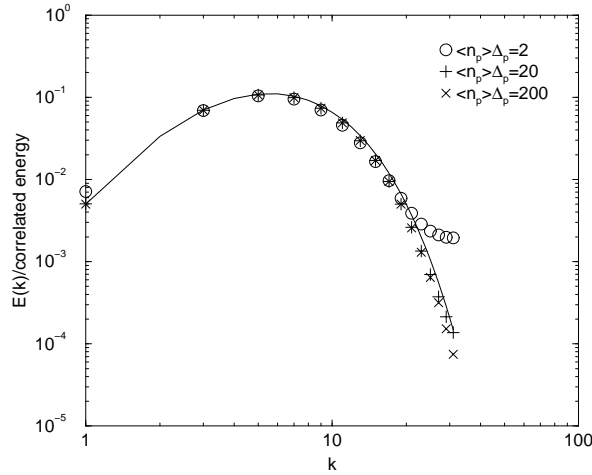


FIG. 3.5 – Spectre d’énergie de la vitesse projeté  $\tilde{u}_p$  pour 2, 20 et 200 particules par cellule. cas synthétique 1D ; projection gaussienne. La ligne continue est le spectre d’énergie de  $u_p$ .

présente l’erreur en fonction du nombre de particules et de la projection utilisée pour le cas bruité. La convergence en fonction du nombre de particules est plus lente, ainsi plus de 100 particules par cellule sont nécessaires pour atteindre le niveau de l’erreur systématique. La classification des projections reste toutefois la même. La projection gaussienne permet d’obtenir à peu près la même erreur que la projection boîte pour un grand nombre de particules et est moins sensible aux erreurs statistiques pour un faible nombre de particules. Cette projection semble être un bon compromis entre erreur spatiale et erreur statistique.

Pour analyser plus en détail les erreurs commises par la projection gaussienne, les spectres d’énergie de  $u_p$ ,  $\tilde{u}_p$  et  $\tilde{\delta v}$  sont tracés pour trois différents nombre moyen de particules par cellule (2, 20 et 200) (Fig. 3.5-3.7). Pour les trois densités de particules, le spectre de la vitesse filtrée est bien retrouvé à grandes échelles (petit nombre d’onde  $k$ ) (Fig. 3.5). Dans le cas 2 particules en moyenne par cellule, le spectre présente une sur-estimation de l’énergie à petite échelle. Cet effet est supprimé quand le nombre de particules augmente : les spectres obtenus avec 20 et 200 particules par cellules sont quasiment identiques jusqu’au nombre d’onde le plus élevé. En comparant les spectres de la vitesse projetée et non projetée, on observe une légère sous-estimation de l’énergie à petite échelle et qui est due à l’erreur spatiale présentée précédemment.

Les spectres d’énergie du bruit sont tracés sur la figure 3.6. Ces spectres sont à peu près plats et leur niveau décroît linéairement avec l’inverse de la densité de particules. Ces niveaux sont comparable à celui du spectre d’énergie du champ de vitesse. De façon plus précise, ce niveau peut être évalué : le spectre d’énergie d’un bruit blanc discretisé sur  $N_p = \langle n_p \rangle NX$  points régulièrement espacés est constant entre les nombre d’onde minimum ( $2\pi/(NX\Delta_p)$ ) et le nombre de Nyquist ( $N_p/2 = \langle n_p \rangle NX\Delta_p/2$ ). En considérant

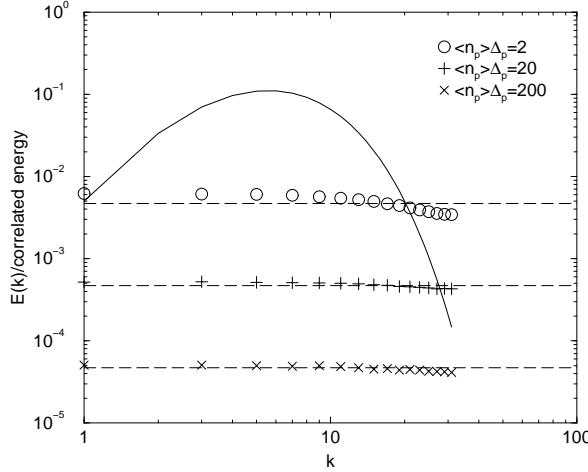


FIG. 3.6 – Spectre du bruit projeté  $\tilde{\delta v}$  pour 2, 20 et 200 particules par cellule. cas synthétique 1D ; projection gaussienne. Les lignes pointillées horizontales correspondent au modèle du spectre du bruit (éq. 3.17).

que l'intégrale du spectre donne l'énergie décorrélée  $\delta q_p^2$ , le niveau du spectre d'énergie du bruit  $E_{\delta v}(k)$  est :

$$E_{\delta v}(k) = \frac{NX\Delta_p}{2\pi} \left(\frac{N_p}{2} - 1\right)^{-1} \delta q_p^2 \quad (3.16)$$

$$\approx \frac{1}{\pi \langle n_p \rangle} \delta q_p^2 \quad (3.17)$$

Pour des particules qui ne sont pas régulièrement espacées, l'équation précédente peut être utilisée comme un modèle du bruit. En comparant les spectres d'énergie du bruit projeté avec ce modèle, le niveau des spectres et la dépendance à la densité de particule sont correctement prédits (2% d'erreur sur les niveaux). La projection filtre le bruit et supprime les échelles plus petites que la maille.

On s'intéresse maintenant à la projection du champ de vitesse bruité (Fig. 3.7). Les échelles les plus énergétiques sont correctement prédites quelque soit le nombre de particules. A petite échelle, le spectre d'énergie de  $\tilde{u}_p$  suit celui du bruit dans les cas 2 et 20 particules par cellule : la projection n'est pas capable d'éliminer le bruit du champ de vitesse. En augmentant le nombre de particules (cas 200 particules), l'énergie du bruit devient négligeable pour tous les nombres d'onde. Un critère a posteriori de validité des spectres d'énergie dans le cas d'un champ bruité peut être défini par :

$$E_{\tilde{u}_p}(k) > \frac{1}{\pi \langle n_p \rangle} \delta q_p^2 \text{ pour tout les } k \quad (3.18)$$

En résumé, lorsque l'on obtient des champs eulériens par projection de grandeurs lagrangiennes, les erreurs commises sont de deux types :

- une erreur spatiale intrinsèque à chaque projecteur,
- une erreur statistique due au nombre limité de particules par cellule.

L'utilisation d'une méthode de projection bien choisie (projection gaussienne par exemple) avec suffisamment de particules, permet d'obtenir des champs eulériens correctes.

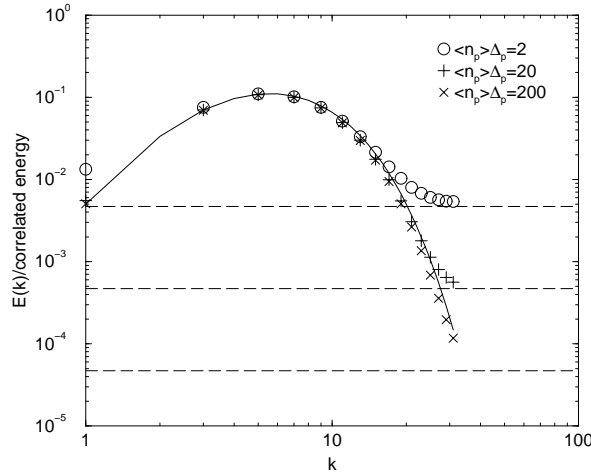


FIG. 3.7 – Spectre d’énergie de la vitesse bruitée projetée  $\tilde{u}_p + \tilde{\delta v}$  pour 2, 20 et 200 particules par cellule. cas synthétique 1D ; projection gaussienne. La ligne continue est le spectre d’énergie de  $u_p$ . Les lignes pointillées horizontales correspondent au modèle du spectre du bruit (éq. 3.17).

### 3.3.3 Cas réel 3D

Deux champs lagrangiens avec 10 et 80 millions de particules ont été étudiés. Les particules sont placées aléatoirement avec une vitesse égale à celle du fluide à leur position. Les quantités lagrangiennes sont alors projetées sur un maillage  $64^3$  et  $128^3$ . Le spectre d’énergie de la vitesse projetée suit celui du fluide sur environ 4 décades (Fig. 3.8). L’augmentation d’énergie à petite échelle n’est pas physique et peut, comme prévu être limitée en augmentant le nombre de particules.

Les deux simulations (DNS+DPS) correspondant à ces deux initialisations ont été réalisées (cas A2 :  $Re_t = 13,6$ ,  $St = 1,1$ ,  $St_K = 2,2$ ). Les champs lagrangiens instantanés après environ un temps de relaxation des particules sont analysés ( $t/\tau_p = 1.4$ ). A cet instant, l’énergie décorrélée représente environ 16% de l’énergie corrélée, et la distribution des particules est inhomogène (régime de concentration préférentielle). Les spectres d’énergie corrélée obtenus avec les projections boîte, volumique large et gaussienne sont présentés sur la figure 3.9abc. La comparaison des spectres obtenus à partir des résultats avec 10 et 80 millions de particules projetés sur un même maillage  $64^3$  permet de vérifier la convergence statistique des résultats. La comparaison des résultats projetés sur les maillages  $64^3$  et  $128^3$  permet d’évaluer la propension de la méthode projection à filtrer les petites échelles. De manière synthétique, on note que :

- les résultats sont non-convergés avec la projection boîte.
- la convergence est obtenue avec les projections volumique large et gaussienne.
- La projection volumique atténue de façon notable l’énergie des échelles de nombres d’onde légèrement inférieurs au nombre d’onde de coupure du maillage.
- Les plus petites échelles mesurées sont très peu affectées par la projection gaussienne.

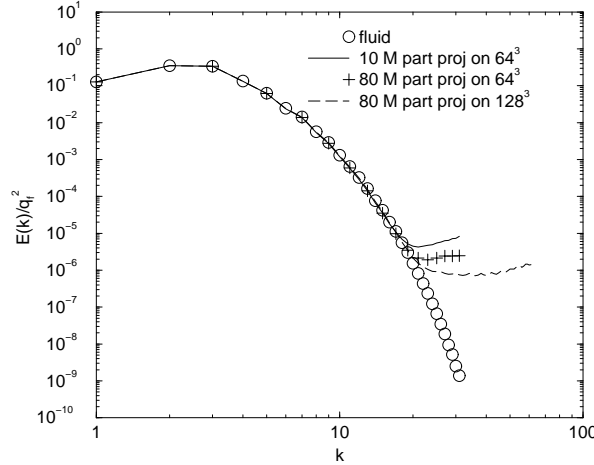


FIG. 3.8 – Spectres d'énergie corrélée initiaux. Cas réels A2-A2'. Projection gaussienne.

Ces résultats sont tout à fait similaires au cas synthétique en une dimension et confirme ainsi l'analyse précédente de la mesure de quantités mésoscopiques. De plus, en comparant les spectres obtenus avec  $8 \cdot 10^7$  particules sur les maillages  $64^3$  et  $128^3$ , il semble que des échelles non triviales existent pour de très grands nombres d'onde.

Le modèle du spectre de bruit 1D (éq. 3.17) est étendu au cas 3D en remplaçant le nombre total de particules par le nombre de particules dans une seule direction ( $\langle n_p \rangle \Delta_p^3 NX$ ), ce qui donne le critère de validité du spectre de vitesse corrélée suivant :

$$E_{\tilde{u}_p}(k) > \frac{1}{\pi \langle n_p \rangle \Delta_p^2} \delta q_p^2 \text{ pour tout les } k \quad (3.19)$$

Le critère de validité est satisfait dans les cas A2-A2' (Fig. 3.10). Ce critère ne dépend pas de la projection utilisée et n'est donc pas suffisant pour assurer la validité du spectre. De plus, ce critère ne prend pas en compte les inhomogénéités de la répartition spatiale des particules et de l'énergie décorrélée. Il peut, toutefois, être utilisé comme un premier indicateur faute de meilleur critère.

Dans la suite, les erreurs seront évaluées quantitativement sur ce même cas cas réel en utilisant la projection gaussienne pour  $10^7$  particules projetées sur un maillage  $64^3$ . Par souci de simplification des écritures, les grandeurs eulériennes obtenues par projection des quantités lagrangiennes sont, dans la suite du mémoire, assimilées aux grandeurs mésoscopiques définies au Chap. 2 :  $\tilde{n}_p$  et  $\tilde{\mathbf{u}}_p$  sont remplacés par  $n_p$  et  $\mathbf{u}_p$ .

### 3.4 Validation de la mesure des grandeurs mésoscopiques

Le choix de la méthode de projection gaussienne a été choisie pour mesurer correctement le champ de vitesse corrélé. La mesure du mouvement décorrélé est décrite dans le paragraphe suivant. Les différentes erreurs seront évaluées quantitativement sur le cas réel déjà utilisé.

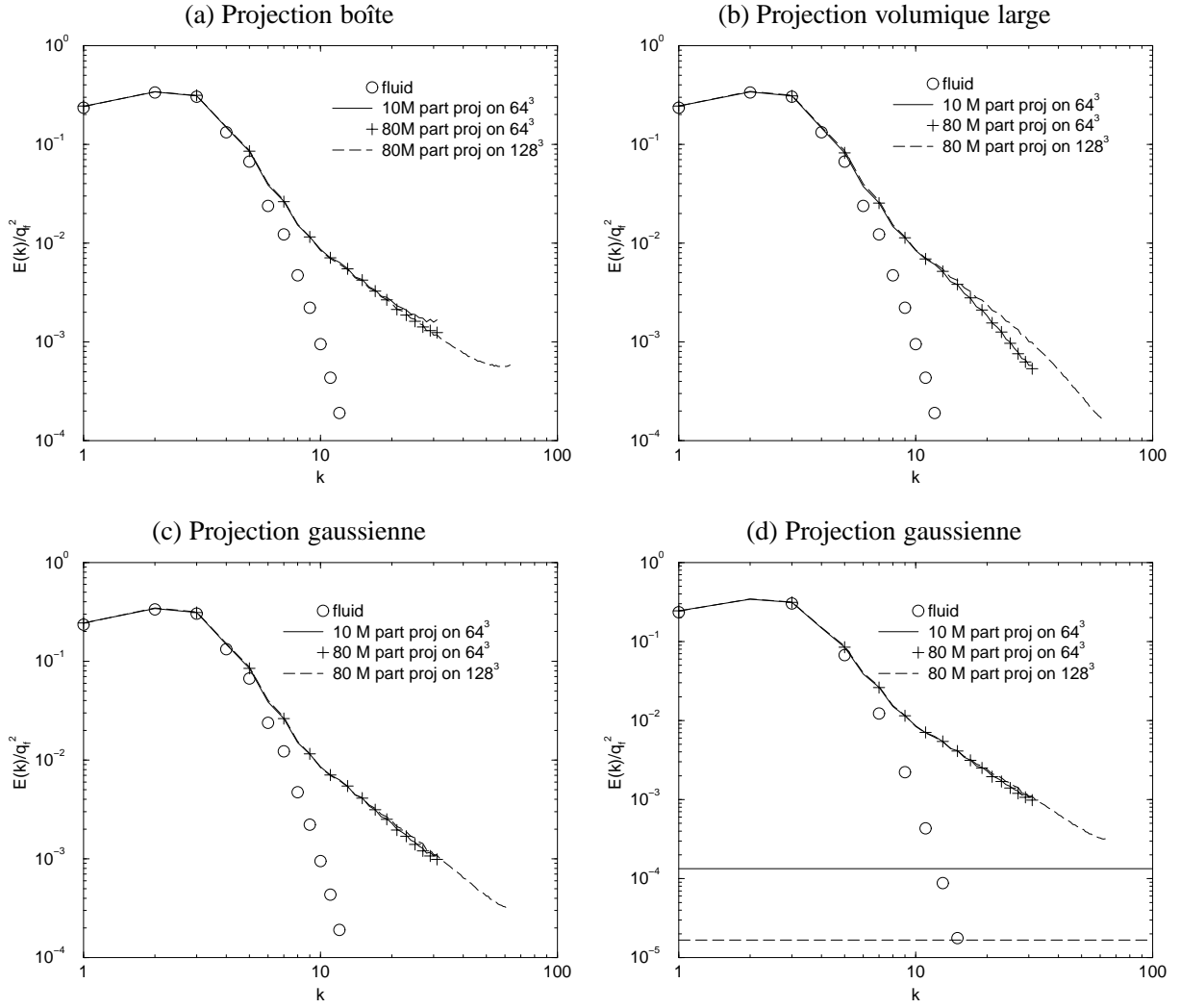


FIG. 3.9 – (abc) Spectres d'énergie corrélée obtenus pour différentes méthodes de projection. Cas réels A2-A2' à  $t/\tau_p = 1.4$ . (d) Spectre d'énergie corrélée obtenu par la projection gaussienne. Le critère de validité (éq. 3.19) est représenté par les lignes horizontales : cas A2 projeté sur  $64^3$  et cas A2' projeté sur  $128^3$  : ligne continue ; cas A2' projeté sur  $64^3$  : ligne tiretée. Cas réels A2-A2' à  $t/\tau_p = 1.4$ .

### 3.4.1 Mesure du mouvement décorrélé

L'énergie non corrélée peut être mesurée soit par projection de l'énergie cinétique totale des particules (méthode 1) :

$$\tilde{n}_p \widetilde{\delta\theta}_p = \frac{1}{2} \frac{1}{V_c} \sum_i \sum_k w(\mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{Q}) V_i^{(k)2} - \frac{1}{2} \tilde{n}_p \sum_i \tilde{u}_{p,i}^2 \quad (3.20)$$

ou bien par projection du mouvement non-corrélé associé à chaque particule (méthode 2) :

$$\delta\mathbf{V}^{(k)} = \mathbf{V}^{(k)} - \tilde{\mathbf{u}}_p(\mathbf{X}^{(k)}) \quad (3.21)$$

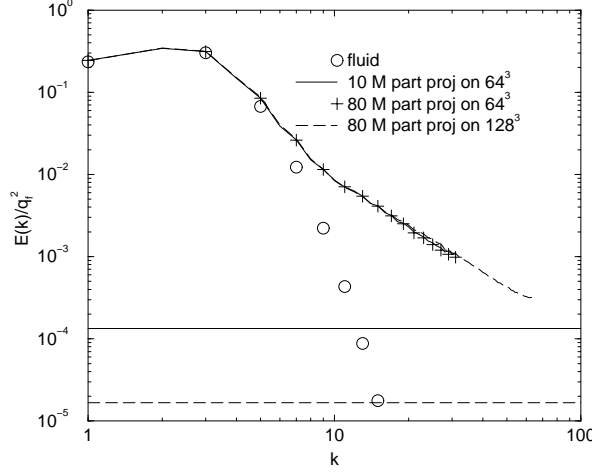


FIG. 3.10 – Spectre d'énergie corrélée obtenu par la projection gaussienne. Le critère de validité (éq. 3.19) est représenté par les lignes horizontales : cas A2 projeté sur  $64^3$  et cas A2' projeté sur  $128^3$  : ligne continue ; cas A2' projeté sur  $64^3$  : ligne tiretée. Cas réels A2-A2' à  $t/\tau_p = 1.4$ .

Maillage de projection	$64^3$	$80^3$	$96^3$	$128^3$	$160^3$	$192^3$
$\Delta x/\eta_K$	0.97	0.78	0.65	0.49	0.39	0.33
Case 1	38.1	19.5	11.3	4.77	2.44	1.41
Case 2	304	156	90.4	38.1	19.5	11.3

TAB. 3.2 – Nombre moyen de particules par cellule pour différents maillages de projection.

Cette étape nécessite une interpolation du champ de vitesse corrélé obtenu précédemment, à la position de chaque particule. Les moments d'ordre deux (tenseur double des corrélations du mouvement décorrélé  $\delta R_{p,ij}$ ) sont obtenus par projection des mouvements non-corrélés associés à chaque particule.

$$\tilde{n}_p \widetilde{\delta R}_{p,ij} = \frac{1}{V_c} \sum_k w(\mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{Q}) \delta V_i^{(k)} \delta V_j^{(k)} \quad (3.22)$$

L'énergie non-corrélée sera alors donnée par la moitié de la trace de du tenseur  $\delta R_{p,ij}$ .

Par les deux méthodes de mesure, l'énergie décorrélée évolue de la même façon (Fig. 3.11). La méthode 1 suppose que le champ de vitesse corrélée est constant dans le volume  $V_c$  autour de chaque nœud. Ses variations à cette échelle sont incluses dans l'énergie décorrélée mesuré par la méthode 1, c'est pourquoi la méthode 1 surestime la RUE. La méthode 2 plus coûteuse en terme de calcul permet de réduire l'erreur à l'initialisation de quasiment deux ordres de grandeurs : la RUE mesurée étant bien négligeable à cette instant. Dans toute la suite de l'étude, les grandeurs liées à la vitesse décorrélée seront toujours mesurées par la méthode 2.

Le biais statistique dû au nombre limité de particules dans le domaine sur le calcul de l'énergie décorrélée peut lui aussi être quantifié. Les résultats Lagrangiens à l'instant  $t = 1.4\tau_p$  sont projetés sur des maillages réguliers comportants de  $64^3$  à  $192^3$  nœuds, ce qui induits différentes valeurs du nombre moyen de particules par cellule (Tab. 3.2). La figure 3.12 montre l'évolution de l'énergie décorrélée moyenne mesurée en fonc-

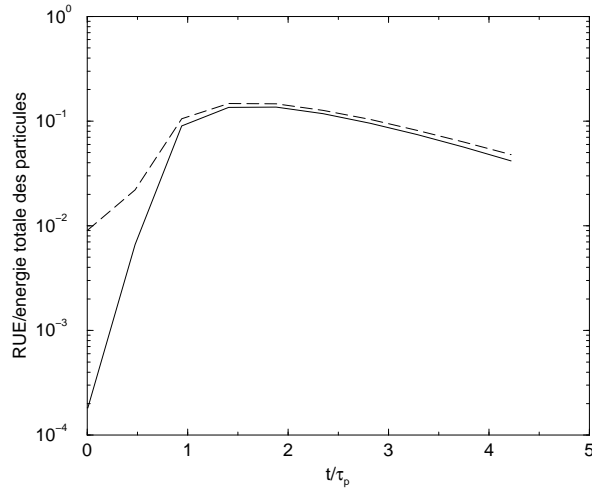


FIG. 3.11 – Evolution temporelle de la fraction moyenne d'énergie particulaire sous forme décorrélée mesurée par la méthode 1 (ligne pointillée) et la méthode 2 (ligne continue). Cas réel A2,  $10^7$  particules projetées sur un maillage  $64^3$ .

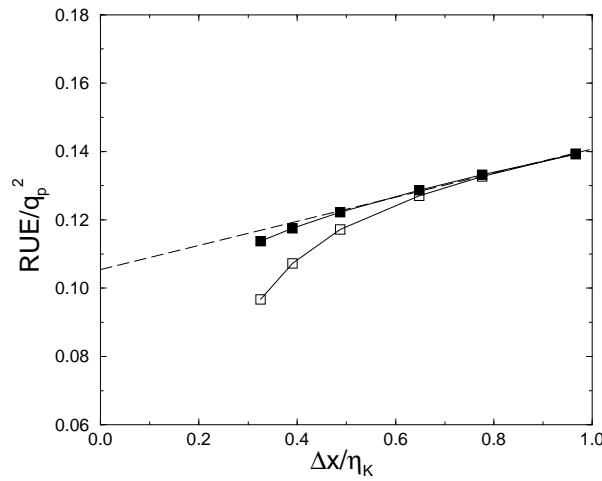


FIG. 3.12 – Fraction moyenne d'énergie particulaire sous forme décorrélée mesurée par la méthode 2 sur les maillages de projection  $64^3$ ,  $80^3$ ,  $96^3$ ,  $128^3$ ,  $160$  et  $192^3$ . Cas réel A2,  $10^7$  particules (carrés vides) et cas réel A2',  $8 \cdot 10^7$  particules projetées (carrés pleins), à  $t/\tau_p = 1.4$ . La ligne tiretée est une interpolation linéaire des résultats obtenus avec les maillages  $64^3$  et  $80^3$ .

Corrélations de $\delta\mathbf{V}^{(k)}$	définition	corrélations initiale	corrélations à $t/\tau_p = 1.4$
avec $\mathbf{u}_f(\mathbf{X}^{(k)})$	$\frac{\{\mathbf{u}_f(\mathbf{X}^{(k)}), \delta\mathbf{V}^{(k)}\}}{\sqrt{\{\mathbf{u}_f(\mathbf{X}^{(k)}), \mathbf{u}_f(\mathbf{X}^{(k)})\}\{\delta\mathbf{V}^{(k)}, \delta\mathbf{V}^{(k)}\}}}$	0,3	0,006
avec $\mathbf{u}_p(\mathbf{X}^{(k)})$	$\frac{\{\mathbf{u}_p(\mathbf{X}^{(k)}), \delta\mathbf{V}^{(k)}\}}{\sqrt{\{\mathbf{u}_p(\mathbf{X}^{(k)}), \mathbf{u}_p(\mathbf{X}^{(k)})\}\{\delta\mathbf{V}^{(k)}, \delta\mathbf{V}^{(k)}\}}}$	0,3	0,03

TAB. 3.3 – Corrélation du mouvement « décorrélé » avec la vitesse du fluide « vue »  $\mathbf{u}_f(\mathbf{X}^{(k)})$  et la vitesse corrélée de la particule  $\mathbf{u}_p(\mathbf{X}^{(k)})$ . Cas réel A2,  $10^7$  particules projetées sur un maillage  $64^3$ .

tion du raffinement du maillage de projection. Dans les cas A2-A2' projetés sur  $64^3$  et  $80^3$ , les résultats sont indépendants du nombre de particules : au minimum, 20 particules en moyenne par cellule sont nécessaires pour obtenir la convergence statistique. La RUE mesurée diminue légèrement avec la taille des mailles, ce qui indique qu'il existe des échelles plus petites que le maillage qui ne peuvent être capturée sur les maillages utilisés. Toutefois, la limite de la mesure de la RUE moyenne est non nulle lorsque la taille des cellules tend vers zéro ( $\delta q_p^2 \approx 0,11q_p^2$ ).

Le formalisme eulérien mésoscopique suppose que les corrélations en deux points entre la vitesse décorrélée d'une particule d'une part et la vitesse du fluide « vu » , la vitesse particulaire corrélée et la vitesse décorrélée d'une deuxième particule d'autre part sont nulles. Pour des raisons numériques, liées à la parallélisation du code de calcul par décomposition de domaine, on se limitera à des corrélations en un point. Les corrélations moyennes de vitesses « décorrélée » -corrélée et de vitesse « décorrélée » -fluide « vu » de chaque particule  $\delta\mathbf{V}^{(k)}$  sont reportées dans le tableau 3.3. A l'initialisation, la RUE mesurée est négligeable devant l'énergie totale des particules et l'erreur commise est corrélée avec les champs  $\mathbf{u}_f$  et  $\mathbf{u}_p$  qui sont théoriquement égaux. A l'instant  $t/\tau_p = 1,4$ , la vitesse « décorrélée » des particules ne présente qu'une corrélation marginale avec les vitesses particulières corrélée et du fluide « vu ».  $\delta\mathbf{V}^{(k)}$  mesuré est bien décorrélée.

A titre indicatif, les PDF des vitesses particulières sont présentés (Fig. 3.13). Les PDF des vitesses Lagrangiennes totales et corrélées sont gaussiennes. Alors que celle de la vitesse décorrélée ne l'est pas. On peut noter que dans l'approche eulérienne adoptée aucune hypothèse sur la forme des différentes PDF de vitesses n'a été nécessaire pour obtenir les équations mésoscopiques sans collision interparticulaire. La prise en compte des collisions nécessitera un modèle pour la PDF locale des vitesses décorrélées, PDF locale qu'il n'a pas été possible de mesurer dans le présent travail à cause du nombre trop faible de particules pour mesurer des PDF suivant les trois dimensions de l'espace des vitesses.

### 3.4.2 Evaluation quantitative des erreurs

Les erreurs sur certaines grandeurs moyennes peuvent être évalué en comparant les grandeurs eulériennes mésoscopiques avec leurs homologues lagrangiennes :



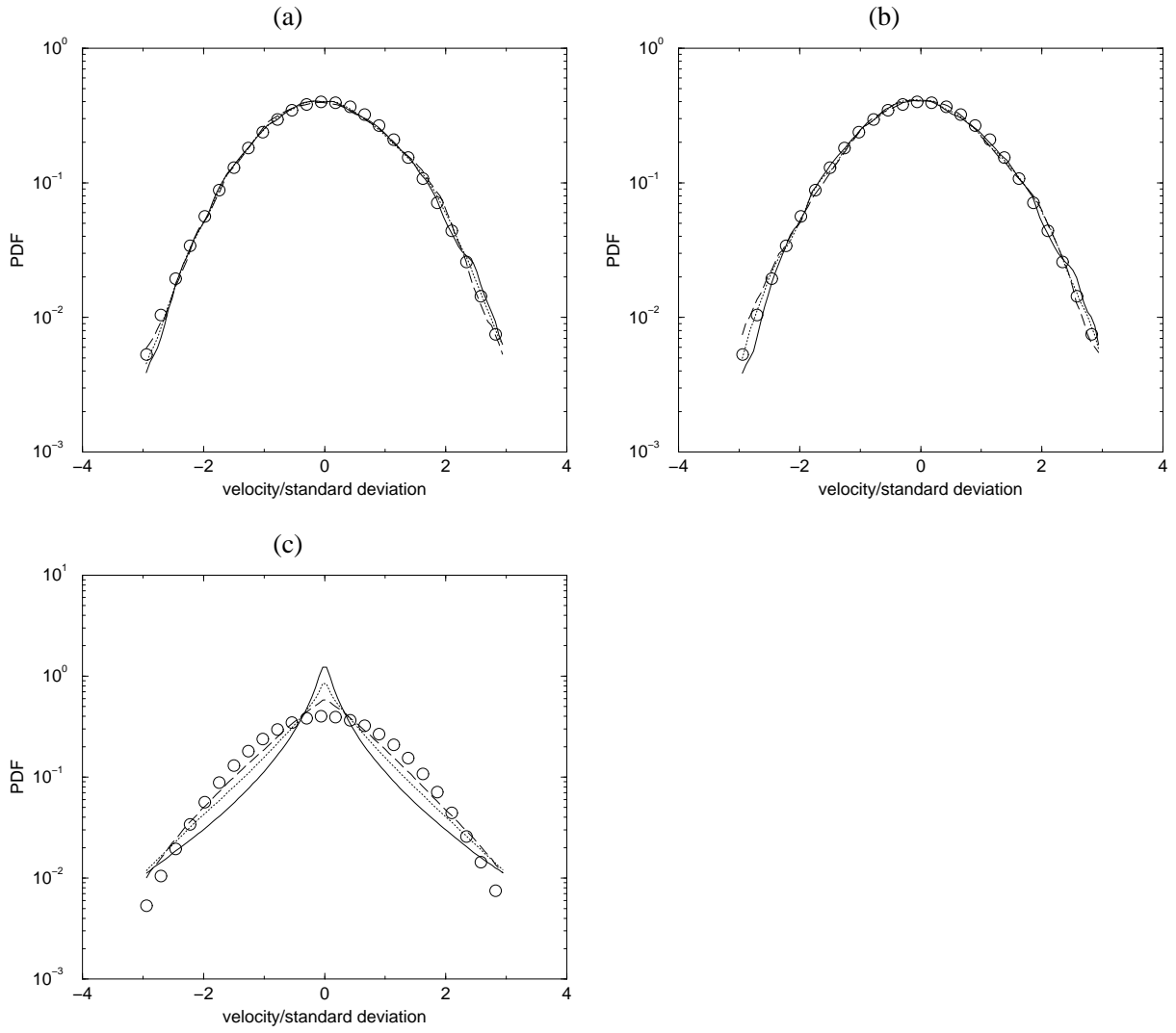


FIG. 3.13 – PDF normalisées des vitesses particulières : vitesses totales  $V_i^{(k)}$  (a), corrélées  $u_{p,i}(\mathbf{X}^{(k)})$  (b) et vitesses décorrélées  $\delta V_i^{(k)}$  (c) à l’instant  $t/\tau_{f0}^t = 1.01$ . cas B1 : lignes continues ; B2 : lignes pointillées ;  $St_K^0 = 5.1$  : lignes tiretées ; Distribution gaussienne : cercles.

Quantité	erreur initiale	erreur à $t/\tau_p = 1.4$
densité du nombre de particules	0,01%	-0,009%
énergie totale particulaire	-0,9%	-1,2%
covariance fluide-particule	-0.4%	-0.4%
énergie du fluide « vu »	0,02%	0,05%

TAB. 3.4 – Evaluation des erreurs sur les grandeurs mésoscopiques moyennes. Cas réel A2,  $10^7$  particules projetées sur un maillage  $64^3$ .

Quantité moyenne	lagrangienne	eulérienne
densité de particules	$\frac{N_p}{NX^3}$	$\langle n_p \rangle$
énergie des particules $q_p^2$	$\frac{1}{2} \{ (U_{p,m}^{(k)})^2 \}$	$\frac{1}{2} \frac{\langle n_p (u_{p,m}^2 + \delta\theta_p) \rangle}{\langle n_p \rangle}$
covariance fluide-particule $q_{fp}$	$\{ U_{p,m}^{(k)} u_{f,m}(\mathbf{X}_p^{(k)}) \}$	$\frac{\langle n_p u_{p,m} u_{f,m} \rangle}{\langle n_p \rangle}$
énergie du fluide « vu » $q_{f@p}^2$	$\frac{1}{2} \{ (u_{f,m}(\mathbf{X}_p^{(k)}))^2 \}$	$\frac{1}{2} \frac{\langle n_p (u_{f,m})^2 \rangle}{\langle n_p \rangle}$

où  $\langle . \rangle$  désigne la moyenne volumique (sur l'ensemble des nœuds du maillage) alors que  $\{ . \}$  est la moyenne sur toutes les  $N_p$  particules  $k$ . L'erreur sur la densité de particules permet d'évaluer la conservation des grandeurs moyennes par la projection gaussienne. Les erreurs sur la covariance fluide-particule et sur l'énergie du fluide « vue » permet en plus de tester l'interpolation. L'erreur sur les quantités moyennes utilisée est définie par :

$$\text{erreur} = \frac{\text{quantité eulérienne} - \text{quantité lagrangienne}}{\text{quantité lagrangienne}} \quad (3.23)$$

Les quantités lagrangiennes sont prises comme référence. Ces erreurs sont évaluées quantitativement sur le cas 10 millions de particules projeté sur un maillage  $64^3$  à l'initialisation et à  $t/\tau_p = 1.4$  (Tab 3.4). L'erreur sur la densité du nombre de particules est suffisamment faible pour estimer qu'avec  $10^7$  dans la simulation, les grandeurs moyennes sont conservées par projection à 0,01% près. L'erreur sur l'énergie du fluide à l'emplacement des particules est aussi négligeable, de plus le spectre d'énergie du fluide « vue » à l'initialisation (Fig. 3.8) est très proche de celui du fluide, ces deux éléments permettent de valider la procédure d'interpolation par polynôme de Lagrange. L'énergie totale des particules et dans une moindre mesure la covariance fluide-particule sont sous-estimées (environ 1% pour  $q_p^2$ ). La projection par son effet de filtrage (même limité par l'utilisation d'un noyau gaussien) a supprimé l'énergie corrélée aux échelles inférieures à la taille de maille.

### 3.5 Traitement des zones sans particule

Dans les cas présentant une forte concentration préférentielle des particules, il peut arriver que la densité du nombre de particules de quelques cellules du maillage soit nulle et ceci même en simulant plusieurs millions de particules et en ayant choisi une méthode de projection adéquate. La vitesse eulérienne mésoscopique n'est alors pas définie en ces emplacements. Toutefois pour mesurer des spectres d'énergie

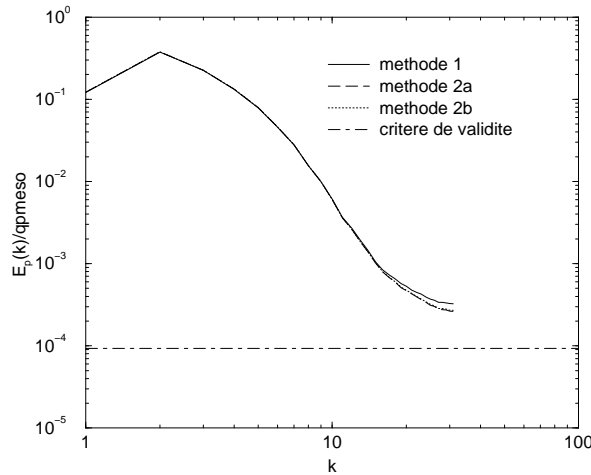


FIG. 3.14 – Traitement de la vitesse corrélée dans les cellules sans particule. Spectre d’énergie corrélée. Cas réel *B2* à  $t/\tau_f^t = 3,5$ . Projection gaussienne sur maillage  $64^3$ . La ligne horizontale est le critère de validité du spectre.

corrélée, la vitesse mésoscopique doit être définie en tout point du maillage. Deux méthodes ont été testées : la vitesse en ces points est choisie nulle (méthode 1) ou bien elle est la moyenne des vitesses des nœuds voisins (si la vitesse en ces points existe) (méthode 2). Deux variantes de la méthode 2 ont été testées :

- Méthode 2a : moyenne non pondérée sur la distance radiale d’une maille (ou plus si il n’y a pas de vitesse définie).
- Méthode 2b : moyenne pondérée gaussièmement sur une distance de 4 mailles.

Seuls les champs de vitesse corrélée sont modifiés, les autres quantités mésoscopiques sont choisies nulles en ces points.

Dans les cas simulés et en raison du grand nombre de particules prises en compte, la présence de zones vides de particules est exceptionnelle. Dans le cas *B2* ( $Re_t = 40,2$ ,  $St_K = 2,2$ ,  $8 \cdot 10^7$  particules) projeté sur un maillage  $64^3$  à l’instant  $t/\tau_f^t = 3,5$  (fin de simulation), 0,4% des cellules possède une densité du nombre de particules nulle. Les champs de vitesses corrélées obtenus par les deux méthodes sont très similaires (Fig. 3.14). La méthode 1 attribue plus d’énergie aux petites échelles que la méthode 2. Les deux variantes de la méthode 2 donnent des résultats quasi identiques. Les méthodes 2 permettent de conserver la continuité du champ de vitesse corrélée et seront utilisées par la suite. Le critère de validité du spectre (ligne horizontale) est tout juste vérifié, ce qui peut expliquer l’infléchissement des spectres pour les nombres d’ondes les plus élevés (supérieurs à 28). Une autre explication possible est la ségrégation des particules qui induit un nombre de cellules avec peu de particules ce qui occasionne une incertitude sur la mesure du mouvement corrélé. Une interpolation plus élaborée pourrait être nécessaire pour des cas avec moins de particules simulées (et donc plus de cellules vides). Toutefois la simple méthode 2a semble suffisante dans les cas traités ici.

### 3.6 Conclusion du chapitre

Des résultats de simulations lagrangiennes peuvent être analysés en terme des grandeurs mésoscopiques eulériennes (présentées au chapitre 2). Cela nécessite l'emploi d'une procédure de projection sur un maillage. Plusieurs types de projections ont été testées. La projection gaussienne permet de concilier une convergence satisfaisante des résultats pour un nombre de particules non prohibitif (plusieurs dizaines par mailles au minimum) et une bonne détection des plus petites échelles mesurable sur un maillage donné.

La non-convergence statistique se traduit par un palier dans les spectres d'énergie corrélée à petite échelle. La convergence en fonction du nombre de particules est plus rapide dans le cas où la distribution de vitesses des particules est continue. Le mouvement décorréolé des particules limite la détection des échelles les moins énergétiques. Pour donner un ordre de grandeur, pour un calcul avec 10 millions de particules, les spectres mesurés sont fiables sur environ 4 décades en absence de mouvement décorréolé et sur au moins 2 décades et demi si l'énergie décorréolée est de environ 15% de l'énergie corrélée. Un modèle simple pour l'évaluation de l'énergie la plus faible mesurable a été proposé.

Les erreurs commises par projection ont été quantifiées sur un cas de calcul 3D sans et avec la présence d'une composante décorréolée dans la vitesse des particules. Dans la suite de l'étude, tous les résultats seront obtenus par la méthode de projection gaussienne, la notation  $\tilde{\cdot}$  sera abandonnée et l'on supposera que les champs eulériens reconstruits sont bien les champs eulériens mésoscopiques.

## Chapitre 4

# Analyse des champs eulériens mésoscopiques

Les champs eulériens mésoscopiques obtenus par projection des résultats lagrangiens sont analysés dans ce chapitre. On s'intéresse, dans l'ordre, aux évolutions des énergies moyennes, à la concentration préférentielle des particules et aux spectres de puissance de la vitesse corrélée. Les différentes modélisations des effets du mouvement décorréolé des particules présentées au Chap. 2 sont, ensuite, testées a priori. Enfin, les résultats lagrangiens sont comparés aux simulations numériques directes Euler-Euler dans les cas A1 et A2 à faible Reynolds.

### 4.1 Evolution des grandeurs moyennes

Les énergies moyennes, corrélées et décorréolées, sont définies par :

$$\tilde{q}_p^2 = \frac{1}{2} \langle u_{p,i} u_{p,i} \rangle_p \quad (4.1)$$

$$\delta q_p^2 = \langle \delta \theta_p \rangle_p \quad (4.2)$$

où  $\langle \cdot \rangle_p$  désigne la moyenne de Favre relative à la phase particulaire sur l'ensemble du domaine de calcul :

$$\langle \phi \rangle_p = \frac{\langle n_p \phi \rangle}{\langle n_p \rangle} \quad (4.3)$$

où  $\langle \cdot \rangle$  est l'opérateur de moyenne volumique sur l'ensemble du domaine de calcul. La moyenne de l'énergie cinétique totale  $q_p^2 = \frac{1}{2N_p} \sum_{k=1}^{N_p} V_j^{(k)} V_j^{(k)}$  dans le formalisme lagrangien est définie de manière équivalente par la somme de l'énergies moyennes  $\tilde{q}_p^2$  et  $\delta q_p^2$  dans le formalisme eulérien mésoscopique. La vitesse initiale de chaque particule est la vitesse du fluide à sa position, l'énergie initiale des particules est totalement corrélée ( $q_p^2(t=0) = \tilde{q}_p^2$ ). Dans les cas de simulation B1, B2 et B3, et  $q_p^2$  décroît continuellement durant la simulation sous l'effet de la traînée (Fig. 4.1). La distribution initiale des vitesses particulières étant initialement hors équilibre (de type Tchen-Hinze), l'énergie décorréolée (RUE) augmente. Après un temps de relaxation

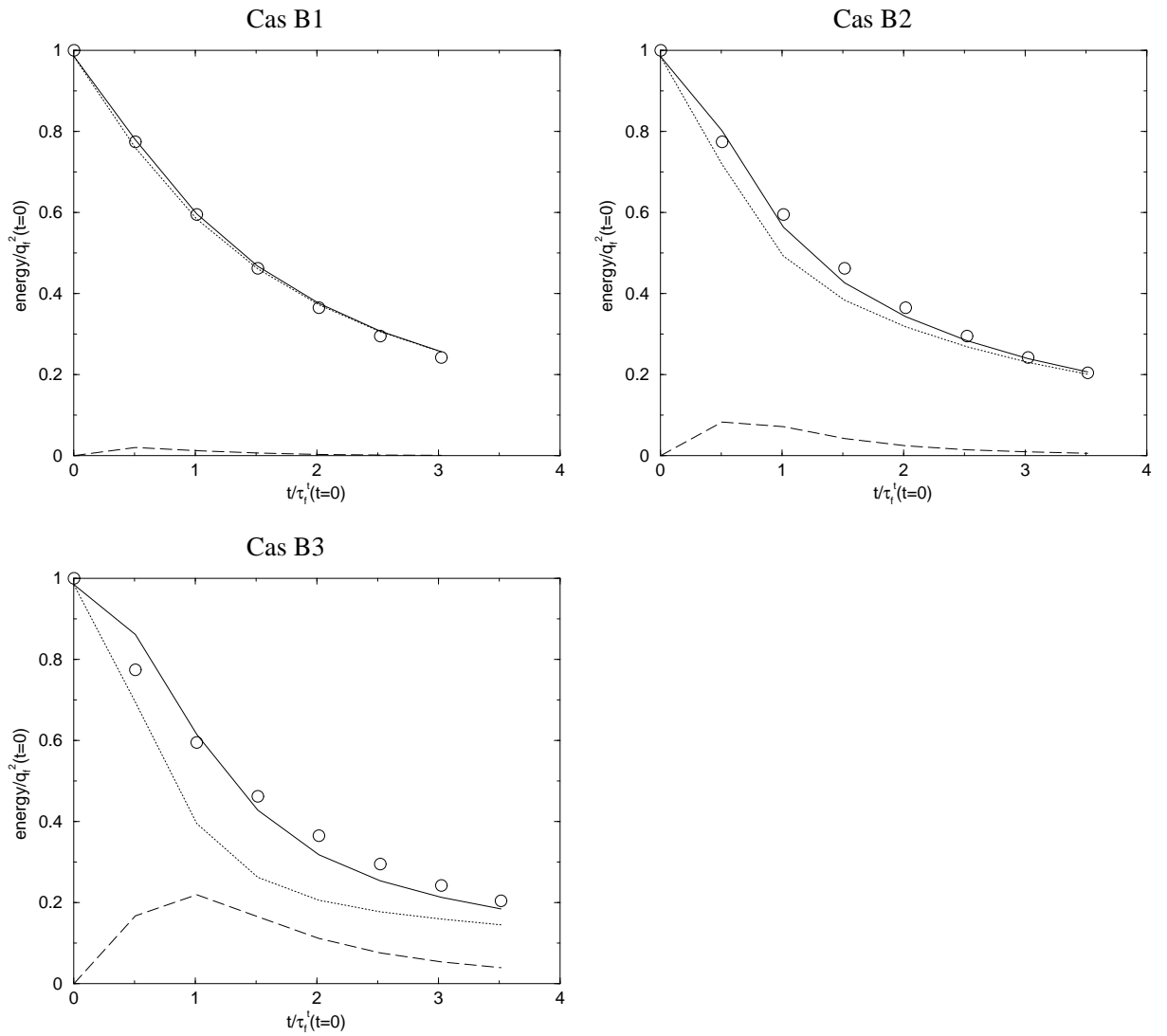


FIG. 4.1 – Evolution temporelle de l'énergie turbulente du fluide (cercles) et des énergies cinétiques moyennes des particules : totale  $q_p^2$  (ligne continue), corrélée  $\hat{q}_p^2$  (ligne pointillée) et décorrelée  $\delta q_p^2$  (ligne tiretée).

des particules, la RUE diminue sous l'effet de la traînée. En accord avec Février et al. (2005), la fraction d'énergie cinétique particulaire sous forme décorrelée augmente avec l'inertie des particules et est au maximum de 2%, 13% et 38% pour les cas B1, B2 et B3 correspondant à des nombres de Stokes initiaux basés sur l'échelle de Kolmogorov de  $St_K^0 = 1, 2, 2$  et  $5, 1$ .

En multipliant l'équation (2.34) par  $u_{p,i}$ , en la moyennant sur le domaine de calcul et en utilisant les condi-

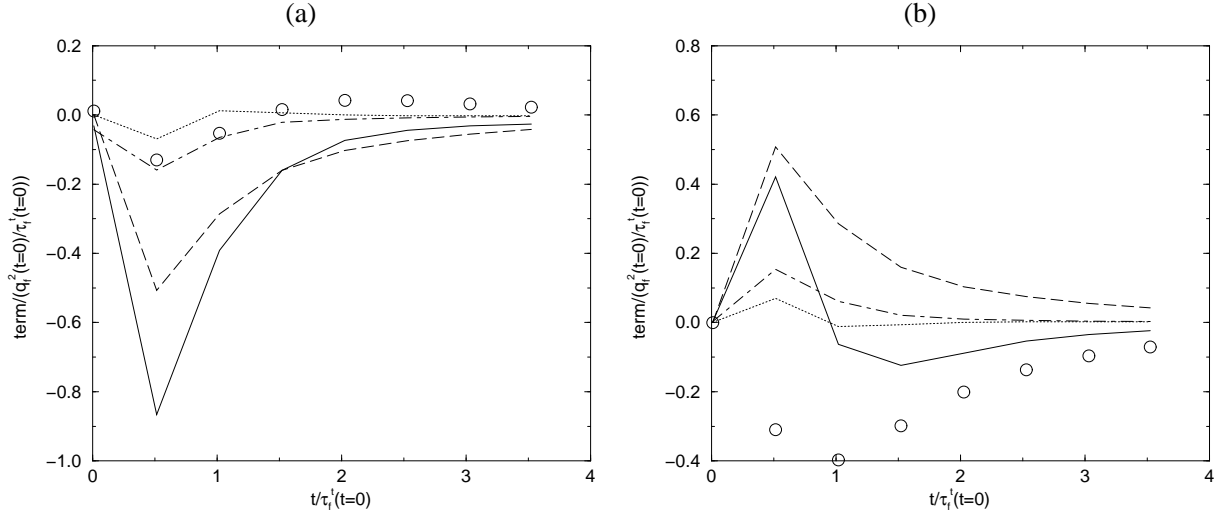


FIG. 4.2 – Evolution temporelle des termes du bilan de l'énergie corrélée moyenne (éq. 4.5) (a) et de l'énergie décorrélée moyenne (éq. 4.7) (b) mesurés dans le cas B3. Dérivée temporelle de l'énergie considérée : ligne continue ; traînée : cercles ; dissipation RUV : ligne tiretée ; pression dilatation particulière : ligne pointillée. La ligne mixte est l'erreur commise sur la fermeture du bilan (somme des termes de droite de l'équation bilan – le terme du membre de gauche).

tions aux limites périodiques, le bilan d'énergie corrélée moyenne dans la configuration étudiée est :

$$\frac{d}{dt} \tilde{q}_p^2 = -\frac{1}{\tau_p} (2\tilde{q}_p^2 - q_{fp}) + \langle \delta R_{p,ij} \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j} \rangle_p \quad (4.4)$$

$$= \underbrace{-\frac{1}{\tau_p} (2\tilde{q}_p^2 - q_{fp})}_I + \underbrace{\langle \delta R_{p,ij}^* \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j} \rangle_p}_{II} + \underbrace{\frac{2}{3} \langle \delta \theta_p \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_i} \rangle_p}_{III} \quad (4.5)$$

Les termes du membre de droite s'interprètent selon : *I* effet de la force de traînée sur l'énergie corrélée ; *II* dissipation par le mouvement décorrélé ; *III* terme de type « pression dilatation » particulière. L'évolution temporelle des termes du bilan d'énergie particulière corrélée dans le cas B3 est présenté sur la Fig. 4.2a. La vitesse initiale des particules étant égale à la vitesse du fluide, les particules sont initialement hors équilibre de Tchen-Hinze, et la traînée détruit de l'énergie corrélée. Par la suite, les vitesses des particules s'adaptent à l'écoulement fluide et le terme moyen de traînée devient positif à partir de  $t/\tau_{f0}^t = 1,5$  : la force de traînée produit alors, en moyenne, un mouvement particulière corrélé.

En moyennant l'équation locale de l'énergie décorrélée  $\delta \theta_p$  (éq. 2.45), on obtient le bilan de l'énergie décorrélée moyenne  $\delta q_p^2$  :

$$\frac{d}{dt} \delta q_p^2 = -\frac{2}{\tau_p} \delta q_p^2 - \langle \delta R_{p,ij}^* \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j} \rangle_p - \frac{2}{3} \langle \delta \theta_p \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_i} \rangle_p \quad (4.6)$$

La traînée détruit l'énergie décorrélée. Les termes *II* et *III* du bilan d'énergie corrélée apparaissent dans ce bilan avec un changement de signe : ainsi ces deux termes couplent  $\tilde{q}_p^2$  à  $\delta q_p^2$ . Le terme *II* dissipe l'énergie

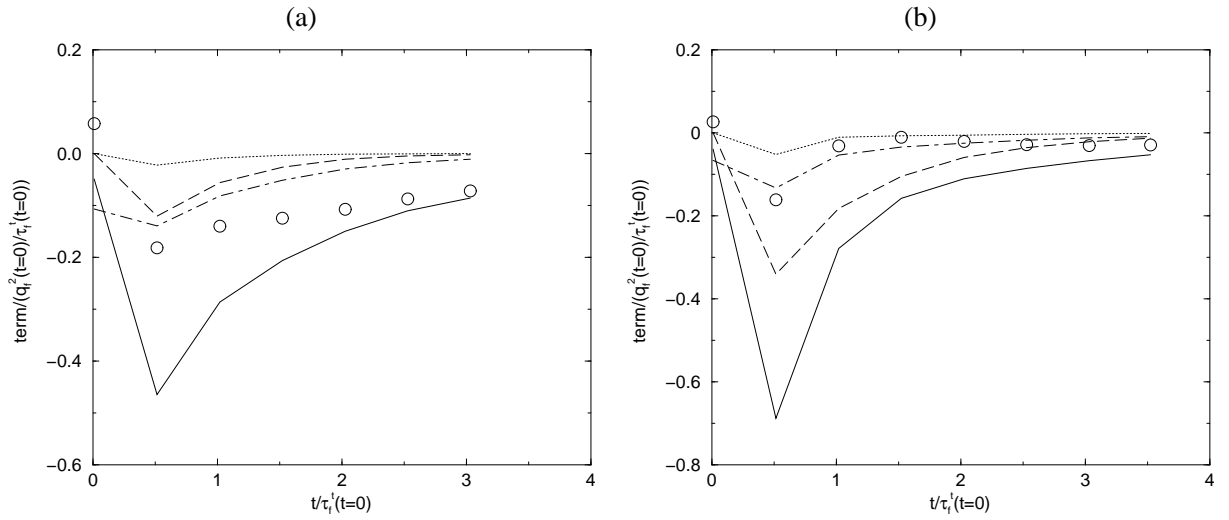


FIG. 4.3 – Evolution temporelle des termes du bilan de l'énergie corrélée moyenne (éq. 4.5) mesurés dans les cas B1 (a) et B2 (b).  $d\tilde{q}_p^2/dt$  : ligne continue ; traînée : cercles ; dissipation RUV : ligne tiretée ; pression dilatation particulière : ligne pointillée. La ligne mixte est l'erreur commise sur la fermeture du bilan (somme des termes de droite de l'équation bilan – le terme du membre de gauche).

corrélée en énergie décorrélée (Fig. 4.2a : valeur négative dans le bilan de  $\tilde{q}_p^2$  et Fig. 4.2b : valeur positive dans celui de  $\delta q_p^2$ ). En moyenne, le terme de pression-dilatation particulière (terme III) transfère de l'énergie du mouvement corrélé vers le mouvement décorrélé juste après l'initialisation ( $t/\tau'_{f0} = 0,5$ ), le sens du transfert est opposé dans la suite de la simulation. La valeur absolue de la pression dilatation moyenne représente en moyenne 5% du terme de dissipation. L'évolution temporelle des énergies corrélées et décorrélées moyennes est dominée par le terme II de transfert d'énergie corrélée vers l'énergie décorrélée et par la traînée.

L'énergie totale  $q_p^2$  est la somme de l'énergie corrélée et de l'énergie non corrélée. Son équation d'évolution est la somme des équations (4.5) et (4.6) :

$$\frac{d}{dt}q_p^2 = -\frac{1}{\tau_p}(2q_p^2 - q_{fp}) \quad (4.7)$$

Lorsque les quantités  $q_p^2$  et  $q_{fp}$  sont calculées à partir des champs eulériens, le bilan précédent est fermé avec une erreur moyenne de 1,8% contre 1% si ses quantités sont directement calculées à partir des résultats lagrangiens. L'erreur moyenne sur la fermeture des bilans des énergies corrélées et décorrélées moyennes est de 13% et 10% du terme dominant en valeur absolue. La somme de ces bilans étant correctement fermée, l'erreur doit donc être commise sur les termes de transferts entre  $\tilde{q}_p^2$  et  $\delta q_p^2$ . Il a été vérifié que la mesure de ces termes moyens était convergée en fonction du nombre de particules utilisées pour le calcul des champs eulériens. L'explication la plus probable de la sous-estimation du transfert est qu'une partie de la dissipation s'effectue à des échelles plus petites que la taille caractéristique du maillage eulérien de projection utilisé. L'évolution des termes du bilan de  $\tilde{q}_p^2$  dans les cas B1 et B2 est présenté sur la Fig. 4.3. Globalement,



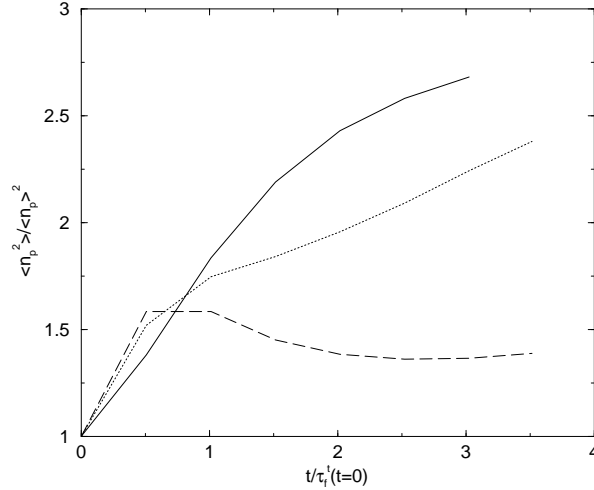


FIG. 4.4 – Evolution du paramètre de concentration préférentielle des particules  $\langle n_p^2 \rangle / \langle n_p \rangle^2$ . Cas B1 : ligne continue ; cas B2 : ligne pointillée ; cas B3 : ligne tiretée.

l'allure des courbes est la même que dans le cas B3. On peut noter que la traînée moyenne ne change pas de signe. L'erreur sur la fermeture du bilan moyen est plus grande pour les particules légères (cas B1 : 22%, B2 : 18% du terme dominant) et est même supérieure à la mesure du terme de dissipation moyenne de l'énergie corrélée dans le cas B1. La majeure partie de la dissipation par le mouvement décorrélé n'est pas capturée, ce qui peut signifier que plus les particules sont légères, plus la dissipation fait intervenir des échelles petites. En supposant que toute l'erreur sur la fermeture du bilan d'énergie corrélée est commise sur le terme  $\langle \delta R_{p,ij} \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j} \rangle_p$  (somme des termes II et III), la mesure de ce terme serait sous-estimée de 66%, 29% et 13% en moyenne dans les cas B1, B2 et B3.

## 4.2 Ségrégation préférentielle

### 4.2.1 Evaluation

Pour des nombres de Stokes intermédiaires, typiquement  $0, 1 \leq St_K \leq 10$ , les particules ne suivent pas exactement l'écoulement fluide et peuvent être éjectées des tourbillons les plus énergétiques. Elles s'accumulent alors dans les zones de faible vorticit . Leur r partition n'est alors plus al atoire (voir F vrier et al. (2002), Shotorban et Balachandar (2006) pour une mesure quantitative). On parle alors de concentration pr f rentielle (Squires et Eaton (1990)). Ce ph nom ne a fait l'objet de nombreux travaux bas s sur des exp rimentations (Vignal (2006)) et des simulations num riques Euler-Lagrange : des r capitulatifs de r sultats r cents sont fournis par Boffeta et De Lillo (2004) en deux dimensions ou par Collins et Keswani (2004) en trois dimensions. Contrairement aux autres  tudes reposant sur une analyse lagrangienne, ce ph nom ne est  tudi  en utilisant les champs particuliers eul riens m soscopiques.

Le param tre  $\langle n_p^2 \rangle / \langle n_p \rangle^2$  permet de quantifier, de mani re pratique, la concentration pr f rentielle d'un point

de vue eulérien (Kaufmann (2004)). A l'initialisation, la répartition des particules est homogène (Fig. 4.4), elle est même aléatoire dans l'ensemble du domaine, mais un tel paramètre n'est pas suffisant pour le savoir. La ségrégation augmente de façon monotone dans les cas B1 et B2. Dans le cas B3 plus inertiel, elle atteint un maximum après un peu moins d'un temps caractéristique turbulent  $\tau_f^t$ , décroît légèrement puis se stabilise. L'augmentation continue de la ségrégation dans les cas B1 et B2 est typique des simulations diphasiques en turbulence décroissante à faible nombre de Reynolds. Le champ de  $n_p$  présente dans les trois cas une forte inhomogénéité, ainsi la fluctuation RMS de la densité du nombre de particules  $n_p$  (rapportée à  $\langle n_p \rangle$ ) vaut 1,3, 1,1 et 0,6. Comparativement à une simulation d'écoulement fluide turbulent et compressible, où les fluctuations RMS de densité sont de l'ordre de 50% (Porter et al. (1992) avec une approche PPM, dédiée au écoulements très compressibles), la phase particulaire apparaît comme extrêmement compressible.

#### 4.2.2 Tentative de caractérisation des amas

La figure 4.5 présente les isocontours de densité du nombre de particules  $n_p$  à la fin des simulations ( $t/\tau_{f0}^t = 3,5$ ) pour les cas B1, B2 et B3. Pour chaque cas, les isocontours  $n_p/\langle n_p \rangle = 1$  et  $n_p/\langle n_p \rangle = 2$  sont représentés de façon à distinguer les zones de concentration préférentielle des zones pauvres en particules. La ségrégation spatiale des particules se produit suivant des surfaces très minces (des filaments sur des représentations de plan de coupe en deux dimensions). Visuellement, la largeur des clusters de particules augmente avec l'inertie des particules. Le nombre et la complexité des structures sont plus grands pour les particules légères qui sont influencés par des structures tourbillonnaires moins énergétiques (plus petites). La fonction d'encombrement  $g_{pp}(r)$  représente, de façon normalisée, le nombre de paires de particules séparées d'une distance  $r$ . En THI, elle s'exprime dans le formalisme eulérien mésoscopique (Février (2000)) en fonction du champ de densité du nombre de particules selon :

$$g_{pp}(\mathbf{r}\mathbf{e}) = \frac{\langle n_p(\mathbf{x})n_p(\mathbf{x} + \mathbf{r}\mathbf{e}) \rangle}{\langle n_p(\mathbf{x}) \rangle^2} \quad (4.8)$$

où  $\mathbf{e}$  est un vecteur unitaire quelconque. Si la densité de particules est homogène, alors  $g_{pp}(r) = 1$ . A l'origine  $r = 0$ ,  $g_{pp}$  vaut le paramètre de concentration préférentielle  $\langle n_p^2 \rangle / \langle n_p \rangle^2$  utilisé précédemment. La fonction d'encombrement à une distance d'un diamètre de particule  $g_{pp}(d_p)$  intervient dans la modélisation des collisions entre particules (Laviéville (1997)). Les fonctions d'encombrement  $g_{pp}(r)$  pour les cas B1, B2 et B3 à l'instant final ont des formes similaires (Fig. 4.6).  $g_{pp}(r)$  est maximale à l'origine et décroît vers 1.

La taille caractéristique des zones d'accumulation des particules  $L_p$  peut être évaluée par une longueur intégrale des corrélations en deux points de  $n_p$  :

$$L_p = \int \frac{g_{pp}(r) - 1}{g_{pp}(0)} dr \quad (4.9)$$

ou bien comme étant la longueur caractéristique de variation du champ de  $n_p$  notée  $l_p$ ,

$$l_p = \left[ \frac{1}{\langle n_p \rangle} \langle \left( \frac{\partial n_p}{\partial x_j} \right)^2 \rangle_p \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (4.10)$$

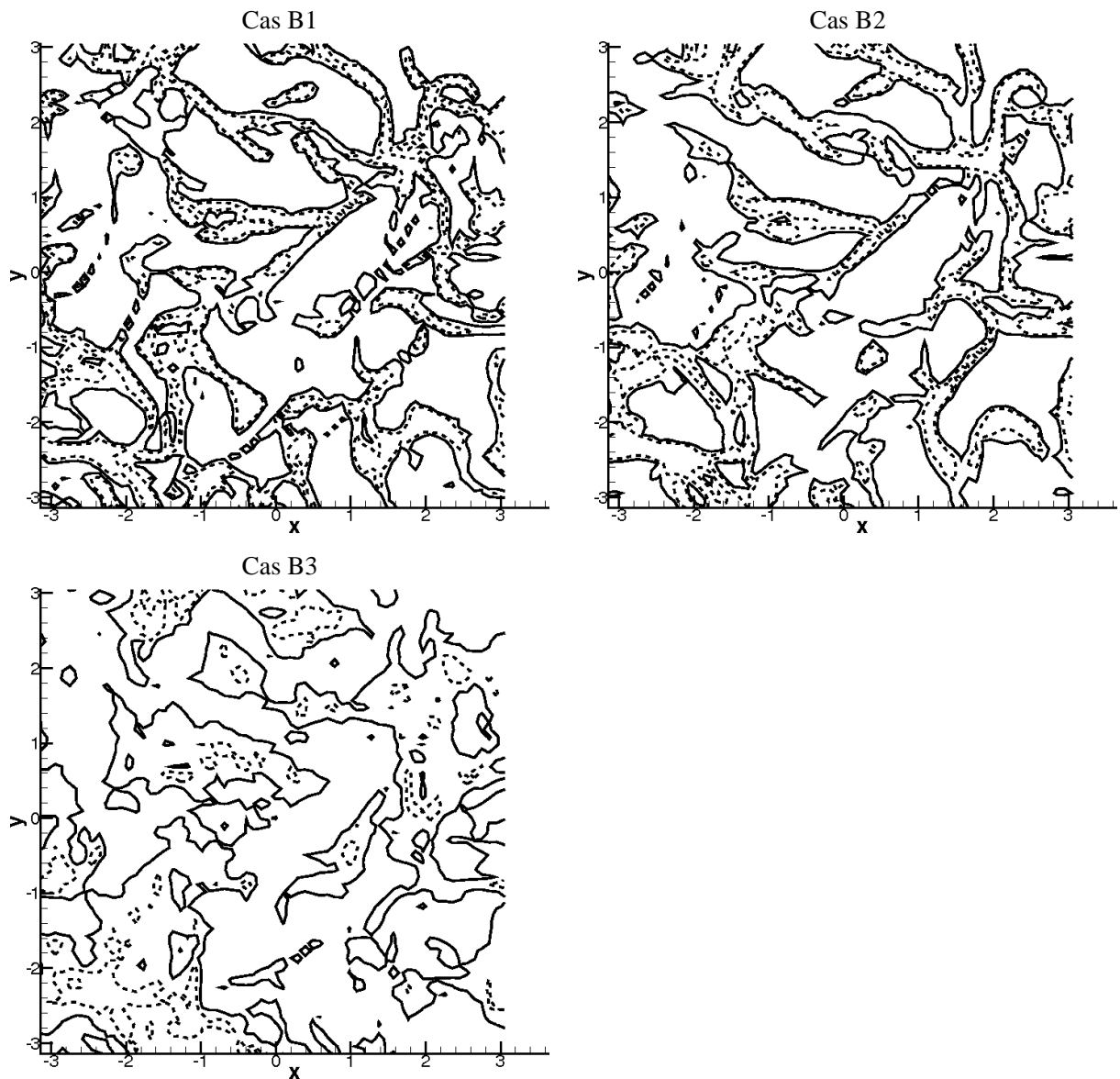


FIG. 4.5 – Isocontour de densité du nombre de particules à la fin de la simulation ( $t/\tau_{f0}^t = 3, 5$ ). Le maillage de projection des grandeurs particulières comporte  $64^3$  nœuds.  $n_p/\langle n_p \rangle = 1$  : ligne continue ;  $n_p/\langle n_p \rangle = 2$  : ligne pointillée.

Ces deux longueurs caractéristiques des amas de particules ne s'interprètent pas de la même façon :  $L_p$  est la distance à partir de laquelle la densité du nombre de particule n'est plus corrélée alors que  $l_p$  serait plutôt une longueur de variation de  $n_p$ , c'est à dire en première approximation la largeur des amas, si les amas sont beaucoup plus longs que larges.

La convergence de  $g_{pp}(r)$  en fonction du maillage de projection des quantités lagrangiennes est testée pour le cas B1 présentant le maximum de ségrégation (Fig. 4.7a). Cette convergence n'est pas réalisée pour des faibles distances  $r$ . La valeur de  $g_{pp}(0)$  augmente avec le raffinement du maillage passant de 2,7 pour un

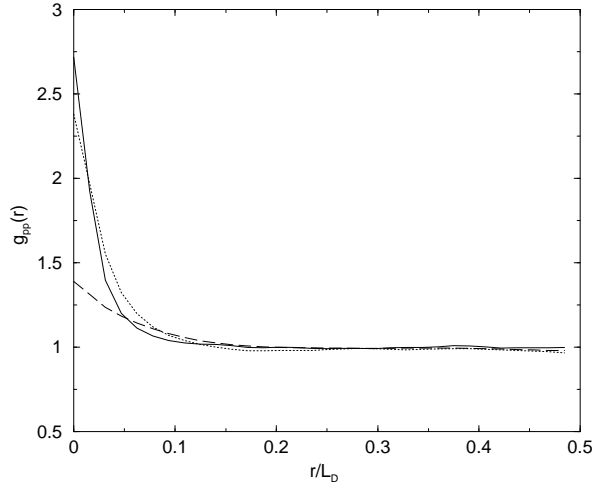


FIG. 4.6 – Fonction d’encombrement  $g_{pp}(r)$  à la fin de la simulation ( $t/\tau_{f0}^t = 3, 5$ ). Le maillage de projection des grandeurs particulières comporte  $64^3$  nœuds. Cas B1 : ligne continue ; cas B2 : ligne pointillée ; cas B3 : ligne tiretée.

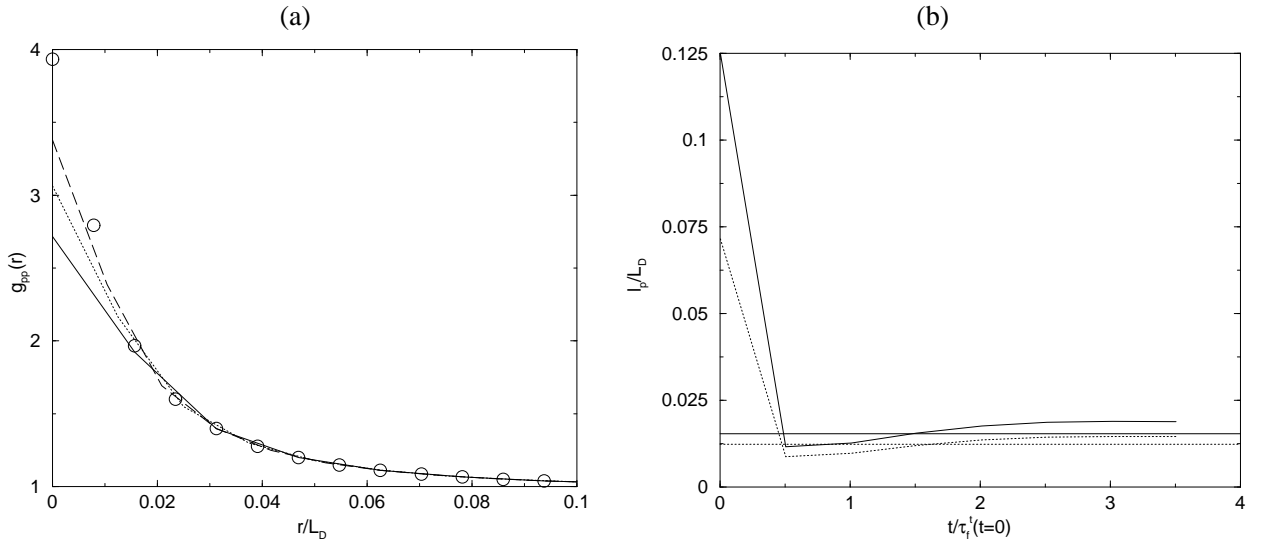


FIG. 4.7 – Tests de convergence au maillage de projection. (a) Fonction d’encombrement  $g_{pp}(r)$  à la fin de la simulation ( $t/\tau_{f0}^t = 3, 5$ ) pour différents maillages de projection :  $64^3$  : ligne continue ;  $80^3$  : ligne pointillée ;  $96^3$  : ligne tiretée ;  $128^3$  : cercles. (b) Evaluation de la « largeur » mesurée des amas de particules  $l_p$  (éq. 4.10) pour le cas B3 pour différents maillages de projection :  $64^3$  : ligne continue ;  $80^3$  : ligne pointillée. Les lignes horizontales représentent la taille des mailles pour les deux maillages considérés.

maillage  $64^3$  à 3,9 pour un maillage  $128^3$ . En conséquence, la longueur  $L_p$  mesurée sur le maillage  $128^3$  est d'un tiers plus faible que celle mesurée sur le maillage  $64^3$ . Par ailleurs, la mesure de  $l_p$  dans le cas B3 n'est elle non plus pas convergée en comparant les résultats obtenus sur un maillage  $64^3$  et  $80^3$ . Des maillages plus fin n'ont pas été tentés à cause du calcul du gradient de  $n_p$ . La longueur  $l_p$  suit une évolution inverse de celle du paramètre de concentration préférentielle  $\langle n_p^2 \rangle / \langle n_p \rangle^2$ . Cette longueur est inférieure à la taille de la maille entre les temps  $t/\tau_{f0}^t = 0,5$  et 2. De sérieux doutes existent sur la pertinence de la mesure  $l_p$ .

Les champs instantanés de densité du nombre de particule obtenus par projection des grandeurs lagrangiennes pour des maillages  $64^3$  et  $128^3$  dans le cas présentant la plus forte ségrégation (cas B1,  $t/\tau_{f0}^t = 3,5$ ) sont représentés sur les figures 4.8a et b, où chaque cellule du maillage de projection est colorée par la valeur brute du champ. La largeur des amas de particules est le plus souvent d'une maille de calcul (Fig. 4.8a) et cela même en raffinant le maillage par un facteur deux dans les trois directions (Fig. 4.8b). La densité maximale du nombre de particules obtenue sur ce maillage raffiné est bien plus grande que sur le maillage plus grossier ( $n_p/\langle n_p \rangle = 19,7$  contre 9,3). De plus, les amas apparaissent plus nombreux et leur structure plus complexe sur le maillage raffiné. Le champ de  $n_p$  obtenu sur le maillage raffiné est filtré sur une longueur caractéristique de deux fois la taille des mailles (Fig. 4.8c). En terme de valeur maximal ( $\bar{n}_p/\langle n_p \rangle = 9,9$ ), de nombre et de largeur, ce champ filtré est tout à fait similaire à celui obtenu sur le maillage grossier. La procédure de projection étant un filtre, le formalisme eulérien ne semble pas le mieux adapté pour étudier précisément la forme des amas particuliers en régime de concentration préférentielle.

Récemment, Bec (2005) a mis en évidence une répartition de type fractale de particules inertielles entraînées par un champ turbulent synthétique pour certaines gammes de nombre de Stokes. Les mesures « naïves » de tailles caractéristiques des amas selon les éq. (4.9) et (4.10) seraient alors non pertinentes.

Pour résumer, il n'a pas été possible de caractériser quantitativement la forme des amas de particules en régime de concentration préférentielle. Seule une mesure globale, qualitative (effet de l'inertie des particules) a été possible. Une description eulérienne des zones des amas particuliers présents en régime de concentration préférentielle nécessite des outils statistiques plus évolués que ceux utilisés dans ce travail. Dans la suite, l'analyse portera sur les champs de vitesses particulières.

### 4.2.3 Prédiction des zones d'accumulations

Le champ instantané de  $n_p$  (champ coloré) et les lignes de niveaux de la divergence du champ de la vitesse particulaire corrélée est présenté (Fig. 4.9a) pour le cas B1 peu de temps après le début de la simulation ( $t/\tau_{f0}^t = 0.5$ ), lorsque les particules interagissent le plus avec la turbulence fluide. La concentration préférentielle des particules est, logiquement, due à la compressibilité du champ de vitesse corrélée, les valeurs les plus grandes de  $n_p$  correspondent à des régions de divergence du champ  $\mathbf{u}_p$  négatives. En utilisant l'approche particulaire à l'équilibre pour des particules à très petit nombre de Stokes ( $St_K \ll 1$ ), la divergence du champ de vitesse des particules peut s'écrire en fonction du champ de vitesse fluide (Maxey

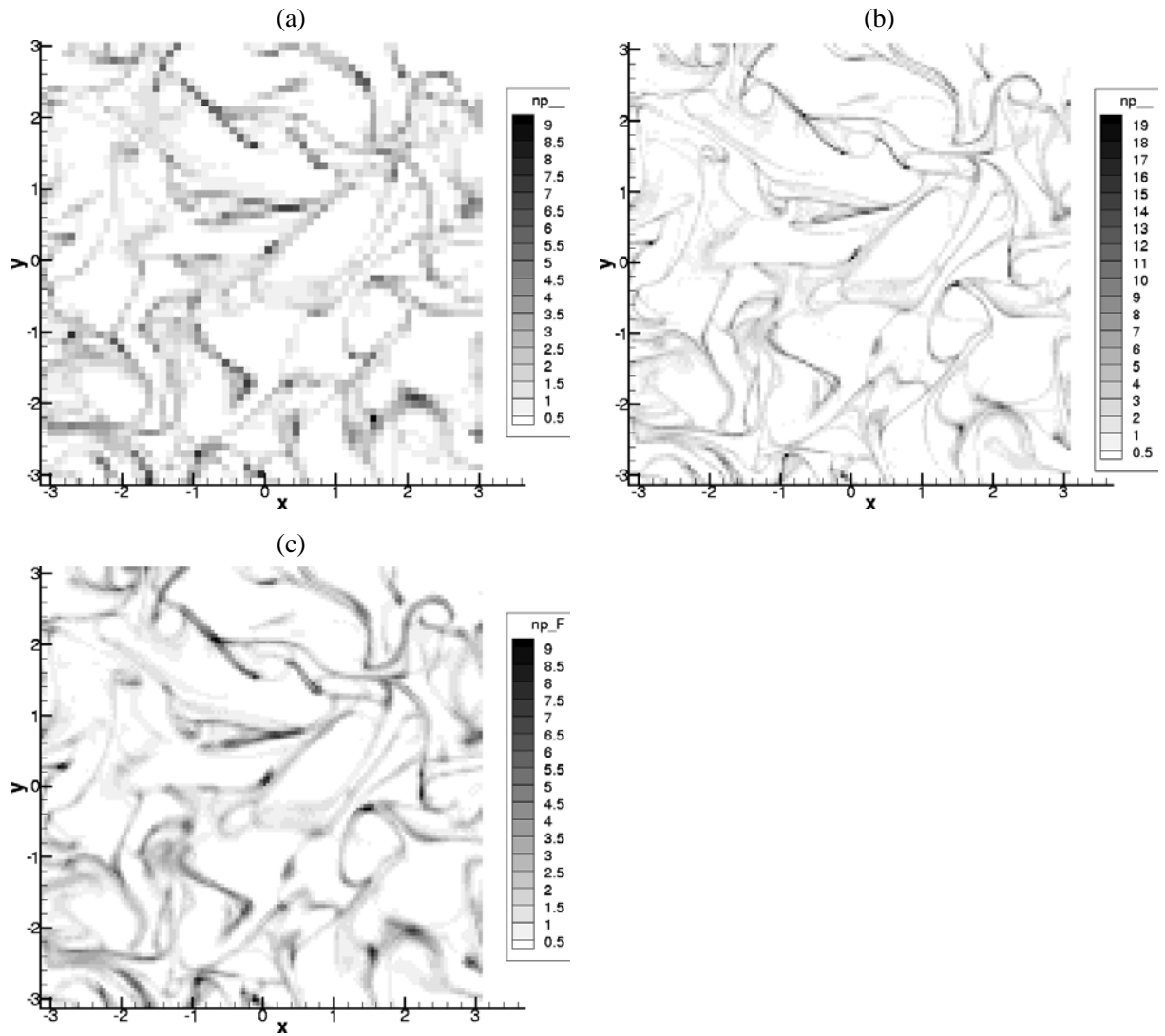


FIG. 4.8 – Champs instantanés de la densité de particules normalisé par  $\langle n_p \rangle$  dans le cas B3 à  $t/\tau_{f0} = 3,5$ . Chaque cellule de calcul est colorée par la valeur brute du champ. Le maillage de projection des grandeurs particulières comporte  $64^3$  nœuds (a) ou  $128^3$  nœuds (b). La figure (c) est le champ (b) après un filtrage boîte sur les 6 nœuds adjacents (en 3D).

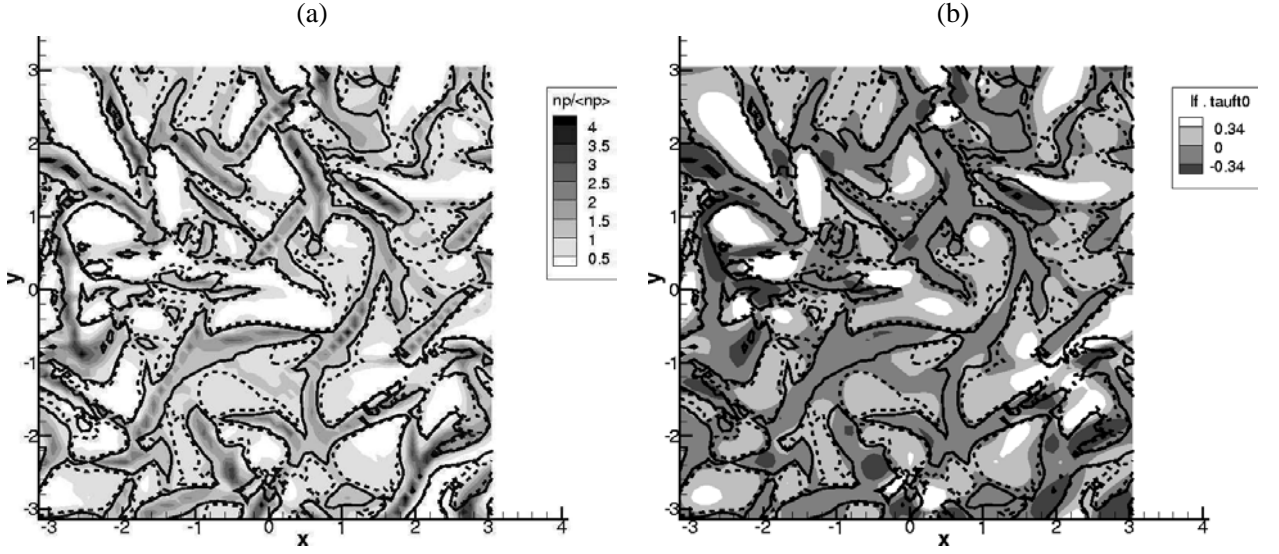


FIG. 4.9 – Champs instantanés de la densité numérique de particules (a) et de la fonction fluide indicatrice de concentration préférentielle  $I_f$  (eq. 4.11) (b). Les lignes suivent les contours de la divergence du champ de vitesse corrélée ( $\frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j} \tau_{f0}^t = 0.34$  : ligne tiretée et  $\frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j} \tau_{f0}^t = -0.34$  : ligne continue). Cas B1 au temps  $t/\tau_{f0}^t = 0.505$ .

(1987)) selon :

$$\frac{\partial u_{p,k}}{\partial x_k} \approx I_f = -\tau_p \frac{\partial u_{f,i}}{\partial x_j} \frac{\partial u_{f,j}}{\partial x_i} \quad (4.11)$$

en turbulence gelée (champ de vitesse du fluide invariant dans le temps). La divergence du champ de vitesse particulaire est positive dans les régions de forte vorticité ou de faible cisaillement fluide, et négative où le cisaillement domine la vorticité fluide. Ainsi, les particules s'accumulent dans les régions de faible vorticité. Le champ instantané est comparé aux isocontours de la divergence du champ de vitesse corrélée particulaire le cas B1 à  $t/\tau_{f0}^t = 0.5$  (Fig. 4.9b). La fonction  $I_f$  est grande (les zones blanches correspondent à des zones de forte vorticité fluide), où la divergence de  $\mathbf{u}_p$  est positive (lignes tiretées). Les régions de divergence négative du champ de vitesse corrélée sont aussi bien prédites par le modèle  $I_f$  dans ce cas de particules légères. Toutefois, une comparaison détaillée montre que les extrema de divergence sont sous-estimés par le modèle.

Pour une analyse quantitative on introduit le coefficient standard de corrélation (Salvetti et Banerjee (1994)) entre les champs  $A$  et  $B$  selon

$$c(AB) = \frac{\langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle}{\sqrt{(\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2)(\langle B^2 \rangle - \langle B \rangle^2)}} \quad (4.12)$$

Si les champs  $A$  et  $B$  sont identiques à une constante additive ou multiplicative près le coefficient de corrélation vaut 1, sinon ce coefficient sera strictement inférieur à l'unité. La corrélation entre  $I_f$  et la divergence du champ de vitesse corrélée des particules (Fig. 4.10a) est de 0,6 dans le cas B1 et décroît avec l'augmentation de l'inertie des particules (0,4 et 0,1 pour les cas B2 et B3, ce qui correspond à une

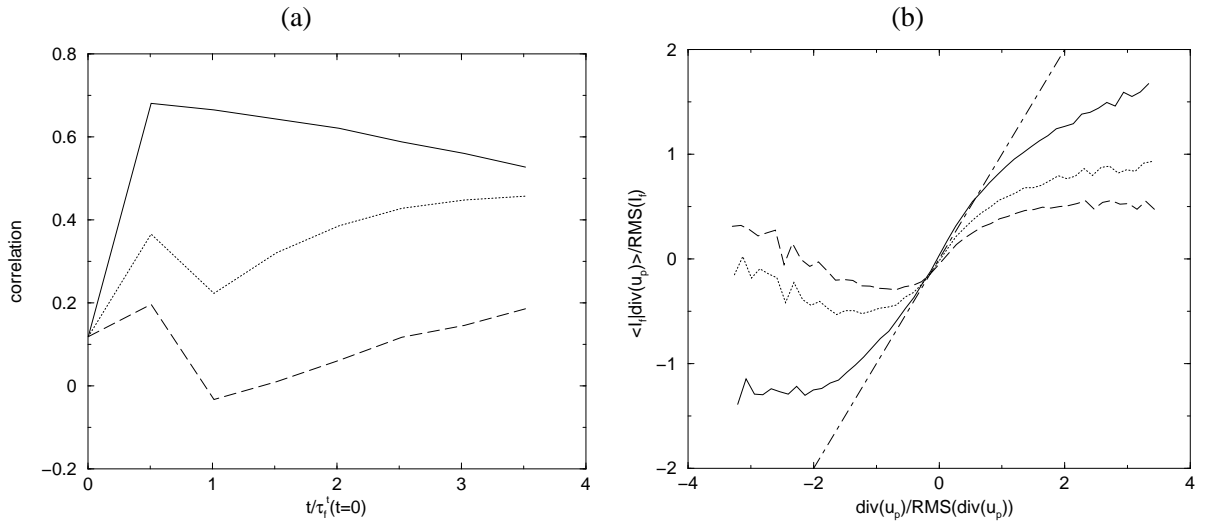


FIG. 4.10 – (a) Evolution temporelle de la corrélation entre les champs  $I_f$  (éq. 4.11) et la divergence du champ de vitesse corrélée des particules. Cas B1 : ligne continue ; cas B2 : ligne pointillée ; cas B3 : ligne tiretée. (b) Moyenne sur l'ensemble du domaine de calcul de  $I_f$  conditionné par la valeur locale de  $\frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j}$  à l'instant  $t/\tau'_{f0} = 0.5$ . Cas B1 : ligne continue ; cas B2 : ligne pointillée ; cas B3 : ligne tiretée. La ligne mixte (point-tiret) suit l'équation  $y = x$ .

grande différence entre les champs  $I_f$  et  $\frac{\partial u_{p,j}}{\partial x_j}$ ). Ceci est confirmé par les moyennes des valeurs du modèle conditionnées par la valeur locale de la divergence de  $\mathbf{u}_p$  mesurée (Fig. 4.10b). Si le modèle était exact, les moyennes conditionnées suivraient la droite d'équation  $y = x$ . Les moyennes conditionnées sont croissantes autour de  $\frac{\partial u_{p,j}}{\partial x_j} = 0$ . Le modèle sous-estime en moyenne les valeurs extrêmes du champ de divergence. En augmentant l'inertie des particules, la zone autour de  $\frac{\partial u_{p,j}}{\partial x_j} = 0$ , où le modèle est valable, se rétrécit. Dans le cas B3, seules les zones où la divergence est nulle sont en moyenne correctement prédites. Comme prévu, la modélisation de la divergence du champ de vitesse particulaire par une approche à l'équilibre n'est plus valable pour des particules trop inertielles.

### 4.3 Spectres des vitesses particulières corrélées

On vient de voir que la concentration préférentielle est causée par la compressibilité du champ de vitesse corrélée. L'analyse spectrale de champs de vitesse compressible est plus complexe que dans le cas incompressible, à cause des fluctuations de densité (masse volumique  $\rho_f$  en turbulence fluide, ou bien  $n_p$  ici) et des interactions complexes entre les différents modes de transfert d'énergie (Bataille et Zhou (1999), Bertoglio et al. (2001) en situation faiblement compressible).



### 4.3.1 Description

Le spectre d'énergie cinétique corrélée est défini à partir du champ vitesse corrélée des particules :

$$E_p(k) = \frac{1}{2} \iiint u_{p,i}^{TF}(\mathbf{k}) u_{p,i}^{TF*}(\mathbf{k}) \delta(k - |\mathbf{k}|) d\mathbf{k} \quad (4.13)$$

où  $TF$  est l'opérateur transformé de Fourier, la notation  $*$  signifie complexe conjugué. Un tel spectre est parfois appelé « spectre de puissance de la vitesse ». Ce spectre ne prenant pas en compte la variation de la densité du nombre de particules, son intégrale pour  $k$  variant entre 1 et  $+\infty$  donne la moyenne de Reynolds de l'énergie corrélée et non pas sa moyenne de Favre  $\tilde{q}_p^2$ . A l'initialisation, le spectre de puissance des vitesses corrélées correspond au spectre d'énergie cinétique, car la répartition des particules est uniforme. Kida et Orszag (1990) pondèrent les vitesses par la racine carrée de la densité (normalisée par la densité moyenne), l'intégrale des spectres de puissance de cette nouvelle variable vaut la moyenne de Favre de l'énergie cinétique. Cette approche n'a pas été retenue, l'utilisation des spectres de puissance de vitesse sans prise en compte des fluctuations de densité semblant être la plus utilisée en turbulence monophasique compressible (Erlebacher et al. (1990) ; Porter et al. (1994) ; Pavlovski et al. (2006)).

La figure 4.11 présente les spectres de vitesses corrélées pour les cas B1, B2 et B3 aux instants  $t/\tau_{f0}^t = 0, 0,5, 1,01$  et  $3,51$ . Il n'a pas été possible de mesurer le spectre d'énergie corrélée des particules les plus légères à l'instant final du fait de la trop grande ségrégation des particules et des énergies à petites échelles trop faibles. Pour comparaison, le spectre d'énergie cinétique du fluide est représenté par des cercles. Le niveau de ce spectre diminue avec le temps sous l'action de la dissipation visqueuse, sa forme reste globalement inchangée. A l'initialisation, les spectres de vitesses particulières corrélées sont très proches du spectre du fluide. Aux instants  $t/\tau_{f0}^t = 0,5, 1,01$  et  $3,5$ , ils suivent approximativement le spectre du fluide aux plus grandes échelles (petit nombre d'onde  $k$ ), le niveau des spectres particulières diminue avec le temps aux plus grandes échelles. Aux grands nombres d'onde, leurs niveaux sont supérieurs à celui du fluide après  $t/\tau_{f0}^t = 0,5$ . Aux plus grandes échelles, l'augmentation de l'inertie des particules diminue l'énergie corrélée. En revanche, l'énergie corrélée à petite échelle augmente avec l'inertie des particules aux instants  $t/\tau_{f0}^t = 0,5$  et  $1,01$ . A la fin de la simulation, le spectre particulaire mesuré dans le cas B3 est légèrement inférieur à celui du cas B2. Les spectres des vitesses corrélées semblent suivre une pente quasiment constante à petite échelle en  $k^{-2}$ . La zone dans laquelle cette pente existe augmente avec le nombre de Stokes : à partir de  $k = 6$  pour le cas B3 et de  $k = 18$  pour le cas B2 à l'instant  $t/\tau_{f0}^t = 1,01$ . Il semble que le cas B1 des particules les plus légères présente une telle pente dans son spectre pour  $k > 27$  à  $t/\tau_{f0}^t = 0,5$  et pour  $22 < k < 29$  à  $t/\tau_{f0}^t = 1,01$  (le palier observé pour  $k > 29$  est sans doute dû à une erreur statistique). L'influence de l'inertie des particules sur la forme des spectres est très différente entre les grandes et les plus petites échelles.

La forme des spectres de vitesses particulières corrélées à petite échelle est assez surprenante. Des pentes constantes sont classiquement observées en écoulement turbulent monophasique incompressible (résultats expérimentaux de Comte-Bellot et Corrsin (1971), par exemple). Beaucoup de travaux tant théoriques que expérimentaux ou numériques existent sur de tels sujets (voir Hinze (1975) par exemple). Il convient donc

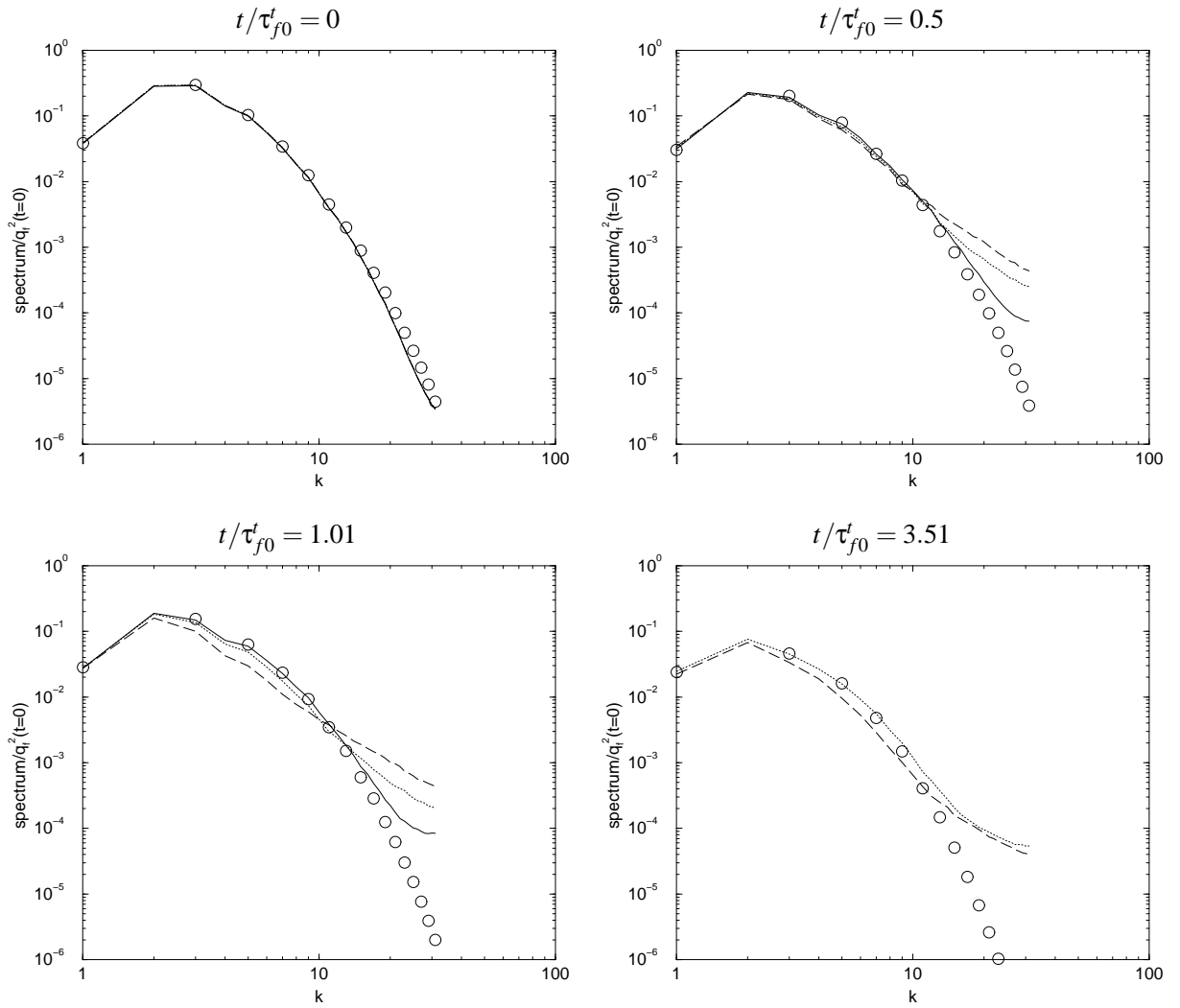


FIG. 4.11 – Spectre de densité d’énergie de la vitesse fluide (cercle) et de la vitesse corrélée des particules aux instants  $t/\tau_{f0}^t = 0, 0,5, 1$  et  $3,5$ . Cas B1 : ligne continue ; cas B2 : ligne pointillée ; cas B3 : ligne tiretée.

d’être extrêmement prudent dans l’analyse et l’interprétation des spectres particulières. A priori, une interprétation « à la Kolmogorov (1941) » n’est pas possible à cause de la grande compressibilité de la phase particulaire.

Pour essayer de comprendre d’où peut provenir une telle forme des spectres à petite échelle, on peut se demander si c’est une conséquence de la méthode de projection utilisée. La méthode de projection a été validée dans le chapitre 3. Les formes des spectres de vitesses corrélées obtenues par trois méthodes de projections différentes (cas A2-A2’, Fig. 3.9) sont très similaires. La projection gaussienne a permis d’obtenir des spectres convergés avec le nombre de particules et indépendants du maillage de projection utilisé dans les cas A2-A2’. La méthode de projection ne peut pas être mise en cause ici. Avant de proposer une interprétation physique de la forme des spectres, l’influence des conditions initiales et des interactions

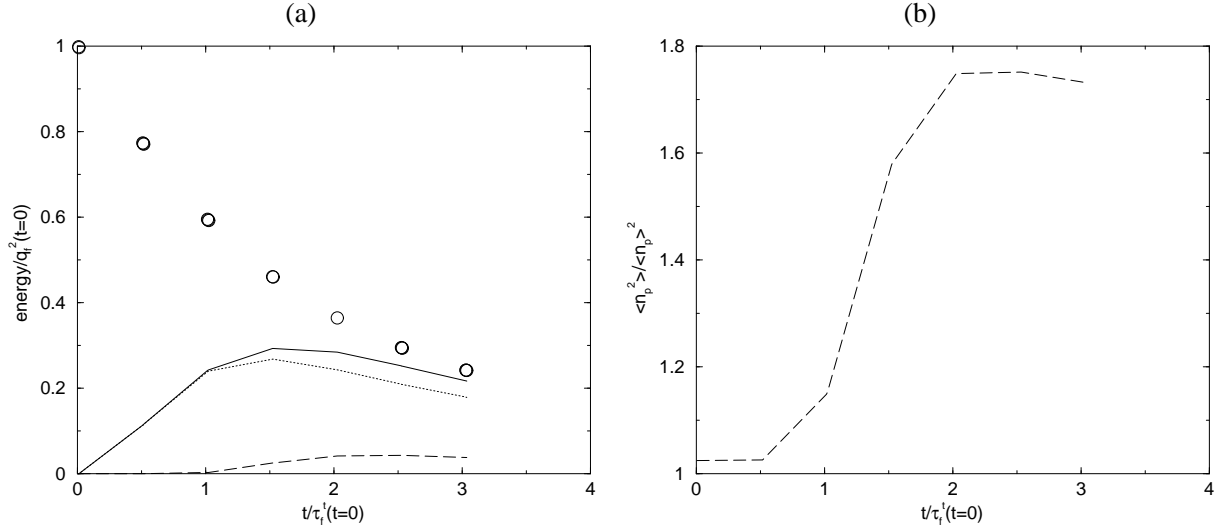


FIG. 4.12 – Cas B3b.(a) Evolution temporelle des énergies : énergie turbulente du fluide (cercles), de l'énergie moyenne des particules  $q_p^2$  (ligne continue), des énergies particulaires, corrélée  $\tilde{q}_p^2$  (ligne pointillée) et décorrélée  $\delta q_p^2$  (ligne tiretée). (b) Evolution temporelle du paramètre de concentration préférentielle  $\langle n_p^2 \rangle / \langle n_p \rangle^2$ .

fluide-particules à petite échelle sont testées.

### 4.3.2 Influence de la condition initiale

Pour tester l'influence de la condition initiale de vitesse des particules, le cas de simulation B3b est réalisé. Les particules sont initialement au repos (vitesse nulle). Comme dans les autres cas, le champ initial de vitesse particulaire est continu, et l'énergie décorrélée est nulle. L'énergie totale des particules augmente pour atteindre son maximum à  $t/\tau_{f0}^t = 1,5$  et décroît ensuite (Fig. 4.12a). Jusqu'à  $t/\tau_{f0}^t = 1$ , l'énergie des particules est entièrement sous forme corrélée ( $\delta q_p^2/q_p^2 = 1\%$  à cet instant). A  $t/\tau_{f0}^t = 3$ , le niveau des trois énergies particulaires, totale, corrélée et décorrélée sont comparables au cas B3 ( $\mathbf{u}_p = \mathbf{u}_f$  à l'initialisation), de même en ce qui concerne le paramètre de concentration préférentielle (Fig. 4.12b). La proportion d'énergie sous forme décorrélée est moins importante (maximum 20% de  $\tilde{q}_p^2$  à  $t/\tau_{f0}^t = 3$ ), ce qui permet d'avoir des spectres de vitesse corrélée convergés avec « seulement »  $10^7$  particules simulées (contre  $8 \cdot 10^7$  dans le cas B3).

Le développement temporel de ces spectres est présenté sur la figure 4.13. A l'instant  $t/\tau_{f0}^t = 0,5$ , le spectre de vitesse particulaire corrélée est similaire à celui du fluide décalé vers le bas. En avançant dans la simulation, le spectre particulaire s'approche de celui du fluide aux grandes échelles tout en restant au dessous de celui-ci, alors qu'à petite échelle il passe au dessus (à partir de  $t/\tau_{f0}^t = 1$ ), une pente se développe et persiste ( $t/\tau_{f0}^t = 1,5, 2$  et  $3$ ). On peut noter que cette pente n'est pas présente tant que le paramètre de concentration préférentielle est faible ( $< 1,2$  environ) et que l'énergie décorrélée est négligeable ( $\delta q_p^2/q_p^2 = 9\%$  à

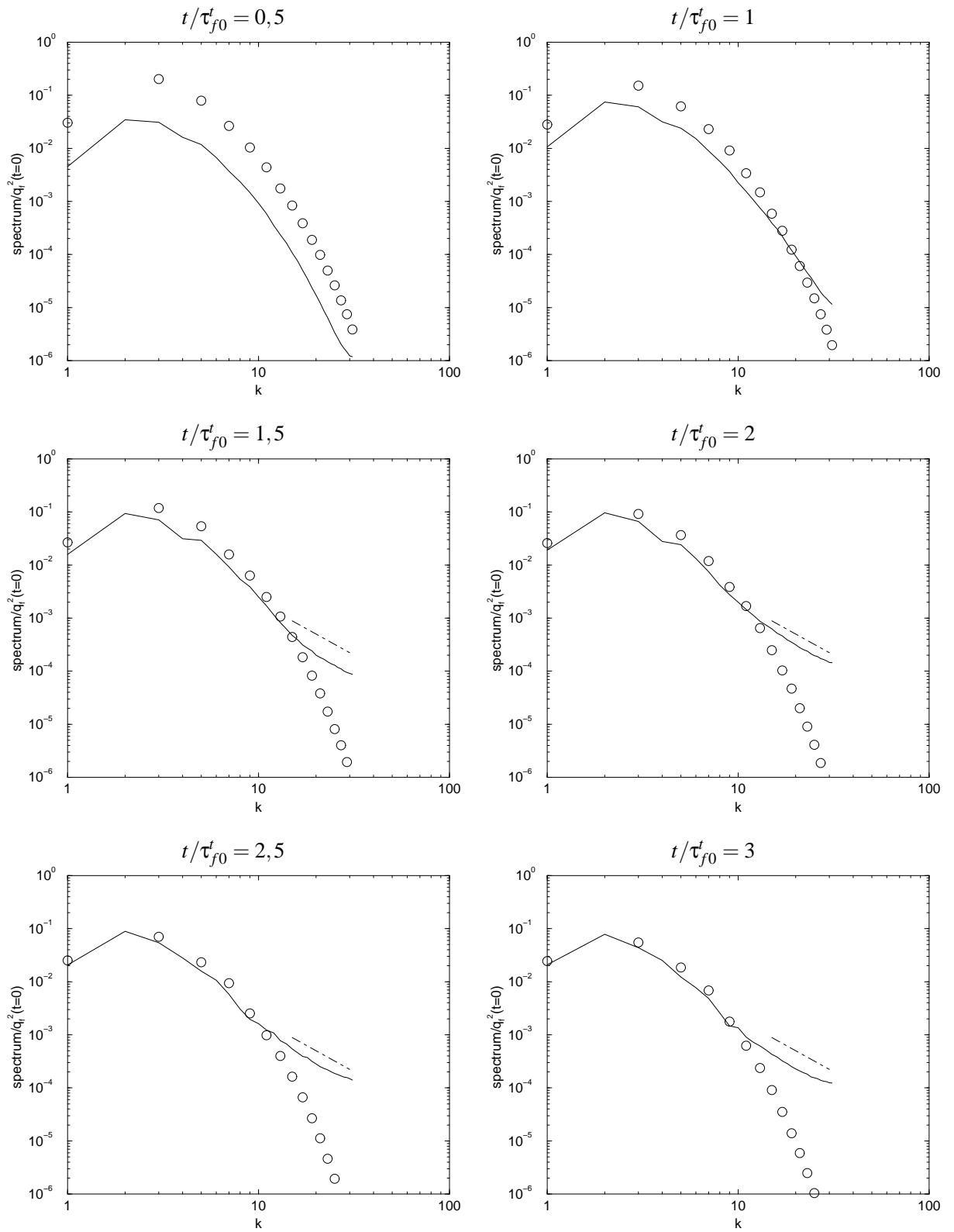


FIG. 4.13 – Spectre de densité d'énergie de la vitesse fluide (cercles) et de la vitesse corrélée des particules (ligne continue) aux instants  $t/\tau_{f0}^t = 0,5, 1, 1,5, 2, 2,5$  et  $3$  dans le cas B3b. La ligne mixte (point-tiret) suit  $k^{-2}$ .

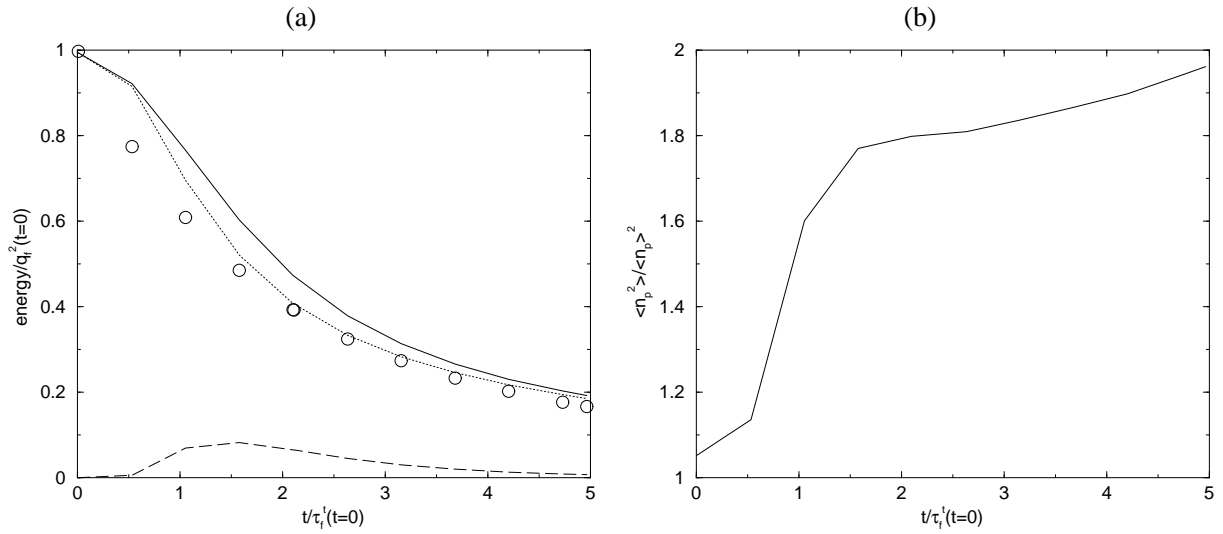


FIG. 4.14 – Cas A2'.(a) Evolution temporelle des énergies : énergie turbulente du fluide (cercles), de l'énergie moyenne des particules  $q_p^2$  (ligne continue), des énergies particulaires, corrélée  $\tilde{q}_p^2$  (ligne pointillée) et décorrelée  $\delta q_p^2$  (ligne tiretée). (b) Evolution temporelle du paramètre de concentration préférentielle  $\langle n_p^2 \rangle / \langle n_p \rangle^2$ .

$t/\tau_{f0}^i = 1, 5$ ). Le mouvement décorréolé des particules ainsi que le phénomène de concentration préférentielle interviennent peut-être dans les mécanismes expliquant cette pente.

Cette condition initiale différente a conduit au développement d'une pente constante dans le spectre des vitesses corrélées. Les champs initiaux de vitesses particulaires n'étant pas physiques au sens où des particules avec un nombre de Stokes important ne suivent pas exactement le fluide ou ne sont pas immobiles, la présence de cette pente à petite échelle est peut-être liée à l'instationnarité de la configuration étudiée. Des simulations DNS/DPS en régime permanent avec un forçage stochastique à grande échelle de la phase fluide (Février et al. (2002)) et la reconstruction des champs mésoscopiques suivant la méthode employée ici (par exemple) pourraient lever cette incertitude sur l'influence des conditions initiales.

### 4.3.3 Interaction fluide-particule à petite échelle

La présence d'une pente aux grands nombres d'onde n'est observée que pour des particules les plus inertielles (cas B2, B3 et B3b). A première vue, ces particules lourdes ont un temps de réponse grand et traversent les petites échelles sans avoir le temps d'interagir. Etant donné les limitations en terme de coût de calcul de la DNS/DPS avec un nombre de particules suffisant pour obtenir des champs eulériens mésoscopiques fiables, il n'a pas été possible de simuler des écoulements à plus grand nombre de Reynolds. Par l'absurde, l'influence des petites échelles est estimée sur un cas à très faible Reynolds et un cas où l'inertie des particules est infinie.

Le cas A2 correspondant à un écoulement fluide à très faible nombre de Reynolds ( $Re_t = 13,6$ ) est présenté.

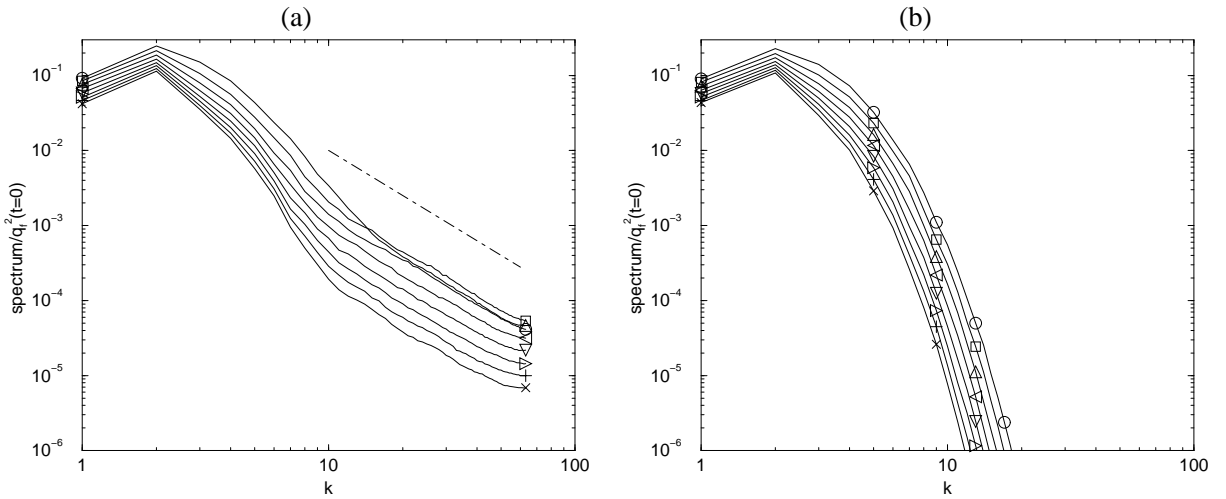


FIG. 4.15 – (a) Spectre de de la vitesse corrélée des particules (ligne continue+symboles) aux instants  $t/\tau_{f0}^t = 1,1$  (cercles),  $1,6$  (carrés),  $2,1$  (triangles hauts),  $2,6$  (triangles gauches),  $3,2$  (triangles bas),  $3,6$  (triangles droits),  $4,2$  (plus),  $4,7$  (multipliés). La ligne mixte suit  $k^{-2}$ . Cas A2' projeté sur un maillage  $128^3$ . (b) Spectre de l'énergie turbulente du fluide. Même légende que (a). Cas A.

Les particules suivent, initialement, la vitesse du fluide. L'évolution temporelle des énergies moyennes est similaire aux cas à plus grand Reynolds A1, A2 et A3 (Fig. 4.14a). L'énergie décorréelée représente au maximum 14% de l'énergie cinétique totale des particules. Le paramètre de concentration préférentielle augmente durant toute la durée de la simulation pour atteindre presque 2 à  $t/\tau_{f0}^t = 5$  (Fig. 4.14b). Les niveaux moyens des spectres d'énergies cinétiques, du fluide et particulaire corrélée, diminuent avec le temps (Fig. 4.15). Dans cet écoulement à très faible Reynolds, l'essentiel de l'énergie turbulente fluide est concentrée sur les premiers nombres d'onde, le spectre du fluide plonge aux nombres d'onde plus grands. A petite échelle, les spectres particuliers présentent une zone, où la pente est constante. Ce cas de simulation présentant la plus grande zone à pente contante dans le spectre  $E_p(k)$ , la pente du spectre aux plus petites échelles est évaluée par régression, l'exposant moyen<sup>1</sup> obtenu vaut  $-2,00 \pm 0,05$ .

Bien que dans le cas A, il n'existe pas de structures turbulentes aux nombres d'ondes supérieurs à l'inverse de l'échelle de Kolmogorov ( $\eta_K^{-1} = 9$  et  $5,9$  aux temps  $t/\tau_{f0}^t = 0,53$  et  $4,7$ ), le fluide frotte quand même sur les particules.

Pour tester par l'absurde, si ce frottement du fluide suffit pour expliquer la présence d'une pente dans le spectre des vitesses corrélées, le cas  $B_\infty$  est réalisé. La vitesse des particules est initialement la vitesse du fluide à leur position (comme dans les cas B1, B2 et B3), la force de traînée est supprimée du code de simulation si bien que les particules avancent continuellement avec leur vitesse initiale. Le fluide n'agit pas sur les particules, c'est le cas limite de particules avançant dans le vide, ou bien de particules avec un temps de relaxation infini. L'énergie particulaire initialement totalement corrélée devient de plus en plus décorréelée

<sup>1</sup>Moyenne sur les 8 temps présentés sur la Fig. 4.15.

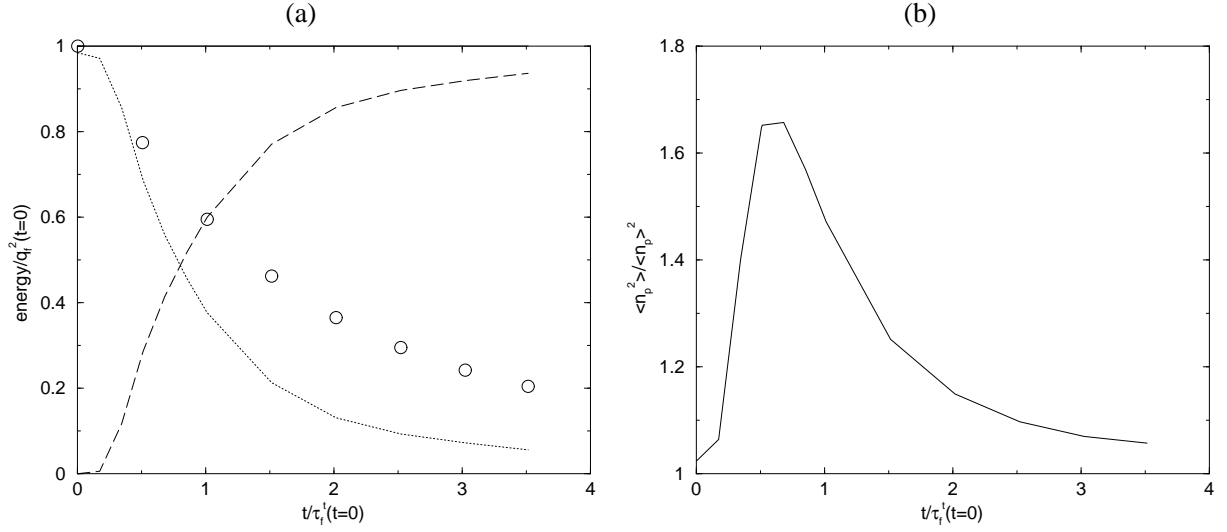


FIG. 4.16 – Cas  $B_\infty$ . (a) Evolution temporelle des énergies : énergie turbulente du fluide (cercles), de l'énergie moyenne des particules  $q_p^2$  (ligne continue), des énergies particulaires, corrélée  $\tilde{q}_p^2$  (ligne pointillée) et décorrélée  $\delta q_p^2$  (ligne tiretée). (b) Evolution temporelle du paramètre de concentration préférentielle  $\langle n_p^2 \rangle / \langle n_p \rangle^2$ .

(Fig. 4.16a). Pour  $t/\tau_{f0}^t = 1$ ,  $\delta q_p^2$  représente déjà 60% de l'énergie totale si bien que le critère de validité des spectres n'est plus satisfait après l'instant sauvegardé  $t/\tau_{f0}^t = 0.83$ . Les spectres des vitesses corrélées sont présentés (Fig. 4.17b). Avec le temps, le niveau du spectre diminue aux grandes échelles, et augmente aux grands nombres d'onde. Une zone avec une pente proche de  $-2$  semble exister aux instants  $t/\tau_{f0}^t = 0,5$  et  $0,68$ . La force de traînée n'est donc pas directement responsable de la forme des spectres à petite échelle.

## 4.4 Analyse des spectres des vitesses

Au vu des résultats précédents, il semble que, pour des particules lourdes, il existe bien une pente en  $k^{-2}$  dans le spectre des vitesses particulaires corrélées à plus petite échelle. Dans cette section, les effets de la force de traînée et la compressibilité du champ de vitesse particulaire sont analysés. Enfin, une interprétation physique de la forme des spectres de vitesse corrélée est proposée.

### 4.4.1 Corrélation des vitesses fluide-particule et effets de la traînée

Le spectre de corrélation des vitesses fluide-particule (covariance) est défini (Kaufmann (2004)) par

$$E_{fp}(k) = \frac{1}{4} \iiint (u_{f,i}^{TF}(\mathbf{k})u_{p,i}^{TF*} + u_{f,i}^{TF*}(\mathbf{k})u_{p,i}^{TF}(\mathbf{k}))\delta(k - |\mathbf{k}|)d\mathbf{k} \quad (4.14)$$

Dans le cas B1,  $E_{fp}$  est quasiment confondu avec le spectre du fluide  $E_f$  (Fig. 4.18). Quand l'inertie des particules augmente (cas B2 et B3), le niveau du spectre de corrélation des vitesses fluide-particule est plus

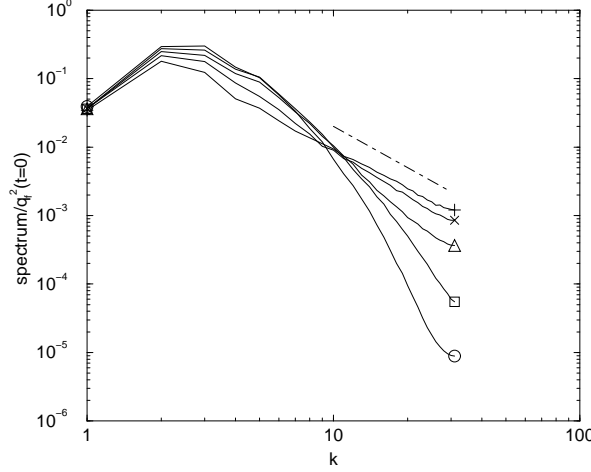


FIG. 4.17 – Spectre de de la vitesse corrélée des particules (ligne continue+symboles) aux instants  $t/\tau_{f0}^t = 0$  (cercles), 0,17 (carrés), 0,34 (triangles), 0,5 (plus), 0,68 (multipliés). La ligne discontinue point-trait suit  $k^{-2}$ . Cas  $B_\infty$

faible que ceux des spectres fluide et particules aux petites échelles, alors qu'aux plus grandes échelles, il est compris entre  $E_f$  et  $E_p$ . A petite échelle, la vitesse particulaire corrélée est peu corrélée avec la vitesse du fluide.

D'après Kaufmann (2004), l'équation d'évolution du spectre des vitesses corrélées peut se mettre sous la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t} E_p(k) - \mathcal{T}_p(k) - \mathcal{T}_p^P(k) + \mathcal{D}_p(k) + \Phi_p(k) = 0 \quad (4.15)$$

où  $\mathcal{T}_p(k)$  représente le transfert par convection,  $\mathcal{T}_p^P(k)$  l'effet du terme de « pression dilatation » particulaire,  $\mathcal{D}_p(k)$  la dissipation par le mouvement décorrélé et  $\Phi_p(k)$  l'effet de la force de traînée. Seul ce dernier terme est étudié par la suite. La répartition spectrale de la force de traînée sur l'évolution du spectre des vitesses corrélées des particules s'exprime en fonction des spectres des vitesses particulaire corrélées et du spectre des corrélations des vitesses fluide-particules selon :

$$\Phi_p(k) = -\frac{E_p(k)}{\tau_p} (1 - C_{fp}(k)) \quad (4.16)$$

où  $C_{fp}(k)$  est un coefficient de corrélation spectrale fluide-particule :

$$C_{fp}(k) = \frac{E_{fp}(k)}{E_p(k)} \quad (4.17)$$

Si ce coefficient est proche de 1, le spectre des vitesses corrélées particulaire est essentiellement déterminé par l'interaction des particules avec le fluide, il existe alors un équilibre de type Tchen-Hinze entre les spectres  $E_p$  et  $E_{fp}$ . Un tel équilibre existe aux plus petits nombres d'onde dans les cas B1 et B2 à  $t/\tau_{f0}^t = 1$  et dans le cas B2 à  $t/\tau_{f0}^t = 3$  (Fig. 4.19). Dans le cas B3, la force de traînée est productrice d'énergie corrélée aux grandes échelles, cette énergie est transférée aux plus grands nombres d'onde par les termes de transfert



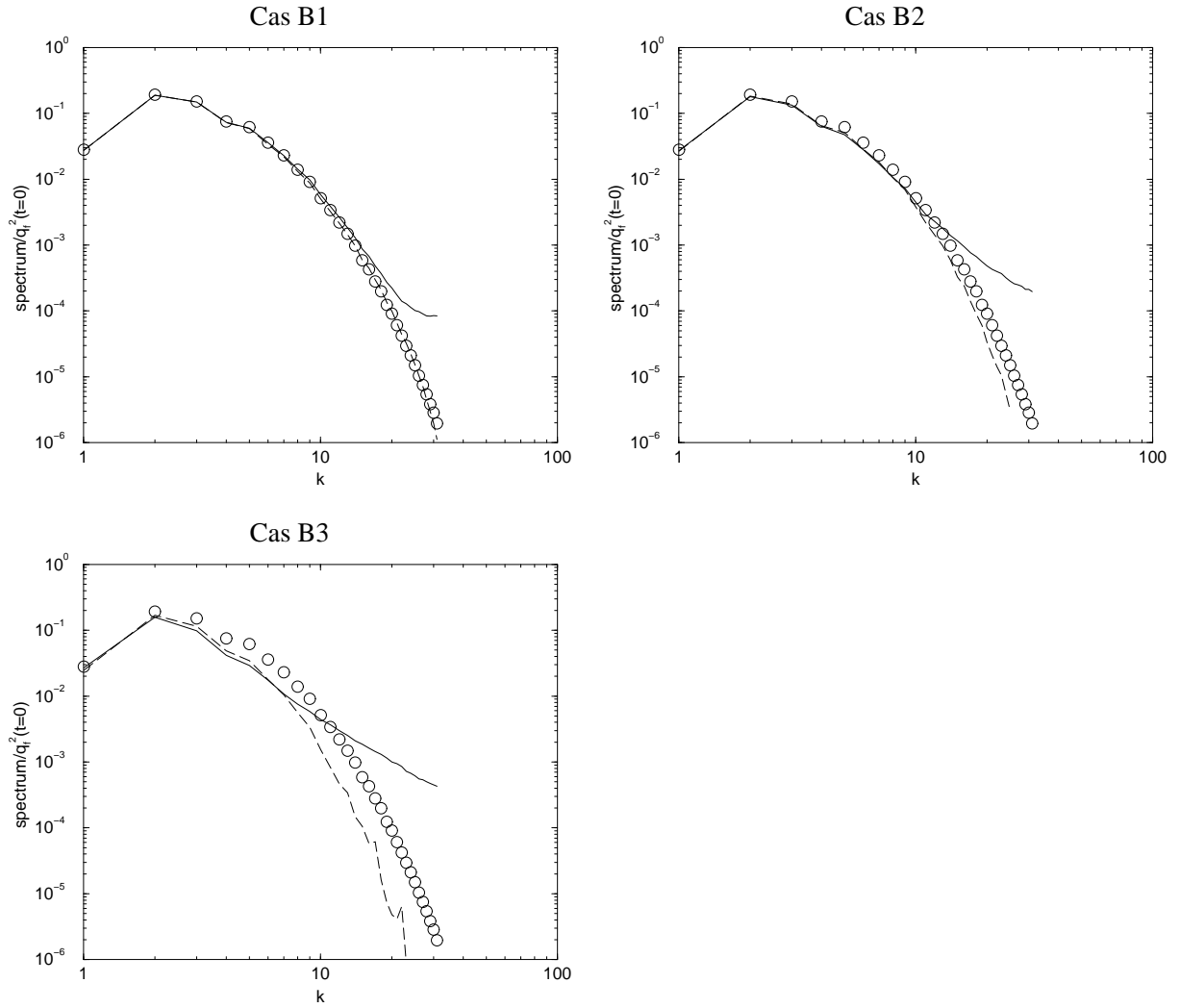


FIG. 4.18 – Spectres des vitesses fluides (cercles), particules (lignes continues) et fluide-particules (lignes pointillées) à  $t/\tau_{f0}^t = 1$  pour les cas B1, B2 et B3.

inter-échelles. Aux petites échelles,  $C_{fp}$  est quasiment nul dans tous les cas présentés, ce qui indique que les vitesses particulières corrélées ne sont pas corrélées avec les vitesses du fluide à ces échelles.

Pour expliquer, l'interaction (ou non) des particules avec les petites échelles du fluide, on peut comparer le temps de relaxation des particules à un temps caractéristique des échelles turbulentes de nombre d'onde  $k$ . On peut supposer que « les particules interagissent (ou pas) avec les échelles du fluide dont le temps caractéristique est supérieur (ou inférieur) au temps de relaxation  $\tau_p$  des particules ». La traînée agissant comme filtre passe bas en fréquence, les particules ne voient que les échelles ayant un grand temps caractéristique. Différents temps caractéristiques d'une échelle fluide de taille  $k$  peuvent être définis.

Tout d'abord, le temps de retournement d'une échelle de nombre d'onde  $k$  de l'écoulement fluide est obtenu

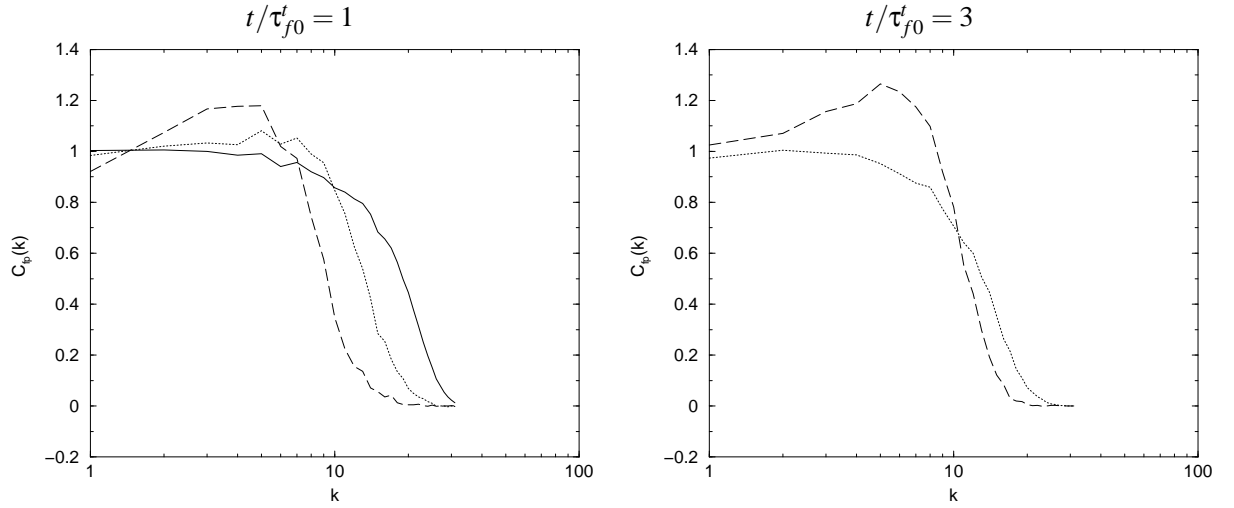


FIG. 4.19 – Coefficient spectral de corrélation fluide-particule  $C_{fp}(k)$  (éq. 4.17) aux instants  $t/\tau_{f0}^t = 1$  et 3 dans les cas B1 (ligne continue, seulement à  $t/\tau_{f0}^t = 1$ ), B2 (ligne pointillée) et B3 (ligne tiretée).

à partir du spectre des vitesses (Hinze (1975)) :

$$\tau_f^u(k) = \left[ \frac{2}{3} k^3 E_f(k) \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (4.18)$$

La figure 4.20a présente l'évolution de ce temps caractéristique cinématique fluide avec la taille de l'échelle. Les échelles du fluide qui interagissent avec les particules selon ce modèle seraient telles que  $\tau_f^u(k) \geq \tau_p$ . Ainsi, les particules interagissent avec toutes les échelles du fluide dans les cas B1 et B2, alors que dans le cas B3 des particules les plus lourdes, seules les plus petites échelles fluide agissent sur les particules. La prédiction de ce modèle n'est conforme ni aux résultats précédemment obtenus ni à la physique de l'écoulement. En effet, des échelles plus petites que la longueur de Kolmogorov ont, certes, un temps caractéristique de retournement très grand, mais aussi une durée de vie quasi-nulle et ne peuvent donc agir sur les particules. Le temps cinématique n'est manifestement pas l'échelle temporelle fluide pertinente de ce problème.

D'après Fede et Simonin (2006), on peut définir un temps caractéristique  $\tau_f^<(k)$  des échelles du fluide plus petites que  $k$  par le rapport de l'énergie et de la dissipation des échelles plus petites que  $k$  (notée  $q_f^{2<}$  et  $\varepsilon_f^<$ ) selon :

$$q_f^{2<}(k) = \int_k^\infty E_f(k') dk' \quad (4.19)$$

$$\varepsilon_f^<(k) = \int_k^\infty 2\nu_f k'^2 E_f(k') dk' \quad (4.20)$$

$$\tau_f^<(k) = \frac{q_f^{2<}(k)}{\varepsilon_f^<(k)} \quad (4.21)$$

La borne supérieure des intégrales est, en pratique, remplacée par le plus grand nombre d'onde résolu ( $k = 32$ ), ce qui induit une erreur dans le calcul de  $\tau_f^<(k)$  aux nombres d'onde proches de 32. On considérait que

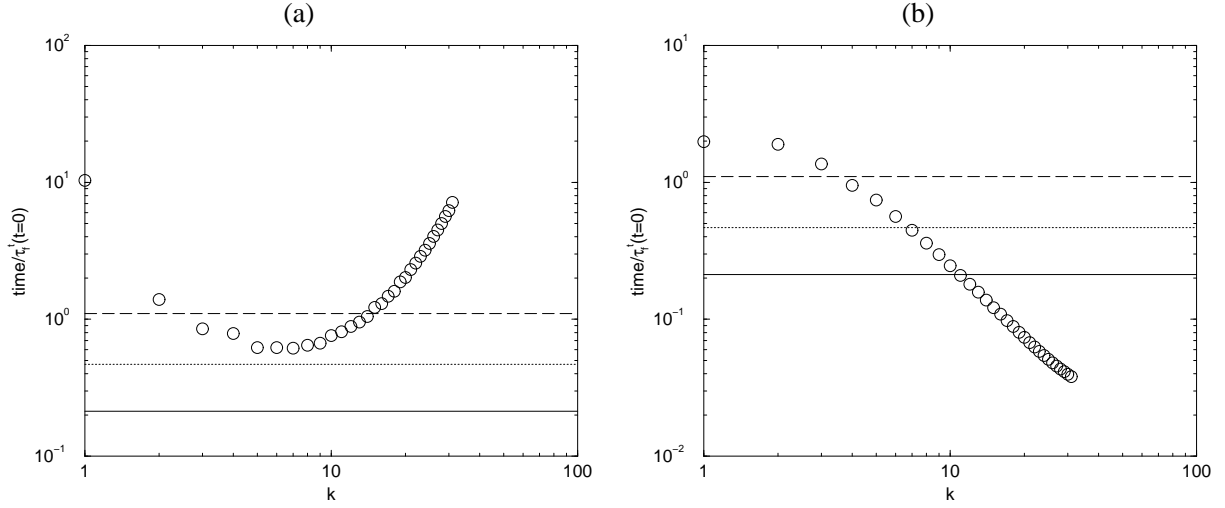


FIG. 4.20 – (a) Comparaison des temps de relaxation des particules  $\tau_p$  (lignes horizontales) et du temps caractéristique cinématique fluide  $\tau_f^t(k)$  (éq. 4.18) en fonction du nombre d’onde  $k$  de l’échelle à l’instant de simulation  $t/\tau_{f0}^t = 1$ . Les lignes horizontales représentent les valeurs du temps de relaxation des particules  $\tau_p$  pour les cas B1 (ligne continue), B2 (ligne pointillée) et B3 (ligne tiretée). (b) même légende que (a) le temps cinématique est remplacé par le temps caractéristique de l’ensemble des échelles plus petites que  $k$ ,  $\tau_f^<(k)$  (éq. 4.21).

l’évolution de  $\tau_f^<(k)$  évaluée ainsi est qualitativement correcte. Le temps  $\tau_f^<(k)$  vaut le temps de dissipation  $T_{\varepsilon_f}$  de l’énergie turbulente en  $k = 0$ . Ce temps  $\tau_f^<(k)$  a été choisi pour être comparé à  $\tau_p$  par analogie avec la modélisation du temps turbulent lagrangien  $\tau_f^t$  proportionnelle au temps de dissipation (voir éq. 1.32-1.33), qui est utilisé pour construire le nombre de Stokes  $St$ .  $\tau_f^<(k)$  décroît quand  $k$  augmente (Fig. 4.20b) à cause de la décroissance de type exponentiel du spectre d’énergie turbulente  $E_f(k)$  dans cette écoulement à faible Reynolds.  $\tau_f^<(k)$  est supérieur à  $\tau_p$  aux plus grandes échelles et inférieur au plus petites. Si l’on considère que les particules ne sont pas sensibles aux échelles turbulentes dont  $\tau_f^<(k) < \tau_p$ , alors les particules lourdes seraient corrélées avec le fluide aux grandes échelles. Le nombre d’onde à partir duquel les particules ne sont plus influencées par le fluide augmente quand l’inertie des particules diminue. Ces prédictions sont en accord avec les résultats précédents,  $\tau_f^<(k)$  est peut-être l’échelle de temps fluide pertinente.

#### 4.4.2 Compressibilité du champ de vitesse

Le champ de vitesse particulaire corrélée  $\mathbf{u}_p$  est décomposé en partie solénoïdale  $\mathbf{u}_p^s$  et compressible  $\mathbf{u}_p^c$ . Cette décomposition est unique en écoulement homogène et est effectuée dans l’espace de Fourier selon :

$$TF(\mathbf{u}_p^s) = TF(\mathbf{u}_p) - \frac{\mathbf{k}.TF(\mathbf{u}_p)}{k^2}\mathbf{k} \quad (4.22)$$

$$TF(\mathbf{u}_p^c) = TF(\mathbf{u}_p) - TF(\mathbf{u}_p^s) \quad (4.23)$$

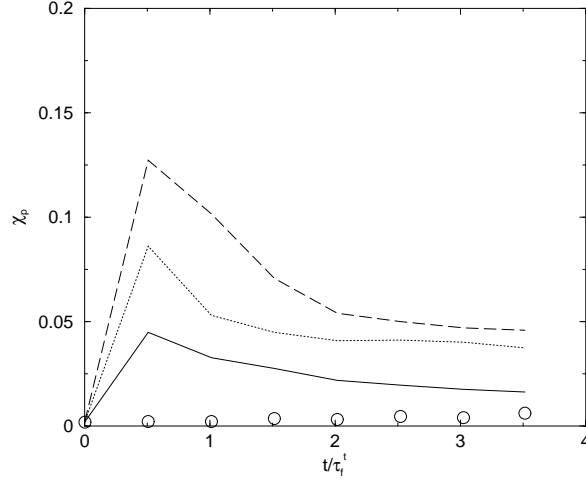


FIG. 4.21 – Evolution du rapport entre l'énergie cinétique compressible et l'énergie cinétique totale pour le fluide (cercle) et l'énergie corrélée particulaire  $\chi_p$  (éq. 4.24). Cas B1 : ligne continue ; cas B2 : ligne pointillée ; cas B3 : ligne tiretée.

où l'opérateur  $TF$  signifie transformée de Fourier. Les spectres d'énergies corrélées, solénoïdale  $E_p^s$  et compressible  $E_p^c$ , sont définis à partir de  $\mathbf{u}_p^s$  et  $\mathbf{u}_p^c$  (Kaufmann (2004)). Les vitesses solénoïdales et compressibles étant orthogonales, la somme de ces spectres est le spectre des vitesses particulières corrélées totales,  $E_p(k) = E_p^s(k) + E_p^c(k)$ . Le rapport entre l'énergie compressible totale et l'énergie totale est noté  $\chi_p$  :

$$\chi_p = \frac{\int_0^\infty E_p^c(k) dk}{\int_0^\infty E_p(k) dk} \quad (4.24)$$

La proportion d'énergie compressible augmente au début de la simulation, puis diminue et se stabilise après  $2\tau_f^t$  (Fig. 4.21) dans les cas B2 et B3. Dans le cas B1, le palier n'est pas présent et  $\chi_p$  vaut 1,5% en fin de simulation.  $\chi_p$  augmente avec l'inertie des particules et représente pendant la phase de stabilisation 5% et 4% pour les cas B2 et B3. A titre indicatif le ratio  $\chi_f$  est aussi reporté sur la figure 4.21. L'énergie compressible du fluide est en moyenne de 0,3% (maximum 0,6%), l'écoulement fluide peut légitimement être considéré comme incompressible.

Les spectres des énergies, corrélée totale, solénoïdale et compressible, permettent d'évaluer la répartition spectrale de ces énergies (Fig. 4.22). Le spectre d'énergie compressible décroît avec la taille des échelles considérées. A petite échelle, les spectres sont parallèles (avec une pente en  $k^{-2}$ ) pour des nombres d'onde supérieurs à 20 et 12 pour les cas B2 et B3.

La répartition spectrale est évaluée par le coefficient spectral de compressibilité défini par le rapport des spectres des vitesses particulières compressible et totale :

$$C_{pc}(k) = \frac{E_p^c(k)}{E_p(k)} \quad (4.25)$$

L'énergie des grandes échelles est principalement sous forme incompressible (Fig. 4.23), toutefois la compressibilité du champ de vitesse augmente avec l'inertie des particules. A petite échelle, les énergies solénoïdales

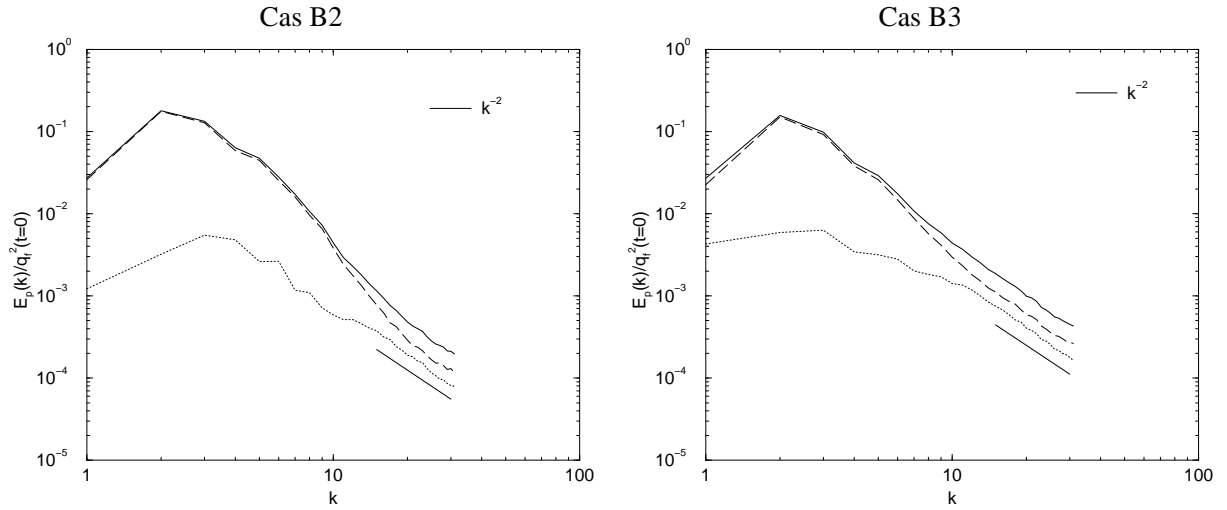


FIG. 4.22 – Spectre des énergies cinétiques particulières : corrélée totale (ligne continue), solénoïdale (ligne tiretée) et compressible (ligne pointillée) à l’instant  $t/\tau_{f0}^t = 1$ .

et compressibles sont du même ordre de grandeur. A petites échelles,  $C_{pc}(k)$  atteint un palier à une valeur de 0,4 indépendamment de l’inertie des particules considérés ici, la valeur du palier se maintient dans le temps. Le palier est atteint pour des valeurs de  $k$  plus faibles quand l’inertie des particules augmentent. Ce palier semble à peu près correspondre à la zone à pente constante du spectre  $E_p(k)$ .

**Lien entre compressibilité du champ de vitesse et concentration préférentielle.** Il est étonnant de constater que c’est dans le cas B3 présentant le moins de concentration préférentielle (comparativement aux cas B1 et B2) que la proportion moyenne d’énergie compressible est la plus importante (de même l’énergie compressible totale, il ne s’agit pas d’une conséquence de l’adimensionnement). L’essentiel de l’énergie particulaire corrélée compressible est aux grandes échelles, la compressibilité des grandes échelles du mouvement particulaire corrélé n’est donc pas une explication suffisante du phénomène de concentration préférentielle dans le formalisme eulérien mésoscopique. Il semble qu’il faille prendre en compte d’autres grandeurs telles que les petites échelles du mouvement corrélé et l’énergie décorrélée.

#### 4.4.3 Interprétation de la forme des spectres

Au vu des résultats précédents, les spectres des vitesses particulières corrélées  $E_p(k)$  présentent deux zones distinctes (le nombre d’onde de transition est noté  $k_p^{tr}$ ) : aux plus grandes échelles les vitesses particulières corrélées « ressemblent » à la vitesse fluide ( $C_{fp} \geq 1$ ) à cause des interactions entre les deux phases par la force de traînée, alors que la vitesse aux plus petites échelles n’est pas corrélée avec le fluide. Pour  $k > k_p^{tr}$ ,  $E_p(k)$  présente une pente constante en  $k^{-2}$ , cette zone correspond aussi à une répartition constante entre les énergies compressible et solénoïdale ( $E_p^s(k)/E_p^c(k) \approx 1,5$ ), la pente du spectre  $E_p(k)$  est proche de  $k^{-2}$ .

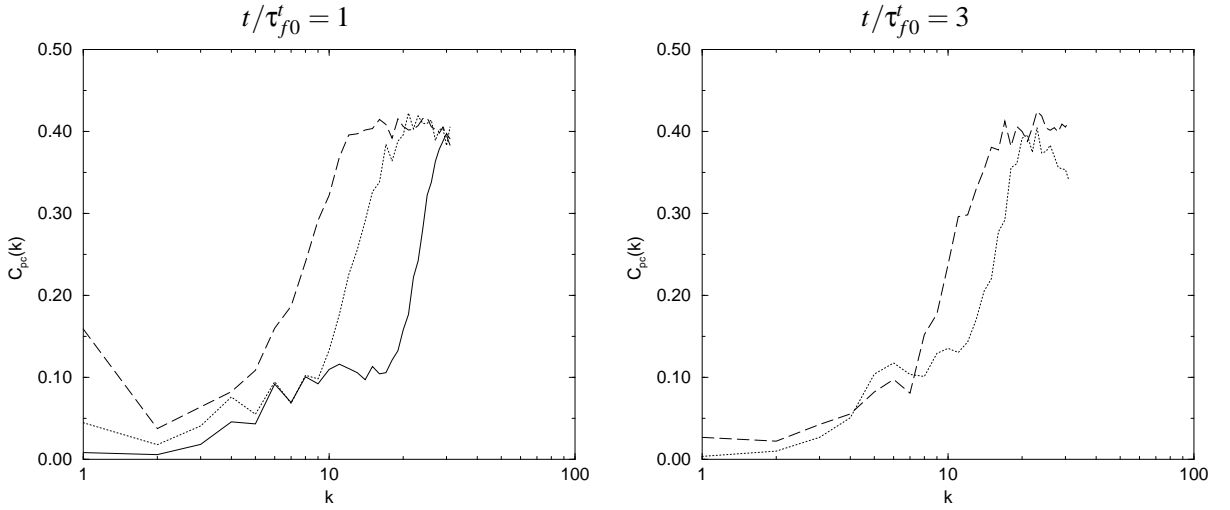


FIG. 4.23 – Coefficient spectral de compressibilité de la vitesse particulaire corrélée  $C_{pc}(k)$  (éq. 4.25) aux instants  $t/\tau_{f0}^t = 1$ , et 3 dans les cas B1 (ligne continue, seulement à  $t/\tau_{f0}^t = 1$ ), B2 (ligne pointillée) et B3 (ligne tiretée).

En écoulement turbulent supersonique, des spectres d'énergie cinétique en  $k^{-2}$  sont classiquement rencontrés : ainsi Porter et al. (1992) initialisent une THI à l'aide d'un champ turbulent synthétique, dans une première phase le spectre de puissance des vitesses présente une pente en  $k^{-2}$  qui se transforme dans une deuxième phase en pente proche de  $k^{-5/3}$  (spectre de Kolmogorov (1941)). Cette zone est associée à un régime où les structures assurant la dissipation de l'énergie cinétique sont des surfaces, des chocs. Cela peut être démontré mathématiquement sur l'équation de Burgers (voir Fournier et Frisch (1983) par exemple), qui est une équation de convection 1D, considérée comme un modèle simplifié des équations de Navier-Stokes.

Les champs instantanés de la dissipation de l'énergie particulaire corrélée par le mouvement décorrélié  $\delta R_{p,ij}^* \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j}$  sont présentés (Fig. 4.24). Ce terme est quasiment nul dans les zones éloignées des amas, et négatif autour des amas de particules. Il présente aussi quelques valeurs positives à l'intérieur des amas dans les cas des particules les plus inertielles. De plus, on a vu que le champ de densité du nombre de particules présente une grande inhomogénéité (Fig. 4.8). Un scénario analogue à celui de la turbulence supersonique est envisageable pour expliquer une pente en  $k^{-2}$  du spectre  $E_p(k)$  aux grands nombres d'onde, la forme des structures dissipatives étant quasiment des surfaces.

#### 4.4.4 Détermination numérique de $k_p^{tr}$

Le nombre d'onde de transition  $k_p^{tr}$  peut être évalué de deux manières différentes et indépendantes : à partir du coefficient de corrélation fluide-particule (4.17), ou bien à partir du coefficient spectral de com-

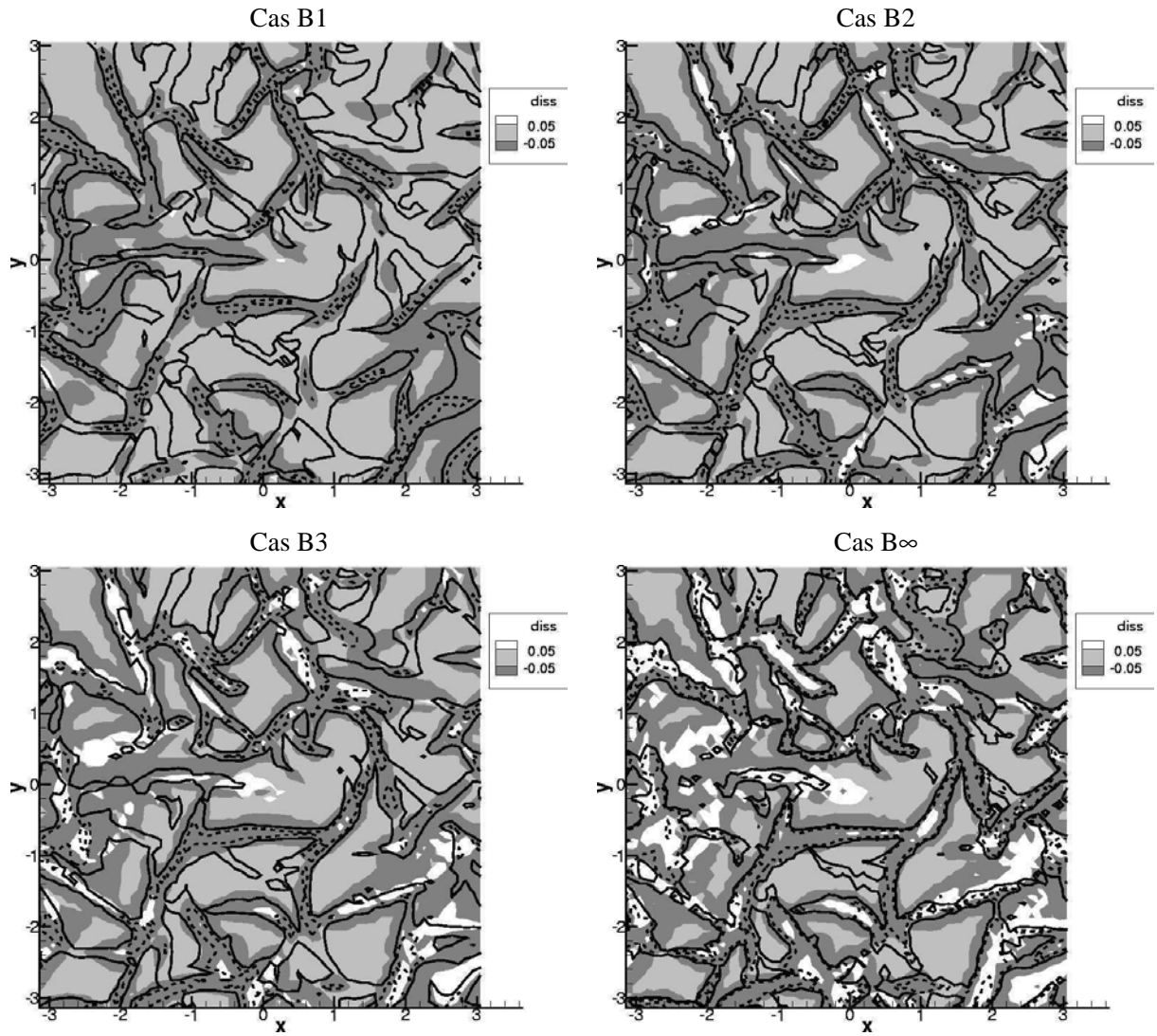


FIG. 4.24 – Isocontour de densité du nombre de particules (lignes) et de dissipation par mouvement décorrélié  $\delta R_{p,ij}^* \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j} / |\langle \delta R_{p,ij}^* \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j} \rangle_p|$  à  $t/\tau_{f0}^t = 0,5$ . Le maillage de projection des grandeurs particulières comporte  $64^3$  nœuds.  $n_p/\langle n_p \rangle = 1$  : ligne continue ;  $n_p/\langle n_p \rangle = 2$  : ligne pointillée.

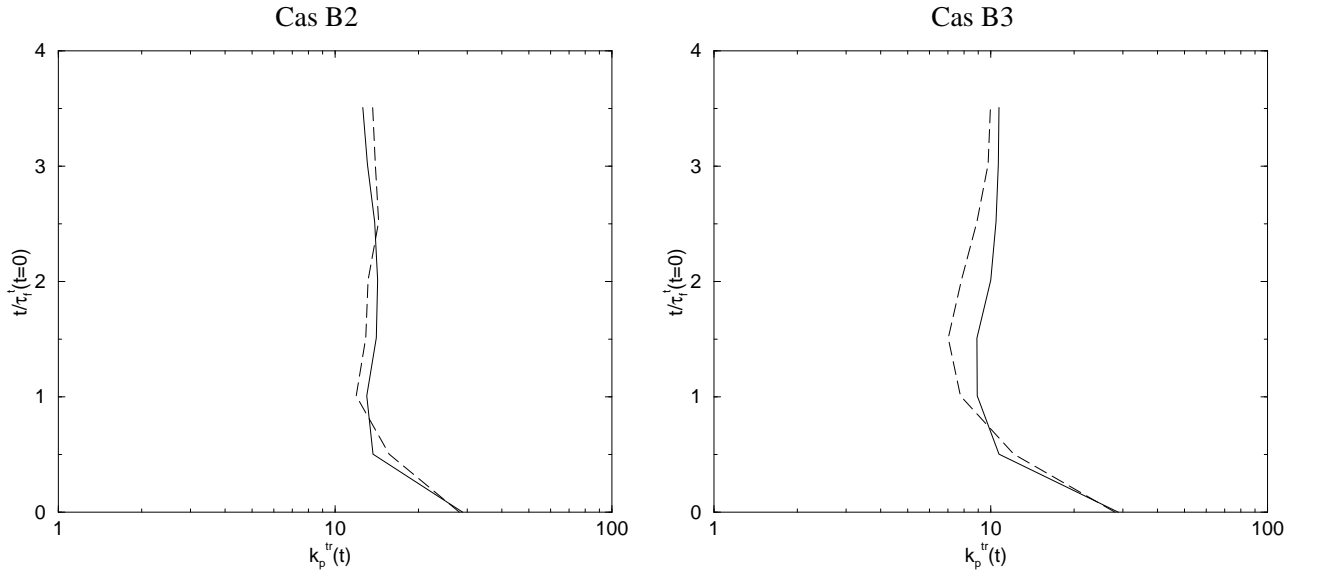


FIG. 4.25 – Evolution temporelle des nombres d'onde de transition  $k_p^{tr}$  mesurés avec le coefficient spectral de corrélation fluide-particule (éq. 4.26 ; ligne continue) ou de compressibilité de la phase particulaire (éq. 4.27 ; ligne tiretée).

compressibilité (4.25) de la vitesse particulaire corrélée :

$$C_{fp}(k_p^{tr}) = \frac{1}{2}(\max_k(C_{fp}(k)) + \min_k(C_{fp}(k))) \quad (4.26)$$

$$C_{pc}(k_p^{tr}) = \frac{1}{2}(\max_k(C_{pc}(k)) + \min_k(C_{pc}(k))) \quad (4.27)$$

Numériquement,  $k_p^{tr}$  est obtenu en utilisant une interpolation linéaire des coefficients spectraux  $C_{fp}(k)$  et  $C_{pc}(k)$ . Cette mesure a été choisie pour la simplicité de sa mise en œuvre numérique. Les résultats obtenus par les deux méthodes sont comparables (Fig. 4.25). A l'initialisation, la mesure de  $k_p^{tr}$  est de 28 avec les deux méthodes, ce qui est proche du nombre d'onde maximum détectable 32. Après avoir atteint un minimum à  $t/\tau_{f0}^t = 1$  dans le cas B2 et à  $t/\tau_{f0}^t = 1,5$  dans le cas B3,  $k_p^{tr}$  augmente puis se stabilise. On retrouve que  $k_p^{tr}$  diminue avec l'inertie des particules.

Différents essais pour déterminer théoriquement  $k_p^{tr}$ , en particulier en comparant  $\tau_f^<(k_p^{tr})$  à  $\tau_p$ , se sont révélés infructueux du fait de la difficulté de la mesure de ces quantités. L'instationnarité de la configuration ne facilite pas non plus l'analyse.

## 4.5 Test a priori des modélisations du mouvement décorrélé

Les transferts entre les différentes grandeurs, les mécanismes physiques mis en jeu ont été analysés. Nous nous intéresserons maintenant à la modélisation des effets du mouvement décorrélé des particules.



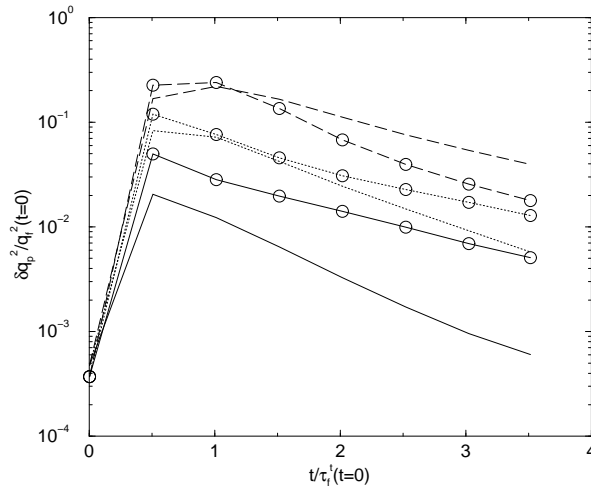


FIG. 4.26 – Comparaison de la RUE moyenne (lignes sans symbole) et des prédictions du modèle empirique de Février et al. (2005) donné par l'éq. (4.28) (lignes+cercles). Cas B1 : ligne continue ; cas B2 : ligne pointillée ; cas B3 : ligne tiretée.

#### 4.5.1 Modélisation sans équation de transport supplémentaire

Février et al. (2005) propose un modèle semi-empirique pour l'énergie particulaire décorrélée moyenne en turbulence homogène isotrope stationnaire. Les variations de la RUE dépendent au premier ordre de la densité du nombre de particules (Kaufmann et al. (2006b)). Les prédictions de ces deux modèles sont testés sur les résultats de simulation Lagrangiennes précédemment décrits.

##### Modèle semi-empirique de Février

Le modèle semi-empirique de Février et al. (2005) permet de prédire le niveau moyen de l'énergie particulaire décorrélée en fonction du temps turbulent lagrangien le long de la trajectoire des particules en THI stationnaire (éq. 2.20). Il est basé sur l'observation empirique suivante :

$$\delta q_p^2 \approx \left( \frac{4q_{f@p}^2 \tilde{q}_p^2}{q_{fp}^2} - 1 \right) \tilde{q}_p^2 \quad (4.28)$$

L'énergie décorrélée moyenne est comparée aux prédictions de l'équation (4.28) pour les cas B1, B2 et B3 (fig. 4.26). Le modèle permet bien de reproduire l'évolution temporelle de la RUE moyenne. L'évolution en fonction de l'inertie des particules est qualitativement correcte. Quantitativement, les variations du niveau d'énergie décorrélée avec l'inertie sont sous-estimées : dans le cas des particules les plus légères la RUE prédite est d'un ordre de grandeur trop élevée (lignes continues) alors qu'elle est 50% trop faible pour le cas avec le nombre de Stokes le plus grand.

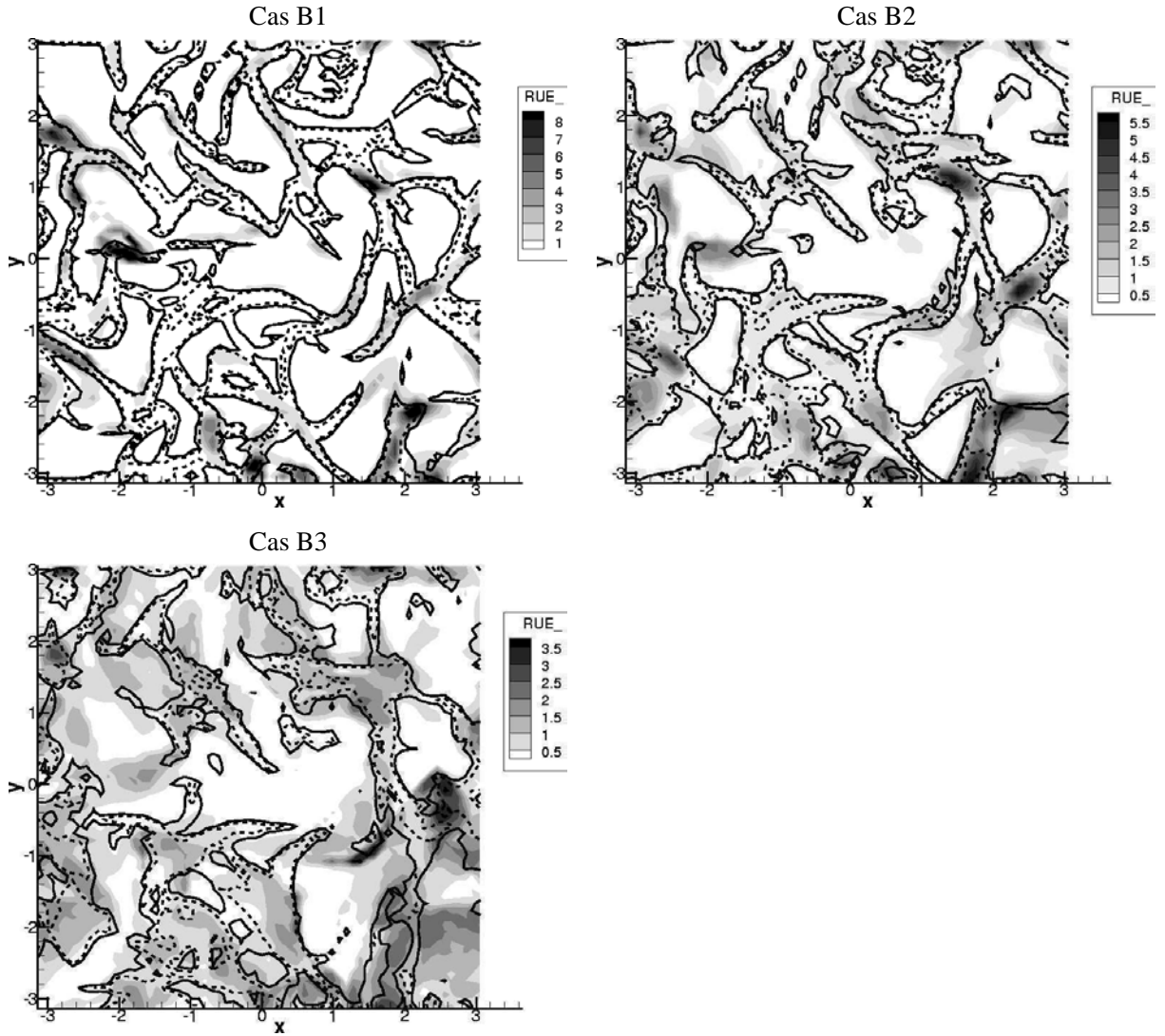


FIG. 4.27 – Champs instantanés de l'énergie décorrelée (normalisée par sa moyenne  $\delta q_p^2$ ) à temps  $t/\tau_{f0}^t = 1$  pour les cas B1, B2 et B3. Les lignes suivent les contours de densité du nombre de particules :  $n_p/\langle n_p \rangle = 1$  : lignes continues ;  $n_p/\langle n_p \rangle = 1,5$  : lignes tiretées.

### Modèle de pression isentropique

Ce modèle permet d'éviter la résolution d'une équation de transport supplémentaire. Il est basé sur l'idée que l'énergie non corrélée est uniquement liée à la divergence du champ de vitesse corrélée et donc à la densité du nombre de particules  $n_p$  selon

$$\delta\theta_p = A n_p^2 \quad (4.29)$$

où  $A$  peut être obtenu en THI par le modèle semi-empirique de Février. Ici,  $A$  est directement évalué à partir des résultats de simulation. La figure 4.27 présente les champs instantanés d'énergie décorrelée pour les cas

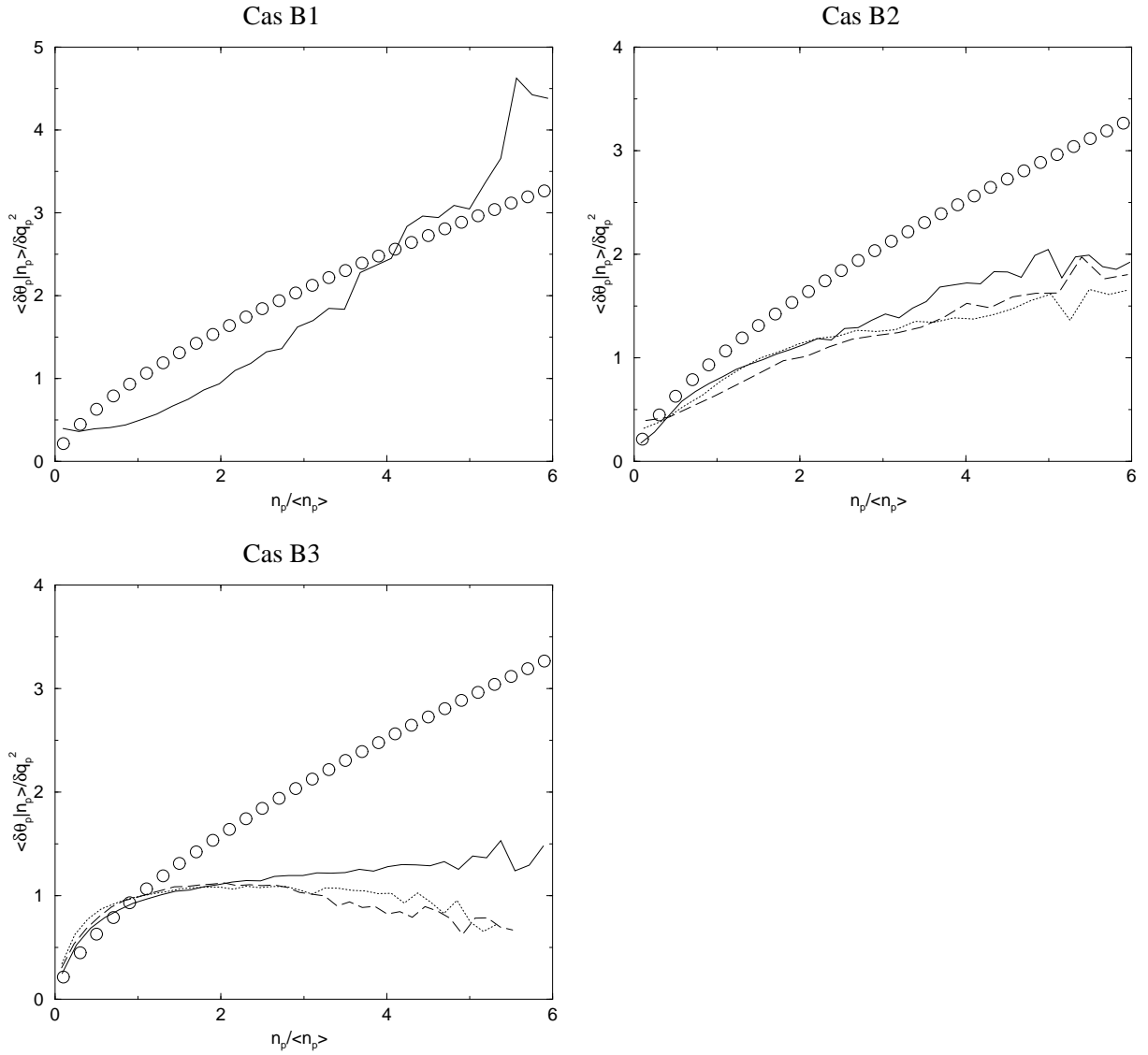


FIG. 4.28 – Moyenne de la RUE conditionnée par la densité locale de particules aux temps  $t/\tau_{f0}^t = 1$  (ligne continue),  $t/\tau_{f0}^t = 2$  (ligne pointillée) et  $t/\tau_{f0}^t = 3$  (ligne tiretée). Le modèle de pression isentropique ( $\langle \delta\theta_p | n_p \rangle = An_p^{\frac{2}{3}}$ ) est représenté par les cercles.

B1, B2 et B3. Les zones de concentration préférentielle de particules sont repérées par des isocontours (pour  $n_p / \langle n_p \rangle = 1$  et  $1,5$ ).  $\delta\theta_p$  est, principalement, localisée dans et autour des amas. La répartition spatiale de  $\delta\theta_p$  est corrélée avec le champ de  $n_p$ . Les moyennes de la RUE locale conditionnées par la densité du nombre de particules  $\langle \delta\theta_p | n_p \rangle$  sont présentées pour les différents cas et comparées au modèle de pression isentropique sur la figure 4.28. L'espace des densités du nombre de particules est discrétisé en plusieurs intervalles. La moyenne de la RUE est ensuite calculée pour chaque intervalle de  $n_p$ . Les moyennes conditionnées sont tracées pour trois instants ( $t/\tau_{f0}^t = 1, 2, 3$ ) dans les cas B2 et B3 et seulement à  $t/\tau_{f0}^t = 1$  pour le cas

B1, l'énergie décorrélée moyenne étant trop faible pour mesurer des moyennes conditionnées aux autres instants de simulation. En accord avec le modèle, l'énergie corrélée est plus grande dans les zones où le nombre de particules est grand. L'évolution de  $\delta\theta_p$  en  $n_p^{\frac{2}{3}}$  n'est pas présente. Pour le cas B2, cette évolution est plutôt en  $n_p^{0.5}$ . Dans le cas B3, la moyenne de  $\delta\theta_p$  conditionnée par  $n_p$  est à peu près horizontale pour  $n_p/\langle n_p \rangle > 1,5$ , l'énergie décorrélée dépend peu du nombre de particules dans les cellules où la concentration en particules est importante. Le modèle de pression isentropique semble peu adapté.

#### 4.5.2 Modèle de viscosité + équation $\delta\theta_p$

Les variables retenues sont la densité du nombre de particules  $n_p$ , la vitesse corrélée  $\mathbf{u}_p$  et l'énergie décorrélée  $\delta\theta_p$ . En utilisant ce jeu de cinq équations, les termes à modéliser sont la partie déviatrice du tenseur des corrélations doubles de vitesses non-corrélées (RUV) dans l'équation de  $\mathbf{u}_p$  et le flux par les corrélations triples dans l'équation de  $\delta\theta_p$ .

#### Corrélations doubles de vitesses non-corrélées

**Modèle de viscosité** Le modèle de viscosité présenté dans le chap. 2 (éq. 2.43- 2.44). Il a été obtenu sous deux hypothèses : l'équilibre production dissipation des corrélations doubles et une faible anisotropie. Pour rappel, le modèle de viscosité due au mouvement décorrélée est :

$$\delta R_{p,ij}^* = -\frac{\tau_p}{3} \delta\theta_p \left[ \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{p,j}}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_{p,k}}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] \quad (4.30)$$

Un tel modèle de viscosité RUV est parfaitement justifié lorsque le nombre de Kundsens est inférieur à l'unité. Le nombre de Kundsens est défini pour un écoulement fluide par le rapport du libre parcours moyen d'une molécule et la plus petite échelle de variation du champ de vitesse mésoscopique :

$$Kn = \frac{l_\delta}{l_m} \quad (4.31)$$

Dans le cadre du formalisme Eulérien mésoscopique,  $l_\delta$  peut être évalué à l'aide de l'énergie décorrélée et du temps de relaxation des particules  $\tau_p$  et  $l_m$  avec l'énergie corrélée  $\tilde{q}_p^2$  et des gradients de vitesse corrélé :

$$l_\delta = \sqrt{\frac{2}{3} \delta q_p^2 \tau_p} \quad (4.32)$$

$$l_m = \frac{\sqrt{\frac{2}{3} \tilde{q}_p^2}}{|S_p|} \quad (4.33)$$

$$Kn_p = \sqrt{\frac{\delta q_p^2}{\tilde{q}_p^2} \tau_p |S_p|} \quad (4.34)$$

où  $|S_p|$  est la norme du tenseur de cisaillement définie par  $|S_p|^2 = 2S_{p,ij}S_{p,ij}$ . Il est aussi possible de définir un nombre de Knudsen par un rapport d'échelles temporelles : le temps de relaxation des particules et de variation du champ de vitesse corrélée (Simonin et al. (2002)),

$$Kn_p' = \tau_p |S(\mathbf{u}_p)| \quad (4.35)$$

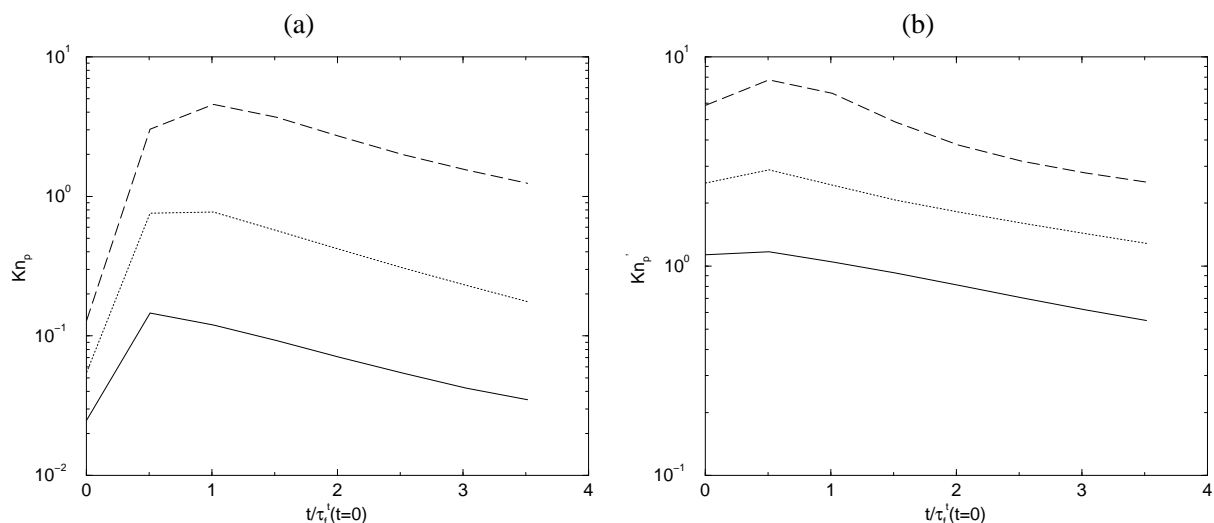


FIG. 4.29 – Evolution des nombres des Knudsen particuliers. (a)  $Kn_p$  définis par les éq. (4.32)-(4.34). (b)  $Kn'_p$  définis par l'éq. (4.35). Cas B1 : ligne continue ; cas B2 : ligne pointillée ; cas B3 : ligne tiretée.

Les évolutions temporelles de  $Kn_p$  et  $Kn'_p$  sont présentées sur la figure 4.29. Le choix de la définition du Knudsen particulaire n'est actuellement pas clair<sup>2</sup>. La définition du Knudsen particulaire  $Kn_p$  (éq. 4.32-4.34) a le bon goût de donner un Knudsen nul si les particules suivent exactement le fluide (RUE nulle). Quelque soit la définition adoptée, ce nombre augmente avec l'inertie des particules. Sur les trois cas étudiés, ce nombre est trop important pour justifier la validité du modèle de viscosité présenté (pour un fluide, la validité des équations de Navier-Stokes est mise en défaut pour un nombre de Knudsen dépassant  $10^{-3}$ ). Par exemple dans le cas extrême de nuages interstellaires d'hydrogène non ionisé, le nombre microscopique de Knudsen (éq. 4.31) vaut environ  $\frac{1}{6}$  et le rapport des temps inter-collisionnel et de la plus petite échelle de la turbulence est de  $\frac{1}{32}$  (Spitzer (1968) cité par Tennekes et Lumley (1972)).

Les coefficients de corrélation direct et contracté entre ce modèle et le terme exact sont comparés pour les cas B1, B2 et B3 sur la figure 4.30. Le coefficient de corrélation direct compare les termes  $n_p \delta R_{p,12}^*$  mesuré et modélisé, alors que, pour le coefficient contracté, la comparaison est effectuée au niveau du terme  $n_p \delta R_{p,12}^* \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j}$  qui intervient dans l'équation locale de l'énergie corrélée. Ces deux types de corrélations sont appelés aussi corrélation aux niveaux tensorielle et scalaire dans la littérature (Clark et al. (1979)).

Les champs de  $\delta R_{p,i,j}^* \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j}$  présentent en majorité des valeurs négatives (Fig. 4.31, ligne continue), ce terme est donc globalement un terme de dissipation de l'énergie corrélée par le mouvement décorrélé des particules. Plus précisément, lorsque l'inertie des particules augmente, la probabilité que ce terme soit positif,

<sup>2</sup>Dans la théorie cinétique des gaz, deux définitions du nombre de Knudsen caractérisant le domaine de validité des équations de Navier-Stokes peuvent apparaître. Par un développement de Chapman Enskog de la PDF des vitesses des molécules intervenant dans l'opérateur de collision de l'équation de Boltzmann, le nombre de Knudsen est un rapport de longueurs caractéristiques (par exemple Graham (2002)). Si un développement de Grad (1939) est utilisé, alors le Knudsen sera un rapport de temps caractéristiques (Jenkins et Richman (1985)).

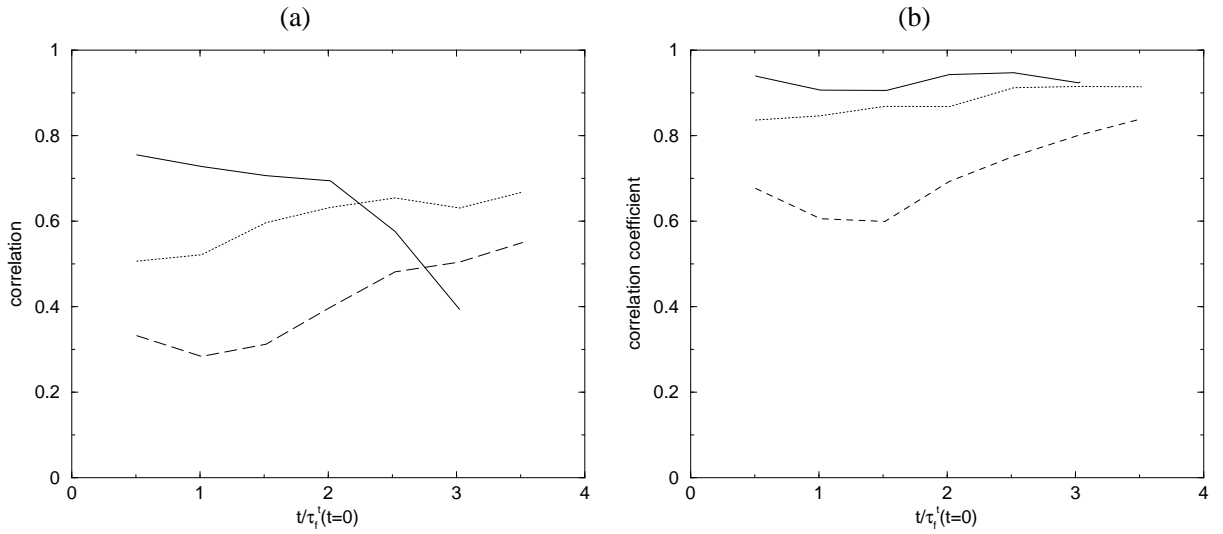


FIG. 4.30 – Coefficients de corrélation direct (a) et contracté (b) entre le champ exact de  $\delta R_{p,ij}^*$  et le modèle de viscosité RUV. Cas B1 : ligne continue ; cas B2 : ligne pointillée ; cas B3 : ligne tiretée.

c'est à dire que le mouvement décorrélé produise de l'énergie corrélée, augmente : 0,3%, 3% et 25% de valeurs positives pour les cas B1, B2 et B3. Les PDF du modèle de viscosité RUV (éq. 4.30) sont présentées en ligne tiretée sur la figure 4.31abc. Pour les cas B1 et B2, la PDF de dissipation est bien reproduite par le modèle de viscosité. Par construction, le modèle de viscosité n'est pas capable de prédire la production de d'énergie corrélée par le mouvement décorrélé. Dans le cas B3, le modèle de viscosité sous-estime la probabilité d'obtenir de grandes valeurs négatives du terme  $\delta R_{p,ij}^* \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j}$ .

Les moyennes des dissipations RUV prédites par le modèle, conditionnées par la valeur locale du terme exact<sup>3</sup> pour les trois cas sont présentées (Fig. 4.31d). Dans les cas B1 et B2, le modèle de viscosité prédit correctement les moyennes conditionnées pour les valeurs négatives du terme  $\delta R_{p,ij}^* \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j}$  (lignes continues et pointillées proches de la ligne mixte d'équation  $y = x$ ). Aux emplacements où ce terme est fortement positif, le modèle de viscosité prédit des valeurs fortement négatives. Cela peut, en partie, expliquer la moindre performance du modèle dans le cas des particules les plus inertielles.

Pour la comparaison des PDF, un coefficient multiplicatif a été introduit dans le modèle de viscosité pour ajuster sa valeur moyenne avec la dissipation RUV moyenne mesurée. Ce coefficient est de l'ordre de l'unité (Fig. 4.32) et diminue quand l'inertie des particules augmente (2,0, 1,1 et 0,36 en moyenne pour les cas B1, B2 et B3). Dans le cas B3b (mêmes particules que pour B3 mais initialisation à vitesse nulle), le coefficient correcteur est très proche de celui du cas B3 et vaut 0,32 en moyenne. Enfin, ce coefficient augmente avec le temps sauf dans le cas B3b où il est à peu près constant durant le temps de simulation. La totalité des

<sup>3</sup>Les moyennes conditionnées permettent de juger l'efficacité d'un modèle et sont préférées ici à l'utilisation de nuages de points souvent illisibles. Ces moyennes conditionnées sont présentées adimensionnalisées de telle sorte qu'un model parfait à une constante multiplicative près suit la droite d'équation  $y = x$ . Si le modèle ne présente aucune corrélation avec le terme exacte, la moyenne conditionnée est une droite horizontale.

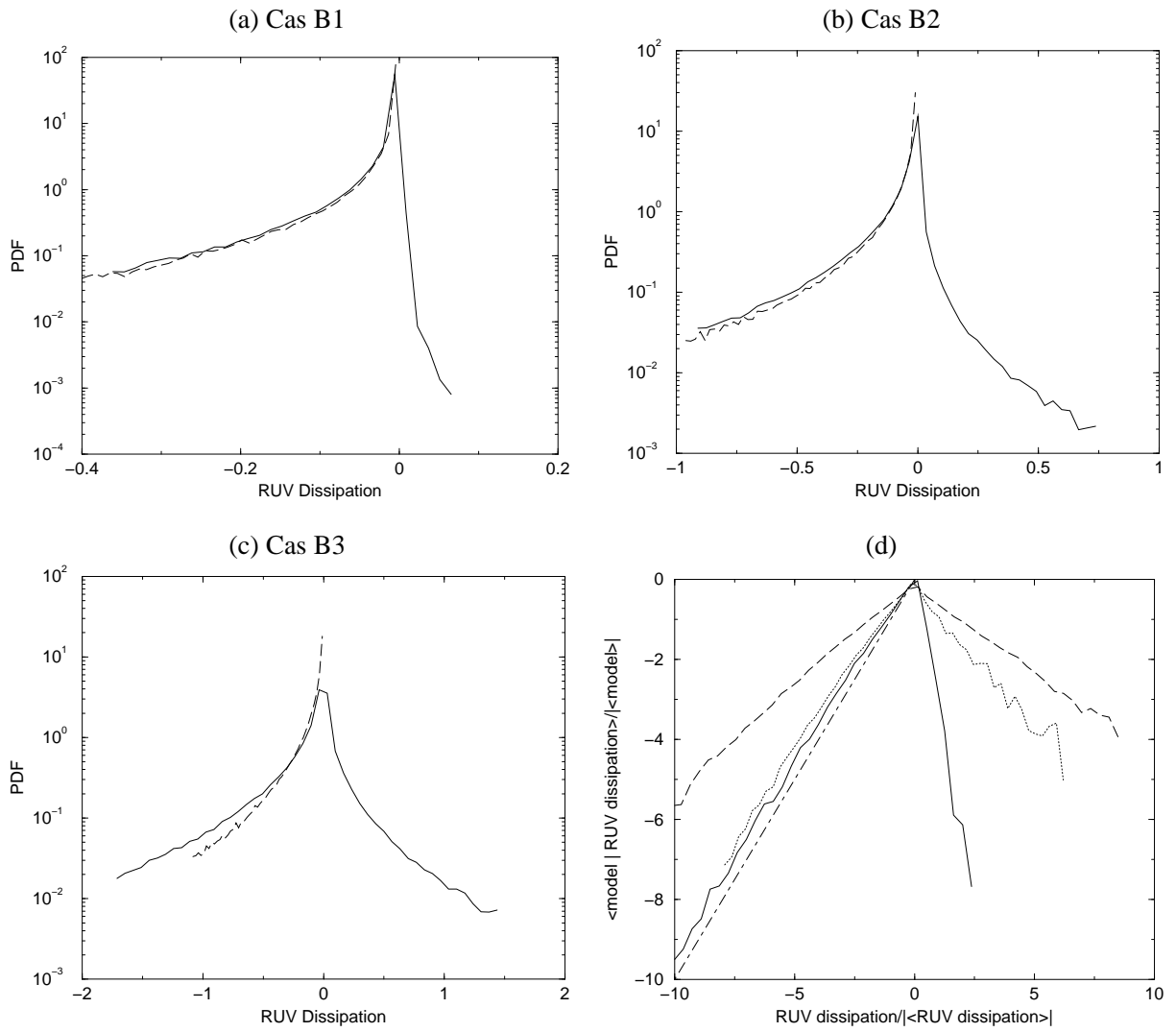


FIG. 4.31 – (abc) PDF de la dissipation due à la vitesse décorrélée ( $\delta R_{p,ij}^* \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j}$ ) exacte (ligne continue) et modélisé par le modèle de viscosité donné par l'éq. (4.30) à l'instant  $t/\tau_f^t = 1$ . (d) Moyenne de la dissipation  $\delta R_{p,ij}^* \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j}$  prédite par le modèle de viscosité, conditionnée par la valeur mesurée (« exacte ») à l'instant  $t/\tau_f^t = 1$ . Cas B1 : ligne continue ; cas B2 : ligne pointillée ; cas B3 : ligne tiretée ; droite d'équation  $y = x$  : ligne mixte.

échelles dissipatives n'étant pas résolue sur le maillage de projection utilisé, les tests a priori ne permettent pas de prescrire une valeur optimale de la constante.

Par ailleurs, pour remédier aux limitations du modèle de viscosité testé (particules « pas trop » inertielles, présence de valeurs positives du terme de dissipation), on peut se demander :

**A-t'on intérêt à utiliser un modèle de viscosité plus général ?** D'après Pope (1975) en écoulement monophasique avec une approche RANS, l'hypothèse de base des modèles de viscosité turbulente est que le

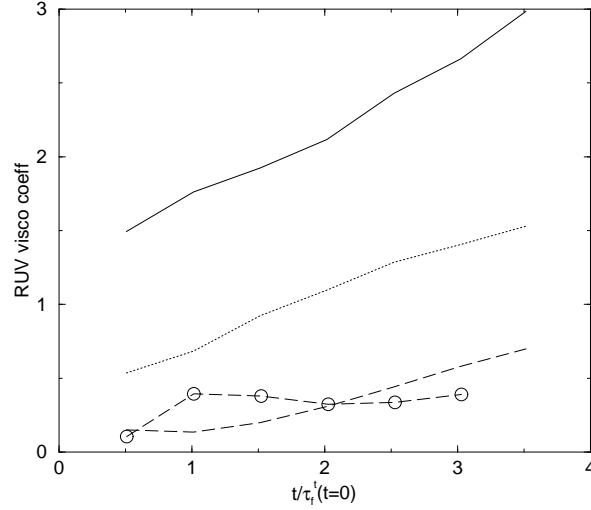


FIG. 4.32 – Coefficient multiplicatif nécessaire pour ajuster la dissipation du modèle de viscosité à la moyenne de la dissipation RUV mesurée. Cas B1 : ligne continue ; cas B2 : ligne pointillée ; cas B3 : ligne tiretée ; cas B3b : ligne tiretée + cercles.

tenseur de Reynolds ne dépend que de grandeurs locales, les termes de transport des contraintes de Reynolds doivent être négligeables.

En négligeant les termes de transport par le mouvement corrélé et par le mouvement décorrélé dans l'équation bilan de  $\delta R_{p,ij}$  (éq 2.35), on obtient un équilibre entre la production par les gradient locaux de vitesse corrélée et la dissipation par la force de traînée :

$$\delta R_{p,mj} \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_m} + \delta R_{p,im} \frac{\partial u_{p,j}}{\partial x_m} + \frac{2}{\tau_p} \delta R_{p,ij} = 0 \quad (4.36)$$

En décomposant  $\delta R_{p,ij}$  en partie déviatrice  $\delta R_{p,ij}^*$  et sphérique, l'équation précédente prend la forme :

$$\delta R_{p,ij}^* + \frac{\tau_p}{2} \left[ \delta R_{p,mj}^* \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_m} + \delta R_{p,im}^* \frac{\partial u_{p,j}}{\partial x_m} - \frac{2}{3} \delta R_{p,mk}^* \frac{\partial u_{p,k}}{\partial x_m} \right] = -v_{RUV} \left[ \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{p,j}}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_{p,k}}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] \quad (4.37)$$

Cette écriture fait apparaître le modèle de viscosité testé précédemment. Le système des 6 équations (4.37) est sous la forme  $A.x = b$ , où  $x$  est le vecteur des 6 composantes du tenseur  $\delta R_{p,ij}^*$  (le tenseur est symétrique),  $A$  est une matrice  $6 \times 6$  et  $b$  est le modèle simple de viscosité. Un modèle de contrainte algébrique (MCA) est obtenu en résolvant ce système (voir Rodi (1976) en RANS cité par Gatski et Speziale (1993)).

Ce modèle a été implanté et testé dans les cas B2 et B3. Le système d'équations est résolu en chaque point par une méthode de décomposition en valeur seule (routines *svdcmp* des « numerical recipes », Press et al. (1997)). Il a été vérifié que les solutions trouvées étaient bien solutions du système (avec une erreur de l'ordre de  $10^{-13}$ ). L'erreur utilisée est une erreur moyenne sur l'ensemble du domaine définie par :

$$erreur = \sqrt{\frac{\langle \frac{1}{6} \sum_{i=1,6} [(A.x)_i - b_i]^2 \rangle}{\langle \frac{1}{6} \sum_{i=1,6} [(A.x)_i]^2 \rangle + \langle \frac{1}{6} \sum_{i=1,6} [b_i]^2 \rangle}} \quad (4.38)$$

Par construction, cette erreur est inférieure à 1. Les coefficients de corrélations au niveau scalaire entre ce modèle et le terme exact (figure 4.33a) sont inférieurs à 0,2. Ce modèle de contrainte algébrique est



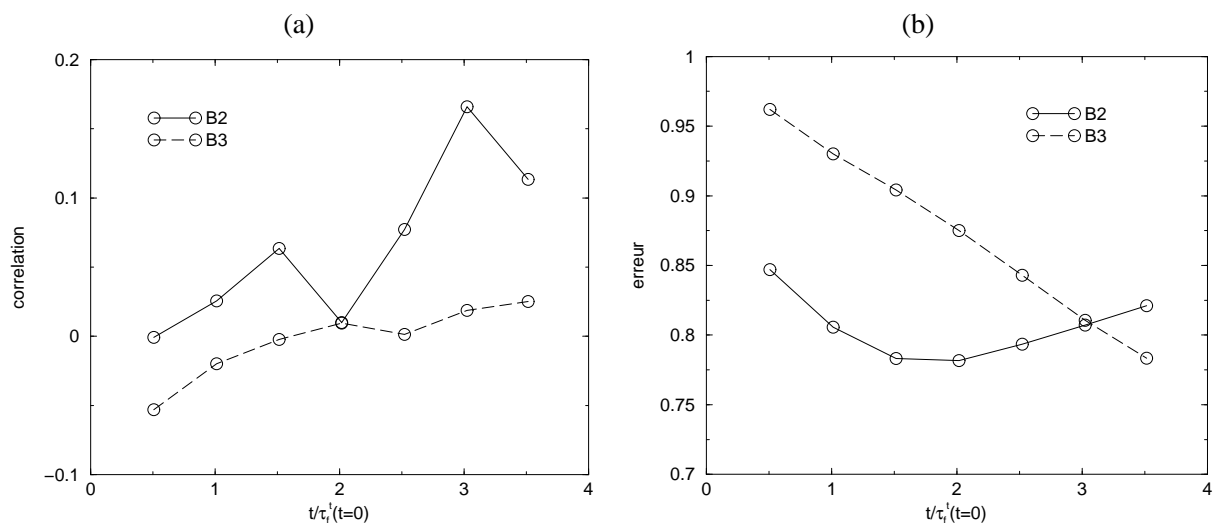


FIG. 4.33 – (a) Coefficients de corrélation au niveau direct du modèle MCA (éq. 4.37). (b) Erreur (éq. 4.38) du modèle MCA donné en injectant les valeurs mesurées des  $\delta R_{p,ij}^*$

inadéquat.

De plus, si l'on injecte les valeurs exactes des  $\delta R_{p,ij}^*$  dans l'équation (4.38), l'erreur moyenne est supérieure à 0,75 (Fig. 4.33b). Les  $\delta R_{p,ij}^*$  exactes ne sont pas solutions de l'équation (4.37). Le transport des  $\delta R_{p,ij}^*$  ne peut donc pas être négligé, le développement d'un modèle de viscosité généralisée semble n'avoir que peu d'intérêt. Il serait plus intéressant de résoudre les équations d'évolutions des 6 corrélations doubles  $\delta R_{p,ij}$ . Cette approche ne sera pas testée dans ce travail, car en THI tous les termes des équations de transport de  $\delta R_{p,ij}^*$  sont nuls en moyenne sur le domaine.

Les deux hypothèses qui permettent l'écriture du modèle simple de viscosité sont problématiques. Et pourtant, ce modèle semble fonctionner dans les tests a priori présentés ici mais aussi dans les tests a posteriori en THI (Kaufmann et al. (2006b)). Ce modèle a fait ses preuves et ne peut pas être disqualifié. Il sera réutilisé par la suite.

### Corrélations triples de vitesses non-corrélées

La modélisation de ce terme est obtenue par analogie avec les fermetures de type RANS des approches cinétiques (Simonin (1996)).

$$n_p \delta Q_{p,j} = -\frac{5}{3} n_p \tau_p \delta \theta_p \frac{\partial}{\partial x_j} \delta \theta_p \quad (4.39)$$

Les coefficients de corrélations entre la diffusion d'énergie décorrélée par le mouvement décorrélé et le modèle à l'équilibre (éq. 4.39) sont très faibles (Fig. 4.34a). Ces corrélations sont données au niveau scalaire ( $\frac{\partial n_p \delta Q_{p,j}}{\partial x_j}$  avec sommation sur l'indice  $j$ ). La constante multiplicative nécessaire pour ajuster les fluctuations du modèle avec les fluctuations de la diffusion mesurées varient entre approximativement 0,2 et 10 pour les différents cas au cours du temps (Fig. 4.34b). Globalement sur l'ensemble du domaine, le modèle diffuse

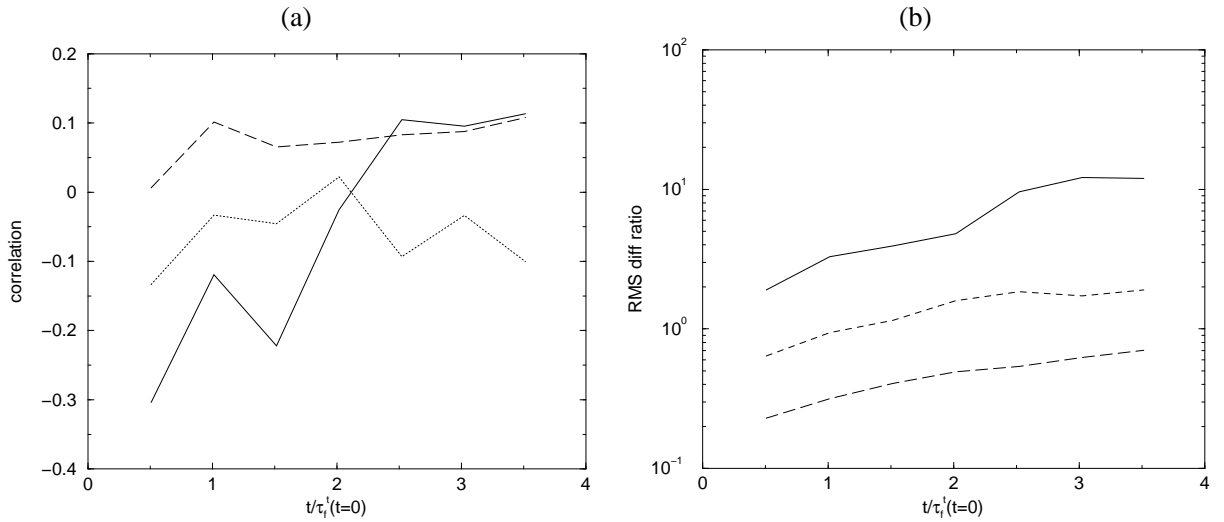


FIG. 4.34 – (a) Coefficients de corrélation au niveau scalaire entre le champ mesuré de  $\frac{\partial n_p \delta Q_{p,j}}{\partial x_j}$  et le modèle de diffusion RUV. (b) Coefficients multiplicatifs permettant d'ajuster la valeur RMS du modèle sur le terme mesuré. Cas B1 : ligne continue ; cas B2 : ligne pointillée ; cas B3 : ligne tiretée.

trop pour les particules lourdes et pas assez pour les particules légères (et pas aux bons endroits en plus).

Il a été vérifié que ces résultats sont convergés en fonction du nombre de particules à l'aide des cas A2 et A2'. Deux explications de la mauvaise performance constaté de ce modèle :

- Le calcul de la diffusion fait intervenir la dérivée spatiale du champ  $n_p \delta Q_{p,m}$ , la densité du nombre de particules étant très irrégulière, le calcul des dérivées spatiales par le schéma compact de Lele n'est peut être pas adapté.
- Le modèle proposé n'est tout simplement pas adapté. En effet ce modèle repose sur une hypothèse d'équilibre des corrélations triples du mouvement décorrélé et l'on a vu précédemment qu'une hypothèse du même type sur les corrélations doubles n'est pas justifiée.

La modélisation correcte de ce terme en DNS à deux fluides reste problématique.

## 4.6 Comparaison de résultats DNS euler-euler et DNS+DPS à faible $Re$

Dans le cadre de la thèse de Kaufmann (2004) qui a précédé la présente étude, les équations eulériennes mésoscopiques couplées avec les équations de Navier-Stokes pour le fluide ont été simulées directement dans le code AVBP du Cerfacs. Les résultats de simulations eulériennes sont alors comparés aux résultats de simulations lagrangiennes (Kaufmann et al. (2002)). L'auteur de ce mémoire n'est intervenu dans le travail de A. Kaufmann que pour améliorer le calcul des champs eulériens à partir des résultats lagrangiens, initié par le post-doc de J. Hélie. La comparaison des résultats eulériens et lagrangiens a fait l'objet d'une soumission d'un article au J. Comp. Phys (Kaufmann et al. (2006b)). Les principaux résultats de cette étude sont rappelés dans les sections suivantes. Les figures sont extraites de l'article soumis.

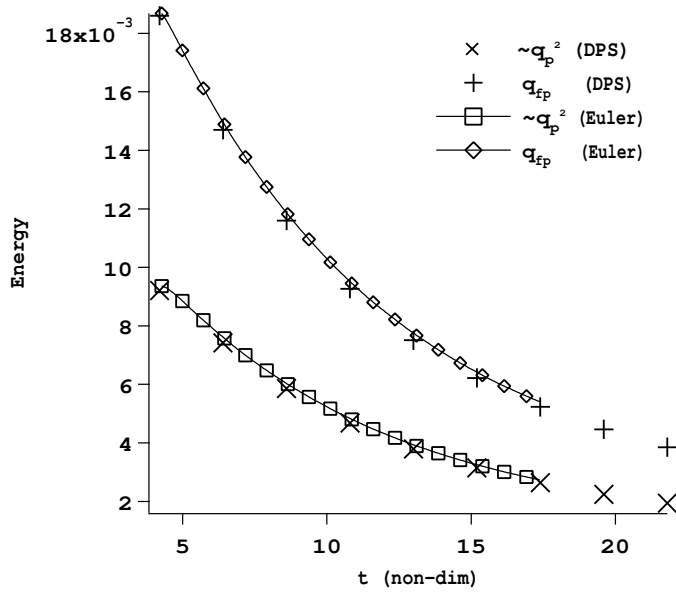


FIG. 4.35 – Comparaison de l'énergie corrélée des particules et de la covariance fluide-particule calculés par les simulations lagrangienne (DPS) ou eulérienne. Cas A1.

Les équations particulières résolues sont les transports de  $n_p$ ,  $\mathbf{u}_p$  et  $\delta\theta_p$  avec les modèles de viscosités RUV et de diffusion RUV. Les champs eulériens initiaux sont obtenus à partir du champ initial lagrangien.

#### 4.6.1 Cas à faible nombre de Stokes (cas A1)

Pour un nombre de Stokes aussi faible ( $St_K = 0,17$ ,  $St = 0,042$ ), les particules suivent presque parfaitement le fluide, la RUE est négligeable aussi bien dans la simulation eulérienne ( $\delta q_p^2 / \bar{q}_p^2 \approx 5.10^{-3}$ ) que dans les résultats lagrangiens. L'énergie des particules est uniquement sous forme du mouvement corrélé. L'énergie totale des particules ainsi que la covariance fluide-particule est correctement prédite par la simulation eulérienne (Fig. 4.35). De plus les spectres d'énergie cinétique corrélée (Fig. 4.36) sont identiques jusqu'au plus grand nombre d'onde mesurable avec les résultats lagrangiens (la remonté des spectres pour  $k > 13$  n'est pas physique, cf chapitre 3). La ségrégation des particules est légèrement sous-estimée par le calcul eulérien (Fig. 4.37).

Dans ce cas de simulation (très petit nombre de Stokes), l'énergie non-corrélée joue peu (ou pas) de rôle. La simulation est d'ailleurs possible si les termes prenant en compte le mouvement décorrélé sont supprimés de l'équation de quantité de mouvement particulaire (Kaufmann (2004)). Les équations résolues étant alors identiques à celles obtenues dans l'approche par filtrage volumique de Druzhinin et Elghobashi (1998), ce cas de simulation a principalement permis de valider la méthode numérique.

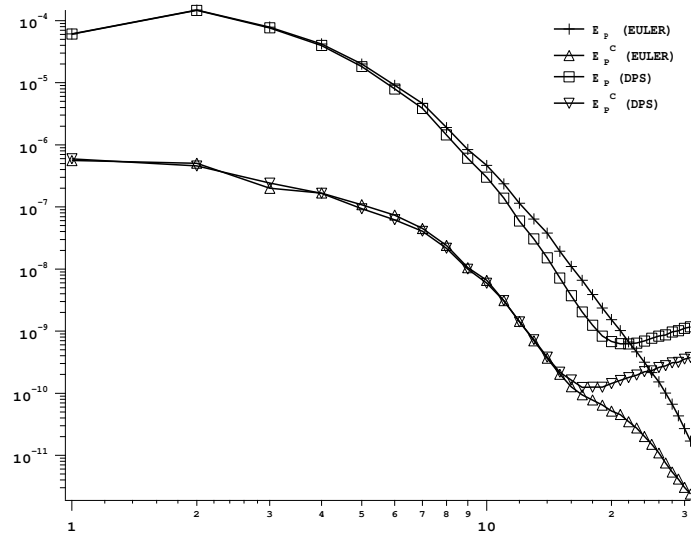


FIG. 4.36 – Comparaison des spectres d'énergie cinétique totale et compressible prédits par simulation eulérienne ou lagrangienne (DPS). Cas A1 à l'instant  $t/\tau_f^t = 1,6$ .

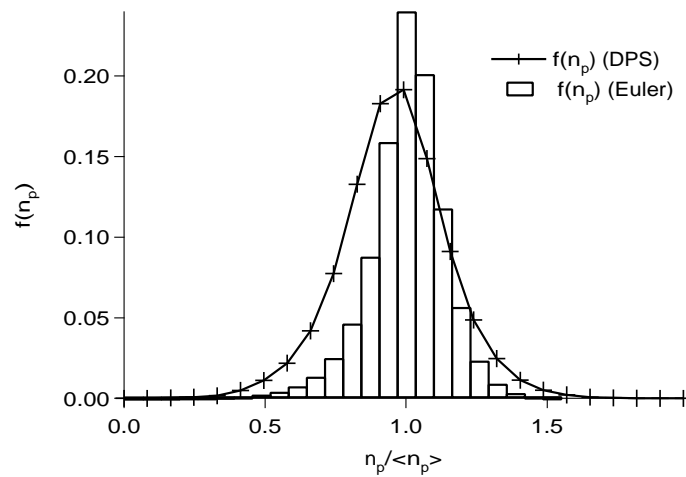


FIG. 4.37 – Comparaison des PDF de densité du nombre de particules prédits par simulation eulérienne ou lagrangienne (DPS). Cas A1 à l'instant  $t/\tau_f^t = 1,6$ .

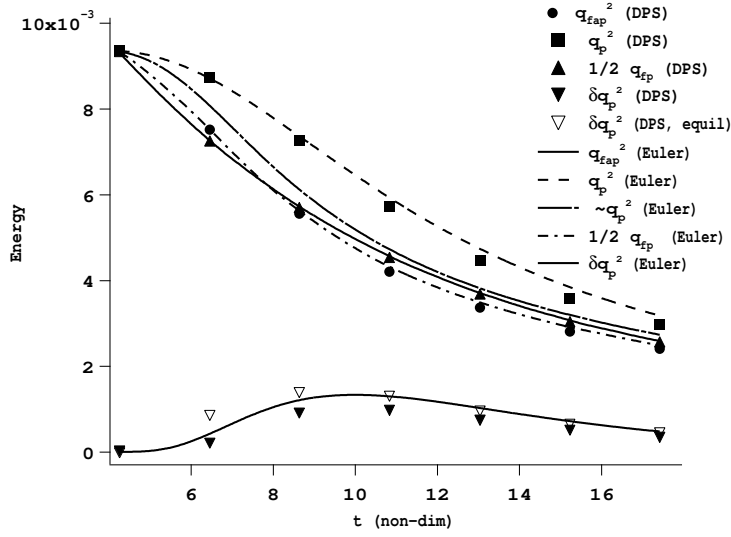


FIG. 4.38 – Evolution temporelle de corrélations fluide, particule et fluide-particule de la DPS (symboles) et de la simulation eulérienne (ligne). Dans l’approche eulérienne, l’énergie totale des particules  $q_p^2$  est calculée par la somme de l’énergie corrélée moyenne et de la RUE moyenne  $\delta q_p^2$ . Cas A2.

#### 4.6.2 Cas à grand nombre de Stokes (cas A2)

Pour des nombres de Stokes supérieurs à  $St_K = 0,17$  ( $St = 0,042$ ), les simulations eulériennes échouent à cause des gradients de concentration en particules qui rendent la simulation instable (Kaufmann (2004)). Le raffinement du maillage (jusqu’à  $192^3$ ) n’a pas permis de rendre les simulations stables. Pour résoudre ce problème, une viscosité en volume est ajoutée dans l’équation de quantité de mouvement corrélé. Ce type d’approche est classiquement utilisé pour des écoulements monophasiques avec ondes de chocs en simulation numérique RANS (von Neumann et Richtmeyer (1950)) ou aux grandes échelles (par exemple : un jet supersonique réactif, Dauplain et al. (2005)). Dans l’approche eulérienne mésoscopique, Kaufmann (2004) écrit ce terme :

$$C_{\xi} n_p (\Delta x)^2 \left| \frac{\partial u_{p,k}}{\partial x_k} \right| S_{p,ij} \quad (4.40)$$

Ce terme agit sur la divergence du champ de vitesse corrélée, ce qui, *in fine*, limite la ségrégation des particules et rend les simulations stables. Ce modèle numériquement empirique ne prétend pas reproduire la physique, mais permet de palier à un manque de résolution de la simulation.

Les résultats suivants sont obtenus pour un maillage  $128^3$ . L’évolution des grandeurs macroscopiques (énergies : corrélée, décorrélée, totale) est correctement reproduite par la simulation eulérienne (Fig. 4.38). Les particules étant lourdes, leurs vitesses deviennent, en partie, décorrélées. Les niveaux des différentes énergies sont en bon accord avec les résultats lagrangiens. Comme prévu, la ségrégation des particules est sous-estimée par la simulation eulérienne (Fig. 4.39). Ces simulations eulériennes permettent de valider l’approche eulérienne mésoscopique pour les écoulements à phase dispersée.

Ces simulations ont été effectuées en utilisant un schéma numérique Lax-Wendrof. Ce schéma est cer-

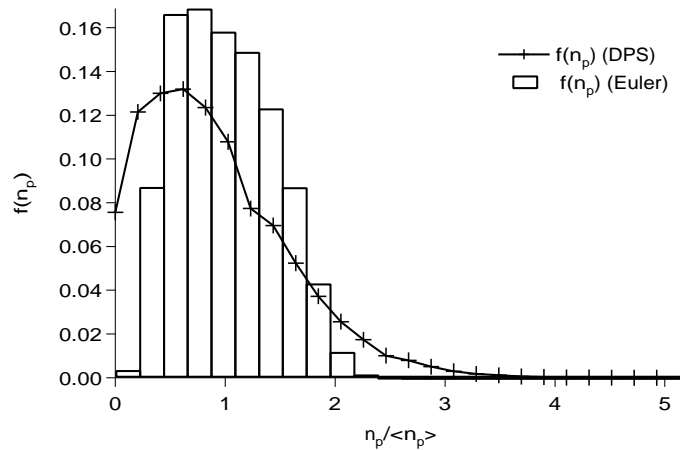


FIG. 4.39 – Comparaison des PDF de densité du nombre de particules prédites par simulation eulérienne ou lagrangienne (DPS). Cas A2 à l’instant  $t/\tau_f^t = 1,6$ .

tainement responsable de l’instabilité du calcul. En effet, Riber (2006) a récemment implanté un schéma numérique différent (TTGC) et réussi à simuler ce cas sans l’ajout d’une viscosité en volume. Les résultats préliminaires obtenus sont encore en cours de validation.

## 4.7 Conclusion du chapitre

Les champs eulériens mésoscopiques obtenus à partir des résultats lagrangiens ont été analysés. Des résultats publiés sur les analyses eulériennes d’une phase dispersée dans une turbulence homogène isotrope ont été retrouvés : la RUE augmente avec l’inertie des particules, l’approche à l’équilibre n’est plus valable quand  $St_K \geq 1$  (Ferry et Balachandar (2001)).

L’analyse des spectres de puissance des vitesses corrélées a permis de distinguer deux zones dans ces spectres (Fig. 4.40). Les (très) grandes échelles sont dominées par les interactions avec la turbulence fluide alors qu’à plus petite échelle les effets de compressibilité et de dissipation par le mouvement décorrélé des particules conduisent à une décroissance du spectre en  $k^{-2}$ . La limite entre ces deux régimes dépend de l’inertie des particules : des particules lourdes sont moins influencées par la turbulence. Le niveau du spectre aux plus grandes échelles diminue quand l’inertie augmente.

Par ailleurs, les prédictions des différents modèles proposés au Chap. 2 ont été évaluées a priori. Le modèle eulérien mésoscopique à 5 équations de transport sur la densité du nombre de particules, la vitesse corrélée et l’énergie décorrélée avec un modèle de viscosité RUV semble convenir. Cela est en accord avec les tests a posteriori de Kaufmann et al. (2006b) et leur validation par comparaison avec des résultats lagrangiens.

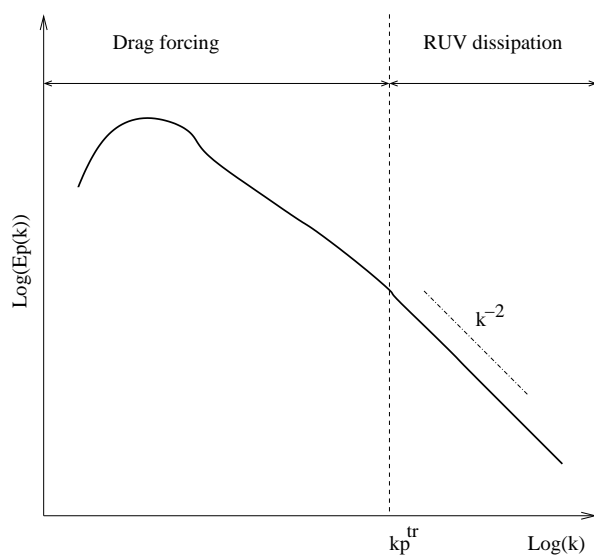


FIG. 4.40 – Forme schématique des spectres de vitesse particulaire corrélée.  $E_p(k)$ . Pour  $k < k_p^{tr}$ , la forme du spectre est lié à l'interaction des particules avec le fluide. Aux plus petites échelles,  $E_p(k) \propto k^{-2}$  probablement à cause de la nature dissipative des zones de concentration préférentielle.





## Chapitre 5

# Approche aux grandes échelles de la phase particulaire

### 5.1 Equations eulériennes mésoscopiques aux grandes échelles

La simulation aux grandes échelles (LES) du mouvement particulaire est obtenue par analogie avec l'approche aux grandes échelles pour la résolution de la turbulence du fluide (Sagaut (1998) par exemple). Elle est basée sur la décomposition des champs eulériens en une composante à grande échelle (résolue) et une partie de sous-maille dont l'effet sur les grandes échelles est modélisé. Cette décomposition est obtenue par une procédure de filtrage.

#### 5.1.1 Séparation des échelles par filtrage

Toute variable  $\phi$  d'un écoulement peut être écrite sous la forme  $\phi = \bar{\phi} + \phi'$ , où  $\bar{\phi}$  représente la contribution à grande échelle et  $\phi'$  celle à petite échelle. Mathématiquement,  $\bar{\phi}$  est obtenue par convolution de  $\phi$  avec un filtre spatial  $G_{\Delta_f}$  sur l'ensemble du domaine de calcul :

$$\bar{\phi}(\mathbf{x}) = \int G_{\Delta_f}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\phi(\mathbf{x}')d\mathbf{x}' \quad (5.1)$$

Afin que l'opération de filtrage conserve la moyenne, l'intégrale de  $G_{\Delta_f}$  doit être égale à l'unité. La longueur caractéristique du filtre est notée  $\Delta_f$ . Dans un calcul LES, le maillage ainsi que les schémas numériques employés imposeront  $\Delta_f$  et la forme du filtre  $G_{\Delta_f}$  qui sont le plus souvent implicites.  $\Delta_f$  est classiquement évaluée comme étant la taille de la maille de calcul. Formellement, les équations aux grandes échelles des grandeurs filtrées sont obtenues par filtrage des équations (2.33), (2.34) et (2.45). Les termes non linéaires filtrés sont réécrits pour faire apparaître des termes de sous-mailles dans les équations d'évolution des grandeurs filtrées.

$$\overline{\phi_f \psi_f} = \bar{\phi}_f \bar{\psi}_f + \underbrace{(\overline{\phi_f \psi_f} - \bar{\phi}_f \bar{\psi}_f)}_{\text{terme de sous-maille}} \quad (5.2)$$

La phase particulière étant compressible et dans le but de simplifier l'écriture des équations filtrées, les grandeurs sont écrites en termes de grandeurs filtrées selon l'opérateur de Favre (notées avec un chapeau) :

$$\bar{n}_p(\mathbf{x}) = \int G_{\Delta_F}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') n_p(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \quad (5.3)$$

$$\hat{\phi}_p(\mathbf{x}) = \frac{1}{\bar{n}_p(\mathbf{x})} \overline{n_p \phi_p(\mathbf{x})} \quad (5.4)$$

### 5.1.2 Equations aux grandes échelles

En appliquant le filtre  $G_{\Delta_F}$  aux équations d'évolution de  $n_p$ ,  $\mathbf{u}_p$  et  $\delta\theta_p$  (éq. 2.33, 2.34 et 2.45), les équations mésoscopiques aux grandes échelles sont :

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{n}_p + \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{n}_p \hat{u}_{p,j} = 0 \quad (5.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{n}_p \hat{u}_{p,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{n}_p \hat{u}_{p,j} \hat{u}_{p,i} = \frac{\bar{n}_p}{\tau_p} [\hat{u}_{f@p,i} - \hat{u}_{p,i}] - \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{n}_p \left( \frac{2}{3} \widehat{\delta\theta}_p \delta_{ij} + \widehat{\delta R}_{p,ij}^* + T_{p,ij} \right) \quad (5.6)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \bar{n}_p \widehat{\delta\theta}_p + \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{n}_p \hat{u}_{p,j} \widehat{\delta\theta}_p &= -2 \frac{\bar{n}_p}{\tau_p} \widehat{\delta\theta}_p - \bar{n}_p \left[ \frac{2}{3} \widehat{\delta\theta}_p \delta_{ij} + \widehat{\delta R}_{p,ij}^* \right] \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j} + \bar{n}_p \Pi_p \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{n}_p (\widehat{\delta Q}_{p,j} + Q_{p,j}) \end{aligned} \quad (5.7)$$

où le tenseur de sous-maille  $T_{p,ij}$  prend en compte l'effet des petites échelles sur la quantité de mouvement corrélée filtrée,  $\Pi_p$  est la production de sous-maille de  $\widehat{\delta\theta}_p$  et  $Q_m$  sa diffusion de sous-maille :

$$T_{p,ij} = \widehat{u_{p,i} u_{p,j}} - \hat{u}_{p,i} \hat{u}_{p,j} \quad (5.8)$$

$$\Pi_p = -[\widehat{\delta R_{p,ij} \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j}} - \widehat{\delta R}_{p,ij} \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j}] \quad (5.9)$$

$$Q_{p,j} = \widehat{u_{p,j} \delta\theta_p} - \hat{u}_{p,j} \widehat{\delta\theta}_p \quad (5.10)$$

Dans les approches LES, seules les grandes échelles de l'écoulement sont calculées, l'effet des petites échelles doit être modélisé.

La principale originalité de l'approche est la présence de deux contributions distinctes dans l'équation de quantité de mouvement filtrée (éq. 5.6). Les deux sont par « nature » très différentes. Les termes dus au mouvement décorrélé filtré sont analogues aux contributions visqueuses et de la pression filtrée dans les équations aux grandes échelles du fluide. On s'attend à une relative indépendance de ces contributions avec la longueur de filtrage  $\Delta_F$ . A l'opposé, la contribution du mouvement de sous-maille est analogue à celle des équations LES du fluide et doit dépendre fortement de  $\Delta_F$ . Pandya et Mashayek (2002) obtiennent de telles équations par filtrage volumique de l'équation cinétique pour une réalisation de la phase particulière. Dans leur approche, le terme de sous-maille doit contenir implicitement les contributions des RUV et des échelles de sous-maille.

## 5.2 Evaluation a priori en THI

### 5.2.1 Méthodologie

Un filtre chapeau, sphérique, dans l'espace physique est utilisé dans ce travail :

$$G_{\Delta_F}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \begin{cases} \frac{1}{\frac{4}{3}\pi(\frac{\Delta_F}{2})^3}, & \text{si } |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \leq \frac{1}{2}\Delta_F; \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (5.11)$$

Ce filtre est choisi pour sa simplicité d'implantation<sup>1</sup>. De plus, il conserve l'invariance galiléenne des équations filtrées. La taille caractéristique du filtre  $\Delta_F$  doit être plus grande que celle de la projection  $\Delta_P$ . Les champs eulériens mésoscopiques particuliers décrits au Chap. 4 sont filtrés pour quatre tailles de filtres différentes :  $\Delta_F = 2\Delta_P, 4\Delta_P, 6\Delta_P$  et  $8\Delta_P$ . Les grandeurs filtrées sont mesurées sur le maillage utilisé pour la projection. En effet, d'après Clark et al. (1979), l'utilisation d'un maillage grossier additionnel n'est pas obligatoire.

### 5.2.2 Concentration préférentielle

Le paramètre indicateur de la concentration préférentielle  $\langle \bar{n}_p^2 \rangle / \langle \bar{n}_p \rangle^2$  diminue drastiquement sous l'effet du filtrage (Fig 5.1). Schématiquement, si la longueur caractéristique du filtrage est plus grande que la distance inter-amas (qui dépend sûrement de l'inertie des particules), alors deux amas distincts n'en forment plus qu'un après filtrage. Ainsi, ses valeurs maximales passent de 2,72, 2,38 et 1,59 dans les cas B1, B2 et B3 non filtrés à 1,15, 1,22 et 1,14 pour un filtrage  $\Delta_F = 8\Delta_P$ . Pour cette plus grande taille de filtrage, le cas B1 présente moins de ségrégation que le cas B2. Dans le cas B1, le processus de filtrage semble plus destructif de la concentration préférentielle que dans le cas B2. Une explication possible de cet effet est la différence de structure des amas, le cas B1 présentant des amas légèrement moins larges mais surtout plus nombreux que dans le cas B2. L'évolution temporelle de  $\langle \bar{n}_p^2 \rangle / \langle \bar{n}_p \rangle^2$  est conservée par le processus de filtrage dans les cas B1 et B2, contrairement au cas B3, où l'augmentation initiale a disparu pour un filtrage  $\Delta_F / \Delta_P > 4$ . Au vu de ses résultats, l'approche LES à deux fluides sous-estimera les effets de concentration préférentielle.

### 5.2.3 Energie décorrélée / énergie de sous-maille

Les énergies moyennes, décorrélée filtrée et de sous-maille, sont comparées pour les quatre longueurs de filtrage à l'instant  $t/\tau_{f0}^t = 1$  (Fig. 5.2). Par construction, la moyenne de la RUE filtrée est indépendante de la taille du filtre. A l'opposé, l'énergie de sous-maille ( $q_{p,SGS} = \frac{1}{2}T_{p,jj}$ ) augmente avec  $\Delta_F$ . L'énergie de sous-maille est du même ordre de grandeur que la RUE dans le cas B2, alors qu'elle est plus grande (respectivement petite) que la RUE dans le cas B1 (resp. B3). D'autre part, la RUE moyenne augmente avec

---

<sup>1</sup>Un filtre « cut-off » dans l'espace spectral aurait pu être utilisé vu la périodicité du domaine de calcul. En raison du parallélisme du code par décomposition de domaine, cette alternative complexe n'a pas été tentée.

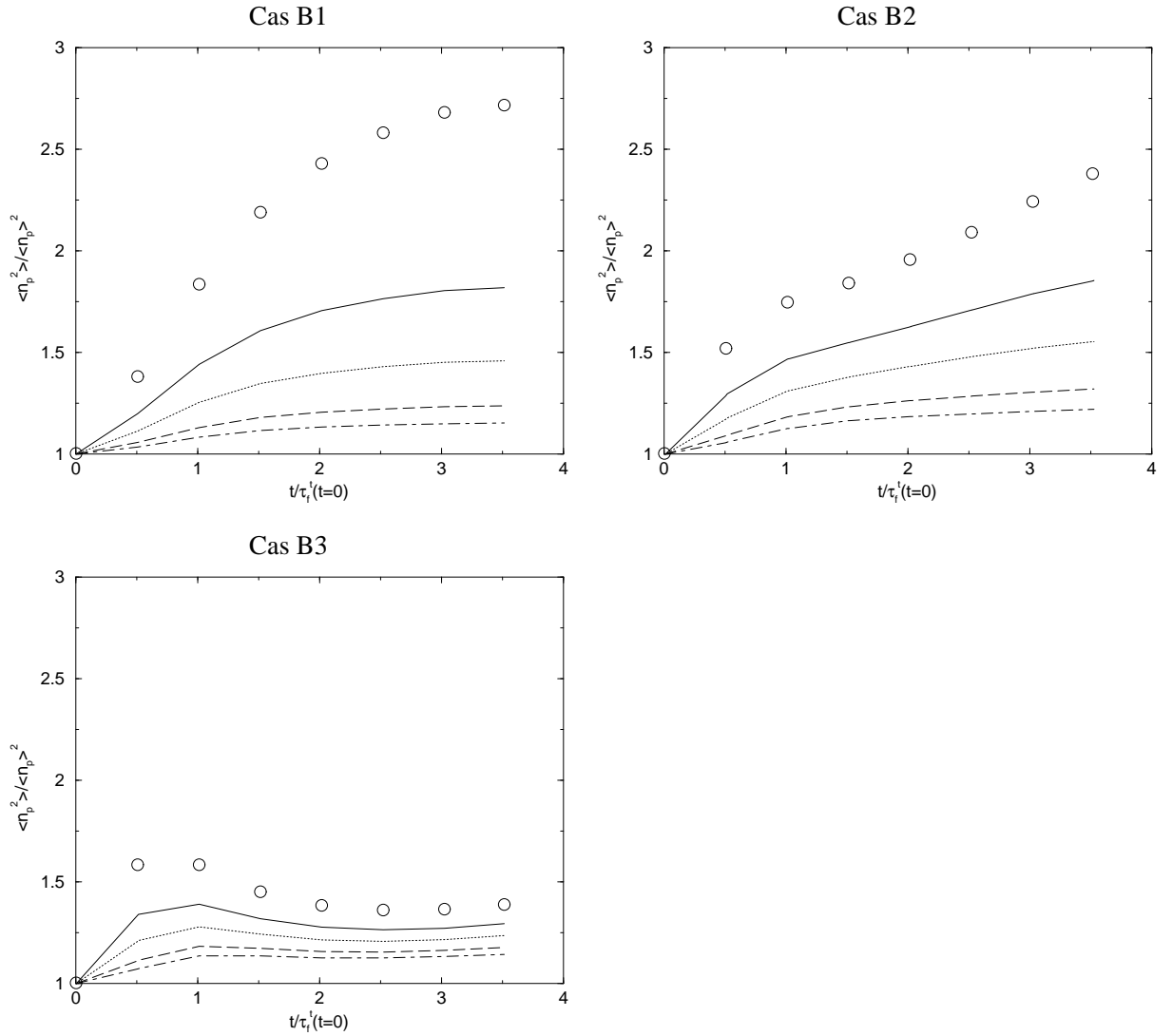


FIG. 5.1 – Evolution du paramètre de concentration préférentielle des particules  $\langle \bar{n}_p^2 \rangle / \langle \bar{n}_p \rangle^2$ .  $\Delta_F = 2\Delta_P$  : ligne continue ;  $\Delta_F = 4\Delta_P$  : ligne pointillée ;  $\Delta_F = 6\Delta_P$  : ligne tiretée ;  $\Delta_F = 8\Delta_P$  : ligne mixte. Les résultats non filtrés sont rappelés (cercles).

l'inertie des particules, alors que l'énergie de sous-maille suit une évolution inverse. La diminution de  $q_{p,SGS}$  avec l'augmentation de l'inertie particulaire est liée à la forme du spectre d'énergie cinétique fluide ainsi qu'à l'instationnarité de la configuration étudiée.

Dans le cas B2, à l'instant  $t/\tau_{f0}^t = 1$ , avec  $\Delta_F = 4\Delta_P$ , les énergies, décorrélée et corrélée de sous-maille, sont pratiquement égales. Les isocontours d'énergies décorrélée et de sous-maille locales sont présentés (Fig. 5.3). Les lignes d'iso-valeurs de densité du nombre de particules ( $\bar{n}_p / \langle n_p \rangle = 1$  et 1.5) sont superposées sur les isocontours pour localiser les différentes énergies comparativement aux amas de particules. La RUE est présente dans les zones de fortes concentrations particulaires, alors que l'énergie de sous-maille semble

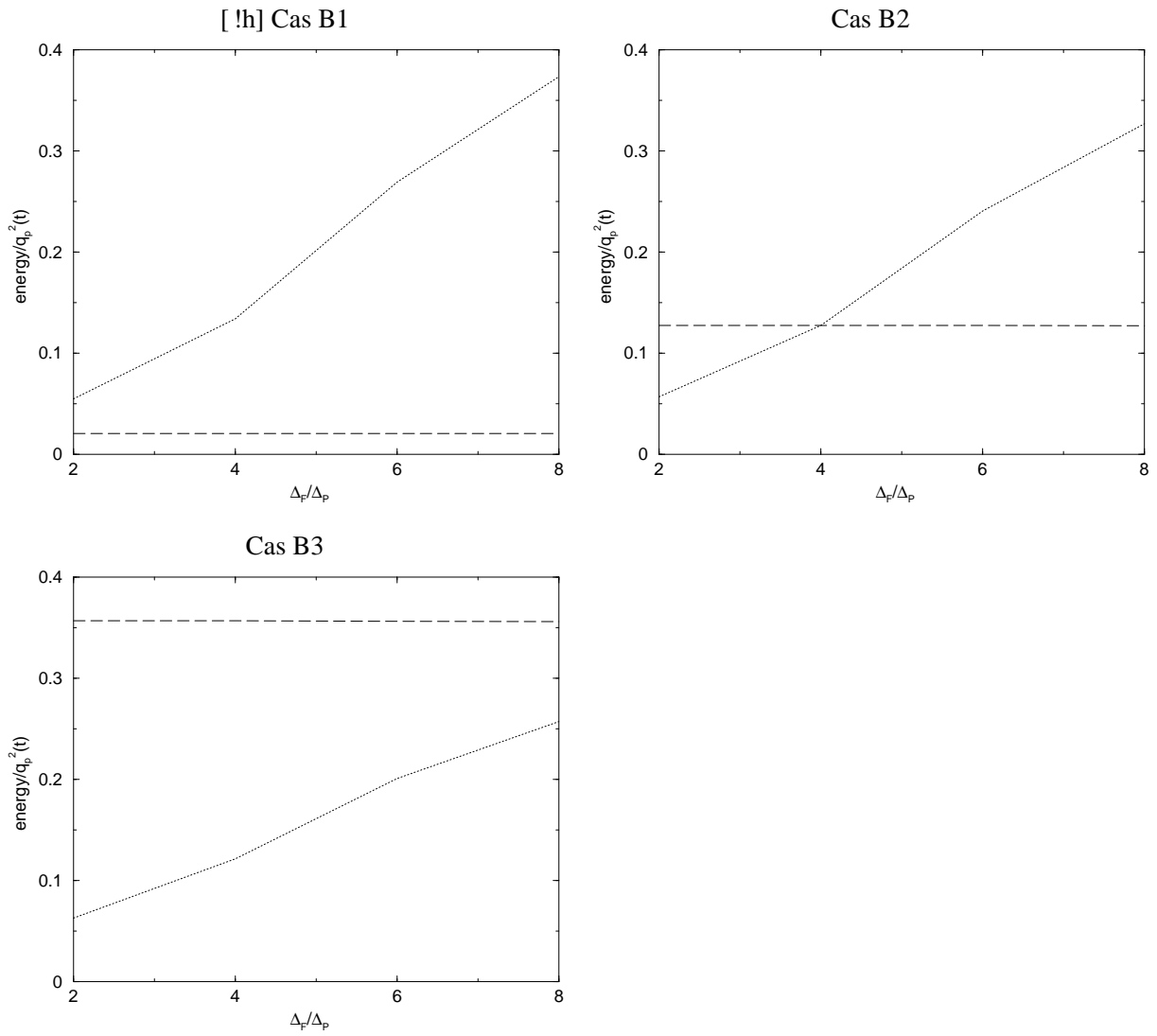


FIG. 5.2 – Evolution des moyennes des énergies décorrélée filtrée (ligne tiretée) et corrélée de sous-maille (ligne pointillée) avec la taille du filtre spatial à l’instant  $t/\tau_{f0}^t = 1$ .

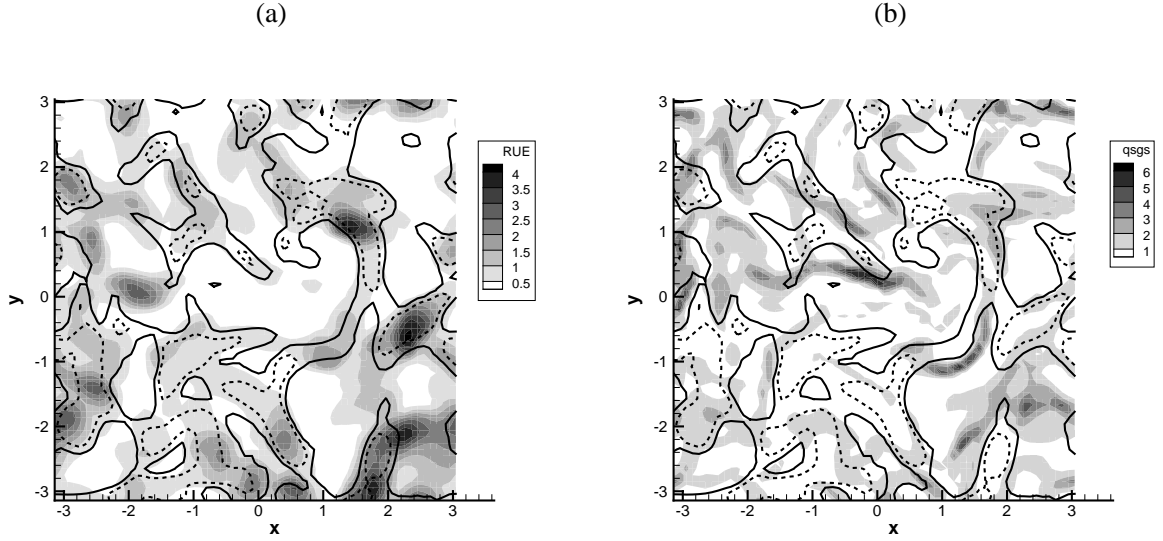


FIG. 5.3 – Champs instantanés de l'énergie décorrélée filtrée (a) et de l'énergie de sous-maille (b). Les grandeurs sont normalisées par leur moyenne. Les lignes sont des isocontours de la densité du nombre de particules ( $\bar{n}_p/\langle n_p \rangle = 1$  : ligne continue et  $\bar{n}_p/\langle n_p \rangle = 1.5$  : ligne tiretée). Cas B2 à l'instant  $t/\tau_{f0}^t = 1$ ,  $\Delta_F = 4\Delta_P$ .

plutôt localisée à l'interface des amas. Les énergies, décorrélée et corrélée de sous-maille, sont différentes par nature mais aussi par comportement. La modélisation des effets de sous-maille devra donc suivre une approche différente de la modélisation des effets du mouvement décorrélé.

## 5.2.4 Energie corrélée filtrée

### Bilan moyen

Le bilan de l'énergie corrélée à grande échelle moyenne ( $\hat{q}_p^2 = \frac{1}{2}\langle \hat{u}_{p,j}\hat{u}_{p,j} \rangle_{\bar{p}}$ ) est obtenu en multipliant l'équation (5.6) par  $\hat{u}_{p,i}$  et en la moyennant sur l'ensemble du domaine de calcul (moyenne pondérée par  $\bar{n}_p$  et notée  $\langle \cdot \rangle_{\bar{p}}$ ). En utilisant les conditions aux limites de périodicité du domaine de calcul, cette équation bilan s'écrit

$$\frac{d}{dt}\hat{q}_p^2 = -\frac{1}{\tau_p}(2\hat{q}_p^2 - \hat{q}_{fp}) + \langle \widehat{\delta R}_{p,ij} \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j} \rangle_{\bar{p}} + \langle T_{p,ij} \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j} \rangle_{\bar{p}} \quad (5.12)$$

où  $\hat{q}_{fp}$  est la covariance fluide-particule à grande échelle :  $\hat{q}_{fp} = \langle \hat{u}_{f,j}\hat{u}_{p,j} \rangle_{\bar{p}}$ . Le premier terme du membre de droite est l'effet de la force de traînée, les deuxième et troisième sont les « dissipations » des RUV filtrés et des contraintes de sous-maille. Les termes de pression-dilatation à grande échelle sont au moins d'un ordre de grandeur inférieur à la dissipation réelle et ont, pour l'instant, été inclus dans les définitions des termes de dissipation par souci de simplicité. L'évolution temporelle des différents termes du bilan de  $\hat{q}_p^2$  mesurés pour  $\Delta_F = 4\Delta_P$  est présentée pour le cas B3 (Fig. 5.4). Le bilan de l'évolution de  $\hat{q}_p^2$  est fermé avec une erreur moyenne de 5,7% du plus grand terme. L'énergie corrélée à grande échelle est produite par

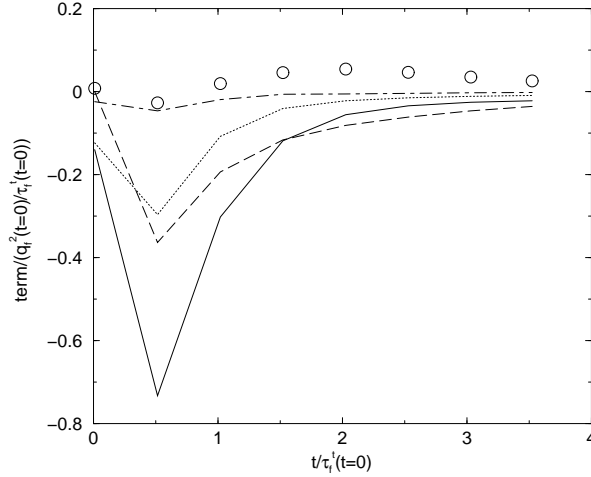


FIG. 5.4 – Evolution temporelle des termes du bilan de l'énergie corrélée aux grandes échelles.  $d\hat{q}_p^2/dt$  : ligne continue ; traînée : cercles ; dissipation RUV : ligne tiretée et dissipation de sous-maille : ligne pointillée. L'erreur (= somme des termes de droite – terme de gauche) est représentée par la ligne mixte. Cas B3,  $\Delta_F = 4\Delta_P$ .

Cas	$\Delta_F/\Delta_P = 0$	$\Delta_F = 2\Delta_P$	$\Delta_F = 4\Delta_P$	$\Delta_F = 6\Delta_P$	$\Delta_F = 8\Delta_P$
B1	22%	23%	21%	17%	12%
B2	18%	14%	12%	9,2%	7,8%
B3	13%	8,1%	5,7%	4,0%	3,3%

TAB. 5.1 – Erreur relative (au terme dominant) moyenne commise sur la fermeture du bilan de  $\hat{q}_p^2$  (éq. 5.12).

la force de traînée et dissipée par les effets combinés des contraintes des RUV aux grandes échelles et des échelles de sous-maille de la vitesse corrélée. La dissipation est principalement assurée par les termes du mouvement décorréolé dans ce cas avec des particules très inertielles.

Dans les trois cas B1, B2, B3, l'erreur commise sur la fermeture du bilan diminue quand  $\Delta_P$  augmente (Tab. 5.1). Cette erreur est importante dans le cas B1 (entre 12% et 23%), modérée dans le cas B2 ( $\approx 10\%$ ) et raisonnable dans le cas B3 quelque soit la taille du filtre considérée ( $<10\%$ ).

### Traînée

On a vu, lors de l'analyse des champs mésoscopiques non filtrés, que l'effet moyen de la traînée sur l'énergie corrélée est  $-\frac{1}{\tau_p}(2\hat{q}_p^2 - q_{fp})$  et change de signe durant la simulation dans les cas B2 et B3 (Fig. 4.2-4.3) : dans un premier temps, il est fortement négatif, par la suite il devient quasiment nul (cas B2) ou positif (cas B3). Pour  $\Delta_F/\Delta_P \leq 4$ , l'évolution temporelle de  $-\frac{1}{\tau_p}(2\hat{q}_p^2 - \hat{q}_{fp})$  est conservée par la procédure de filtrage, alors que pour des largeurs de filtre plus grande, ce terme reste positif durant toute la simulation.

La procédure de filtrage permet de différencier les effets de traînée sur les grandes et les petites échelles

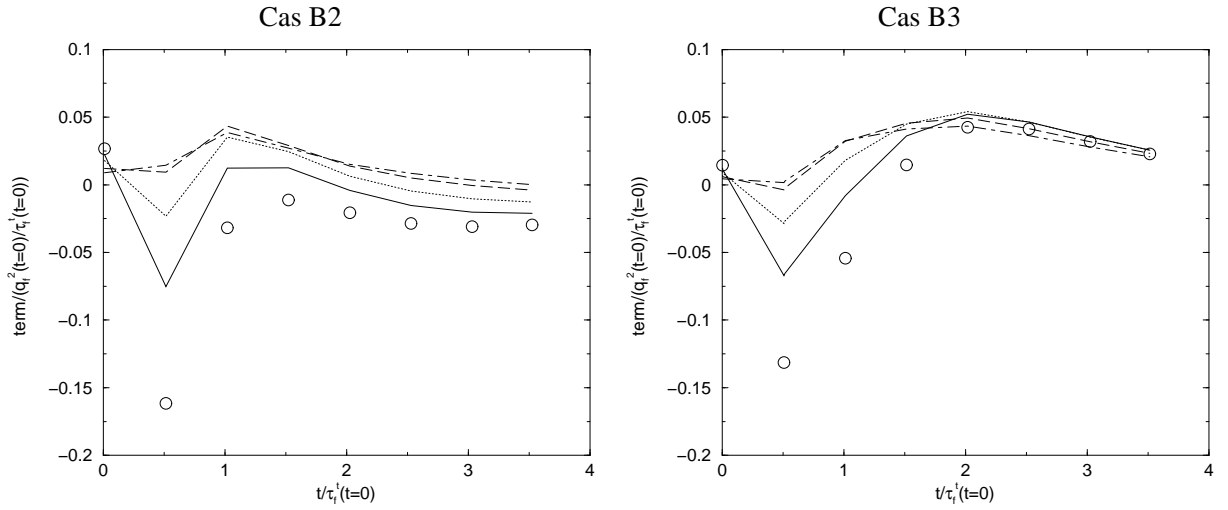


FIG. 5.5 – Evolution temporelle du terme moyen de traînée  $-\frac{1}{\tau_p}(2\hat{q}_p^2 - \hat{q}_{fp})$  aux grandes échelles pour différentes tailles de filtre.  $\Delta_F = 2\Delta_P$  : ligne continue ;  $\Delta_F = 4\Delta_P$  : ligne pointillée ;  $\Delta_F = 6\Delta_P$  : ligne tiretée ;  $\Delta_F = 8\Delta_P$  : ligne mixte. Les résultats non filtrés sont rappelés (cercles).

de l'énergie particulaire corrélée. En première approximation, la force de traînée produit de l'énergie corrélée aux grandes échelles et en détruit aux petites. Ces résultats sont en accord avec l'analyse des spectres du terme de traînée effectuée au paragraphe 4.4.1.

### Dissipations RUV/sous-maille

Les dissipations RUV ( $\widehat{\delta R}_{p,ij} \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j}$ ) et de sous-maille ( $T_{p,ij} \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j}$ ) moyennes des cas B1, B2 et B3 sont comparées à l'instant  $t/\tau_{f0}^t = 1$  sur la figure 5.6. Le terme de sous-maille (resp. RUV) est le plus grand dans le cas B1 des particules légères (resp. cas B3 des particules lourdes), alors que, dans le cas B2, les valeurs des deux termes sont proches (moins de 50% d'écart). Dans les 3 cas, pour toutes les largeurs de filtrage testées, ces deux dissipations sont en moyenne du même ordre de grandeur. La dissipation RUV moyenne diminue avec la taille du filtre, ce qui indique que cette dissipation se produit à petite échelle. La dissipation de sous-maille suit logiquement une évolution inverse, à l'exception de la plus grande largeur de filtre considérée, où la dissipation de sous-maille diminue, peut-être à cause de la trop grande taille du filtre (plus grande ou du même ordre que l'échelle intégrale).



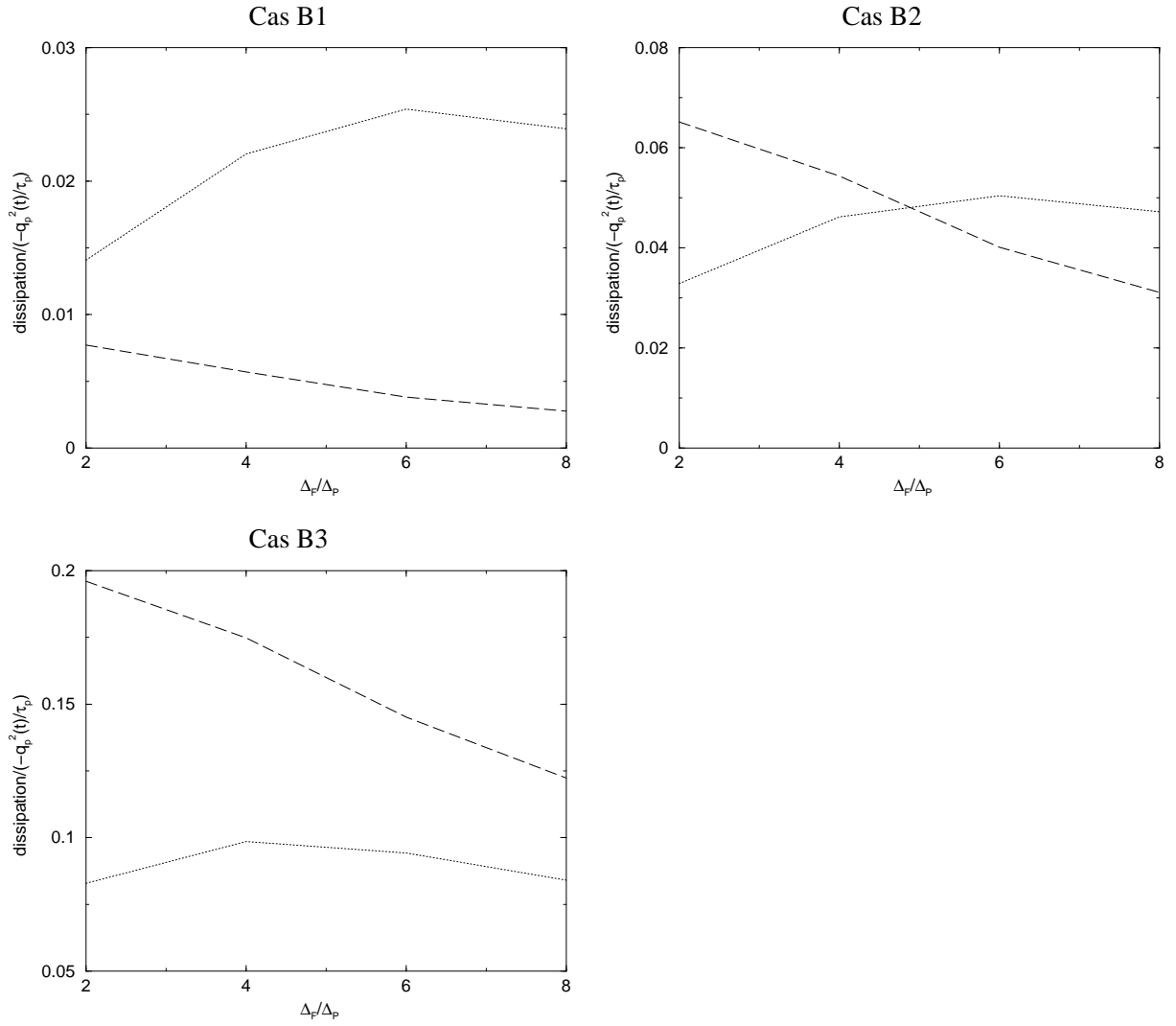


FIG. 5.6 – Evolution des dissipations moyennes de RUV (ligne tiretée) et de sous-maille (ligne pointillée) avec la taille du filtre spatial à l’instant  $t/\tau_{f0}^t = 1$ .

### 5.2.5 Equation de l’énergie décorrélée filtrée

#### Bilan moyen

Compte tenu des conditions aux limites périodiques, l’équation d’évolution de l’énergie décorrélée filtrée moyenne  $\widehat{\delta q_p^2} = \langle \delta \theta_p \rangle_{\bar{p}}$  est :

$$\frac{d}{dt} \widehat{\delta q_p^2} = -\frac{2}{\tau_p} \widehat{\delta q_p^2} - \langle \widehat{\delta R}_{p,ij} \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j} \rangle_{\bar{p}} + \langle \Pi_p \rangle_{\bar{p}} \quad (5.13)$$

Le premier terme du membre de droite est la destruction de l’énergie décorrélée filtrée par la traînée. Le deuxième terme représente la production par les gradients de vitesse mésoscopique à grande échelle et  $\Pi_p$

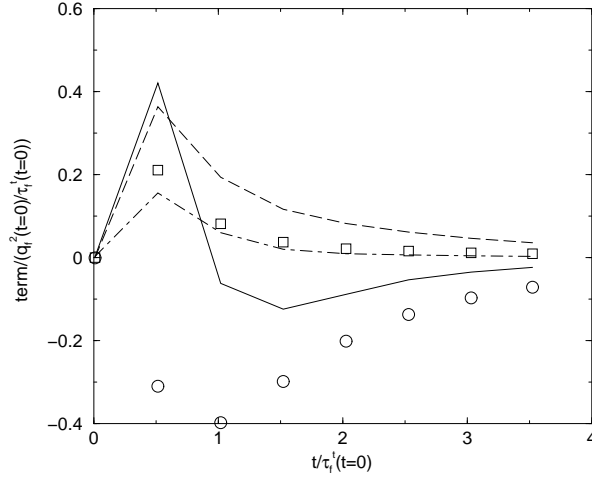


FIG. 5.7 – Evolution temporelle des termes du bilan de l'énergie décorrélée filtrée (éq. 5.13).  $d\widehat{\delta q_p^2}/dt$  : ligne continue ; traînée : cercles ; – dissipation RUV : ligne tiretée et production de sous-maille  $\langle \Pi_p \rangle_{\bar{p}}$  : carrés. L'erreur (= somme des termes de droite – terme de gauche) est représentée par la ligne mixte. Cas B3,  $\Delta_F = 4\Delta_P$ .

Cas	$\Delta_F/\Delta_P = 0$	$\Delta_F = 2\Delta_P$	$\Delta_F = 4\Delta_P$	$\Delta_F = 6\Delta_P$	$\Delta_F = 8\Delta_P$
B1	42%	42%	42%	42%	42%
B2	16%	16%	17%	16%	16%
B3	10%	11%	11%	11%	11%

TAB. 5.2 – Erreur relative (au terme dominant) moyenne commise sur la fermeture du bilan de  $\widehat{\delta q_p^2}$  (éq. 5.13). La première colonne correspond aux cas non filtrés.

est la production d'énergie décorrélée par le mouvement décorrélé de sous-maille :

$$\Pi_p = -[\widehat{\delta R_{p,im}} \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j} - \widehat{\delta R_{p,im}} \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_m}] \quad (5.14)$$

L'évolution temporelle des différents termes de l'éq. (5.13) est présentée sur la Fig. 5.7 dans le cas B3,  $\Delta_F = 4\Delta_P$ . Les termes de production sont maximaux à l'instant  $t/\tau_{f0}^t = 1$  puis décroissent. Le terme  $\langle \Pi_p \rangle_{\bar{p}}$  mesuré est du même ordre de grandeur que la production par les gradients de vitesse corrélée filtrée. L'erreur sur la fermeture du bilan de la RUE filtrée moyenne est du même ordre de grandeur que  $\langle \Pi_p \rangle_{\bar{p}}$  mesuré. Cette erreur relative ne dépend pas de la largeur du filtre dans les trois cas B1, B2 et B3 et est la même que dans les cas non filtrés (Tab. 5.2). On a vu précédemment dans le Chap. 4 que la résolution spatiale du maillage de projection n'était sûrement pas suffisante pour mesurer la dissipation RUV totale  $\epsilon_p = \delta R_{p,im}^* \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j}$ , c'est pourquoi la mesure de  $\Pi_p$  est elle aussi sous-estimée. Toutefois la valeur moyenne de la production de sous-maille  $\langle \Pi_p \rangle_{\bar{p}}$  peut être indirectement évaluée. En effet, le bilan d'énergie corrélée de sous-maille  $q_{p,SGS} =$

Cas	$\Delta_F = 2\Delta_P$	$\Delta_F = 4\Delta_P$	$\Delta_F = 6\Delta_P$	$\Delta_F = 8\Delta_P$
B1	4,8%	2,7%	11%	14%
B2	5,6%	1,6%	3,1%	5,1%
B3	6,1%	3,4%	1,8%	1,3%

TAB. 5.3 – Erreur relative (au terme dominant) moyenne commise sur la fermeture du bilan de  $\widehat{\delta q_p^2} + \langle q_{p,SGS} \rangle_{\bar{p}}$ , éq. (5.16).

$\frac{1}{2}T_{p,jj}$  moyenne s'écrit :

$$\frac{d}{dt} \langle q_{p,SGS} \rangle_{\bar{p}} = \underbrace{-\frac{1}{\tau_p} \langle q_{p,SGS} - q_{fp,SGS} \rangle_{\bar{p}}}_I - \underbrace{\langle T_{p,ij} \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j} \rangle_{\bar{p}}}_{II} - \underbrace{\langle \Pi_p \rangle_{\bar{p}}}_{III} \quad (5.15)$$

Les différents termes du membre de droite de l'équation représentent :

- Terme *I* : traînée de sous-maille, où la covariance fluide-particule de sous-maille est  $q_{fp,SGS} = \widehat{u_{f,m} u_{p,m}} - \hat{u}_{f,m} \hat{u}_{p,m}$ ,
- Terme *II* : production par les gradients de vitesses à grandes échelles,
- Terme *III* : dissipation de l'énergie de sous-maille par le mouvement non corrélé.

L'évolution temporelle des termes de l'équation (5.15) est présentée dans le cas B3,  $\Delta_F = 4\Delta_P$  (Fig. 5.8a). L'énergie de sous-maille est produite par la dissipation de sous-maille de l'énergie corrélée et transférée au mouvement décorrélé par le terme  $\Pi_p$ . Le rôle de la traînée à petite échelle dépend de l'inertie des particules considérées. Dans ce cas de particules inertielles, la traînée de sous-maille moyenne est toujours négative.

Le terme  $\Pi_p$  peut aussi s'interpréter comme le transfert entre l'énergie de sous-maille du mouvement corrélé et l'énergie décorrélée. Ainsi, le bilan de la somme  $\widehat{\delta q_p^2} + q_{p,SGS}$  ne fait pas intervenir  $\Pi_p$  :

$$\frac{d}{dt} (\widehat{\delta q_p^2} + \langle q_{p,SGS} \rangle_{\bar{p}}) = -\frac{1}{\tau_p} (2\widehat{\delta q_p^2} + \langle q_{p,SGS} - q_{fp,SGS} \rangle_{\bar{p}}) - \langle \widehat{\delta R}_{p,ij} \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j} \rangle_{\bar{p}} - \langle T_{p,ij} \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j} \rangle_{\bar{p}} \quad (5.16)$$

L'erreur sur la fermeture de cette équation (Tab. 5.3) est plus faible que l'erreur sur la fermeture du bilan de  $\widehat{\delta q_p^2}$  (Tab. 5.2) : 8%, 4% et 3% dans les cas B1, B2 et B3. Cela justifie la supposition que l'erreur commise sur le bilan de  $\widehat{\delta q_p^2}$  est liée à la mesure du terme  $\langle \Pi_p \rangle_{\bar{p}}$ . On peut alors évaluer  $\langle \Pi_p \rangle_{\bar{p}}$  comme la somme de sa valeur mesurée et de l'erreur sur le bilan de  $\widehat{\delta q_p^2}$ . Avec cette évaluation, les productions d'énergie décorrélée par les grandes échelles et par le terme de sous-maille sont presque égales dans le cas B3,  $\Delta_F = 4\Delta_P$  (voir Fig. 5.7). Le terme  $\Pi_p$  doit donc être modélisé.

### Termes de diffusion

Deux termes de diffusion sont présents dans l'équation de l'énergie décorrélée filtrée locale (éq. 5.7) :

- le terme  $-\frac{\partial}{\partial x_j} \bar{n}_p \widehat{\delta Q}_{p,j}$  est la diffusion par le mouvement décorrélé filtré,
- et  $-\frac{\partial}{\partial x_j} \bar{n}_p Q_{p,j}$  est la diffusion par les échelles de sous-maille du mouvement corrélé.

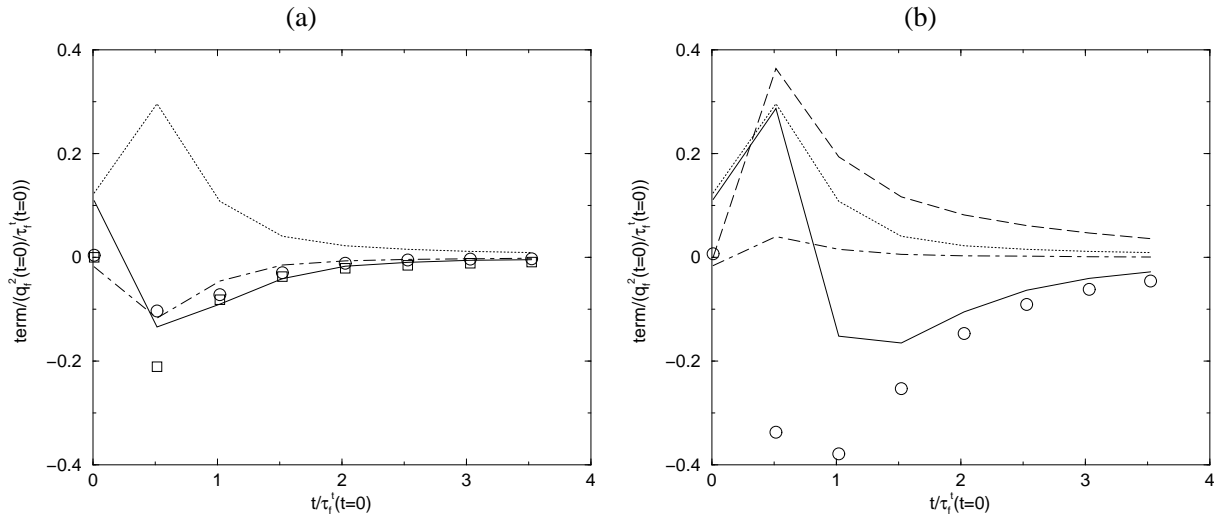


FIG. 5.8 – (a) Evolution temporelle des termes du bilan de l'énergie de sous-maille moyenne (éq. 5.15). Terme d'instationnarité : ligne continue ; traînée : cercles ;  $-\langle T_{p,ij} \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j} \rangle_{\bar{p}}$  : ligne tiretée et  $\langle \Pi_p \rangle_{\bar{p}}$  : carrés. (b) Evolution temporelle des termes du bilan de la somme des énergies moyennes de sous-maille et décorrélée filtré (éq. 5.16). Terme d'instationnarité : ligne continue ; traînée : cercles ;  $-\langle T_{p,ij} \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j} \rangle_{\bar{p}}$  : ligne pointillée et  $-\langle \widehat{\delta R}_{p,ij} \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j} \rangle_{\bar{p}}$  : ligne tiretée. L'erreur (= somme des termes de droite - terme de gauche) est représentée par la ligne mixte. Cas B3,  $\Delta_F = 4\Delta_P$ .

Les fluctuations moyennes de ces deux termes suivent la même évolution temporelle dans le cas B3 avec  $\Delta_F = 4\Delta_P$  (Fig. 5.9) : elles décroissent après avoir atteint un maximum à  $t/\tau_{f0}^t = 0,5$ . On peut noter que les fluctuations de la diffusion RUV filtrée diminuent légèrement moins vite que celles de la diffusion de sous-maille.

Les fluctuations moyennes des termes de diffusion par les RUV et de sous-maille de l'énergie décorrélée sont comparées à l'instant  $t/\tau_{f0}^t = 1$  dans les cas B1, B2 et B3 pour différentes longueurs de filtrage. Les fluctuations des termes de diffusion diminuent avec la taille de filtrage (Fig. 5.10). La diffusion RUV diminue plus vite que la diffusion de sous-maille avec la taille caractéristique du filtrage. De plus, on retrouve la même évolution de l'importance relative des termes que pour l'énergie de sous maille/énergie décorrélée ou bien entre les dissipations SGS/RUV : l'importance de la diffusion par le mouvement décorrélé augmente avec l'inertie des particules. Dans tous les cas étudiés ici, les deux termes de diffusion restent du même ordre de grandeur.

### 5.3 Conclusion du chapitre

Les équations mésoscopiques aux grandes échelles de la phase dispersée ont été présentées. L'originalité de l'approche réside dans la présence de termes dus au mouvement décorrélé des particules en plus des termes de sous-maille. Les différents termes de sous-maille ont été, quantitativement, comparés à leurs

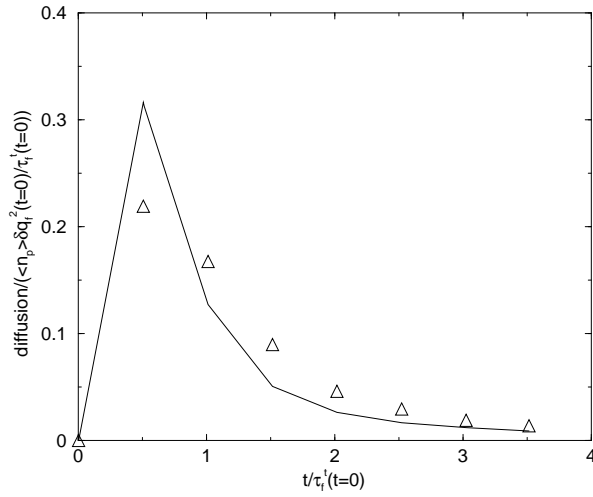


FIG. 5.9 – Evolution temporelle des valeurs RMS des termes de diffusion de l'énergie décorrélée filtrée. Diffusion RUV  $\frac{\partial \widehat{n}_p \delta Q_{p,i}}{\partial x_j}$  : triangles ; diffusion de sous-maille  $\frac{\partial \bar{n}_p Q_{p,i}}{\partial x_j}$  : ligne continue. Cas B3,  $\Delta_F = 4\Delta_P$ .

équivalents dus au mouvement décorrélé. Les effets du mouvement décorrélé sont plus importants que les effets de sous-maille pour des particules lourdes, tout en restant du même ordre de grandeur. Des modélisations sont proposées et testées dans le chapitre suivant.

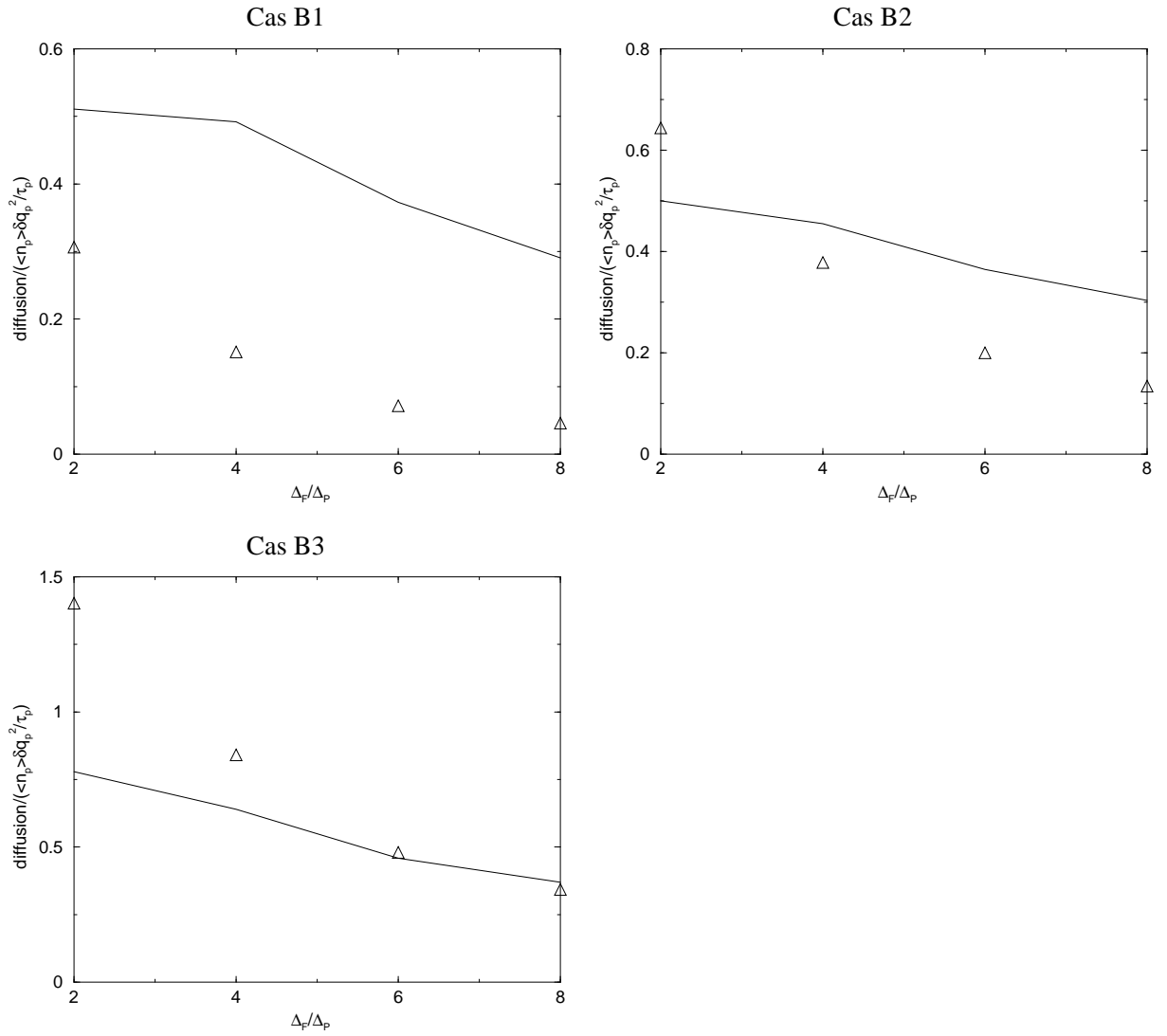


FIG. 5.10 – Evolution des fluctuations moyennes (RMS) des termes de diffusion RUV  $\frac{\partial \bar{n}_p \widehat{\delta Q}_{p,j}}{\partial x_j}$  (triangles) et de diffusion de sous-maille  $\frac{\partial \bar{n}_p Q_{p,j}}{\partial x_j}$  (ligne continue) avec la taille du filtre spatial à l'instant  $t / \tau_{f0}^t = 1$ .

## Chapitre 6

# Modélisations des termes de l'approche LES

Les termes à modéliser sont ontologiquement de deux types : ils proviennent soit du processus de moyenne d'ensemble (sur les réalisations de la phase particulaire conditionnée par une réalisation fluide), soit du filtrage spatial des équations eulériennes. L'étude est limitée à l'approche à cinq équations pour les grandes échelles de la phase dispersée. Les termes provenant de la moyenne d'ensemble sont : la partie non sphérique du tenseur des corrélations doubles du mouvement décorrélé dans les équations filtrées de quantité de mouvement et d'énergie décorrélée, et le flux de l'énergie décorrélée par les corrélations triples du mouvement décorrélé dans l'équation filtrée de l'énergie décorrélée. Trois termes de sous-maille doivent être modélisés : le tenseur des contraintes de sous-maille  $T_{p,ij}$  dans l'équation de quantité de mouvement, la diffusion ainsi que la production de sous-maille de l'énergie décorrélée filtrée.

### 6.1 Termes filtrés issus de la moyenne d'ensemble

Les modèles proposés ainsi que les résultats des tests a priori sont similaires à ceux présentés sur les champs non filtrés au Chap. 4. En conséquence, les résultats sont présentés pour le cas B3 seulement (c'est le cas où les bilans des grandeurs moyennes sont les mieux fermés).

#### 6.1.1 Tenseur du mouvement décorrélé : $\widehat{\delta R}_{p,ij}$

Un modèle de viscosité RUV pour la partie déviatrice du tenseur des corrélations du mouvement décorrélé non filtré  $\delta R_{p,ij}^*$  a été testé et validé pour des particules « pas trop » inertielles. En utilisant ce modèle pour les grandeurs filtrées, le tenseur  $\widehat{\delta R}_{p,ij}^*$  s'exprime :

$$\bar{n}_p \widehat{\delta R}_{p,ij}^* = -\bar{n}_p \hat{v}_{RUV} \hat{S}_{p,ij}^* - [\overline{n_p v_{RUV} S_{p,ij}^*} - \bar{n}_p \hat{v}_{RUV} \hat{S}_{p,ij}^*] \quad (6.1)$$

où  $v_{RUV} = \frac{\tau_p}{3} \delta \theta_p$  et  $\hat{v}_{RUV} = \frac{\tau_p}{3} \widehat{\delta \theta}_p$ . Le deuxième terme du membre de droite de l'équation (6.1) est un terme de sous-maille dû aux variations spatiales de la viscosité RUV. Ce terme est négligé pour deux raisons :

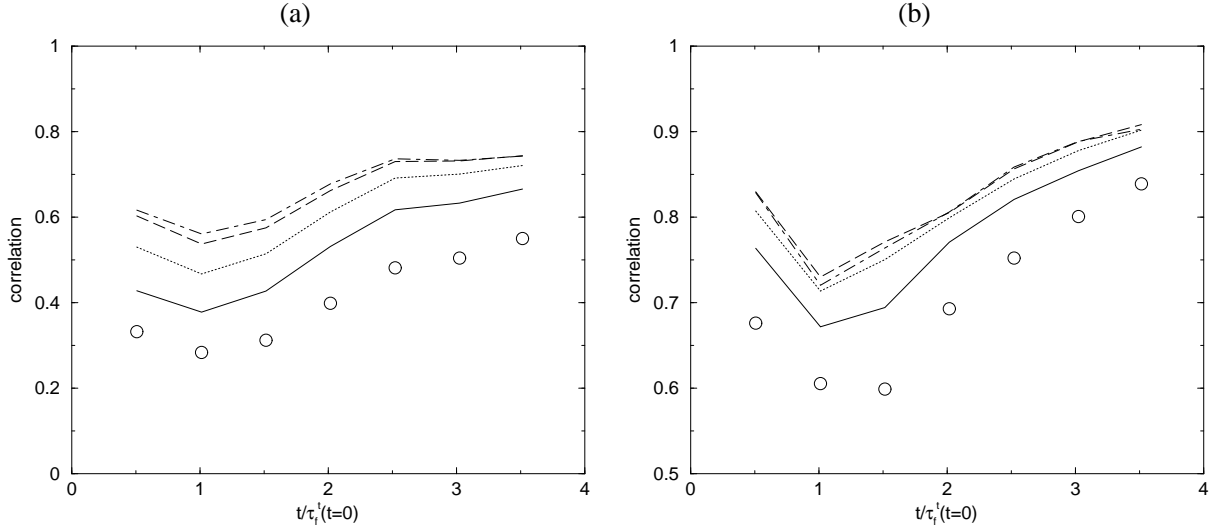


FIG. 6.1 – Coefficients de corrélation direct (a) et contracté (b) entre le champ exact de  $\widehat{\delta R}_{p,ij}^*$  et le modèle de viscosité RUV pour différentes longueurs de filtrage.  $\Delta_F = 2\Delta_P$  : ligne continue ;  $\Delta_F = 4\Delta_P$  : ligne pointillée ;  $\Delta_F = 6\Delta_P$  : ligne tiretée ;  $\Delta_F = 8\Delta_P$  : ligne mixte. Pour rappel, les résultats sur les grandeurs non filtrées sont indiqués par des cercles.

- Modéliser un terme de sous-maille d'un modèle de contrainte sur lequel quelques doutes quant à la validité subsistent (au moins en terme de coefficient de corrélation au niveau scalaire, Fig. 4.30), semble hasardeux ;
- L'équivalent monphasique de ce terme est négligeable par rapport à la diffusion visqueuse filtrée dans les tests a priori sur une couche de mélange compressible (Vreman (1995)).

En conséquence, le modèle suivant est proposé pour  $\widehat{\delta R}_{p,ij}^*$  :

$$\bar{n}_p \widehat{\delta R}_{p,ij}^* = -\bar{n}_p \hat{\nu}_{RUV} \hat{S}_{p,ij}^* \quad (6.2)$$

Les coefficients de corrélation entre ce modèle et le tenseur  $\widehat{\delta R}_{p,ij}^*$  mesurés sont meilleurs pour les contraintes filtrées que pour les contraintes non filtrées aussi bien au niveau direct (Fig. 6.1a) qu'au niveau contracté (Fig. 6.1b). De plus, les coefficients de corrélation augmentent avec la taille du filtre (0,71 en moyenne pour le cas non filtré et  $> 0,8$  pour  $\Delta_F = 4\Delta_P$ ,  $6\Delta_P$  ou  $8\Delta_P$  au niveau scalaire).

Augmenter la taille du filtre conduit à réduire la probabilité des valeurs positives de la dissipation à grande échelle locale par le mouvement décorréolé des particules  $\widehat{\delta R}_{p,ij}^* \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j}$  (Fig. 6.2). On a vu précédemment (paragraphe. 4.5.2) que le modèle de viscosité du mouvement décorréolé (éq. 4.30) permet de bien représenter les valeurs négatives du terme non filtré  $\delta R_{p,ij}^* \frac{\partial u_{p,i}}{\partial x_j}$  mais ne prédit pas le bon signe dans les zones où le terme dissipation RUV est positif (Fig. 4.31d).

Le modèle de viscosité semble convenir, un coefficient multiplicatif voisin de l'unité est toutefois nécessaire pour obtenir la bonne dissipation RUV moyenne aux grandes échelles (Fig. 6.4a). Ce coefficient augmente avec la taille du filtre et varie dans le temps. On peut remarquer que ce coefficient évolue, qualitativement,



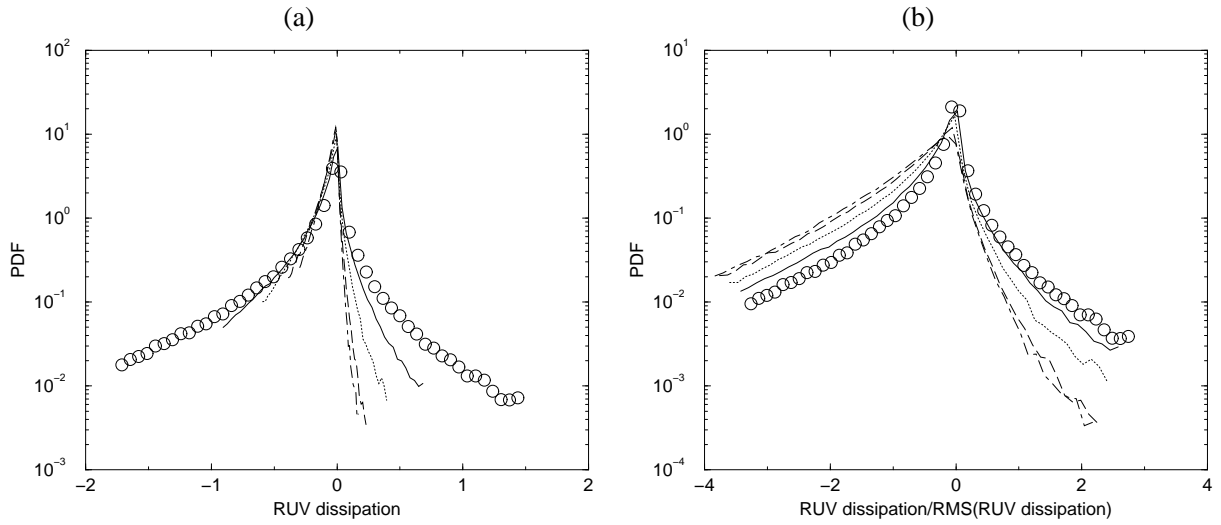


FIG. 6.2 – PDF de la dissipation RUV non filtrée (cercles) et filtrée pour différentes longueurs de filtrage.  $\Delta_F = 2\Delta_P$  : ligne continue ;  $\Delta_F = 4\Delta_P$  : ligne pointillée ;  $\Delta_F = 6\Delta_P$  : ligne tiretée ;  $\Delta_F = 8\Delta_P$  : ligne mixte. PDF non normalisées (a) ou normalisées par les valeurs RMS (b). Cas B3 à  $t/\tau_{f0}^t = 1$

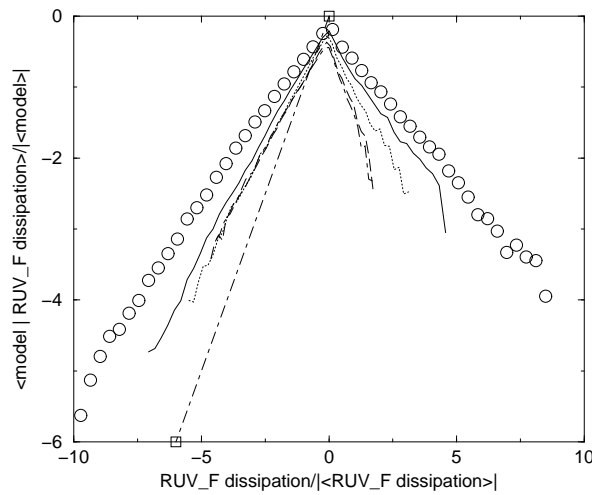


FIG. 6.3 – Moyenne de la dissipation aux grandes échelles  $\widehat{\delta R}_{p,ij}^* \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j}$  prédite par le modèle de viscosité (éq. 6.2) conditionnée par la valeur mesurée (« exacte ») à l'instant  $t/\tau_f^t = 1$ .  $\Delta_F = 2\Delta_P$  : ligne continue ;  $\Delta_F = 4\Delta_P$  : ligne pointillée ;  $\Delta_F = 6\Delta_P$  : ligne tiretée ;  $\Delta_F = 8\Delta_P$  : ligne mixte. Pour rappel, les résultats sur les grandeurs non filtrées sont indiqués par des cercles. Droite  $y = x$  : ligne mixte + carrés.

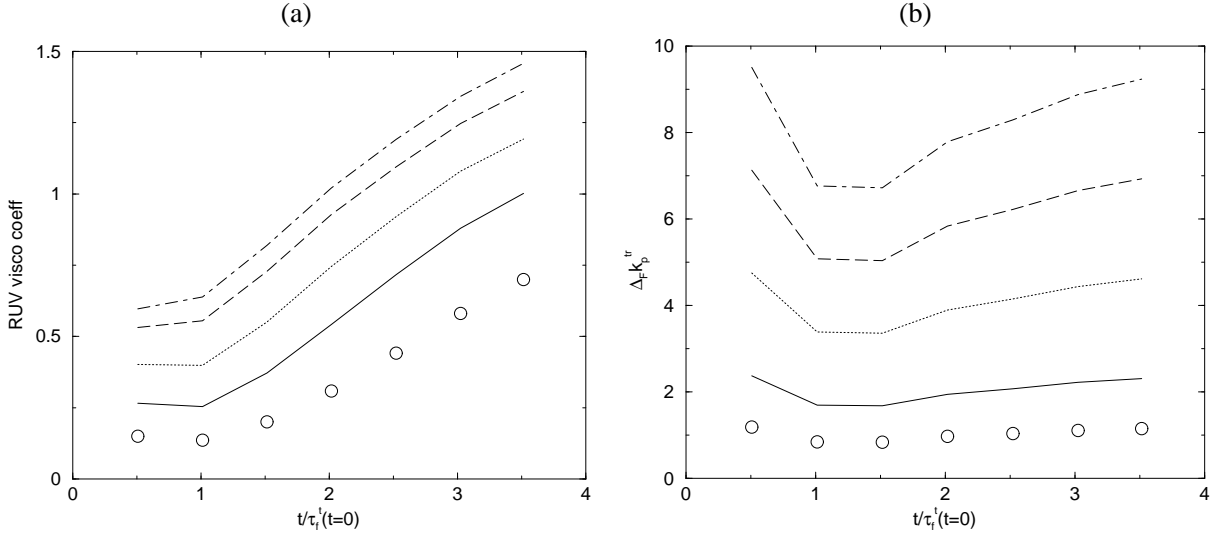


FIG. 6.4 – (a) Evolution temporelle du coefficient multiplicatif nécessaire pour ajuster la dissipation du modèle de viscosité à la moyenne de la dissipation RUV des grandes échelles mesurée pour les différentes largeurs de filtre.  $\Delta_F = 2\Delta_P$  : ligne continue ;  $\Delta_F = 4\Delta_P$  : ligne pointillée ;  $\Delta_F = 6\Delta_P$  : ligne tiretée ;  $\Delta_F = 8\Delta_P$  : ligne mixte. Pour rappel, les résultats sur les grandeurs non filtrées sont indiqués par des cercles. (b) Evolution temporelle de  $\Delta_F k_p^{tr}$ . Le nombre d'onde de transition  $k_p^{tr}$  entre les régimes dominés par la traînée ou par la dissipation RUV est mesuré suivant l'éq. (4.26).  $\Delta_F = \Delta_P$  : cercles ;  $\Delta_F = 2\Delta_P$  : ligne continue ;  $\Delta_F = 4\Delta_P$  : ligne pointillée ;  $\Delta_F = 6\Delta_P$  : ligne tiretée ;  $\Delta_F = 8\Delta_P$  : ligne mixte.

comme  $\Delta_F k_p^{tr}$  (Fig. 6.4b), où  $k_p^{tr}$  est le nombre d'onde de transition entre les échelles particulières corrélées dominées par la traînée et celles où  $E_p(k) \propto k^{-2}$ . Il est peut-être possible de déterminer l'évolution du coefficient du modèle de viscosité RUV filtré en fonction du seul paramètre adimensionnel  $\Delta_F k_p^{tr}$ .

### 6.1.2 Diffusion par mouvement décorrélé de $\widehat{\delta\theta}_p$

Par analogie avec la modélisation du terme non filtré (éq. 4.39), le terme filtré peut être modélisé par :

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \bar{n}_p \widehat{\delta Q}_{p,j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{5}{3} \bar{n}_p \tau_p \widehat{\delta\theta}_p \frac{\partial}{\partial x_j} \widehat{\delta\theta}_p \right) \quad (6.3)$$

où le terme de sous-maille dû à la non homogénéité du coefficient de diffusion est négligé pour les raisons évoquées au paragraphe 6.1.1 à propos de la modélisation de  $\widehat{\delta R}_{p,ij}^*$ . La figure 6.5a présente l'évolution temporelle des coefficients de corrélation au niveau scalaire. Ces coefficients sont très faibles ( $< 0,3$ ). Les moyennes conditionnées de ce modèle montrent que ni les grandes valeurs ni les faibles valeurs du terme de diffusion RUV ne sont correctement prédites en moyenne par ce modèle (Fig. 6.6a). La forme de la PDF du terme de diffusion (Fig. 6.6b) n'est elle non plus pas reproduite par le modèle : elle est symétrique, alors que le modèle prédit une forme légèrement dissymétrique (bien que la moyenne soit nulle).

Le modèle proposé pour la diffusion de  $\widehat{\delta\theta}_p$  par les corrélations triples des RUV filtrées échoue à tous les tests a priori. Les hypothèses qui ont permis d'obtenir ce modèle sont l'équilibre des corrélations triples

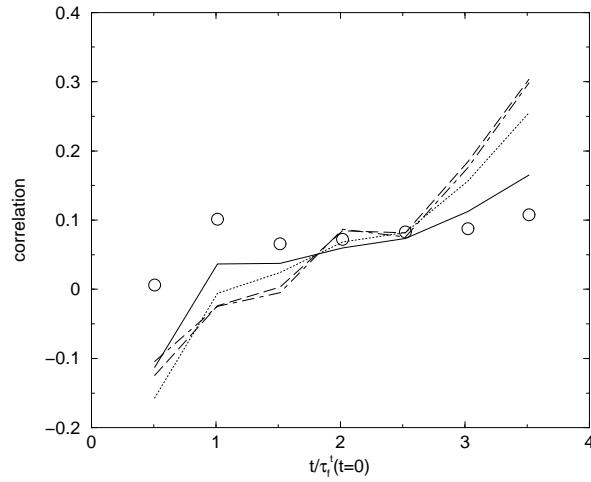


FIG. 6.5 – Coefficients de corrélation entre le champ mesuré de  $\frac{\partial \bar{n}_p \delta \widehat{Q}_{p,m}}{\partial x_m}$  et le modèle de diffusion RUV filtré (éq. 6.3).  $\Delta_F = 2\Delta_P$  : ligne continue ;  $\Delta_F = 4\Delta_P$  : ligne pointillée ;  $\Delta_F = 6\Delta_P$  : ligne tiretée ;  $\Delta_F = 8\Delta_P$  : ligne mixte. Pour rappel, les résultats sur les grandeurs non filtrées sont indiqués par des cercles. Cas B3.

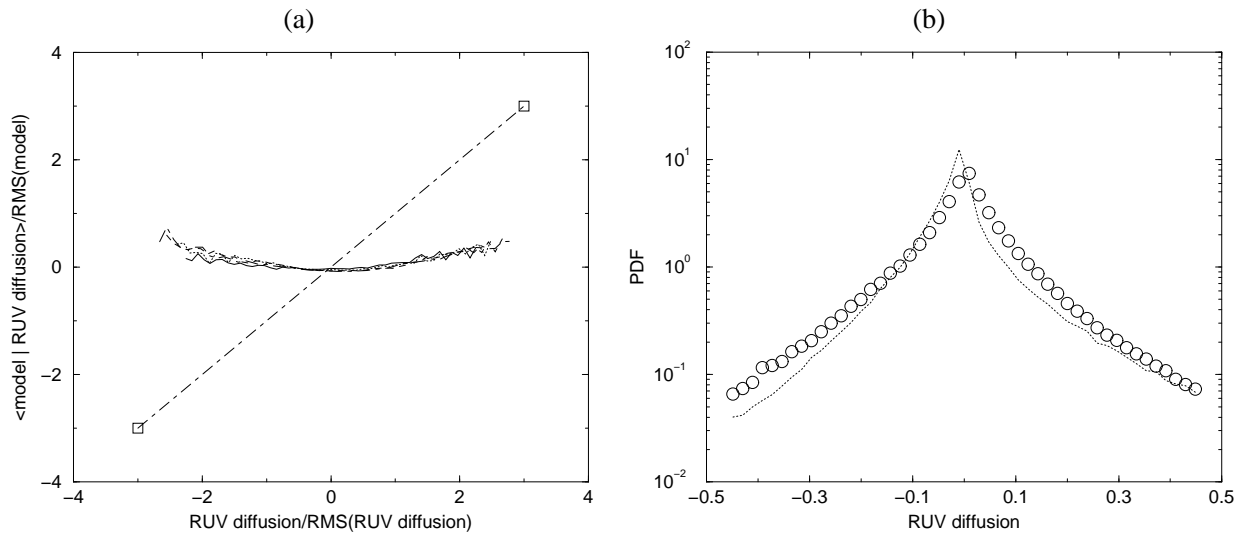


FIG. 6.6 – (a) Moyenne de la diffusion RUV modélisée conditionnée par la mesure de la grandeur pour différentes longueurs de filtrage :  $\Delta_F = 2\Delta_P$  : ligne continue ;  $\Delta_F = 4\Delta_P$  : ligne pointillée ;  $\Delta_F = 6\Delta_P$  : ligne tiretée ;  $\Delta_F = 8\Delta_P$  : ligne mixte. La droite d'équation  $y = x$  est représentée avec un ligne mixte+carrés. Cas B3 à  $t/\tau_{f0}^t = 1$ . (b) PDF de l'énergie corrélée de sous-maille exacte (carrés) et prédiction du modèle (éq. 6.3). Cas B3,  $\Delta_F = 4\Delta_P$  à  $t/\tau_{f0}^t = 1$ .

et la forme proche d'une gaussienne de la PDF locale des vitesses décorréelées. Ces hypothèses ne sont probablement pas valides dans les cas étudiés. La modélisation correcte de ce terme reste une question ouverte.

## 6.2 Tenseur de sous-maille : $T_{p,ij}$

### 6.2.1 Stratégies de modélisation

Les modèles proposés doivent satisfaire plusieurs types de contraintes (Sagaut (1998)) : ils doivent être consistants du point de vue des phénomènes physiques modélisés (conservation de l'invariance galiléenne, mêmes effets, ...) et doivent être numériquement acceptables (coût numérique, stabilité des calculs, ...). Seuls des tests a priori des modèles sont réalisés dans ce travail, les contraintes numériques des modèles ne seront donc pas évaluées. Toutefois, les modèles proposés par la suite étant très similaires aux modèles classiquement utilisés en LES monophasique, on peut supposer que ces modèles sont aussi numériquement acceptables pour les LES Euler-Euler.

Selon la classification de Sagaut (1998), le développement de modèles de sous-maille peut se faire suivant deux approches distinctes. La modélisation structurelle consiste à évaluer la forme du tenseur de sous-maille, elle vise à trouver une approximation la plus semblable possible du tenseur. Cette catégorie regroupe les modèles de type similarité d'échelles et gradient. La modélisation fonctionnelle, quant à elle, cherche à reproduire l'action du tenseur de sous-maille sur les grandes échelles.

Avant de proposer une modélisation du tenseur des contraintes de sous-maille de type fonctionnel, il convient de déterminer quel est le rôle des petites échelles ( $k > k_c$ , le nombre d'onde de coupure du filtre est  $k_c \approx 2\pi/\Delta_F$ ) du mouvement corrélé. Deux différents cas doivent être examinés (Fig. 6.7) :

- $k_c > k_p^{tr}$  (Fig. 6.7a) : seule une partie des échelles dissipatives est résolue. Le modèle de sous-maille doit permettre de dissiper l'énergie aux échelles proche du nombre d'onde de coupure. Le rôle du tenseur de sous-maille particulière est, en première approximation, le même que celui du fluide, bien que les mécanismes assurant la dissipation soient différents. Des modèles équivalents à ceux utilisés en turbulence compressible sont envisageables.
- $k_c < k_p^{tr}$  (Fig. 6.7b) : les échelles assurant la dissipation du mouvement corrélé ne sont pas résolues. De plus une partie des échelles de sous-maille est corrélée avec le fluide par l'intermédiaire de la force de traînée. La coupure du filtrage LES se situe alors dans la zone de forçage par la traînée du spectre de vitesse corrélée, si bien que le tenseur de sous-maille des particules « ressemble » à celui du fluide et doit en conséquence assurer un rôle dissipatif.

Dans la suite, la présentation des modèles de sous-maille sera limité au cas  $k_c > k_p^{tr}$ . Les tests a priori ne sont effectués que sur le cas B3 dont le spectre des vitesses corrélées présente la plus grande zone de dissipation<sup>1</sup>.

---

<sup>1</sup>Les résultats des tests a priori dans le cas A2' (très faible Reynolds turbulent) projeté sur un maillage  $128^3$  sont en tout point similaires à ceux obtenus sur le cas B3. Ces résultats préliminaires ont fait l'objet de présentations dans des congrès internationaux (Moreau et al. (2005b,c)). Le proceeding de l'ILASS america 2005 est inclu en annexe.

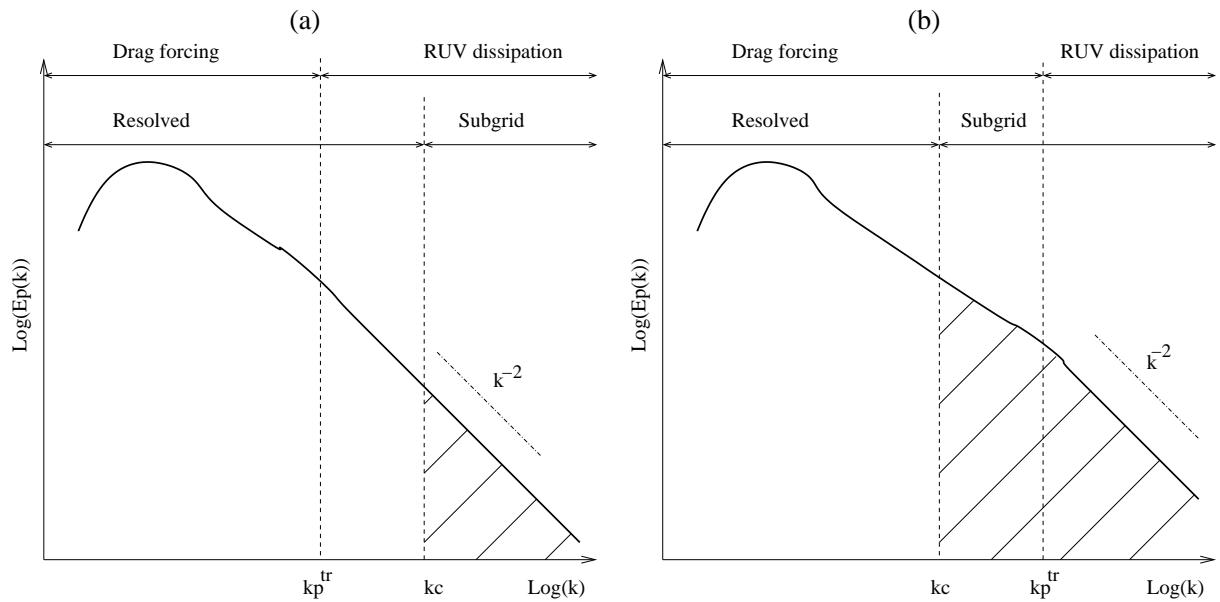


FIG. 6.7 – Forme schématique de la séparation d'échelle des spectres des vitesses particulières corrélées  $E_p(k)$ .  $k_p^{tr}$  est le nombre d'onde de transition entre le régime dominé par la traînée et la zone de dissipation.  $k_c$  est le nombre d'onde de coupure du filtrage LES ( $k_c \approx \pi/\Delta_P$ ). Les échelles de sous-maille (hachures) doivent être modélisées. (a)  $k_p^{tr} < k_c$ . (b)  $k_p^{tr} > k_c$ .

Le positionnement des différents nombres de coupure  $k_c$  sur le spectre des vitesses particulières corrélées est présenté sur la Fig. 6.8 dans le cas B3, à l'instant  $t/\tau_{f0}^t = 1$ . Lorsque  $\Delta_F = 4\Delta_P$ , le nombre d'onde de transition  $k_p^{tr}$  est à peu près égal au nombre d'onde de coupure  $k_c$ .

Dans les cas où les échelles particulières de sous-maille sont corrélées avec celles du fluide, les tenseurs de sous-maille particulaire et fluide sont très similaires, si bien que les résultats des tests a priori seraient équivalents à ceux classiquement effectués en écoulement monophasique fluide. De tels tests a priori ont peu d'intérêt dans les cas simulés, du fait des faibles nombres de Reynolds des écoulements fluide simulés.

## 6.2.2 Modèles

Trois modèles de sous-maille utilisés en écoulement turbulent compressible sont adaptés à l'approche particulaire aux grandes échelles : le modèle de Smagorinsky sous deux variantes, un modèle de similarité d'échelles et un modèle mixte. Ces modèles ont été choisis car ce sont les plus fréquemment utilisés en LES monophasique. Il existe de nombreux autres modèles de sous maille pour les écoulements compressibles, le développement de tels modèles est un sujet de recherche en pleine expansion (par exemple, Vreman (1995), Nicoud et Ducros (1999), Lenormand et al. (2000)).

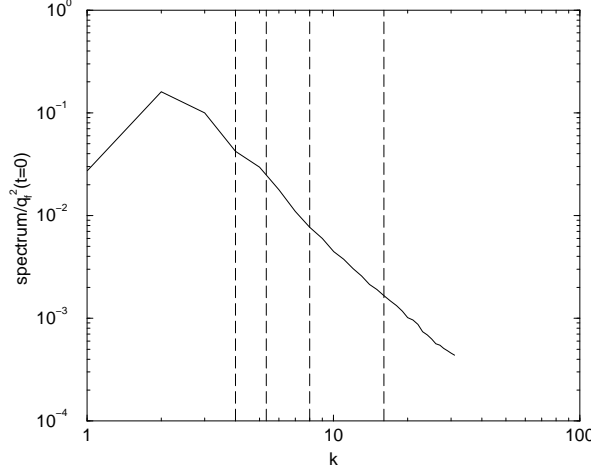


FIG. 6.8 – Positionnement des nombres d’onde de coupure  $k_c$  (ligne tiretée) sur le spectre des vitesses corrélées  $E_p(k)$  (ligne continue). Le nombre d’onde de coupure est évalué par  $k_c = 2\pi/\Delta_F$ .  $\Delta_F = 2\Delta_p, 4\Delta_p, 6\Delta_p, 8\Delta_p$ . Cas B3 à  $t/\tau_{f0}^t = 1$ . transition est évalué à 7,8 ou 8,9 selon la méthode (voir Fig. 4.25).

### Modèles de type Smagorinsky

Le premier modèle est le fameux modèle de Smagorinsky (1963) dans une version compressible<sup>2</sup>

$$T_{p,ij}^* = -C_S^2 \Delta_F^2 |\hat{S}_p^*| \hat{S}_{p,ij}^* \quad (6.4)$$

où  $\hat{S}_{p,ij}^*$  est la partie déviatrice du tenseur de cisaillement des vitesses particulières filtrées, sa norme est définie par  $|\hat{S}_p^*|^2 = \frac{1}{2} \hat{S}_{p,ij}^* \hat{S}_{p,ij}^*$ .

Cette approche est similaire à celle de Shotorban et Balachandar (2006) qui, dans le formalisme de l’hypothèse d’équilibre de la phase particulaire, ont suggéré de modéliser l’effet des échelles de sous-maille sur le champ de vitesse particulaire par un modèle de Smagorinsky exprimé à l’aide du champ de vitesse du fluide :

$$T_{p,ij}^* = -C_S \Delta_F^2 |\bar{S}_f| \bar{S}_{f,ij} \quad (6.5)$$

où  $\bar{S}_{f,ij}$  est le tenseur des contraintes de cisaillement filtrées du fluide.

Les deux modèles de viscosité précédents ne modélisent que la partie anisotrope du tenseur de sous-maille  $T_{p,ij}$ . Un modèle de Yoshizawa<sup>3</sup> est utilisé pour l’énergie corrélée de sous-maille :

$$q_{p,SGS} = C_Y \Delta_F^2 |\hat{S}_p|^2 \quad (6.6)$$

<sup>2</sup>Il existe plusieurs déclinaisons compressibles du modèle de Smagorinsky. La viscosité turbulente du modèle fait intervenir soit la norme du tenseur de cisaillement totale (Moin et al. (1991); Erlebacher et al. (1992); Martin et al. (2000)), soit la norme de sa partie déviatrice (Lenormand et al. (2000)). Cette dernière formulation a été retenue pour la suite. Toutefois, des tests préliminaires en utilisant ces deux modèles de Smagorinsky compressibles ne montrent pas de différences notables sur les tests a priori.

<sup>3</sup>Même remarque que pour la définition compressible du modèle de Smagorinsky. Voir note de bas de page numéro 2.

En écoulement incompressible, un tel modèle n'est pas nécessaire, l'énergie de sous-maille étant ajoutée à la pression filtrée. Cette quantité intervient dans l'équation de quantité de mouvement à grande échelle dans le terme  $-\frac{2}{3}\bar{n}_p q_{p,SGS} \delta_{ij}$  et est couplée à la RUE filtrée selon le terme  $\frac{\partial}{\partial x_i} [-\frac{2}{3}\bar{n}_p (\widehat{\delta\theta}_p + q_{p,SGS})]$ . Dans le cas de particules légères ( $St \ll 1$ ), l'énergie décorrélée est négligeable devant l'énergie de sous-maille. Pour les particules plus inertielles étudiées ici, les valeurs moyennes des énergies de sous-maille et décorrélée sont du même ordre de grandeur (Fig. 5.2). De plus, les champs locaux instantanés de  $q_{p,SGS}$  présentent des variations plus importantes que ceux de  $\widehat{\delta\theta}_p$  et ne sont pas localisés au même emplacement (dans le cas B2,  $\Delta_F = 4\Delta_p$ , Fig. 5.3). A priori, l'énergie de sous-maille doit être modélisée.

### Modèle de similarité d'échelles

En introduisant la fluctuation de sous-maille de la vitesse  $\mathbf{u}''_p = \mathbf{u}_p - \widehat{\mathbf{u}}_p$ , le tenseur de sous-maille  $T_{p,ij}$  peut être écrit comme la somme de trois termes selon :

$$T_{p,ij} = L_{p,ij} + C_{p,ij} + R_{p,ij} \quad (6.7)$$

où les termes de Leonard  $L_{p,ij}$ , croisés  $C_{p,ij}$  et de Reynolds  $R_{p,ij}$  sont

$$L_{p,ij} = \widehat{\hat{u}_{p,i}\hat{u}_{p,j}} - \hat{u}_{p,i}\hat{u}_{p,j} \quad (6.8)$$

$$C_{p,ij} = \widehat{\hat{u}_{p,i}u''_{p,j}} + \widehat{u''_{p,i}\hat{u}_{p,j}} \quad (6.9)$$

$$R_{p,ij} = \widehat{u''_{p,i}u''_{p,j}} \quad (6.10)$$

Le terme de Leonard dépend seulement de grandeurs filtrées et peut être calculé explicitement. Par une approche de déconvolution Stolz et Adams (1999), les fluctuations de sous-maille de la vitesse sont au premier ordre  $\mathbf{u}''_p \approx \widehat{\mathbf{u}}_p - \widehat{\widehat{\mathbf{u}}}_p$ . En supposant que

$$\widehat{\hat{u}_{p,i}u''_{p,j}} \approx \widehat{\hat{u}_{p,i}(\hat{u}_{p,j} - \widehat{\widehat{u}}_{p,j})} \quad (6.11)$$

$$\widehat{u''_{p,i}\hat{u}_{p,j}} \approx (\hat{u}_{p,i} - \widehat{\widehat{u}}_{p,i})(\hat{u}_{p,j} - \widehat{\widehat{u}}_{p,j}) \quad (6.12)$$

Le tenseur de sous-maille est, finalement, modélisé par :

$$T_{p,ij} = C_B (\widehat{\hat{u}_{p,i}\hat{u}_{p,j}} - \widehat{\widehat{\widehat{u}}_{p,i}\widehat{\widehat{u}}_{p,j}}) \quad (6.13)$$

Le coefficient du modèle doit être  $C_B = 1$  pour assurer la conservation de l'invariance galiléenne du tenseur de sous-maille (Speziale (1985)). Par construction, ce modèle ne prend en compte que la contribution des échelles résolues au terme de sous-maille. En écoulement fluide, ce modèle donne de très bons résultats aux tests a priori, mais sous-estime la dissipation ce qui conduit à des calculs instables pour les tests a posteriori. Une solution consiste à interdire certaines valeurs prédites par ce modèle (Vreman (1995)). Un tel modèle est théoriquement capable de prendre en compte la remontée d'énergie des petites échelles vers les plus grandes (« backscatter effect », Horiuti (1989)).

## Modèle mixte

Ce modèle est basé sur l'idée d'obtenir une bonne représentation des transferts inter-échelles par le modèle de similarité et la bonne dissipation par le modèle de Smagorinsky. Physiquement, le modèle de similarité d'échelle prend en compte la contribution des grandes échelles aux échelles non résolue, alors que le modèle de viscosité permet de bien représenter la cascade d'énergie vers les petites échelles. Ce modèle a été testé a priori pour des écoulements fluides compressibles par Erlebacher et al. (1992). Dans le cadre de l'approche particulière mésoscopique à grandes échelles, ce modèle s'écrit :

$$T_{p,ij} = \widehat{\hat{u}_{p,i}\hat{u}_{p,j}} - \hat{u}_{p,i}\hat{u}_{p,j} - C'_S \Delta_F^2 |\hat{S}_p^*| \hat{S}_{p,ij}^* + \frac{2}{3} C'_Y \Delta_F^2 |\hat{S}_p^*|^2 \delta_{ij} \quad (6.14)$$

Erlebacher et al. (1992) proposent les valeurs  $C'_S = 0.092$  pour la constante de Smagorinsky et  $C'_Y = 0.0033$  pour le modèle de Yoshizawa. Speziale et al. (1988) à l'aide de test a priori pour des écoulements faiblement compressibles en THI, suggèrent de négliger le modèle de Yoshizawa ( $C'_Y = 0$ ).

## Ajustement dynamique des coefficients

Les modèles de type Smagorinsky dépendent du cisaillement total, ainsi les gradients moyens de vitesse contribuent à la dissipation, ce qui conduit à de mauvais résultats en LES, lorsque des gradients de vitesse moyenne, au sens de Reynolds, existent. Cela a été de nombreuses fois mis en évidence en écoulement monophasique dans des configurations telles que les jets (Le Ribault et al. (1999)), ou les écoulements en canal (Piomelli et al. (1988)). L'ajustement dynamique des constantes des modèles compressibles de Smagorinsky (Moin et al. (1991)) et mixte (Vreman (1995)) permet d'améliorer les résultats. Ces méthodes reposent sur une hypothèse de type similarité d'échelle : les champs résolus sont explicitement filtrés sur une échelle caractéristique plus grande que la taille des mailles de calcul (typiquement sur une longueur double) appelée « niveau test » ; l'identité de Germano (Germano et al. (1991)) permet de relier les contraintes résolues aux contraintes de sous-maille non résolues et celles du « niveau test » ; il est supposé que les tenseurs de sous-maille à ces deux niveaux peuvent être modélisés par le même modèle avec le même coefficient. La valeur du coefficient est ensuite obtenue par contraction de l'identité de Germano avec le tenseur de cisaillement (Germano et al. (1991)) ou avec le tenseur des contraintes résolues (Lilly (1992)) suivi d'une prise de moyenne spatiale dans une direction d'homogénéité, ou temporelle (Meneveau et Katz (2000)). L'application de cette méthode d'ajustement dynamique des coefficients dans le cas particulier est, tout à fait, envisageable. Une restriction peut toutefois être formulée : le nombre d'onde de coupure du niveau test devra rester inférieur au nombre d'onde de transition si  $k_c < k_p^{tr}$ . En effet, dans le cas contraire, la pente du spectre des vitesses corrélées changeant entre les nombres d'onde de coupure du maillage et du niveau test, l'hypothèse de l'identité de la valeur du coefficient aux deux nombres de coupure n'est plus satisfaite.



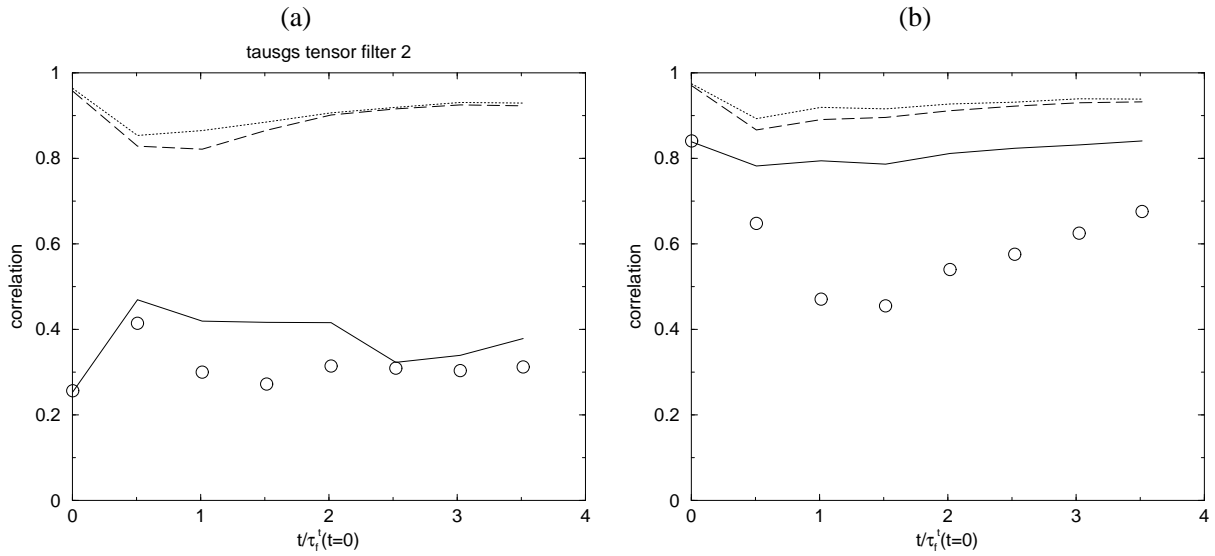


FIG. 6.9 – Evolution temporelle des coefficients de corrélation direct (a) et contracté (b) entre le tenseur de sous-maille  $T_{p,ij}^*$  mesuré et les prédictions des modèles. modèle de viscosité : ligne continue ; modèle de similarité : ligne pointillée ; modèle mixte : ligne tiretée ; modèle de viscosité vitesse fluide : cercles. Cas B3,  $\Delta_F = 4\Delta_P$ .

### 6.2.3 Tests a priori

Les modèles précédents sont testés à l'aide des champs eulériens mésoscopiques obtenus par projection des résultats lagrangiens. Les tests a priori de modèles de sous-maille ne permettent pas d'évaluer la performance des modèles dans une vraie simulation des grandes échelles (Germano et al. (1991); Moin et al. (1991)). Toutefois, ils constituent un premier pas dans l'évaluation des modèles de sous-maille.

Les tests des modélisations du tenseur de sous-maille  $T_{p,ij}$  sont effectués pour le cas B3 seulement. Dans ce cas, le spectre des vitesses corrélées présente une pente à peu constante en  $k^{-2}$  du nombre d'onde  $k = 6$  jusqu'au plus grand nombre d'onde 32, alors que dans le cas B2, la zone à pente constante s'étend seulement de  $k = 18$  à  $k = 32$ . Malgré le manque de compréhension des transferts d'énergie dans un tel système particulière, on suppose que la présence d'une zone à pente constante dans le spectre des vitesses particulières corrélées est révélateur d'un comportement typique des écoulements chargés en particules inertielles. Le nombre d'onde caractéristique du filtre LES est choisi de manière à filtrer des échelles correspondant à la zone à pente constante.

### Partie déviatrice

Les coefficients de corrélation aux niveaux direct et contracté entre la partie déviatrice du tenseur de sous-maille mesuré ( $T_{p,ij}^*$ ) et les prédictions des modèles sont présentés (Fig. 6.9). Au niveau des coefficients de corrélations directs, les modèles de Smagorinsky particulière (éq. 6.4) ou fluide (éq. 6.5) présentent

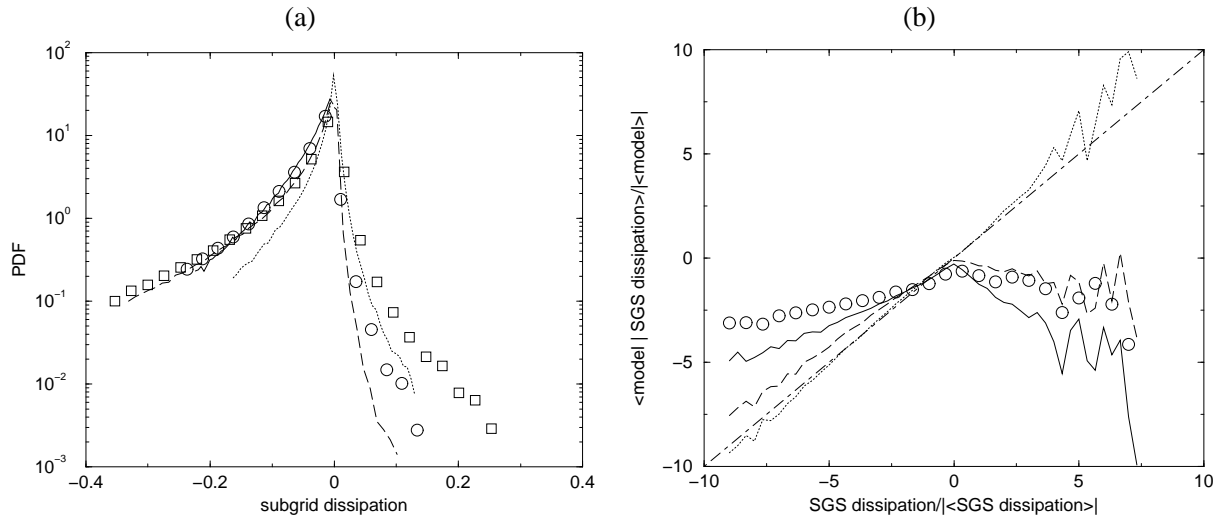


FIG. 6.10 – (a) PDF de la dissipation de sous-maille  $T_{p,ij}^* \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j}$  exacte (carrés) et prédiction des modèles. (b) Moyennes des prédictions des modèles conditionnées par la valeur locale mesurée. La ligne mixte représente la droite d'équation  $y = x$ . Modèle de viscosité : ligne continue ; modèle de similarité : ligne pointillée ; modèle mixte : ligne tiretée ; modèle de viscosité vitesse fluide : cercles. Cas B3,  $\Delta_F = 4\Delta_P$  à  $t/\tau_{f0}^t = 1$ .

une faible corrélation ( $< 0,5$ ), alors que les modèles de similarité et mixte possèdent des coefficients de corrélation plus élevés ( $> 0,8$ ). Au niveau scalaire qui est le plus représentatif du comportement des modèles (Clark et al. (1979)), la corrélation du modèle de Smagorinsky fluide reste faible ( $\approx 0,6$ ). La corrélation du modèle de Smagorinsky particulaire est plus grande (0,81 en moyenne), mais pas aussi bonne que celle des modèles de similarité et mixte (0,93 and 0,91).

Les PDF de la dissipation de sous-maille  $T_{p,ij}^* \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j}$  mesurée ou bien prédites par les modèles à l'instant  $t/\tau_{f0}^t = 1$  sont présentés (Fig. 6.10a). Les coefficients  $C_S$  et  $C'_S$  des modèles de Smagorinsky et mixtes sont déterminés en ajustant la moyenne de la dissipation des modèles sur la valeur exacte. La constante du modèle de similarité d'échelle est 1. Le terme  $T_{p,ij}^* \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j}$  est principalement négatif, mais présente quelques valeurs positives, qui ne peuvent pas être prises en compte par le modèle de Smagorinsky particulaire, et dont la probabilité est sous-estimée par les trois autres modèles. Le modèle de similarité ( $C_B = 1$ ) sous-estime la dissipation moyenne. La forme de la PDF pour  $T_{p,ij}^* \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j} < 0$  est correctement prédite par les modèles de Smagorinsky particulaire et fluide et par le modèle mixte.

Les moyennes conditionnées des quatre modèles de la partie déviatrice du tenseur de sous-maille sont calculées entre la valeur moyenne de la dissipation moins quatre fois la valeur RMS et plus 4 fois la valeur RMS (Fig. 6.10b). Les moyennes conditionnées du modèle de Smagorinsky exprimé avec les vitesses fluides filtrées sont faibles aussi bien pour les valeurs négatives du terme de dissipation que pour les valeurs positives. Le modèle de Smagorinsky particulaire sous-estime, en moyenne, les valeurs négatives du terme  $T_{p,ij}^* \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j}$ . Les valeurs positives ne peuvent pas être prédites par ce modèle. La corrélation des valeurs po-

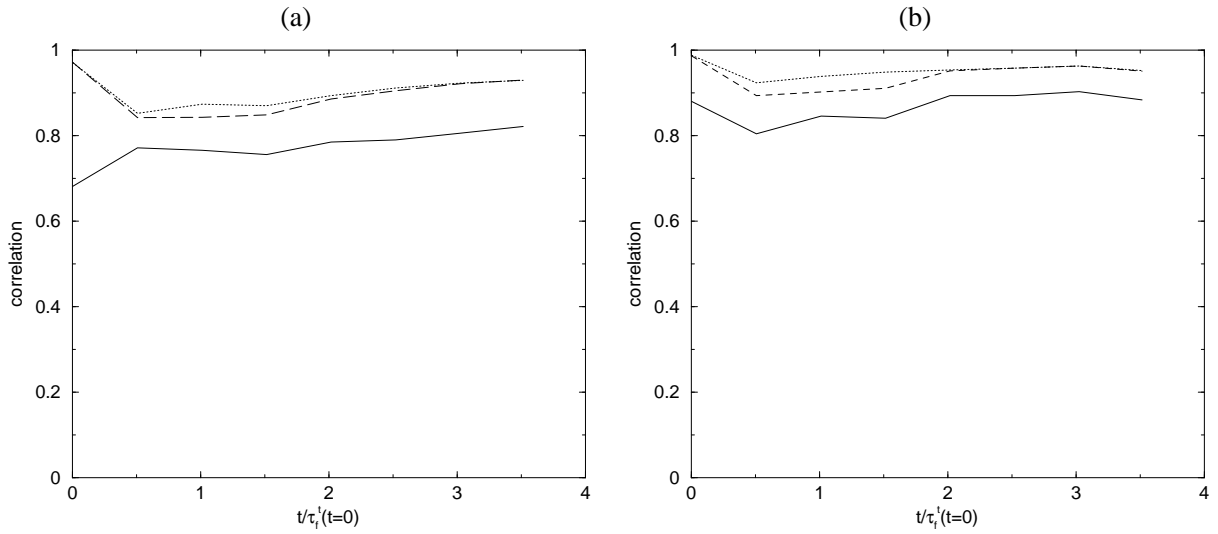


FIG. 6.11 – Evolution temporelle des coefficients de corrélation direct (a) et contracté (b) entre l'énergie de sous-maille  $q_{p,SGS}$  mesuré et les prédictions des modèles. modèle de viscosité (Yoshizawa) : ligne continue ; modèle de similarité : ligne pointillée ; modèle mixte : dashed line. Cas B3,  $\Delta_F = 4\Delta_P$ .

sitives est à peu près du même niveau que pour les valeurs négatives, sauf que le signe est faux. Ainsi, le modèle de Smagorinsky particulière prédit des valeurs fortement négatives, quand  $T_{p,ij}^* \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j}$  est fortement positif. Seul le modèle de similarité d'échelle est capable de prédire correctement les valeurs négatives. L'ajout du modèle de similarité au modèle de Smagorinsky dans le modèle mixte permet d'améliorer la prédiction des valeurs négatives comparativement au modèle de Smagorinsky seul. Les valeurs positives sont, elles aussi, mieux prédites puisqu'elles sont, en moyenne, quasiment nulles (et non plus négatives) : les modèles de similarité et de Smagorinsky se compensent aux endroits où  $T_{p,ij}^* \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j} > 0$ . Cela représente un gain par rapport au modèle de Smagorinsky, mais l'effet de type remontée d'énergie des petites échelles (en anglais : « backscatter effect ») n'est, en moyenne, pas prédit par le modèle mixte.

### Energie de sous-maille

Concernant l'énergie de sous-maille, les modèles de Yoshizawa, de similarité et mixte sont bien corrélés (coefficients  $> 0,8$ ) avec le terme exact aussi bien au niveau tensoriel ou direct ( $q_{p,SGS}$ , Fig. 6.11a) que scalaire ou contracté ( $q_{p,SGS} \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j}$ , Fig. 6.11b).

La forme de la PDF de dissipation est bien prédite par les quatre modèles (Fig. 6.12a). On peut seulement remarquer que le modèle de Yoshizawa surestime la proportion des faibles valeurs de  $q_{p,SGS}$ . Les moyennes conditionnées sont, elles aussi, bien prédites (Fig. 6.12a) jusqu'à  $q_{p,SGS}/\langle q_{p,SGS} \rangle_{\bar{p}} = 2$ . Les très grandes valeurs de l'énergie de sous-maille sont, légèrement, surestimées par (dans l'ordre croissant de l'erreur commise) les modèles mixtes et de Yoshizawa. Le modèle de similarité d'échelle prédit correctement les fortes valeurs de  $q_{p,SGS}$  en moyenne.

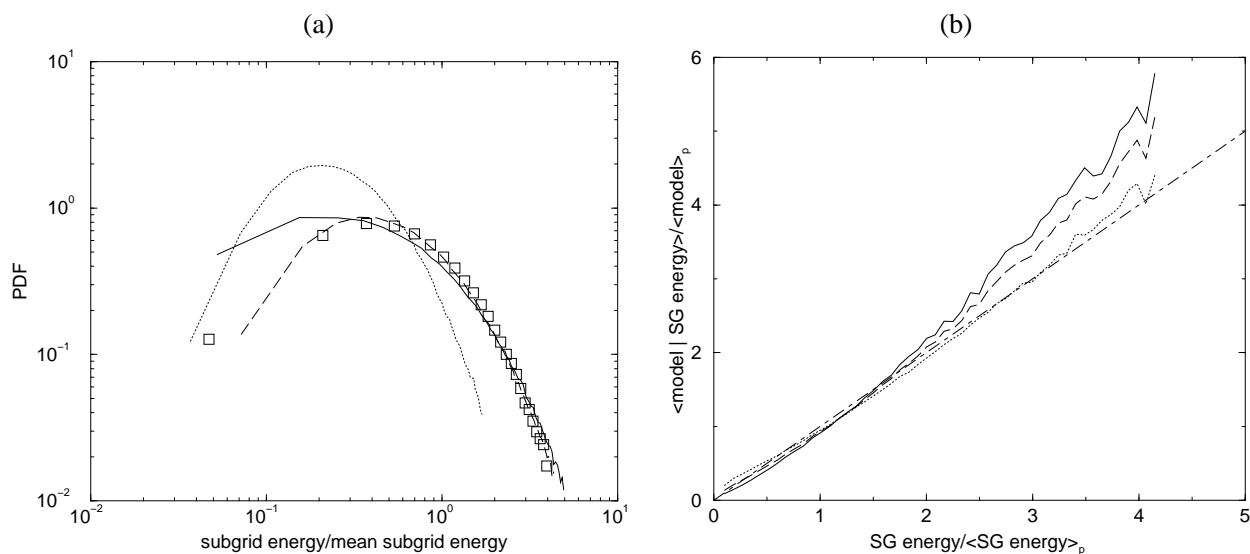


FIG. 6.12 – (a) PDF de l'énergie corrélée de sous-maille exacte (carrés) et prédiction des modèles ; (b) Moyennes de l'énergie corrélée de sous-maille prédite par les modèles conditionnées par la valeur locale mesurée. La ligne mixte représente la droite d'équation  $y = x$ . modèle de viscosité (Yoshizawa) : ligne continue ; modèle de similarité : ligne pointillée ; modèle mixte : dashed line. Cas B3,  $\Delta_F = 4\Delta_P$  à  $t/\tau_{f0}^t = 1$ .

### Détermination des constantes des modèles

Les valeurs des coefficients des modèles de Smagorinsky (resp. Yoshizawa) sont évaluées en ajustant la dissipation (resp. l'énergie) de sous-maille moyenne des modèles à la valeur mesurée (exacte). L'évolution temporelle des constantes est présentée (Fig. 6.13a : modèles de Smagorinsky particulière, fluide et compris dans le modèle mixte ; Fig. 6.13b : modèles de Yoshizawa des modèles de viscosité et mixte). Après l'initialisation, les coefficients de Smagorinsky augmentent puis se stabilisent. En effet à l'initialisation, les vitesses particulières corrélées sont égales à la vitesse fluide, le tenseur de sous-maille des particules est celui du fluide. Comme l'écoulement fluide est faiblement turbulent, la dissipation visqueuse fluide des grandes échelles n'est pas négligeable devant la dissipation de sous-maille et le coefficient de Smagorinsky ( $C_S = 0,11$ ) est plus faible que celui théoriquement déterminé en écoulement fluide pleinement turbulent à partir de la pente du spectre ( $C_S = 0,18$ , Lesieur et Métais (1996)). Ces coefficients varient peu, à l'exception du cas du modèle de Smagorinsky fluide. Aucune valeur n'est prescrite pour ce dernier modèle. Les valeurs moyennes des coefficients obtenues pour les différentes longueurs de filtre sont répertoriées dans le tableau 6.1.

Ainsi, la constante de Smagorinsky du modèle de viscosité vaut en moyenne (temporelle)  $C_S = 0,16$ . Cette valeur est très proche des valeurs standards dans le cas d'un écoulement monophasique : 0,2 ou 0,17 en THI (Deardorff (1971); Schumann (1991)), 0,13 pour une couche de mélange compressible (Vreman et al. (1996)) ou 0,1 en canal (Deardorff (1970)). Le coefficient du modèle de Yoshizawa, quant à lui, vaut ap-

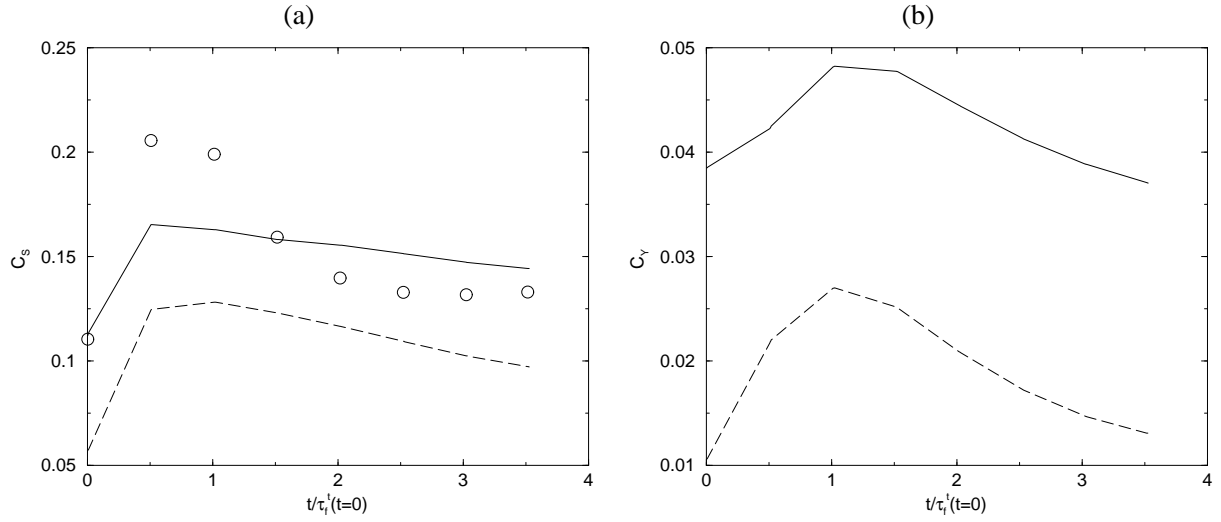


FIG. 6.13 – (a) Evolution temporelle des coefficients des modèles de  $T_{p,ij}^*$ . Modèle de viscosité : ligne continue ; modèle mixte : ligne tiretée ; modèle de viscosité vitesse fluide : cercles. (b) Evolution temporelle des coefficients des modèle de  $q_{p,SGS}$ . modèle de viscosité (Yoshizawa) : ligne continue ; modèle mixte : dashed line. Cas B3,  $\Delta_F = 4\Delta_P$ .

Modèle	Coefficient	$\Delta_F = 2\Delta_P$	$4\Delta_P$	$6\Delta_P$	$8\Delta_P$
Viscosité part.	$C_S$	0,19	0,16	0,16	0,15
	$C_Y$	0,055	0,043	0,053	0,053
Mixte	$C'_S$	0,13	0,12	0,13	0,12
	$C'_Y$	0,021	0,020	0,029	0,032

TAB. 6.1 – Evaluation des constantes moyennes (hors initialisation) des modèles de viscosité particulaire (éq. 6.4 et 6.6) et du modèle mixte (éq. 6.14) pour les différentes tailles du filtre. Cas B3.

proximativement 0,051. Cette valeur est en accord avec la proposition originelle de Yoshizawa ( $C_Y = 0.039$ ). Malgré ses coefficients de corrélation élevés, le modèle de similarité d'échelle (avec  $C_B = 1$ ) sous-estime la dissipation et l'énergie de sous-maille d'un facteur 2,2. Une valeur  $C_B \neq 1$  viole la propriété d'invariance galiléenne des équations des grandes échelles, c'est pourquoi le modèle de similarité d'échelle est écarté. Les valeurs des coefficients des parties Smagorinsky et Yoshizawa du modèle mixte sont  $C'_S = 0,12$  et  $C'_Y = 0,025$ .  $C'_S$  est proche de la valeur standard pour le fluide ( $C'_S = 0.092$ ), alors que  $C'_Y$  est supérieur d'un ordre de grandeur aux valeurs classiquement utilisées en écoulement fluide ( $0 \leq C'_Y \leq 0.0033$ , Ha et Zhu (1998)).

### Influence de l'inertie des particules

Dans le cas de particules lourdes, des modèles de type Smagorinsky ou mixte exprimés en fonction de la vitesses particulières corrélées filtrées des particules réussissent les tests a priori. Dans le cas de particules plus légères où  $k_c < k'_p$ , le champ de vitesse aux grandes échelles et le tenseur de sous-maille ressemblent à ceux du fluide. Les modèles proposés tendent alors vers les modèles de sous-maille fluide. Les coefficients des modèles particuliers devront, toutefois, être modifiés vers les valeurs standards des modèles monophasiques. Les coefficients de Smagorinsky calculés dans le cas des particules lourdes étant proches des valeurs standards, seuls les coefficients du modèles de Yoshizawa devront être ajustés, par exemple selon une procédure dynamique.

## 6.3 Diffusion de sous-maille de l'énergie décorrélée

On a vu dans les cas testés que la diffusion de sous-maille de l'énergie décorrélée filtrée  $-\frac{\partial \bar{n}_p Q_{p,j}}{\partial x_j}$  est du même ordre de grandeur que la diffusion par le mouvement décorrélé  $-\frac{\partial \bar{n}_p \widehat{\delta Q}_{p,j}}{\partial x_j}$  et doit être modélisée. Le terme des fluctuations énergie décorrélée-vitesses corrélées de sous-maille  $Q_{p,j}$  est  $\widehat{u_{p,j} \delta \theta_p} - \widehat{u_{p,j}} \widehat{\delta \theta_p}$ . Les modèles de sous-maille présentés sont dérivés de ceux classiquement utilisés en LES monophasique compressible pour le terme de diffusion de sous-maille de température.

### 6.3.1 Modèles

#### Diffusion d'échelle

Le modèle de diffusion a été introduit en écoulement monophasique compressible par Moin et al. (1991) (dans sa version dynamique). Le flux de sous-maille est alors modélisé par :

$$\bar{n}_p Q_{p,m} = -\bar{n}_p \frac{\nu_{p,SGS}}{Pr_{p,SGS}} \frac{\partial \widehat{\delta \theta}_p}{\partial x_m} \quad (6.15)$$

où la viscosité de sous-maille est donnée par le modèle de Smagorinsky et  $Pr_{p,SGS}$  est le nombre de Prandtl particulaire de sous-maille. La pertinence de l'inclusion de la divergence du champ de vitesse dans la

définition de  $\nu_{p,SGS}$  de ce modèle de diffusion (indépendamment de la modélisation du tenseur de sous-maille) est discuté par Vreman (1995) en écoulement monophasique compressible. En ce qui concerne l'approche particulière, les tests effectués ne montrent pas de différence notable pour les deux définitions possibles de la viscosité de sous-maille, si bien que les résultats des tests sont seulement présentés pour  $\nu_{p,SGS} = C_S \Delta_F^2 |\bar{S}_p^*|$  et  $C_S$  choisi pour obtenir la dissipation de sous-maille correcte.

### Similarité d'échelle

Ce modèle de type structurel est obtenu par analogie avec le modèle de Bardina pour le tenseur des contraintes de sous-maille.

$$\bar{n}_p Q_{p,m} = C'_B \bar{n}_p (\widehat{\hat{u}}_{p,m} \widehat{\hat{\delta\theta}}_p - \widehat{\hat{u}}_{p,m} \widehat{\hat{\delta\theta}}_p) \quad (6.16)$$

La constante  $C'_B$  doit théoriquement être égale à 1 pour ne pas violer la condition d'invariance galiléenne de l'équation de transport de l'énergie décorrélée filtrée.

### Modèle mixte

Un modèle mixte, proposé en turbulence compressible par Speziale et al. (1988), est la somme des modèles de diffusion et de similarité d'échelle :

$$\bar{n}_p Q_{p,m} = \bar{n}_p (\widehat{\hat{u}}_{p,m} \widehat{\hat{\delta\theta}}_p - \widehat{\hat{u}}_{p,m} \widehat{\hat{\delta\theta}}_p - \frac{\nu'_{p,SGS}}{Pr'_{p,SGS}} \frac{\partial \widehat{\hat{\delta\theta}}_p}{\partial x_m}) \quad (6.17)$$

### 6.3.2 Tests a priori

Les coefficients de corrélation des différents modèles sont à peu près constants dans le temps (Fig. 6.14). Le modèle de diffusion d'échelles présente la plus faible corrélation moyenne (0,5), l'ajout d'un modèle de similarité permet d'obtenir de meilleurs coefficients de corrélation (0,8) du même ordre que ceux du modèle de type Bardina seul (0,8 aussi).

La forme ainsi que la symétrie de la PDF du terme de diffusion de sous-maille sont correctement prédites par les trois modèles (Fig. 6.15a). Le modèle de similarité avec  $C'_B = 1$  sous-estime la fluctuation moyenne de  $-\frac{\partial \bar{n}_p \widehat{\hat{Q}}_{p,j}}{\partial x_j}$ . Les moyennes conditionnées montrent que l'ensemble des valeurs du terme de diffusion est en moyenne bien prédit par les modèles de similarité et mixte. Celles du modèle de diffusion d'échelle sont moins bonnes. Ces résultats sont en accord avec les résultats des tests a priori des modélisations du tenseur de sous-maille : les modèles mixtes donnent de meilleurs résultats que les modélisations purement fonctionnelles ou purement structurelles.

### Détermination des constantes des modèles

Les valeurs moyennes des nombres de Prandtl de sous-maille  $Pr_{p,SGS}$  et  $Pr'_{p,SGS}$  en fonction de  $\Delta_F$  sont regroupées dans le tableau 6.2.

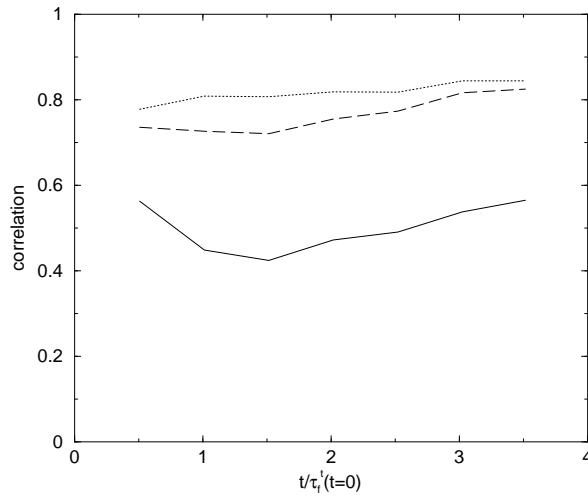


FIG. 6.14 – Coefficients de corrélation entre la diffusion de sous-maille de l'énergie décorrélée mesurée et les prédictions des modèles : Modèle de diffusion d'échelle : ligne continue ; modèle de similarité : ligne pointillée ; modèle mixte : ligne tiretée. La ligne mixte représente la droite d'équation  $y = x$ . Cas B3,  $\Delta_F = 4\Delta_P$ .

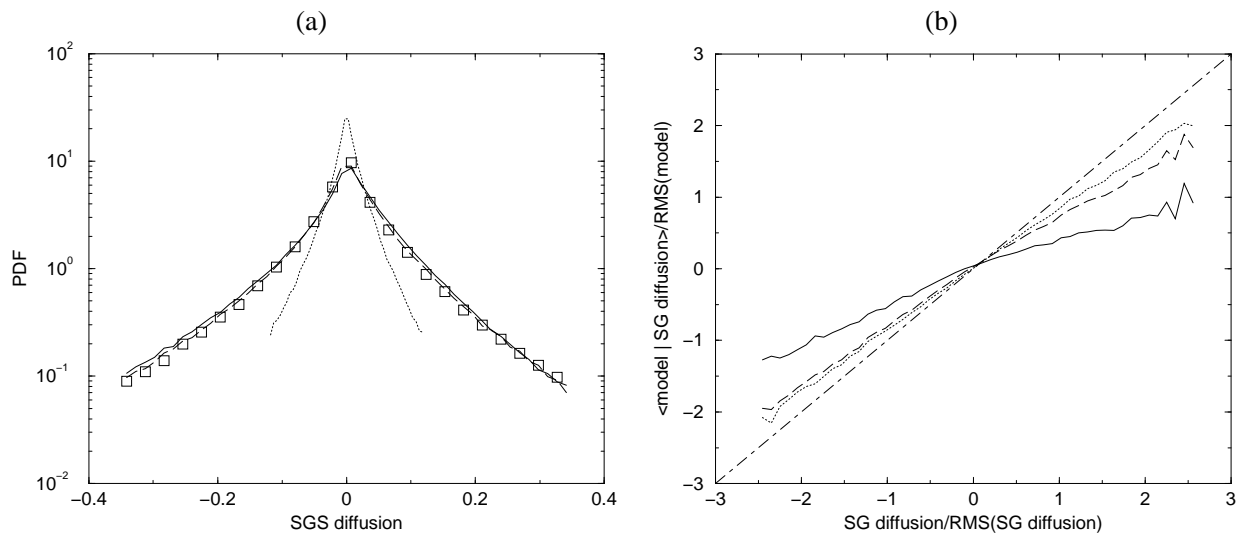


FIG. 6.15 – (a) PDF de la diffusion de sous-maille de l'énergie décorrélée mesurée (carrés) et prédiction des modèles ; (b) Moyenne de la diffusion de sous-maille de l'énergie décorrélée modélisée conditionnée par la mesure de la grandeur. La droite d'équation  $y = x$  est représentée avec un ligne mixte. Modèle de diffusion d'échelle : ligne continue ; modèle de similarité : ligne pointillée ; modèle mixte : ligne tiretée. Cas B3,  $\Delta_F = 4\Delta_P$  à  $t/\tau_{f0}^t = 1$ .



Modèle	Coefficient	$\Delta_F = 2\Delta_p$	$4\Delta_p$	$6\Delta_p$	$8\Delta_p$
Viscosité part.	$Pr_{p,SGS}$	0,67	0,78	0,86	0,91
Mixte	$Pr'_{p,SGS}$	1,4	1,4	1,3	1,3

TAB. 6.2 – Evaluation des constantes moyennes (hors initialisation) des modélisation du terme de diffusion de sous-maille : modèles de viscosité particulaire (éq. 6.15) et du modèle mixte (éq. 6.17) pour les différentes tailles du filtre.

La valeur de  $Pr_{p,SGS}$  du modèle de diffusion d'échelle est obtenue en ajustant la valeur RMS du modèle sur celle du terme mesuré. Pour  $\Delta_F = 2\Delta_p$ , le Prandtl moyen vaut 0,67. Sa valeur augmente légèrement avec la longueur de filtrage pour atteindre 0,91 quand  $\Delta_F = 8\Delta_p$ . Ces valeurs sont comparables à celles obtenus en écoulement fluide : la valeur la plus utilisée est 0,5, l'évaluation par la version dynamique de ce modèle donne les valeurs 0,4 ou 0,85 en THI (Moin et al. (1991)) ou  $\approx 1$  dans une couche de mélange compressible (Vreman (1995)). Dans le cas du modèle mixte de diffusion,  $Pr'_{p,SGS}$  est calculé de façon à obtenir le taux de fluctuation de la diffusion de sous-maille moins le terme de similarité d'échelle. La valeur du Prandtl de sous-maille du modèle mixte est plus élevée que celle du modèle de diffusion d'échelle ( $Pr'_{p,SGS} = 1,4$ ) et semble peu dépendante de la largeur du filtre. Cette valeur est supérieure à celle préconisée en écoulement monophasique compressible (0,5 en THI selon Speziale et al. (1988)), ce qui pourrait indiquer que la diffusion de sous-maille de la phase particulaire est moins grande que celle du fluide (la valeur du coefficient de Smagorinsky du modèle mixte étant proche de celle du modèle fluide).

## 6.4 Production de sous-maille de l'énergie décorrélée

La production de sous-maille d'énergie décorrélée est du même ordre de grandeur que la production par les grandes échelles (paragraphe 5.2.5). Le terme  $\Pi_p$  doit être modélisé.

### 6.4.1 Modèles

#### Similarité d'échelle

Un modèle de similarité d'échelle peut être exprimé à l'aide des corrélations du mouvement décorrélé filtré  $\widehat{\delta R}_{p,ij}$ .

$$\Pi_p = \widehat{\delta R_{p,ij} \hat{S}_{p,ij}} - \widehat{\delta R_{p,ij}} \widehat{\hat{S}_{p,ij}} \quad (6.18)$$

Un modèle analogue a été proposé par Martin et al. (2000) pour le terme de dissipation visqueuse de sous-maille dans l'équation de l'énergie totale du fluide en écoulement monophasique compressible.

### Equilibre local de l'énergie de sous-maille

En supposant que l'énergie de sous-maille est localement à l'équilibre (somme des termes de transport nulle),  $\Pi_p$  est reliée à la dissipation de sous-maille et à la traînée de sous-maille,

$$\Pi_p = T_{p,im} \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_m} + \frac{1}{\tau_p} (2q_{p,SGS} - q_{fp,SGS}) \quad (6.19)$$

Ce modèle peut être simplifié en supposant que la covariance fluide-particule de sous-maille est négligeable : ( $k_c > k_p^{tr}$ )

$$\Pi_p = T_{p,im} \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_m} + \frac{1}{\tau_p} (2q_{p,SGS}) \quad (6.20)$$

Cette hypothèse semble raisonnable si  $k_c > k_p^{tr}$ . La traînée de sous-maille apparaît alors comme un terme de production d'énergie décorrélée filtrée. Le terme de traînée de l'équation de quantité de mouvement étant local dans l'espace spectral, cette formulation pose problème. Pour y remédier, la totalité du terme de traînée peut être négligé, le modèle simplifié d'équilibre local (Riber et al. (2006b)) devient alors

$$\Pi_p = T_{p,im} \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_m} \quad (6.21)$$

Ce modèle revient à supposer que l'énergie corrélée aux grandes échelles est directement convertie en énergie décorrélée par la dissipation de sous-maille. Trois variantes du modèle d'équilibre local sont ainsi proposées.

### Modèles de type Ghosal

Par un raisonnement dimensionnel, le terme de production de sous-maille d'énergie décorrélée est évalué par :

$$\Pi_p = C \frac{q_{p,SGS}^{\frac{3}{2}}}{\Delta_F} \quad (6.22)$$

Ce modèle a historiquement été proposé pour modéliser ce même terme (mais de signe opposé) dans l'équation de transport de l'énergie de sous-maille (Ghosal et al. (1995)). L'énergie corrélée de sous-maille  $q_{p,SGS}$  nécessaire dans ce modèle peut être obtenue par un modèle de Yoshizawa ou par un modèle de similarité d'échelle (Vreman (1995); Martin et al. (2000); Lenormand et al. (2000)). La constante du modèle peut être évaluée en supposant un équilibre global (et non plus local) de l'énergie de sous-maille dans une direction d'homogénéité de l'écoulement (Vreman (1995)). La production moyenne par les échelles de sous-maille vaut alors l'opposé de la dissipation de l'énergie cinétique aux grandes échelles par le tenseur de sous-maille.

### 6.4.2 Tests a priori

Comme on l'a vu précédemment, trois approches différentes pour la modélisation du terme de production de sous-maille de l'énergie décorrélée filtrée sont envisagées. Le modèle de similarité d'échelle repose

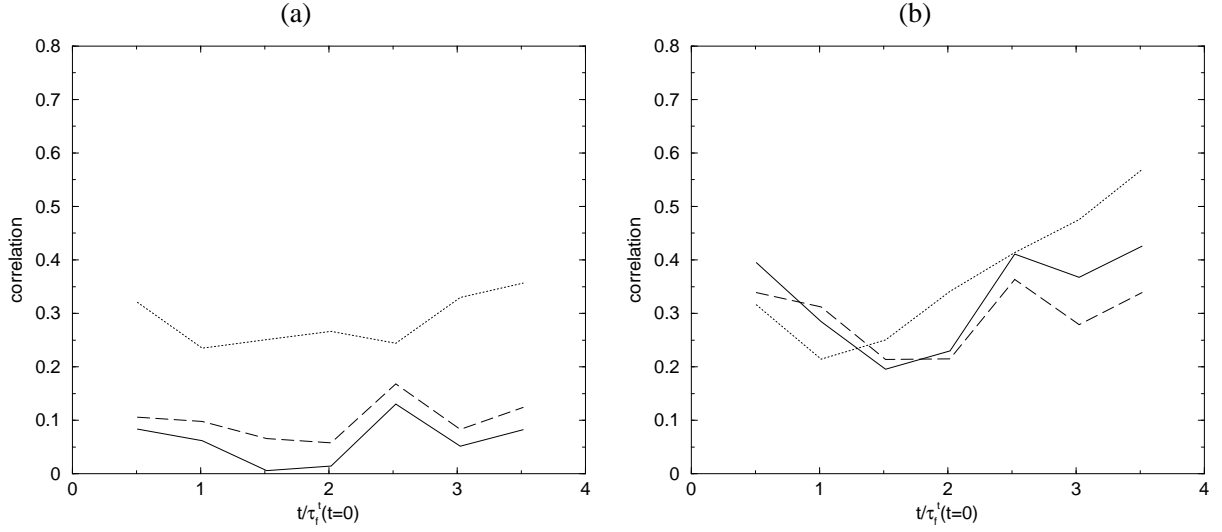


FIG. 6.16 – Coefficients de corrélation entre le champ mesuré de  $\Pi_p$  et les modèles calculés avec  $\widehat{\delta R}_{p,ij}$ ,  $T_{p,im}$ ,  $q_{fp,SGS}$  et  $q_{p,SGS}$  mesurés pour des tailles de filtre  $\Delta_F = 2\Delta_p$  (a) et  $\Delta_F = 6\Delta_p$  (b). Modèle à l'équilibre (éq. 6.19) : ligne continue ; Modèle de similarité d'échelle (éq. 6.18) : ligne pointillée ; Modèle de type Ghosal (éq. 6.22) : ligne tiretée.

sur le mouvement décorréolé alors que les modèles à l'équilibre dépendent des grandeurs de sous-maille du champ de vitesse corréolé et les modèles de type Ghosal seulement de l'énergie corréolé de sous-maille. Pour tester ces différentes approches, les corrélations sont calculées entre le terme mesuré et les termes obtenus suivant les équations (6.18), (6.19) et (6.22) où  $\widehat{\delta R}_{p,ij}$ ,  $T_{p,im}$ ,  $q_{fp,SGS}$  et  $q_{p,SGS}$  sont exacts (Fig. 6.16). Pour  $\Delta_F = 2\Delta_p$ , les coefficients de corrélation moyens sont de 0,06, 0,1 et 0,3 pour les modèles d'équilibre local, de Ghosal et de similarité. Ces coefficients augmentent avec la taille du filtre tout en restant faibles : 0,3, 0,3 et 0,4.

La probabilité d'obtenir des valeurs négatives de  $\Pi_p$  diminue quand la longueur de filtrage  $\Delta_F$  augmente (Fig. 6.16). La PDF de  $\Pi_p$  est quasiment symétrique autour de zéro pour  $\Delta_F = 2\Delta_p$  et se déporte vers les valeurs positives quand  $\Delta_F$  augmente. Cela peut expliquer l'amélioration (légère) de la corrélation des modèles d'équilibre et de type Ghosal quand  $\Delta_F$  augmente, le modèle de type Ghosal étant défini positif et le modèle d'équilibre présentant une probabilité marginale de valeurs négatives (Fig. 6.18a). Aucun des modèles ne parvient à reproduire la forme de la PDF de  $\Pi_p$  pour  $\Delta_F = 6\Delta_p$ . La PDF du modèle de similarité est quasiment symétrique autour de zéro, alors que  $\Pi_p$  est principalement positif. Les modèles d'équilibre locale et de Ghosal prédissent à peu près correctement la PDF des valeur positives de  $\Pi_p$ .

Les moyennes conditionnées des modèles (Fig. 6.18b) confirment la piètre performance des différentes modélisations. On peut toutefois noter que le modèle de similarité prédit correctement les valeurs négatives de  $\Pi_p$ .

On a vu au Chap. 5 que la moyenne de  $\Pi_p$  mesurée ne représente que 60% du  $\Pi_p$  exacte. On ne peut donc

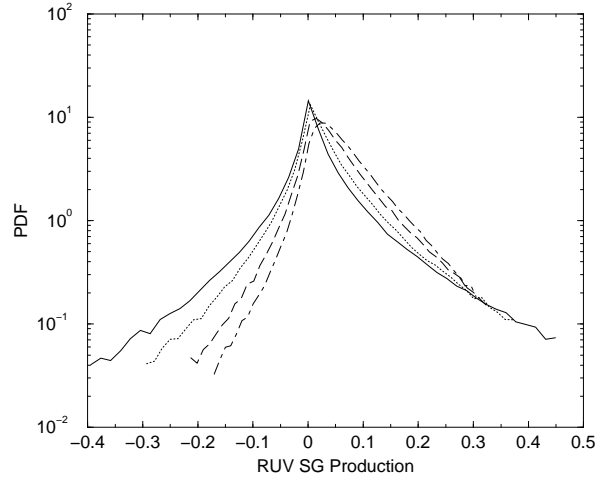


FIG. 6.17 – PDF de production par RUV de sous-maille d'énergie décorrélée filtrée mesurée RUV pour différentes longueurs de filtrage.  $\Delta_F = 2\Delta_P$  : ligne continue ;  $\Delta_F = 4\Delta_P$  : ligne pointillée ;  $\Delta_F = 6\Delta_P$  : ligne tiretée ;  $\Delta_F = 8\Delta_P$  : ligne mixte. Cas B3 à  $t/\tau_{f0}^t = 1$

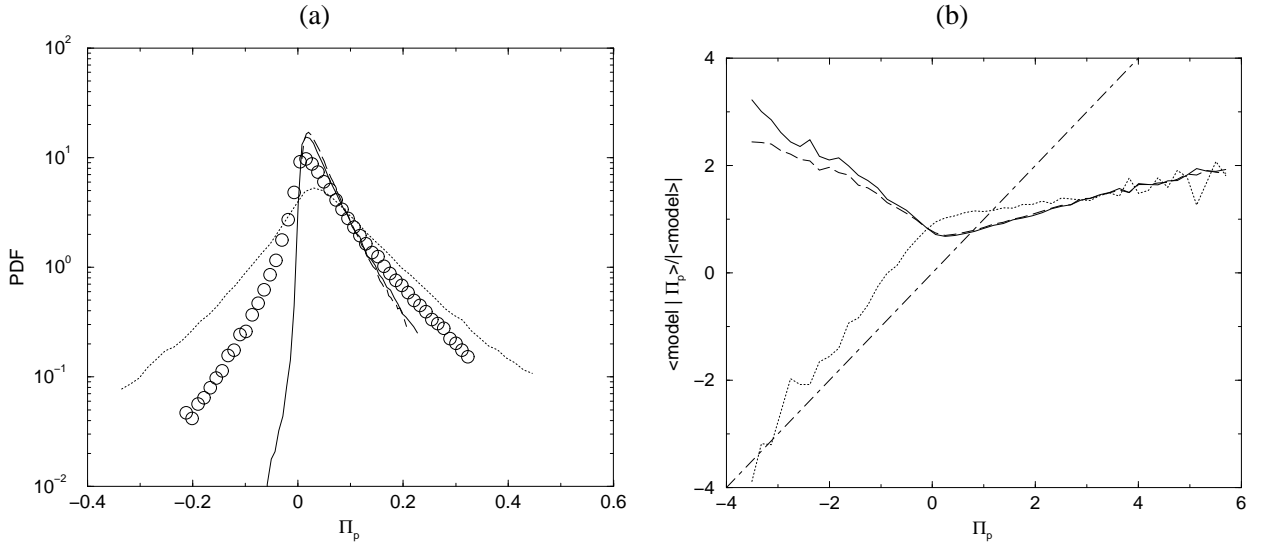


FIG. 6.18 – (a) PDF de la production de sous-maille de l'énergie décorrélée  $\Pi_p$  mesurée (cercles) et prédiction des modèles ; (b) Moyenne de la production de sous-maille de l'énergie décorrélée  $\Pi_p$  modélisée, conditionnée par la mesure de la grandeur. La ligne mixte représente la droite d'équation  $y = x$ . Modèle à l'équilibre (éq. 6.19) : ligne continue ; Modèle de similarité d'échelle (éq. 6.18) : ligne pointillée ; Modèle de type Ghosal (éq. 6.22) : ligne tiretée. Cas B3,  $\Delta_F = 6\Delta_P$  à  $t/\tau_{f0}^t = 1$ .

pas être conclusif quant à la performance des modèles testés. On peut toutefois retenir que les modèles d'équilibre local et de Ghosal donnent des résultats équivalents.

équation	terme	modèle	corr. tens.	corr. scalaire	PDF	moy. cond.	constante	
$\widehat{u}_{p,i}$	$\widehat{\delta R}_{p,ij}^*$	équilibre	-	+	=	=	=	
		$T_{p,ij}^*$	viscosité	-	+	=	-	+
		viscosité fluide	-	-	+	-	-	
		similarité	+	+	+	+	-	
		mixte	+	+	=	=	+	
	$q_{p,SGS}$	viscosité	+	+	=	=	+	
		similarité	+	+	+	+	-	
		mixte	+	+	+	+	=	
	$\widehat{\delta\theta}_p$	$\widehat{\delta Q}_{p,j}$	équilibre		-	-	-	-
			$Q_{p,j}$	viscosité		=	+	=
similarité				+	+	+	-	
mixte				+	+	+	+	
$\Pi_p$		similarité		= ?	- ?	= ?		
		équilibre locale		= ?	= ?	- ?		
		Ghosal		= ?	= ?	- ?		

TAB. 6.3 – Tableau récapitulatif des performances des différents modèles. Accord bon : +, moyen : =, mauvais : -. La colonne « constante » correspond à la possibilité de prescrire un coefficient moyen au modèle permettant de correctement prédire les quantités moyennes ou RMS par ce modèle (aucune possibilité d'ajustement de coefficient n'existe pour les modèles de similarité d'échelle). Le caractère « ? » indique la présence d'un doute quant à la validité de la mesure du terme et, par conséquent, d'un doute sur la pertinence des résultats des tests a priori réalisés.

## 6.5 Conclusion du chapitre

Des modélisations des différents termes inconnus dans les équations mésoscopiques aux grandes échelles ont été proposées. Des tests a priori de ces modèles ont été effectués dans le cas où le nombre d'onde de coupure du filtre LES est supérieur au nombre d'onde de transition entre les zones dominées par la force de traînée ou par la dissipation RUV.

Le tableau 6.3 présente un récapitulatif des performances des différents modèles aux tests a priori. Les modèles de viscosité RUV pour le tenseur  $\widehat{\delta R}_{p,ij}^*$  du mouvement décorrélé et les modèles de Smagorinsky particuliers ou mixtes pour les contraintes de sous-maille permettent de fermer correctement l'équation de la quantité de mouvement des grandes échelles. Sur les trois termes à modéliser dans l'équation de l'énergie

décorrélée filtrée, seule la diffusion de sous-maille est correctement modélisée (par un modèle de diffusion d'échelle ou mixte). Les prédictions de la production de sous-maille et de la diffusion par les corrélations triples du mouvement décorrélé restent des questions ouvertes.

# Conclusion et perspectives

Une nouvelle approche eulérienne aux grandes échelles pour simuler un nuage de particules inertielles soumis à une turbulence fluide a été présentée. Elle est basée sur le formalisme eulérien mésoscopique (Février et al. (2005)) qui permet de décomposer la vitesse de chaque particule en une partie corrélée spatialement et une partie décorrélée. La dérivation des équations LES particulaires comprend deux étapes : une moyenne d'ensemble conditionnée par une réalisation du champ fluide turbulent est suivie d'un filtrage spatial LES classique des équations de transport. En conséquence, les termes à modéliser sont de deux sortes : ceux provenant de la moyenne d'ensemble sont modélisés par analogie avec les fermetures de type RANS de la méthode aux moments, alors que l'effet des termes de sous-maille est prédit par des modèles similaires à ceux employés en turbulence monophasique compressible.

Pour valider ces modélisations, des simulations Euler-Lagrange (DNS/DPS) comportant plusieurs dizaines de millions de particules ont été réalisées en turbulence homogène isotrope décroissante. Les collisions inter-particulaires et le couplage inverse ne sont pas pris en compte dans cette étude. Les sept cas de simulation effectués ont permis d'évaluer l'influence de différents paramètres : le nombre de particules, le Reynolds turbulent, l'inertie des particules ainsi que l'initialisation du champ de vitesse particulaire.

En l'absence de couplage inverse et de collisions, les particules ignorent l'existence de leurs pairs, si bien que simuler une réalisation particulaire comportant un grand nombre de particules est strictement équivalent à simuler un grand nombre de réalisations du champ particulaire comportant un nombre plus faible de particules. Les champs eulériens mésoscopiques (obtenus théoriquement par moyenne d'ensemble conditionnée) sont mesurés à partir des résultats lagrangiens par une procédure de projection équivalente à un filtrage volumique. Cette transformation occasionne deux types d'erreurs : un biais statistique dû au nombre limité de particules par cellule du maillage eulérien de projection et une erreur spatiale intrinsèque à chaque projecteur. Une projection gaussienne tronquée est utilisée pour limiter ces deux types d'erreur et est validée sur des cas synthétiques monodimensionnels et sur des cas réels en trois dimensions. L'ensemble de la chaîne de mesure des grandeurs mésoscopiques est elle aussi validée.

L'analyse des spectres de puissance des vitesses corrélées a permis de distinguer deux zones dans ces spectres. Les (très) grandes échelles sont dominées par les interactions avec la turbulence fluide alors qu'à plus petite échelle les effets de compressibilité et de dissipation par le mouvement décorrélé des particules conduisent à une décroissance du spectre en  $k^{-2}$ . La limite entre ces deux régimes dépend de l'inertie des particules : des particules lourdes sont moins influencées par la turbulence. Le niveau du spectre aux

plus grandes échelles diminue quand l'inertie augmente. Les modélisations proposées par Simonin et al. (2002) et Kaufmann et al. (2006b) des termes dus au mouvement particulaire décorrélé ont été testées a priori. L'approche à cinq équations de transport sur la densité numérique de particules, la vitesse corrélée et l'énergie décorrélée semble convenir.

Les champs mésoscopiques sont filtrés et analysés. Schématiquement, l'énergie particulaire corrélée à grande échelle est produite par la force de traînée, et dissipée en énergie décorrélée sous l'effet des échelles de sous-maille et du mouvement décorrélé. L'énergie décorrélée filtrée est enfin détruite par la traînée. L'importance des différents termes des équations des grandes échelles sont évalués : relativement aux termes de sous-maille, l'importance des termes dus au mouvement décorrélé (énergie, dissipation, diffusion) augmente avec l'inertie des particules, mais les termes de sous-maille ou du mouvement décorrélé restent du même ordre dans les cas simulés.

Des modèles de types viscosité d'échelle, similarité d'échelles et mixte sont proposés pour le tenseur des contraintes de sous-maille. Les résultats des tests a priori de ces modèles sont comparables à ceux obtenus en écoulement monophasique compressible : le modèle de Smagorinsky montre les plus faibles coefficients de corrélation direct, mais des corrélations correctes au niveau contracté ; le modèle de similarité, malgré de bons coefficients de corrélations n'est pas capable de prédire la bonne dissipation ; le modèle mixte est sur tous les points meilleur que le simple modèle de Smagorinsky. De plus, les constantes des modèles de Smagorinsky et mixtes sont proches des valeurs standards utilisées en écoulement monophasique. Par contre, les constantes des modèles de Yoshizawa utilisés pour prédire l'énergie de sous-maille sont largement supérieures aux valeurs standards. En ce qui concerne l'équation d'énergie décorrélée filtrée, le terme de diffusion de sous-maille est correctement prédit par les modèles de diffusion d'échelle ou mixte. La modélisation correcte des termes de production de sous-maille et de diffusion par les contraintes triples du mouvement décorrélé restent des questions ouvertes.

Ce travail s'inscrit dans la dynamique du développement des approches Euler-Euler LES au sein des groupes IMFT-EEC et CERFACS-CFD. Ce développement s'effectue sur deux fronts : l'analyse a priori des champs mésoscopiques obtenus par post-traitement de résultats de simulation lagrangienne dont un des buts est la proposition de modèles et la simulation numérique Euler-Euler « directe » ou des grandes échelles. La méthode de mesure des champs mésoscopiques à partir de résultats lagrangiens va être utilisée en THI forcée pour étudier l'influence des conditions initiales sur la forme des spectres des vitesses particulaires corrélées ainsi que, à terme, l'effet des collisions sur les grandeurs mésoscopiques (P. Fede). La prise en compte du couplage inverse par le formalisme eulérien utilisé fait l'objet d'une thèse ministérielle (E. Massi Boscolo). Les modèles de viscosité (modèles de type Smagorinsky et Yoshizawa) ont été implantés dans le code de simulation numérique Euler-Euler AVBP dans le cadre de la thèse de E. Riber. Une validation a posteriori de ces modèles est en cours dans des configurations plus complexes : jet confiné (Riber et al. (2005, 2006b)) et écoulement recirculant (Riber et al. (2006a)). Les simulations Euler-Euler aux grandes échelles où les effets du mouvement décorrélé sont négligés, permettent de prédire correctement les flux moyens de masse et de quantité de mouvement particulaire, mais l'agitation totale (dont une partie est décorrélée) est sous-



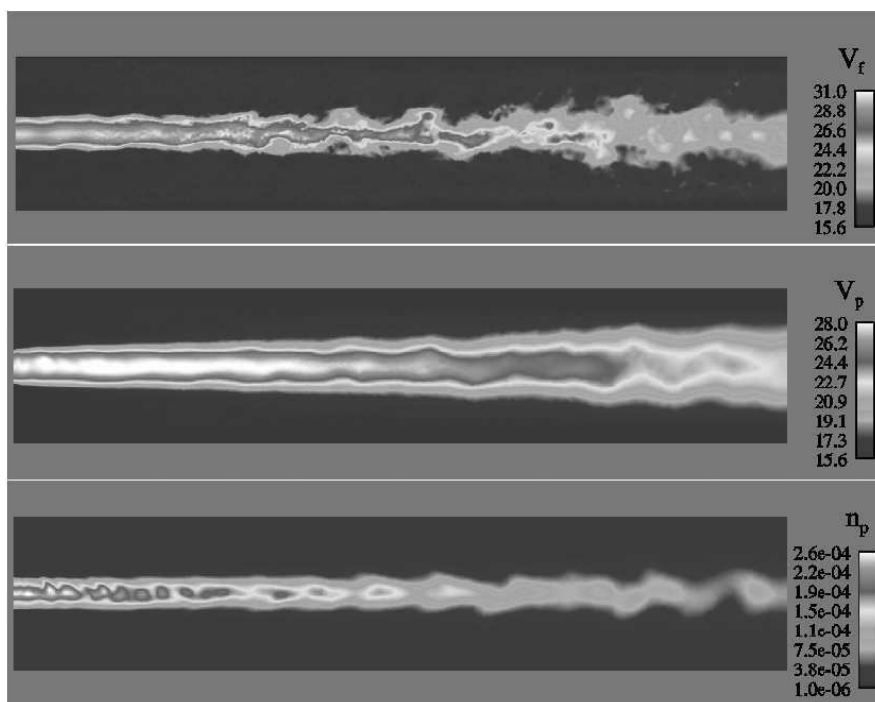


FIG. 6.19 – Champs instantanés de vitesse fluide (haut) et particulaire corrélée (milieu) dans la direction du jet et de la fraction volumique de particules (bas). Figure tirée de la présentation Moreau, Riber, Bedat et Simonin pour la conférence Euromech 2006 à Stockholm. Cas du jet confiné (Riber et al. (2005, 2006b)).

estimée dans le cas du jet confiné (Riber et al. (2006b)). On doit toutefois noter qu'il existe des fluctuations de vitesse corrélée et de densité numérique de particules dans les simulations réalisés (Fig. 6.19). L'évaluation de l'énergie décorrélée par la corrélation de Vance et al. (2006) à partir des résultats de simulation Euler-Euler permet d'obtenir des niveaux agitation particulaire en accord avec les mesures expérimentales. Des tests préliminaires en incorporant la dissipation du mouvement décorrélé (valeur standard des différents coefficients) ainsi que la résolution de l'équation de transport supplémentaire sur l'énergie décorrélée filtrée conduit à une « relaminarisation » de l'écoulement particulaire. Plusieurs causes possibles sont actuellement à l'étude : la valeur trop élevée du coefficient de viscosité par le mouvement décorrélé (voire la forme même du modèle) ou bien le comportement pathologique du modèle de Smagorinsky à coefficient constant qui dissipe trop dans le cas de tels écoulements présentant des gradients moyens de vitesse. Des modèles de sous-maille de type hyper-viscosité (Sagaut et Levasseur (2005) en THI monophasique) pour la phase particulaire sont en cours de développement.



# Bibliographie

- A. Albrecht. *Etude numérique des transferts dynamiques et thermiques au sein d'un mélange turbulent gaz-goutte-particule : application à la zone d'injection de charge d'un réacteur à lit fluidisé de FCC*. PhD thesis, INP Toulouse, 2001.
- A. B. Basset. *Treatise on Hydrodynamics*, volume 2. Deighton Bell, London, 1888.
- F. Bataille and Y. Zhou. Nature of energy transfert process in compressible turbulence. *Physical Review E*, 59(5) :5417–5426, 1999.
- J. Bec. Multifractal concentrations of inertial particles in smooth random flows. *J. Fluid Mech.*, 528 : 255–277, 2005.
- A. Berlemont, O. Simonin, and M. Sommerfeld. Validation of inter-particle collision models based on large eddy simulation. In *Gas-Solid Flows*. ASME FED, 1995.
- Bertoglio, F. Bataille, and J-D Marion. Two-point closures for weakly compressible turbulence. *Phys. fluids*, 13(1) :290–310, 2001.
- G. A. Bird. *Molecular Gas Dynamics*. Clarendon Press, Oxford, 1976.
- G. Boffeta and F. De Lillo. Large scale inhomogeneity of inertial particles in turbulent flows. *Phys. Fluids*, 16(4) :L20, 2004.
- M. Boivin, O. Simonin, and K. D. Squires. Direct numerical simulation of turbulence modulation by particles in isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.*, 375 :235–263, 1998.
- M. Boivin, O. Simonin, and K. D. Squires. On the prediction of gas-solid flows with two-way coupling using large eddy simulation. *Phys. Fluids*, 12 :2080–2090, 2000.
- H. Boughanem and A. Trouvé. *Validation du code de simulation directe ntmix3d pour le calcul des écoulements turbulents réactifs*. Technical Report 42907, Institut Français du Pétrole, 1996.
- J. Boussinesq. *Sur la résistance qu'oppose un liquide indéfini en repos...* Comptes Rendus, Acad. Sci., Paris, 1885.

- P. Chassaing. *Turbulence en mécanique des fluides*. collection POLYTECH, cepadues-editions edition, 2000.
- R. A. Clark, J. H. Ferziger, and W. C. Reynolds. Evaluation of subgrid-scale models using an accurately simulated turbulent flow. *J. Fluid Mech.*, 91 :1–16, 1979.
- R. Clift, J.R. Grace, and M.E. Weber. *Bubbles, drops and particles*. Academic Press, 1978.
- L. Collins and A. Keswani. Reynolds number scaling of particle clustering in turbulent aerosols. *New J. Phys.*, 6 :119, 2004.
- G. Comte-Bellot and S. Corrsin. Grid turbulence. *J. Fluid Mech.*, 25 :657, 1966.
- G. Comte-Bellot and S. Corrsin. Simple eulerian time correlation of full- and narrow-band velocity signal in grid generated 'isotropic' turbulence. *J. Fluid Mech.*, 48 :273–337, 1971.
- A. Dauplain, B. Cuenot, and T. J. Poinso. Large eddy simulation of a supersonic hydrogen-air diffusion flame. In *Complex Effects in Large Eddy Simulation*. Limassol, 2005.
- J. W. Deardorff. A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large reynolds numbers. *J. Fluid Mech.*, 41 :453–480, 1970.
- J. W. Deardorff. On the magnitude of the subgrid scale eddy viscosity coefficient. *J. Comput. Phys.*, 7 : 120–133, 1971.
- E. Deutsch. *Dispersion de particules dans une turbulence homogène isotrope calculée par simulation numérique directe des grandes échelles*. PhD thesis, Ecole Centrale de Lyon, 1992.
- E. Deutsch and O. Simonin. Large eddy simulation applied to the motion of particles in stationary homogeneous fluid turbulence. In *Turbulence modification in Multiphase flow*. ASME FED, 1991.
- O.A. Druzhinin. On the 2-way interaction in 2-dimensional particle-laden flows - the accumulation of particles and flow modification. *J. Fluid Mech.*, 297 :49–76, 1995.
- O.A. Druzhinin and S. Elghobashi. Direct numerical simulations bubble-laden turbulent flows using the two-fluid formulation. *Phys. Fluids*, 10 :685–697, 1998.
- O.A. Druzhinin and S. Elghobashi. On the decay rate of isotropic turbulence laden with microparticles. *Phys. Fluids*, 11(3) :602–610, 1999.
- S. Elghobashi and G. C. Truesdell. On the two-way interaction between homogeneous turbulence and dispersed solid particles. i : Turbulence modification. *Phys. Fluids A*, 5 :1790–1801, 1993.
- S. Elghobashi and G.C. Truesdell. Direct simulation of particle dispersion in a decaying isotropic turbulence. *J. of Fluid Mech*, 242 :655–700, 1992.

- G. Erlebacher, M. Y. Hussaini, H. O. Kreiss, and S. Sarkar. The analysis and simulation of compressible turbulence. *Theoret. Comput. Fluid Dynamics*, 2 :73–95, 1990.
- G. Erlebacher, M. Y. Hussaini, C. G. Speziale, and T. A. Zang. Toward the large-eddy simulation of compressible flows. *J. Fluid Mech.*, 238 :155–185, 1992.
- P. Fede. *Modélisation et simulation de l'influence de la turbulence sur les collisions dans les écoulements mono- et bi-solides*. PhD thesis, INP Toulouse, 2004.
- P. Fede and O. Simonin. Numerical study of the subgrid fluid turbulence effects on the statistics of heavy colliding particles. *Phys. Fluids*, 18 :045103, 2006.
- P. Fede, O. Simonin, and P. Villedieu. Monte carlo simulation of colliding particles in gas-solid turbulent flows from a joint fluid-particle pdf equation. In *5th Symp. on Numerical Methods for Multiphase Flows*. ASME FED, 2002.
- P. Fede, O. Simonin, and P. Villedieu. Stochastic modeling of the subgrid fluid velocity fluctuation seen by inertial particles. In *CTR Summer Program Stanford*, 2006.
- A. Ferrante and S. Elghobashi. On the physical mechanisms of two-way coupling in particle-laden isotropic turbulence. *Phys. Fluids*, 15(2) :315–329, 2003.
- J. Ferry and S. Balachandar. A fast eulerian method for disperse two-phase flow. *Int. J. Multiphase Flow*, 27 :1199–1226, 2001.
- P. Février. *Etude numérique des effets de concentration préférentiels et de corrélation spatiale entre vitesse de particules solides en turbulence homogène isotrope stationnaire*. PhD thesis, INP Toulouse, 2000.
- P. Février, O. Simonin, and D. Legendre. Particle dispersion and preferential concentration dependence on turbulent reynolds number from direct and large-eddy simulations of isotropic homogeneous turbulence. In *4th Int. Conference on Multiphase Flows*. ICMF, 2002.
- P. Février, O. Simonin, and K. D. Squires. Partitioning of particle velocities in gas-solid turbulent flows into a continuous field and a spatially uncorrelated random distribution : theoretical formalism and numerical study. *J. Fluid Mech.*, 533 :1–46, 2005.
- J. D. Fournier and U. Frisch. L'équation de burgers déterministe et statistique. *J. Mech. Th. Appl.*, 2(5) : 699–750, 1983.
- R. Gatignol. The faxen formulae for a rigid particle in an unsteady non uniform stokes flow. *J. Mec. Th. & Appl.*, 9 :143–160, 1983.
- T. B. Gatski and C. G. Speziale. On explicit algebraic stress models for complex turbulent flows. *J. Fluid Mech.*, 254 :59–78, 1993.

- M. Germano. Differential filters for the large eddy numerical simulation of turbulent flows. *Phys. Fluids*, 29 :1755–1757, 1986.
- M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W. H. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. Fluids A*, 3 :1760–1765, 1991.
- S. Ghosal, T. S. Lund, P. Moin, and K. Akselvoll. A dynamic localization model for large eddy simulation. *J. Fluid Mech.*, 286 :229–255, 1995.
- H. Grad. On the kinetic theory of rarefied gases. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 2(4) : 331–407, 1939.
- J. R. Graham. *Astronomy 202 : Astrophysical Gas Dynamics*. Astronomy Department UC, Berkeley, <http://grus.berkeley.edu/jrg/ay202/lectures.html> edition, 2002.
- J. Ha and Z. Zhu. Computation of turbulent reactive flows in industrial burners. *Applied Mathematical Modelling*, 22 :1059–1070, 1998.
- K. Hanjalic and B.E. Launder. A reynolds stress model of turbulence and its application to thin shear flows. *J. Fluid Mech.*, 52 :609–638, 1972.
- D. C. Haworth and S. B. Pope. A generalized Langevin model for turbulent flows. *Phys. Fluids*, 2 :738–744, 1986.
- J. O. Hinze. *Turbulence*. McGraw-Hill, 1975.
- K. Horiuti. The role of the Bardina model in large eddy simulation of turbulent channel flow. *Phys. Fluids A*, 1(2) :426–428, 1989.
- L. Howarth and T. Karman. On the statistical theory of isotropic turbulence. *Proc. of the Roy. Soc. Gottingen Nachrichte*, A164(917) :192–215, 1938.
- J.T. Jenkins and M.W. Richman. Grad’s 13-moments system for dense gas of inelastic spheres. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 87 :355–377, 1985.
- A. Kaufmann. *Vers la simulation des grandes echelles en formulation Euler-Euler des écoulements réactifs diphasiques*. PhD thesis, INP Toulouse, 2004.
- A. Kaufmann, O. Simonin, T. Poinso, and J. Helie. Dynamics and dispersion in eulerian-eulerian DNS of two-phase flows. In *Proceedings of the Summer Program 2002*. Center for Turbulence Research, 2002.
- A. Kaufmann, J. Helie, O. Simonin, and T. Poinso. Comparison between lagrangian and eulerian particle simulations coupled with dns of homogeneous isotropic decaying turbulence. *Proceedings of the Estonian Academy of Sciences*, 11 :91–105, 2006a.

- A. Kaufmann, M. Moreau, J. Helie, and O. Simonin. Comparison between lagrangian and mesoscopic eulerian approaches for inertial particle ensemble suspended in decaying isotropic turbulence. *submitted to J. Comput. Phys.*, 2006b.
- D. A. Khalitov and E. K. Longmire. Effect of particle size on velocity correlations in turbulent channel flow. In *FEDSM03*. ASME FED, 2003.
- S. Kida and S. A. Orszag. Energy and spectral dynamics in forced compressible turbulence. *J. Sci. Comp.*, 5(2) :85–125, 1990.
- I. Kim, S. Elghobashi, and W.A. Sirignano. On the equation for spherical-particle motion : Effect of reynolds and acceleration numbers. *J. Fluid Mech.*, 367 :221–253, 1998.
- A.N. Kolmogorov. Local structure of turbulence in an incompressible fluid at very high reynolds number. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 30 :299–303, 1941.
- N. A. Konan, O. Simonin, and K. D. Squires. Rough wall boundary condition derivation for particle continuum equations : validation from les/dps of gas-solid turbulent channel flow. In *FEDSM2006 ASME Joint U.S.-European Fluids Engineering Summer Meeting, July 17-20, Miami, Floride, USA*. ASME FED, 2006.
- J. Laviéville. *Simulations numérique des interactions entre l'entraînement par la turbulence et les collisions interparticulaires en écoulements gaz-solide*. PhD thesis, Université de Rouen, 1997.
- C. Le Ribault, S. Sarkar, and S. A. Stanley. Large eddy simulation of a plane jet. *Phys. of Fluids*, 11(10) : 3069–3083, 1999.
- S. Lele. Compact finite difference schemes with spectral like resolution. *J. Comput. Phys.*, 103 :16–42, 1992.
- E. Lenormand, P. Sagaut, and L. Ta Phuoc. Large eddy simulation of subsonic and supersonic channel flow at moderate reynolds number. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 32 :369–406, 2000.
- M. Lesieur and O. Métais. New trends in large eddy simulation of turbulence. *Annu. Rev. Fluid. Mech.*, 28 : 45–82, 1996.
- D. K. Lilly. A proposed redefinition of the Germano subgrid-scale closure method. *Phys. Fluids A*, 4 : 633–635, 1992.
- M. P. Martin, U. Piomelli, and G. V. Candler. Subgrid-scale models for compressible large eddy simulations. *Theoret. Comput. Fluid Dynamics*, 13 :361–376, 2000.
- M. R. Maxey. The gravitational settling of aerosol particles in homogeneous turbulence and random flow fields. *J. Fluid Mech.*, 174 :441–465, 1987.

- M. R. Maxey and J. J. Riley. Equation of motion for a small rigid sphere in a non uniform flow. *Phys. of Fluids*, 26 :2883–2889, 1983.
- C. Meneveau and J. Katz. Scale-invariance and turbulence models for large eddy simulation. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 32 :1–32, 2000.
- R. S. Miller and J. Bellan. Direct numerical simulation of a confined three-dimensional gas mixing layer with one evaporating hydrocarbon droplet laden stream. *J. Fluid Mech.*, 384 :293, 1999.
- P. Moin, K. Squires, W. Cabot, and S. Lee. A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport. *Phys. Fluids A*, 3 :2746–2757, 1991.
- J. Moreau, M. Fogleman, G. Charnay, and J. Borée. Phase invariant proper orthogonal decomposition for the study of a compressed vortex. *Journal of Thermal Science*, 14 (2) :108–113, 2005a.
- M. Moreau, P. Fede, O. Simonin, and P. Villedieu. Monte carlo simulation of colliding particles in gas-solid homogeneous turbulent shear flows. In *4th ASME-JSME Joint Fluids Engineering Conference*. ASME FED, 2003.
- M. Moreau, P. Fede, O. Simonin, and P. Villedieu. Stochastic lagrangian modelling and monte carlo simulation of collisions in gas-solid homogeneous turbulent shear flows. In *5th International Conference on Multiphase Flow*. ICMF, 2004.
- M. Moreau, B. Bedat, and O. Simonin. From euler-lagrange to euler-euler large eddy simulation approaches for gas-particle turbulent flows. In *INCA Workshop*, 2005b.
- M. Moreau, B. Bedat, and O. Simonin. A priori testing of subgrid stress models for Euler-Euler two-phase LES from Euler-Lagrange simulations of gas-particle turbulent flow. In *18th Ann. Conf. on Liquid Atomization and Spray Systems*. ILASS Americas, 2005c.
- F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient. *Flow Turb. and Combustion*, 62 (3) :183–200, 1999.
- R. S. Oey. *Gas-liquid flows in a Two-Fluid formalism, Modelling and validation of closure relations*. PhD thesis, Technische Universiteit Delft, Neaderland, 2005.
- C. W. Oseen. *Neure Methoden und Ergebnisse in der Hydrodynamik*. Akademische Verlag, Leipzig, 1927.
- R. V. R. Pandya and F. Mashayek. Two-fluid large-eddy simulation approach for particle-laden turbulent flows. *Int. J. of Heat and Mass Transfert*, 45 :4753–4759, 2002.
- R. Paoli, J. Hélie, and T. Poinso. Contrail formation in aircraft wakes. *J. Fluid Mech.*, 502 :361–373, 2004.
- T. Passot and A. Pouquet. Numerical simulation of compressible homogeneous flow in the turbulent regime. *Journal of Fluid Mechanics*, 181 :441–466, 1987.



- G. Pavlovski, M. D. Smith, and M.-M. Mac Low. Hydrodynamical simulations of the decay of high-speed molecular turbulence. *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 368 :943–958, 2006.
- U. Piomelli, P. Moin, and J. H. Ferziger. Model consistency in large eddy simulation of turbulent channel flows. *Phys. Fluids*, 31 :1884–1891, 1988.
- S. B. Pope. A more general effective-viscosity hypothesis. *Journal of Fluid Mechanics*, 72 :331–340, 1975.
- S. B. Pope. On the relationship between stochastic lagrangian models of turbulence and second-moment closures. *Phys. Fluids*, 6 :973–985, 1994.
- D. H. Porter, A. Pouquet, and P. R. Woodward. Three-dimensional supersonic homogeneous turbulence : A numerical study. *Physical Review Letters*, 68 :3156–3159, 1992.
- D. H. Porter, A. Pouquet, and P. R. Woodward. Kolmogorov-like spectra in decaying three-dimensional supersonic flows. *Phys. Fluids*, 6(6) :2133–2142, 1994.
- W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. *Numerical Recipes in Fortran 77*. Cambridge University Press, [www.library.cornell.edu/nr/cbookfpdf.html](http://www.library.cornell.edu/nr/cbookfpdf.html), 1997.
- T. N. Randrianarivelo. *Etude numérique des interactions hydrodynamiques fluides/solides : application aux lits fluidisés*. PhD thesis, Université Bordeaux 1, 2005.
- S. L. Rani and S. Balachandar. Preferential concentration of particles in isotropic turbulence : a comparison of the lagrangian and the equilibrium eulerian approaches. *Powder Technology*, 141 :109–118, 2004.
- S. L. Rani and S. Balachandar. Evaluation of the equilibrium eulerian approach for the evolution of particle concentration in isotropic turbulence. *Int. J. Multiphase Flow*, 29 :1793–1816, 2003.
- M. W. Reeks. On the continuum equations for dispersed particles in nonuniform flows. *Phys. Fluids*, 4(6) : 1290–1303, 1992.
- J. Reveillon and L. Vervisch. Accounting for spray vaporization in turbulent combustion modeling. In *Proceedings of the Summer Program*. Center for Turbulence Research, 1998.
- E. Riber. Private communication. Technical report, 2006.
- E. Riber, M. Moreau, O. Simonin, and B. Cuenot. Towards large eddy simulation of non-homogeneous particle laden turbulent gas flows using euler-euler approach. In *11th Workshop on Two-Phase Flow Predictions*, 2005.
- E. Riber, M. Garcia, V. Moureau, H. Pitsch, O. Simonin, and T. Poinso. Evaluation of numerical strategies for LES of two-phase reacting flows. In *Proceedings of the Summer Program*. Center for Turbulence Research, 2006a.

- E. Riber, M. Moreau, O. Simonin, and B. Cuenot. Development of Euler-Euler LES approach for gas-particle turbulent jet flow. In *Proc.Symposium Fluid-Particle Interaction in Turbulence*. 2006 ASME Joint U.S. - European Fluids Engineering Summer Meeting, Miami, FEDSM2006-98110, 2006b.
- W. Rodi. A new algebraic relation for calculating the reynolds stresses. *Z. angew. Math. Mech.*, 56 :T219–T221, 1976.
- P. Sagaut. *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows*. Springer, Berlin, 1998.
- P. Sagaut and V. Levasseur. Sensitivity of spectral variational multiscale methods for large-eddy simulation of isotropic turbulence. *Phys. Fluids*, 17 :035113, 2005.
- M. Sakiz. *Simulation numérique lagrangienne et modélisation eulérienne d'écoulements diphasiques gaz-particules en canal vertical*. PhD thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, France, 1999.
- M. V. Salvetti and S. Banerjee. A priori tests of a new dynamic subgrid-scale model for finite-difference large-eddy simulations. *Phys. Fluids*, 7 :2831–2847, 1994.
- C. Saulnier, O. Simonin, D. Vedrine, and L. Donnat. Eulerian multiphase modeling of feed injection and vaporisation in fcc riser reactors. In *8th international conference on circulating fluidized beds*, pages 328–335. Kefa cen, 2005.
- L. Schiller and A. Nauman. A drag coefficient correlation. *V.D.I. Zeitung*, 77 :318–320, 1935.
- D.P. Schmidt. Theoretical analysis for achieving high-order spacial accuracy in lagrangian/eulerian source terms. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, in press.
- U. Schumann. Direct and large eddy simulation of turbulence - summary of the state-of-the-art 1991. In *Lecture Series 1991-02 : Introduction to the modeling of turbulence*. von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1991.
- B. Shotorban and S. Balachandar. Two-fluid large eddy simulation approach for gas-particle turbulent flows using equilibrium assumption. In *Proceedings of FEDSM2006*. ASME Joint U.S. - European Fluids Engineering Summer Meeting Miami, FL, USA, July 17-20, 2006, 2006.
- O. Simonin. Theoretical and experimental modeling of particulate flows. In *Lecture Series 2000-06*. von Karman Institute for Fluid Dynamics, 2000.
- O. Simonin. Combustion and turbulence in two-phase flows. In *Lecture Series 1996-02*. von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1996.
- O. Simonin, P. Février, and J. Laviéville. On the spatial distribution of heavy-particle velocities in turbulent flow : from continuous field to particulate chaos. *J. of Turbulence*, 3(40) :1–18, 2002.

- J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations. i : The basic experiment. *Month. Weath. Rev.*, 91(3) :99–165, 1963.
- C. G. Speziale. Galilean invariance of subgrid-scale stress models in the large-eddy simulation of turbulence. *J. Fluid Mech.*, 156 :55–62, 1985.
- C. G. Speziale, G. Erlebacher, T. A. Zang, and M. Y. Hussaini. The subgrid modelling of compressible turbulence. *Phys. Fluids*, 31 :940–942, 1988.
- L. Jr Spitzer. *Diffuse matter in space*. Interscience, New York, 1968.
- K. D. Squires and J. K. Eaton. Particle response and turbulence modification in isotropic turbulence. *Phys. Fluids A*, 2 :1191, 1990.
- G.G. Stokes. *On the Effect of the Inertial Friction of Fluids on the Motion of Pendulums*. Trans. Cambridge Phil. Soc., 1851.
- S. Stolz and N. A. Adams. An approximate deconvolution procedure for large-eddy simulation. *Phys. Fluids*, 11(7) :1699–1701, 1999.
- C.M. Tchen. *Mean value and correlation problems connected with the motion of small particles suspended in a turbulent fluid*. PhD thesis, Delft, Martinus Nijhoff, The Hague, 1947.
- A. Ten Cate, J. J. Derksen, L. M. Portela, and H. E. A. Van den Akker. Fully resolved simulations of colliding monodisperse spheres in forced isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 519 :233–271, 2004.
- H. Tennekes and J. L. Lumley. *A First course in Turbulence*. The MIT Press, Cambridge, 1972.
- W. S. J. Uijttewaal and R. V. A. Oliemans. Particle dispersion and deposition in direct numerical and large eddy simulations of vertical pipe flows. *Physics of Fluids*, 8 :2590, 1996.
- M.W. Vance, K. Squires, and O. Simonin. Properties of the particle field in gas-solid turbulent channel flow. *Physics of Fluids*, in press, 2006.
- O. Vermorel, B. Bedat, O. Simonin, and T. Poinsot. Numerical study and modelling of turbulence modulation in particle laden slab flow. *J. of Turbulence*, 335 :75–109, 2003.
- L. Vignal. *Chute d'un nuage de particules dans une turbulence diffusive : étude des couplages entre phases par diagnostics optiques*. PhD thesis, INP Toulouse, 2006.
- I. Vinkovic, C. Aguirre, M. Ayrault, and S. Simoëns. Large eddy simulation of the dispersion of solid particles in a turbulent boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol*, page in press, 2006.
- J. von Neumann and R. D. Richtmeyer. A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks. *J. Appl. Phys.*, 21 :231, 1950.

- B. Vreman. *Direct and large-eddy simulation of the compressible turbulent mixing layer*. PhD thesis, Universiteit Twente, 1995.
- B. Vreman, B. Geurts, and H. Kuerten. Comparison of numerical schemes in large eddy simulation of the temporal mixing layer. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, 22 :297, 1996.
- O. R. Walton. *Granular solid flow project*. Quaterly report, January-March, UCID-20297-88-1, 1988.
- Q. Wang and K. D. Squires. Large eddy simulation of particle deposition in a vertical turbulent channel flow. *Int. J. Multiphase Flow*, 22 :667, 1996.

# Publications

- M. Moreau, B. Bedat and O. Simonin, A priori testing of subgrid stress models for Euler-Euler two-phase LES from Euler-Lagrange simulations of gas-particle turbulent flow. In *18th Ann. Conf. on Liquid Atomization and Spray Systems*. ILASS Americas, 2005.
- M. Moreau, P. Fede, O. Simonin and P. Villedieu, Stochastic Lagrangian Modelling and Monte Carlo Simulation of Collisions in Gas-Solid Homogeneous Turbulent shear Flows. In *5th International Conference on Multiphase Flow*. ICMF,2004.
- M. Moreau, P. Fede, O. Simonin and P. Villedieu, Monte Carlo simulation of colliding particles in gas-solid homogeneous turbulent shear flows. In *4th ASME-JSME Joint Fluids Engineering Conference*. ASME FED 2003.



## **A priori testing of subgrid stress models for Euler-Euler two-phase LES from Euler-Lagrange simulations of gas-particle turbulent flow**

M. Moreau\*, Benoît Bedat, Olivier Simonin  
Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse  
UMR CNRS-INPT-UPS 5502, 31400 Toulouse, FRANCE

### **Abstract**

Numerical simulations of industrial configurations with unsteady phenomena need the use of modern numerical tools as Large Eddy Simulations. One way to perform this kind of simulation to gas-dispersed phase turbulent flows is to use Two-fluid Large Eddy Simulation (TFLES). Such modeling allows to incorporate more detail physics than Reynolds Averaged Numerical Simulations. In the case of inertial particles with response times larger than the Kolmogorov time scale, the Eulerian approach for particle phase must account specifically for the effects of a Random Uncorrelated Motion (RUM) (Fevrier et al. [1]). Derived in the framework of the Mesoscopic Eulerian Formalism, Particle Large Eddy equations are obtained by volume filtering of mesoscopic eulerian equation. The particle large scales are recovered while subgrid scale effects need to be modeled. Subgrid stress (SGS) models derived from fluid compressible turbulence SGS models are presented. Results of gas-particle Euler Lagrange simulations (DNS+DPS) in homogeneous isotropic decaying turbulence are carefully interpreted in term of particle eulerian mesoscopic fields. The mesoscopic fields are then filtered to obtain large scale fields. A priori tests of subgrid stress models for the particulate phase mesoscopic eulerian field show that the presented SGS models are relevant in the studied case.

---

\*Corresponding Author

## INTRODUCTION

Direct Numerical Simulations (DNS) of turbulent fluid flows coupled with Deterministic Particles Simulation (DPS) have been extensively used to study dispersed phase interacting with fluid turbulent flow. However, due to the huge number of particle involved, this Euler-Lagrange approach is very difficult to handle in industrial configurations. An alternative numerical simulations based on Eulerian balance equations for dispersed phase and Navier-Stokes equation for the fluid, coupled through inter-phase exchange terms might be an effective alternative approach. Eulerian equations associated to dispersed phase can be obtained by different ways.

Pandya & Mashayek [2] suggest to take the moments of the filtered kinetic equation for phase space density of the particle. Closure is then provided on subgrid terms of filtered kinetic equation and on higher order moment equation. But as shown by Fevrier et al. [1], in the case of inertial particles with response times larger than the Kolmogorov time scale, the Eulerian approach for particle phase must account specifically for the effects of a particle Random Uncorrelated Motion (RUM), which can be derived in the frame of the Mesoscopic Eulerian Formalism (MEF). Eulerian equations of the dispersed phase are obtained by a conditional average for a given fluid turbulent flow realization. Kaufmann et al. [3] performing Two-Fluid DNS suggests that the spacial resolution for the dispersed phase must be higher than the fluid one (ie. Kolmogorov length scale) and introduces subgrid term models.

The general purpose of this study is the validation of Two-Fluid LES formulation from post-processing of DNS+DPS results in homogeneous isotropic gas-particle turbulent flows. Eulerian quantities are obtained through Lagrangian particle quantity projection on an Eulerian grid. Special care must be provided in the interpretation of Lagrangian results in term of mesoscopic eulerian fields. Filter-length-independant Random Uncorrelated Energy (RUE) and subgrid terms are identified. Non-spheric terms of RUM tensor are modeled with a viscosity assumption, and subgrid terms with classical SGS models for fluid compressible flows (Moin et al. [4]; Erlebacher et al. [5]) adapted to dispersed flows. A priori tests of SGS models are performed.

## THE PARTICLE MESOSCOPIC EULERIAN FORMULATION

### Particle correlated and uncorrelated motion: hypotheses

In Lagrangian approach for the particulate phase, all particles are individually tracked. The position of particle center mass  $\mathbf{X}_p^{(k)}$  and the velocity  $\mathbf{U}_p^{(k)}$  of each particle  $k$  are computed.

Particles coming from different regions of the flow (for example ejected from vortexes) can be very closed, but can have very different velocities. To account this phenomenon, Fevrier et al. [1] introduce the Mesoscopic Eulerian Formalism which supposes that the Lagrangian particle velocity  $\mathbf{U}_p^{(k)}$  can be split into a spacially correlated part  $\mathbf{u}_p(\mathbf{X}_p^{(k)}, t)$  and an uncorrelated part  $\delta\mathbf{U}_p^{(k)}$  called Random Uncorrelated Motion :

$$\mathbf{U}_p^{(k)} = \mathbf{u}_p(\mathbf{X}_p^{(k)}(t), t) + \delta\mathbf{U}_p^{(k)} \quad (1)$$

such as the mesoscopic Eulerian velocity field  $\mathbf{u}_p$  is continuous, RUM of different particles are uncorrelated between each other, with the mesoscopic Eulerian velocity field and with the turbulent fluid flow.

### Formalism

To take into account this uncorrelated particle velocity distribution, Février et al. [1] introduce the particle probability density function for a given fluid flow realization :  $\check{f}_p$ .  $\check{f}_p(\mathbf{c}_p, \mathbf{x}, t)d\mathbf{c}_p$  is the mean number of particles at time  $t$ , with mass center position  $\mathbf{x}$  and having velocity  $\mathbf{c}_p \in [\mathbf{c}_p, \mathbf{c}_p + d\mathbf{c}_p]$  for the considered fluid flow realization. Thus,  $\check{f}_p$  obeys the transport equation :

$$\frac{\partial}{\partial t}\check{f}_p + \frac{\partial}{\partial x_j}c_{p,j}\check{f}_p + \frac{\partial}{\partial c_{p,j}}\frac{F_{p,j}}{m_p}\check{f}_p = \left(\frac{\partial}{\partial t}\check{f}_p\right)_{coll} \quad (2)$$

where  $\mathbf{F}_p$  is the force acting on a particle of mass  $m_p$  and the last term is the pdf modification by inter-particle collision. Considering particle with diameter  $d_p$  smaller than the Kolmogorov length scale, the particle to fluid density ratio is high ( $\rho_p \gg \rho_f$ ) without gravity effect the particle motion is governed by the drag force, which can be taken as the Stokes drag force for small particle Reynolds number :

$$\mathbf{F}_p = -\frac{m_p}{\tau_p}(\mathbf{c}_p - \mathbf{u}_{f@p}) \text{ with } \tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu_f} \quad (3)$$

where  $\mathbf{u}_{f@p}$  is the fluid velocity "viewed" by the particle. For sufficiently dilute flow, the collision effect is negligible. Equation 2 is then closed and becomes :

$$\frac{\partial}{\partial t}\check{f}_p + \frac{\partial}{\partial x_j}c_{p,j}\check{f}_p = \frac{\partial}{\partial c_{p,j}}\left[\frac{c_{p,j} - u_{f@p,j}}{\tau_p}\check{f}_p\right] \quad (4)$$



Particle mesoscopic eulerian quantities such as number density  $n_p$ , correlated velocity  $\mathbf{u}_p$  are given by integration of the conditioned pdf  $\check{f}_p$  over particle velocity space :

$$n_p(\mathbf{x}, t) := \int \check{f}_p(\mathbf{c}_p, \mathbf{x}, t) d\mathbf{c}_p \quad (5)$$

$$\mathbf{u}_p(\mathbf{x}, t) := \frac{1}{n_p} \int \mathbf{c}_p \check{f}_p(\mathbf{c}_p, \mathbf{x}, t) d\mathbf{c}_p \quad (6)$$

The RUM tensor  $\langle \delta u_{p,i} \delta u_{p,j} \rangle$  takes into account the uncorrelated part of the particle velocity:

$$\langle \delta u_{p,i} \delta u_{p,j} \rangle(\mathbf{x}, t) := \frac{1}{n_p} \int (\mathbf{c}_{p,i} - u_{p,i})(\mathbf{c}_{p,j} - u_{p,j}) \check{f}_p(\mathbf{c}_p, \mathbf{x}, t) d\mathbf{c}_p \quad (7)$$

Transport equations of particle number and correlated momentum are derived by integration of Eq. 4 :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} n_p + \frac{\partial}{\partial x_j} n_p u_{p,j} &= 0 \quad (8) \\ \frac{\partial}{\partial t} n_p u_{p,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} n_p u_{p,j} u_{p,i} &= \frac{n_p}{\tau_p} (u_{f@p,i} - u_{p,i}) \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x_j} n_p \langle \delta u_{p,j} \delta u_{p,i} \rangle \quad (9) \end{aligned}$$

The first term of the rhs of the above equation takes into account the momentum transfert from fluid phase to the particulate phase by drag force and the second term is the effect of uncorrelated particle motion to the correlated motion. This last term needs closure law. The Random Uncorrelated energy  $\delta\theta_p$  of the particle is defined as half the trace of the RUM tensor :

$$\delta\theta_p = \frac{1}{2} \langle \delta u_{p,k} \delta u_{p,k} \rangle \quad (10)$$

$$\delta\tau_{ij} = -n_p \langle \delta u_{p,i} \delta u_{p,j} \rangle + \frac{2}{3} n_p \delta\theta_p \delta_{ij} \quad (11)$$

The deviatoric part of the RUM tensor ( $\delta\tau_{ij}$ ) can be modeled by a viscosity assumption (Simonin et al. [6]), while  $\delta\theta_p$  follows a transport equation.

## PARTICLE MESOSCOPIC LARGE EDDY SIMULATION

In LES, it is assumed that the particle mesoscopic fields can be decomposed into two parts. The first one contains the large scale eddies, while the second one is the unresolved small scale eddies whose effects on the resolved large scale eddies are modeled by subgrid scale (SGS) model.

## Filtering of MEF equations

The particle number density is not homogeneous for some regime (e. g. preferential concentration regime), so mesoscopic transport equations are written in term of Favre filtered (or particle number density-weighted) quantities (denoted by an hat) :

$$\bar{n}_p(\mathbf{x}) = \int G_{\Delta_f}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') n_p(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \quad (12)$$

$$\hat{\phi}_p = \frac{1}{\bar{n}_p} \overline{n_p \phi_p}(\mathbf{x}) \quad (13)$$

where  $G_{\Delta_f}$  is some spatial filter kernel of characteristic length  $\Delta_f$  and the integral is over the flow domain. In this paper we use the top hat filter defined by :

$$\begin{aligned} G_{\Delta_f}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') &= \frac{1}{\frac{4}{3}\pi\Delta_f^3}, \text{ if } |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \leq \Delta_f; \\ &0, \text{ elsewhere.} \quad (14) \end{aligned}$$

Applying the spacial filter  $G_{\Delta_f}$  to the governing equations (Eq. 8 and 9) leads to :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \bar{n}_p + \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{n}_p \hat{u}_{p,j} &= 0 \quad (15) \\ \frac{\partial}{\partial t} \bar{n}_p \hat{u}_{p,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{n}_p \hat{u}_{p,j} \hat{u}_{p,i} &= \frac{\bar{n}_p}{\tau_p} [\hat{u}_{f@p,i} - \hat{u}_{p,i}] \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{n}_p \langle \widehat{\delta u_{p,j} \delta u_{p,i}} \rangle \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x_j} T_{p,ij} \quad (16) \end{aligned}$$

where the subgrid stress (SGS) tensor  $T_{p,ij}$  accounts for subgrid scale eddies effects on the filtered particle mesoscopic momentum and is :

$$T_{p,ij} = \bar{n}_p (\widehat{u_{p,i} u_{p,j}} - \hat{u}_{p,i} \hat{u}_{p,j}) \quad (17)$$

In LES approach, only large scale equations are solved so a model must be provided on the effects of the SGS.

## Modeling of particle MEF subgrid stress

Mesoscopic eulerian subgrid stress models are written by analogy with subgrid scale models for compressible turbulence. First Kaufmann et al. [3] supposes that the subgrid term of filtered MEF momentum equation acts on the compressible component of the velocity field like a pressure term and a posteriori-test the subgrid bulk viscosity model :

$$T_{p,ij} = -\bar{n}_p C \Delta_f^2 \left| \frac{\partial \hat{u}_{p,k}}{\partial x_k} \right| \frac{\partial \hat{u}_{p,k}}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (18)$$

Fluid SGS modeling have been extensively studied since the advent of DNS. The SGS tensor can

be split into spheric and deviatronic parts. The trace-free SGS tensor is modeled using a viscosity assumption (Smagorinsky-type model), while the sub-grid "energy" is parametrized by a Yoshizawa model (Moin et al. [4]) :

$$T_{f,ij} = P_{SGS}\delta_{ij} + \nu_{SGS}(S_{f,ij} - \frac{1}{3}S_{f,kk}) \quad (19)$$

$$T_{f,ij} = 2\bar{\rho}_f\Delta_f^2|S|^2C_I\delta_{ij} - 2\bar{\rho}_f\Delta_f^2|S_f|C_S(S_{f,ij} - \frac{1}{3}S_{f,kk}) \quad (20)$$

where  $S_{f,ij}$  is the filtered fluid strain rate tensor and  $|S_f|$  its norm :

$$S_{f,ij} = \frac{1}{2}(\frac{\partial \hat{u}_{f,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \hat{u}_{f,j}}{\partial x_i}) \text{ and } |S_f|^2 = 2S_{f,ij}S_{f,ij} \quad (21)$$

Even for fluid flows coefficient values  $C_I$  and  $C_S$  are not universal. For incompressible fluid flows, the Smagorinsky coefficient  $C_S$  can be linked to the decreasing rate of the Kolmogorov cascade leading to a value of 0.032 (for a Kolmogorov "constant" of 1.4), but is often chosen as 0.01 in channel flow simulations. For compressible flows Yoshizawa suggests  $C_S = 0.026$  and  $C_I = 0.039$ , while Moin et al. in pipe flow LES evaluate  $C_S$  and  $C_I$  by a dynamical procedure and find lower values ( $C_S \in [0.008; 0.014]$ ;  $C_I \in [0.0025; 0.009]$ ).

Another approach is the triple decomposition of the SGS tensor into Leonard, Cross and Reynolds term :

$$T_{f,ij} = L_{ij} + C_{ij} + R_{ij} \quad (22)$$

$$L_{ij} = \bar{\rho}_f(\widehat{\hat{u}_{f,i}\hat{u}_{f,j}} - \hat{u}_{f,i}\hat{u}_{f,j}) \quad (23)$$

$$C_{ij} = \bar{\rho}_f(\widehat{\hat{u}_{f,i}u_{f,j}''} + u_{f,i}''\widehat{\hat{u}_{f,j}}) \quad (24)$$

$$R_{ij} = \bar{\rho}_f(\widehat{u_{f,i}''u_{f,j}''}) \quad (25)$$

with  $\mathbf{u}_f'' = \mathbf{u}_f - \hat{\mathbf{u}}_f$ . The Leonard term can be explicitly calculated, while the cross and the Reynolds term need closure laws. According to Erlebacher et al. [5], the cross term is modeled by a scale similarity (Bardina-type) model and the Reynolds term by a Yoshizawa and a compressible Smagorinsky-type model :

$$C_{ij} = \bar{\rho}_f(\hat{u}_{f,i}\hat{u}_{f,j} - \hat{\hat{u}}_{f,i}\hat{\hat{u}}_{f,j}) \quad (26)$$

$$R_{ij} = 2\bar{\rho}_f\Delta_f^2|S_f|^2C_I'\delta_{ij} - 2\bar{\rho}_f\Delta_f^2|S_f|C_S'(S_{f,ij} - \frac{1}{3}S_{f,kk}) \quad (27)$$

coefficient values of this mixed model are  $C_S' = 0.0085$  and  $C_I' = 0.0033$  (Ha & Zhu [7]). Erlebacher et al. neglect the trace of the Reynolds

term ( $C_I' = 0$ ) for relative low compressible fluid turbulent flows.

These fluid SGS models are adapted to the particle mesoscopic LES by replacing  $\bar{\rho}_f$  by the filtered particle number  $\bar{n}_p$  and the filtered fluid velocity ( $\hat{\mathbf{u}}_f$ ) by the particle mesoscopic one ( $\hat{\mathbf{u}}_p$ ).

## FROM LAGRANGIAN QUANTITIES TO MESOSCOPIC EULERIAN FIELDS Euler Lagrange Simulations

In Euler Lagrange simulations (DNS+DPS), the fluid phase is computed by solving the Navier-Stokes equation on an Eulerian grid, while particles viewed as points are individually tracked. Motion equations of individual particle  $k$  are :

$$\frac{d\mathbf{X}^{(k)}}{dt} = \mathbf{U}_p^{(k)} \quad (28)$$

$$\frac{d\mathbf{U}_p^{(k)}}{dt} = -\frac{\mathbf{U}_p^{(k)} - \mathbf{u}_{f@p}(\mathbf{X}^{(k)}(t), t)}{\tau_p} \quad (29)$$

where  $\mathbf{u}_{f@p}(\mathbf{X}^{(k)}(t), t)$  is the fluid velocity non disturb by the  $k$  particle presence at the  $k$  particle location and is obtained by interpolation of the Eulerian fluid velocity field  $\mathbf{u}_f$  at the particle  $k$  location  $\mathbf{X}_p^{(k)}$ .

## Mesoscopic Eulerian field calculation

The informations of the Lagrangian dispersed phase are post-processed and transformed into continuous Eulerian fields of mesoscopic quantities. Particle mesoscopic number density and velocity are calculated by projection in the framework of the particle in cell (PIC) approximation from the Lagrangian position to the Eulerian grid [8]. As pointed out by Boivin et al. [9], any projection method using PIC approximation can be seen as a filter, so the quantity mean is conserved by projection. Mesoscopic Eulerian quantities are computed by :

$$n_p(\mathbf{x}) = \int H_\Delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(\mathbf{x}' - \mathbf{X}_p^{(k)})d^3\mathbf{x}' \quad (30)$$

$$n_p\mathbf{u}_p(\mathbf{x}) = \int H_\Delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(\mathbf{x}' - \mathbf{X}_p^{(k)})\mathbf{U}_p^{(k)}d^3\mathbf{x}' \quad (31)$$

Different types of projection kernel  $H_\Delta$  can be used. In this study, the volumic projector is applied :

$$H_\Delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \prod_{i=1}^3 (1 - \frac{|x_i - x'_i|}{\Delta x}), \text{ if } |x_i - x'_i| \leq \Delta x; \quad (32)$$

$$0, \text{ otherwise.}$$

where  $\Delta x$  is the cell size, the projector characteristic length  $\Delta$  is  $2\Delta x$ . Kaufmann et al. [8] evaluate the

RUE by :

$$n_p \delta \theta_p = \frac{1}{2} \int H_{\Delta}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{X}_p^{(k)}) U_{p,j}^{(k)} U_{p,j}^{(k)} d^3 \mathbf{x}' - \frac{1}{2} n_p u_{p,j} u_{p,j} \quad (33)$$

An alternative numerical approach is the computation of the RUM velocity. First the correlated velocity field  $\mathbf{u}_p$  is interpolated at each particle location and the RUM of each particle is obtained by :

$$\delta \mathbf{U}_p^{(k)} = \mathbf{U}_p^{(k)} - \mathbf{u}_p(\mathbf{X}_p^{(k)}(t), t) \quad (34)$$

RUM tensor field is then computed by projection :

$$n_p \langle \delta u_{p,i} \delta u_{p,j} \rangle = \int H_{\Delta}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{X}_p^{(k)}) \delta U_{p,i}^{(k)} \delta U_{p,j}^{(k)} d^3 \mathbf{x}' \quad (35)$$

RUE is finally obtained by eq. 10. The problem of consistency of these continuous fields obtained by postprocessing of discrete Lagrangian quantities with their definitions in the MEF framework is at this time not totally cleared (Simonin et al. [6]).

#### A priori-testing of SGS model

We now have MEF fields ( $n_p$ ,  $\mathbf{u}_p$ ,  $\langle \delta u_{p,i} \delta u_{p,j} \rangle$ ) of the size of the projecting grid. These post-processed fields can then be used as input for the analysis of various SGS models. Mesoscopic Eulerian fields are Favre filtered according to Eq. 13 to obtain filtered fields  $\bar{n}_p$ ,  $\hat{\mathbf{u}}_p$ , and exact SGS tensor  $T_{p,ij}$ . SGS models predictions can then be compared with the exact expression of the subgrid tensor.

Standard correlation coefficients between fields  $A$  and  $B$  [10] are then calculated :

$$c(A, B) = \frac{(\{AB\}_E - \{A\}_E \{B\}_E)}{((\{A^2\}_E - \{A\}_E^2)(\{B^2\}_E - \{B\}_E^2))^{\frac{1}{2}}} \quad (36)$$

#### SIMULATION OVERVIEW

DNS of the dimensionless compressible Navier-Stokes equations (introducing an acoustic Reynolds number  $Re_{ac} = 200$ ) coupled with DPS have been performed with NTMIX3D which uses a six-order compact finite difference scheme on cartesian grids [11] and third order Runge Kutta time stepping.

Numerical tools use domain decomposition and MPI for parallel computations. The evaluation of eulerian quantities at particle location is done by a four order Lagrangian interpolation scheme [12].

DNS+DPS have been performed for a freely decaying turbulence in a  $64^3$  grid points cubic box of  $2\pi$  length with periodic boundary conditions without two-way coupling. The fluid velocity is initialised

Fluid turbulence :

$Re_t$	$q_f^2$	$\eta_K$	$L_t$	$\tau_K$	$\tau_f^t$
6.6	0.0094	0.1	0.45	2.1	4.2

Particle properties :

Case	St	$d_p$	$\tau_p$	$N_p$
1	1.1	$25 \cdot 10^{-5}$	4.6	10,000,000
2	1.1	$25 \cdot 10^{-5}$	4.6	80,000,000

**Table 1.** Initial dimensionless conditions of the DNS+DPS

according to a Passot-Pouquet energetic spectrum. The  $N_p$  particles are randomly embedded into the gaseous field after one eddy turn-over time. At this time the turbulent Reynolds number is 6.6 (see TABLE 1). The particle distribution is mono-dispersed. Particle initial velocities are the fluid velocities at their locations. Particle behaviour depends on the Stokes number defined by :

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_f^t} \quad \text{with} \quad \tau_f^t = \frac{q_f^2}{2.075 \varepsilon_f} \quad (37)$$

$\tau_f^t$  is the fluid turbulent time scale given by Haworth and Pope [13] where  $q_f^2$  is the fluid turbulent energy and  $\varepsilon_f$  is the dissipation rate. The initial Stokes number is 1.1 corresponding to a particle preferential concentration regime (Maxey [14]).

## RESULTS AND DISCUSSION

### Particle Mesoscopic Eulerian fields

Let us introduce some global mean quantities. The particle kinetic energy  $q_p^2$  is defined at the particle location, while the particle correlated energy  $\check{q}_p^2$  and the mean RUE  $\delta q_p^2$  are defined on the eulerian grid :

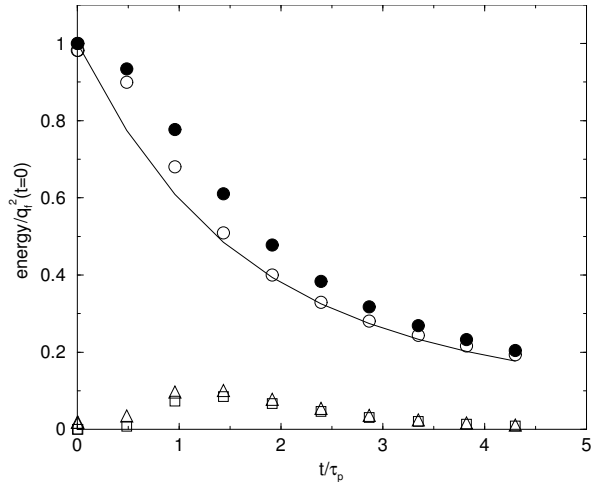
$$q_p^2 = \frac{1}{2} \{U_{p,i}^{(k)} U_{p,i}^{(k)}\}_L \quad (38)$$

$$\check{q}_p^2 = \frac{1}{2} \frac{\{n_p u_{p,i} u_{p,i}\}_E}{\{n_p\}_E} \quad (39)$$

$$\delta q_p^2 = \frac{\{n_p \delta \theta_p\}_E}{\{n_p\}_E} \quad (40)$$

The time evolution of measured particle and fluid kinetic energies are shown in FIGURE 1. Particle are initialised without RUE and due to their inertia their motion become partially uncorrelated (maximum 14% of the mean particle energy  $q_p^2$  is uncorrelated).

At the initialisation the RUE is zero while the particle correlated energy is equal to the fluid turbulent energy. The measured particle kinetic energy



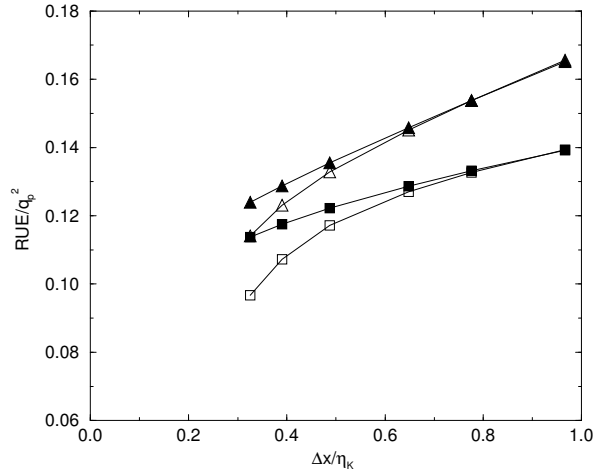
**Figure 1.** Time development of the fluid turbulent energy (line), the particle kinetic energy (●), the mesoscopic correlated energy (◊), RU energy evaluated by Eq. 10 (◻) or by Eq. 33 (△). Case 1 projected on a  $64^3$  grid.

Grid	$64^3$	$80^3$	$96^3$	$128^3$	$160^3$	$192^3$
$\Delta x/\eta_K$	0.97	0.78	0.65	0.49	0.39	0.33
Case 1	38.1	19.5	11.3	4.77	2.44	1.41
Case 2	304	156	90.4	38.1	19.5	11.3

**Table 2.** Mean particle density number for different projection grid sizes.

$q_p^2$  is the fluid one, that validate the interpolation procedure. Due to the consistency of the projector with a filtering procedure, some particle correlated energy  $\tilde{q}_p^2$  is lost by the projection (about 2%). This loss of energy due to projection is included in the measurement of the RUE  $\delta q_p^2$  with Eq. 33 (but the equality  $\delta q_p^2 = q_p^2 - \tilde{q}_p^2$  coming from the MEF is satisfied). An alternative is the use of Eq. 10 leading to a negligible error of approximatively 0.03% at the initialisation.

Another error that can be numerically quantified is the statistical bias due to the limited number of particles per cell. Lagrangian results at the time  $t = 1.4\tau_p$  (corresponding to the maximum of RUE in the simulation) are projected on different size meshes (see TABLE 2) leading to different mean particle number per cell. FIGURE 2 shows that 20 particles per cell are needed to be statistically converged. The measured RUE is not cell size independant, that indicates that there are some particle energetic length scales not capture by the projection procedure. But it can be handle that the measured RUE has a non-zero limit when the projection cell



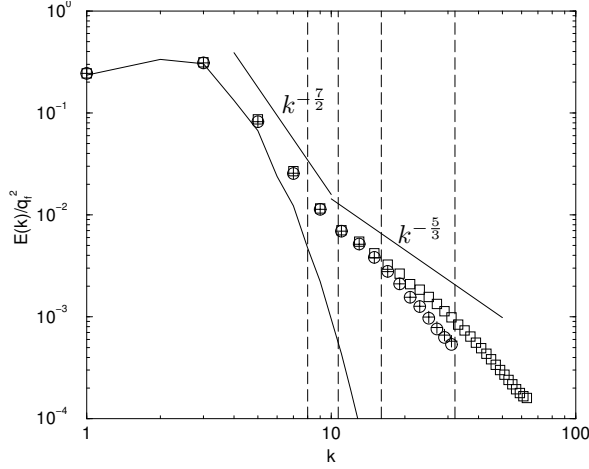
**Figure 2.** Projection grid influence on the measurement of RUE by Eq. 10 (squares) or by Eq. 33 (triangles) at time  $t/\tau_p = 1.4$ . Case 1 : empty symbols ; Case 2 : filled symbols.

size tend to zero ( $\delta q_p^2 \approx 0.1q_p^2$ ) leading to an overestimation of RUE of maximum 30%. The numerical post-treatment is able to separate continuous correlated motion from the Lagrangian particle discret field (most of error is done by projector). Evaluation of RUM is validated, error on RUE is quantified.

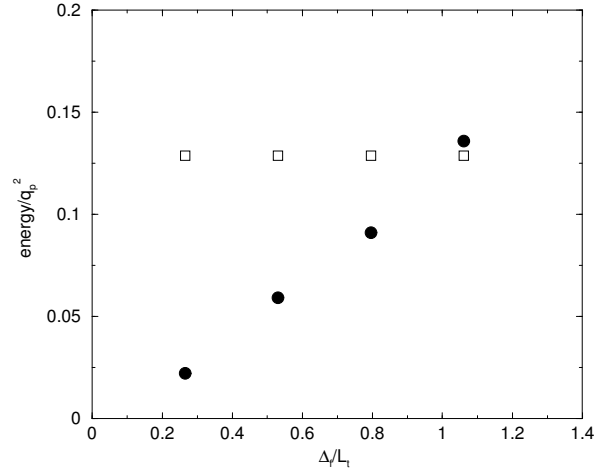
FIGURE 3 shows the three-dimensional eulerian energy spectra of the fluid turbulence and of the particle correlated velocity. There is no significant difference between particle spectra obtained by projection on a  $64^3$  grid point for case 1 and 2, so that their is non statistical bias even on energy spectrum with 40 particles per cell. Comparing spectra on a  $64^3$  grid with one obtained by a projection on a more precise grid ( $128^3$  points), it can be noticed that some energy at small scale is lost by the projection procedure. Due to the very small Reynolds number (at time  $t/\tau_p = 1.4$ ,  $Re_t = 4.1$ ), fluid turbulence spectrum does not present an inertial range. At largest scales the particle spectra follow the fluid one. A change of incline is observed for smaller scales leading to a decrease rate of about  $-\frac{5}{3}$ , no theoretical justification is available up to date.

### Evaluation of SGS effects

Mesoscopic eulerian particle velocity field have been obtained and can be filtered to check subgrid stress models. Results are presented for the case 2 projected on a  $128^3$  grid point. Mesoscopic fields ( $n_p$ ,  $\mathbf{u}_p$ ,  $\delta\theta_p$ ,  $\delta\tau_{ij}$ ) are top-hat filtered for different filter lengths  $\Delta_f = 2\Delta x, 4\Delta x, 6\Delta x, 8\Delta x$ . The corresponding cut wave numbers and their positions over



**Figure 3.** Three-dimensional eulerian energy spectra at time  $t/\tau_p = 1.4$  : fluid (—); particle : Case 1 on a  $64^3$  grid (+) ; Case 2 on a  $64^3$  grid ( $\circ$ ) and on a  $128^3$  grid ( $\square$ ).



**Figure 4.** Evolution with the filter length of the mean subgrid energy ( $\bullet$ ) and of the mean filtered RUE ( $\square$ ). Case 2 projected on a  $128^3$  grid at time  $t/\tau_p = 1.4$

the particle energetic spectra are traced on FIGURE 3 (dash lines).

Local subgrid "energy"  $\theta_{SGS}$  is defined by :

$$\theta_{SGS} = \frac{1}{2} \frac{T_{p,kk}}{\bar{n}_p} \quad (41)$$

FIGURE 4 shows the filter length evolution of the mean  $\theta_{SGS}$  and of the mean filtered RUE. Mean filtered RUE is filter length independant due to the filter conservation of the mean quantities. These energies are of the same order, so none of them can be neglected in this case.

Subgrid dissipation rates by deviatronic part of SGS tensor  $\varepsilon_{SGS}^{(I)}$ , by spherical part  $\varepsilon_{SGS}^{(II)}$ , and their equivalent due to RUM  $\varepsilon_{RUM}^{(I)}$  and  $\varepsilon_{RUM}^{(II)}$  are given by :

$$\varepsilon_{SGS}^{(I)} = \left( \frac{T_{p,ij}}{\bar{n}_p} - \frac{2}{3} \theta_{SGS} \delta_{ij} \right) \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j} \quad (42)$$

$$\varepsilon_{SGS}^{(II)} = \frac{2}{3} \theta_{SGS} \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_i} \quad (43)$$

$$\varepsilon_{RUM}^{(I)} = - \frac{\widehat{\delta\tau}_{ij}}{\bar{n}_p} \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_j} \quad (44)$$

$$\varepsilon_{RUM}^{(II)} = \frac{2}{3} \widehat{\delta\theta}_p \frac{\partial \hat{u}_{p,i}}{\partial x_i} \quad (45)$$

FIGURE 5 shows the evolution with the filter length of these dissipations. Dissipation is mainly due to subgrid stresses and to deviatronic part of the RUM tensor. The correlation between the filtered RUE and the filtered divergence of the particle mesoscopic

Term	Model	Correlation		Model constants	
		$2\Delta x$	$8\Delta x$	$2\Delta x$	$8\Delta x$
$q_{SGS}^2$	SG viscosity	0.75	0.75	0.013	0.012
	mixed	0.65	0.65		
$\varepsilon_{SGS}^{(I)}$	SG viscosity	0.81	0.68	0.023	0.016
	mixed	0.90	0.80		
$\varepsilon_{SGS}^{(II)}$	SG viscosity	0.83	0.82	0.0077	0.0058
	mixed	0.85	0.86		

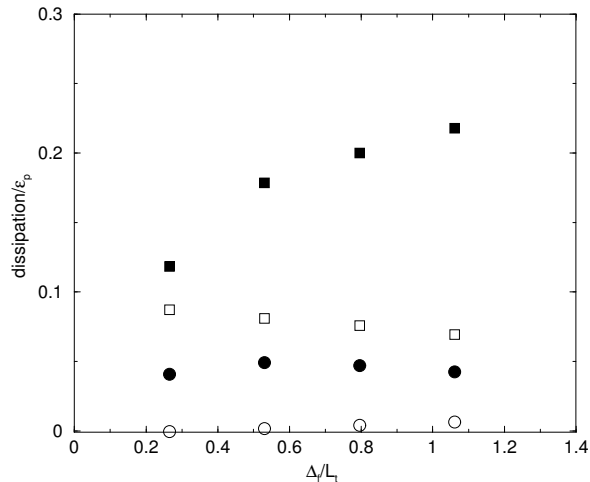
**Table 3.** Summary of correlation coefficients between exact SGS and models for two filter length  $\Delta_f = 2\Delta x$  and  $8\Delta x$  Case 2 projected on a  $128^3$  grid at time  $t/\tau_p = 1.4$

field is very low. This is an indication for the modeling of the RUE.

### Test of SGS models

The subgrid viscosity model (Eq. 20) and the mixed model (Eq. 22-23 and Eq. 26-27) are compared to exact SGS. Standard correlation coefficients between exact SGS and models are provided in TABLE 3 at the scalar level of the subgrid energy and dissipations for two different filter length ( $\Delta_f = 2\Delta x$  et  $8\Delta x$ ). Correlation coefficients show a good agreement of the models with the exact term (a slightly better for the mixed model).

The mean subgrid dissipations predicted by the mixed models with the standard coefficient values ( $C'_S = 0.0085$  and  $C'_I = 0.0033$ ) is comparable to the exact one (about 5% error on  $\varepsilon_{SGS}^{(I)}$  and less



**Figure 5.** Evolution with the filter length of the Favre mean dissipations :  $\varepsilon_{SGS}^{(I)}$  (■) ;  $\varepsilon_{SGS}^{(II)}$  (●) ;  $\varepsilon_{RUM}^{(I)}$  (□) ;  $\varepsilon_{RUM}^{(II)}$  (○).  $\varepsilon_p$  is the global particle dissipation ( $\varepsilon_p = \frac{1}{\tau_p}(q_{fp} - 2q_p^2)$ ), with  $q_{fp}$  the fluid-particle covariance. Case 2 projected on a  $128^3$  grid at time  $t/\tau_p = 1.4$

than 10% on  $\varepsilon_{SGS}^{(II)}$ . Subgrid viscosity model coefficient values  $C_S$  can be determined by matching the computational mean non compressible subgrid dissipation  $\varepsilon_{SGS}^{(I)}$  leading to  $C_S \approx 0.2$ . This value is in agreement with the one suggest by Yoshizawa in fluid flow. Whereas  $C_I$  can be chosen to match the exact subgrid energy ( $C_I \approx 0.12$ ) or the compressible dissipation leading to a value of the half  $C_I \approx 0.0065$ . More elaborate and rigourous determination of model coefficients can be provided. But it must be enlightened that these coefficients are of the same order that ones of the fluid turbulent SGS models.

It seems that particle mesoscopic SGS models of the same form than fluid compressible turbulence ones are adapted to take into account the subgrid effects on particle mesoscopic fields. Even the fact that the particulate phase is highly compressible ( $n_p'/\{n_p\}_E \approx 0.8$ ), no specific behaviour of the particle subgrid stress has been pointed out.

## CONCLUSION

It has been shown that it is possible to extract mesoscopic eulerian fields from Lagrangian DNS+DPS results. Errors have been identified and are mainly due to the projection procedure which needs to be improved in further studies (e. g. with higher turbulent Reynolds number). The particle correlated energetic spectra shows that energy

is present for length scales smaller than fluid Kolmogorov length scale.

Euler-Euler LES equations for the particulate phase have been presented. Subgrid terms are recover and SGS models (SG viscosity and mixed models) adapted from fluid compressible turbulence subgrid models are introduced and a-priori tested. Good agreement is found on the scalar compressible and incompressible subgrid dissipations. No model coefficient adaptation to particulate flow is needed for the mixed and coefficients of the viscosity model seems to be in the same order than ones of the fluid model. These preliminary results needs to be complete by further studies including higher fluid Reynolds number and particle Stokes number influence. Models for Random Uncorrelated stress tensor and RU energy must also to be tested. A posteriori testing of SGS models in Two Fluid LES of more complex flows (confined jets) is under investigation and shows encouraging results (Riber et al. [15]).

## Nomenclature

Lagrangian quantities of the particle $k$	
$\mathbf{X}^{(k)}$	Position of center of mass
$\mathbf{U}_p^{(k)}$	Translation velocity
$\delta\mathbf{U}_p^{(k)}$	Random Uncorrelated Motion
Eulerian fields	
$n_p$	Particle number density
$\mathbf{u}_p$	Particle mesoscopic velocity
$\mathbf{u}_f$	Fluid velocity
$\mathbf{u}_{f@p}$	Fluid "seen" velocity
$\langle \delta u_{p,i} \delta u_{p,j} \rangle$	Random Uncorrelated stress tensor
$\delta\theta_p$	Random Uncorrelated energy
$\delta\tau_{ij}$	Deviatronic part of RU stress tensor
$T_{p,ij}$	Particle subgrid stress tensor
$T_{f,ij}$	Fluid subgrid stress tensor
Notations	
$\bar{\cdot}$	Volume filtered quantity
$\hat{\cdot}$	Favre filtered quantity
$\{\cdot\}_E$	Reynolds averaging on the Eulerian grid
$\{\cdot\}_L$	Averaging at the Lagrangian particle location

## References

- [1] P. Février, O. Simonin, and K. D. Squires. *in press J. Fluid Mech.*, 2005.
- [2] R. V. R. Pandya and F. Mashayek. *Int. J. of Heat and Mass Transfert*, 45:4753–4759, 2002.

- [3] A.. Kaufmann, O. Simonin, and T. Poinso. *5<sup>th</sup> Int. Conf. on Multiphase Flow*. ICMF'04, 2004.
- [4] P. Moin, K. Squires, W. Cabot, and S. Lee. *Phys. Fluids A*, 3:2746–2757, 1991.
- [5] G. Erlebacher, M. Y. Hussaini, C. G. Speziale, and T. A. Zang. *J. Fluid Mech.*, 238:155–185, 1992.
- [6] O. Simonin, P. Février, and J. Laviéville. *J. of Turbulence*, 2002.
- [7] J. Ha and Z. Zhu. *Applied Mathematical Modelling*, 22:1059–1070, 1998.
- [8] A. Kaufmann, O. Simonin, T. Poinso, and J. Helie. *Proceedings of the Summer Program 2002*. Center for Turbulence Research, 2002.
- [9] M. Boivin, O. Simonin, and K. D. Squires. *Phys. fluids*, 12:2080–2090, 2000.
- [10] M. V. Salvetti and S. Banerjee. *Phys. Fluids*, 7:2831–2847, 1994.
- [11] S. Lele. *J. Computational Physics*, 103:16–42, 1992.
- [12] S. Balachandar and M. R. Maxey. *J. Computational Physics*, 83:96–125, 1989.
- [13] D. C. Haworth and S. B. Pope. *Phys. Fluids*, 2:738–744, 1986.
- [14] M. R. Maxey. *J. Fluid Mech.*, 174:441–465, 1987.
- [15] E. Riber, M. Moreau, O. Simonin, and B. Cuenot. *11th Workshop on Two-Phase Flow Predictions*, 2005.





# Stochastic Lagrangian Modelling and Monte Carlo Simulation of Collisions in Gas-Solid Homogeneous Shear Turbulent Flows

Mathieu Moreau<sup>1</sup>, Pascal Fede<sup>1</sup>, Olivier Simonin<sup>1</sup>, Philippe Villedieu<sup>2</sup>

1: Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, UMR CNRS-INPT-UPS 5502, France, simonin@imft.fr

2: ONERA, Centre d'Études de Toulouse, France, villedieu@oncert.fr

---

**Abstract** In this paper, the modelling of particle-particle collisions by Stochastic Lagrangian approach in gas-particle homogeneous shear turbulent flows is investigated. This study is limited to the case of monodispersed particle flows without two-way coupling. The only external force acting on particles is the drag force. Particle statistics (particle velocities, fluid velocities "viewed by the particles") are given in terms of the joint fluid-particle probability density function (pdf). The evolution of this pdf obeys a Boltzmann type equation. The collision part of this equation is closed by assuming the correlated colliding particle closure. The fluid velocities "viewed by the particles" need also to be closed.

The equation of evolution of the fluid-particle pdf is solved using a Lagrangian stochastic approach. Monte Carlo collision algorithm which takes into account the correlation between the colliding particles are tested in homogeneous isotropic turbulent flows. Several form of Langevin equations for the fluid velocity along the particle path are proposed in homogeneous flows. Results of stochastic simulations are compared with statistics from Deterministic Particles Simulation coupled with Large Eddy Simulation of a gas turbulent flow (DPS/LES), and with predictions computed in the frame of the moment method.

---

## 1 Introduction

Gas-particle turbulent flows are found in very wide range of applications as for example in fluidized bed, rocket propulsor and sand transport. In such applications lots of complex mechanisms take place such as particle-fluid, particle-particle and particle-wall interactions. The effective methods for dispersed phase computation can be separated in two general approaches, the Lagrangian approach (discrete particulate method) and the two-fluid approach (moment method). Both approaches need closures for fluid-particle and particle-particle interactions. To account for the collisions in deterministic Lagrangian simulation of gas-solid flows, a huge number of particles is needed. This limitation can be avoided by using Monte Carlo method developed in the frame of kinetic theory of rarefied gases. These algorithms are very efficient but need to be adapted in gas-solid turbulent flows. Indeed the standard Monte Carlo algorithms are based on the molecular chaos assumption which assume that positions and velocities of colliding particles are not correlated. But this assumption is no longer valid if particles are interacting with a turbulent flow. For example, as pointed out by Berlemont et al. (1995), in homogeneous isotropic turbulent gas-solid flows stochastic Lagrangian approaches based on molecular chaos assumption lead to an appreciable underestimation of the particle kinetic energy. This phenomenon can be avoided by using specific closures for collision operator. Following Laviéville et al. (1995), a Monte Carlo algorithm for gas particle turbulent flows called M3C ("Monte Carlo Collision Correlated") algorithm has been developed by Fede et al. (2002) assuming that the colliding particles are viewing the same fluid velocity. The M3C algorithm have been validated for the case of isotropic homogeneous turbulence (Fede et al., 2002) and for homogeneous turbulent shear flows (Moreau et al., 2003).

The basic Langevin equation introduced for stochastic modelling of fluid turbulence viewed by the particles leads to a overestimation of fluid-particle covariance in turbulent shear flows (Moreau et al., 2003). Here more sophisticated Langevin models are tested in order to avoid this problem. A

better agreement is obtained with a Langevin equation derived from the LSSG model proposed by Pope (1994b).

In addition variants of M3C algorithm are tested and compared with a Babovsky type algorithm accounting for the collision closure proposed by Laviéville (Hylkema and Villedieu, 1999) in Homogeneous Isotropic Turbulence. In order to validate our approach, results of stochastic simulations are compared with results from Deterministic Particles Simulation coupled with Large Eddy Simulation (DPS/LES) of gaseous homogeneous turbulent flows (isotropic and simple shear flows) and with moment method predictions.

## 2 Statistical description of fluid particle flows

This approach is derived by analogy between the random motion of particles induced by turbulent fluid flow and the thermal motion of molecules in gas. Particle statistics are given in terms of the particle probability density function (pdf) :  $f_p(\mathbf{c}_p, \mathbf{x}, t)$ . To account for the fluid turbulence effect, Simonin (1996) proposed an approach based on the joint fluid-particle probability density function  $f_{fp}(\mathbf{c}_f, \mathbf{c}_p, \mathbf{x}, t)$ .  $f_{fp}(\mathbf{c}_f, \mathbf{c}_p, \mathbf{x}, t)d\mathbf{c}_f d\mathbf{c}_p d\mathbf{x}$  is the number of particles at time  $t$ , with center of mass  $\mathbf{x}$  located in  $[\mathbf{x}, \mathbf{x} + d\mathbf{x}]$ , with velocity  $\mathbf{c}_p \in [\mathbf{c}_p, \mathbf{c}_p + d\mathbf{c}_p]$ , viewing a fluid velocity  $\mathbf{c}_f \in [\mathbf{c}_f, \mathbf{c}_f + d\mathbf{c}_f]$ . Thus,  $f_{fp}$  obeys a Boltzmann type equation :

$$\frac{\partial f_{fp}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [c_{p,i} f_{fp}] = - \frac{\partial}{\partial c_{p,i}} \left[ \left\langle \frac{du_{p,i}}{dt} \middle| \mathbf{c}_p, \mathbf{c}_f \right\rangle f_{fp} \right] - \frac{\partial}{\partial c_{f,i}} \left[ \left\langle \frac{du_{f,i}}{dt} \middle| \mathbf{c}_p, \mathbf{c}_f \right\rangle f_{fp} \right] + \left( \frac{\partial f_{fp}}{\partial t} \right)_{coll} \quad (1)$$

The first term of the right hand side represents the effects of external forces on the particle path, the second term account for the fluid turbulence evolution along the particle path, the last term represents the joint fluid-particle pdf modification induced by collisions (also called collision operator).

### 2.1 Particle path computation

The present work is focussed on gas-solid flows with particle diameter  $d_p$  comparable with the Kolmogorov characteristic length scale ( $d_p \leq \eta_K$ ). But according to the large particle to fluid density ratio considered ( $\rho_p \gg \rho_f$ ), the response time of the particle remains much larger than the Kolmogorov time scale ( $\tau_p \gg \tau_K$ ). In such flows, the drag force is dominant, hence particle position and velocity equations can be written as :

$$\frac{dx_{p,i}}{dt} = u_{p,i} \quad (2)$$

$$\frac{du_{p,i}}{dt} = - \frac{u_{p,i} - u_{f,i}}{\tau_{fp}^F} + \rho_p g_i \quad (3)$$

$\mathbf{u}_p$  is the particle velocity,  $\mathbf{u}_f$  the fluid velocity viewed by the particle,  $\rho_p$  is the density of the particle and  $\mathbf{g}$  is the gravity acceleration.  $\tau_{fp}^F$  is the particle relaxation time :

$$\tau_{fp}^F = \frac{4}{3} \frac{\rho_p}{\rho_f} \frac{d_p}{C_D} \frac{1}{|\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_f|} \quad (4)$$

$\rho_f$  is the density of the fluid and  $C_D$  is the local drag coefficient which can be written following Schiller and Nauman (1935) :

$$C_D = \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) \quad Re_p = \frac{d_p |\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_f|}{\nu_f} \quad (5)$$

$Re_p$  is the particle Reynolds number with  $\nu_f$  the kinematic viscosity of the fluid. From Eq. (3) the first term of the right hand side of Eq. (1) can be written explicitly :

$$\left\langle \frac{du_{p,i}}{dt} \middle| \mathbf{c}_p, \mathbf{c}_f \right\rangle f_{fp} = - \frac{1}{\tau_{fp}^F} (c_{p,i} - c_{f,i}) f_{fp} \quad (6)$$

## 2.2 Fluid turbulence Lagrangian modelling

During the last decades, the Lagrangian simulation of turbulent fluid flow has been extensively studied. Haworth and Pope (1986), Pope (1994a) have proposed a Langevin equation for the fluid velocity along the fluid elements trajectory. They show that Langevin process is efficient for modelling the dispersion of passive scalar and allows to ensure consistency with Reynolds Stress transport Model (RSM). By analogy with the single phase approach, Simonin et al. (1993) propose the following Langevin equation for the fluid velocity along the particle path :

$$du_{f,i} = -\frac{1}{\rho_f} \frac{\partial P_f}{\partial x_i} dt + (u_{p,j} - u_{f,j}) \frac{\partial U_{f,i}}{\partial x_j} dt + G_{fp,ij} (u_{f,j} - U_{f,j}) dt + H_{fp} \delta W_{fp,i} \quad (7)$$

where  $P_f$  is the mean fluid pressure,  $\mathbf{U}_f$  is the mean fluid velocity. The second term of the right hand side equation is specific of gas solid flows and is written to ensure the fluid kinetic stresses tensor viewed by the particle to be equal to the Renolds stress tensor.  $\delta W_{fp,ij}$  is a Wiener process and  $H_{fp}$  is a model coefficient depending on turbulence statistics. This coefficient can be linked to the fluid dissipation  $\varepsilon_f$  and the Kolmogorov's "constant" through the Lagrangian structure function (without trajectory effects :  $H_{fp} = \sqrt{\varepsilon_f C_0}$ ).  $G_{fp,ij}$  is a second order tensor of fluid statistics viewed by the particles. A general form of  $G_{fp,ij}$  in incompressible flows is :

$$\begin{aligned} G_{fp,ij} &= \frac{\varepsilon_f}{q_f^2} (\alpha_1 \delta_{ij} + \alpha_2 b_{f,ij} + \alpha_3 b_{f,ij}^2) + H_{ijkl} \frac{\partial U_{f,k}}{\partial x_l} \\ H_{ijkl} &= \beta_2 \delta_{ik} \delta_{jl} + \beta_3 \delta_{il} \delta_{jk} + \gamma_2 \delta_{ik} b_{f,jl} + \gamma_3 \delta_{il} b_{f,jk} + \gamma_5 b_{f,ik} \delta_{jl} + \gamma_6 b_{f,il} \delta_{jk} \end{aligned} \quad (8)$$

where  $q_f^2$  is the turbulent kinetic energy of the fluid viewed by the particle,  $b_{f,ij}$  is the fluid anisotropy tensor:

$$b_{f,ij} = \frac{\langle u'_{f,i} u'_{f,j} \rangle_p}{\langle u'_{f,l} u'_{f,l} \rangle_p} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \quad (9)$$

$\mathbf{u}'_f$  is the fluctuating part of the fluid velocity viewed by the particle.  $b_{f,ij}^2$  and  $b_{f,ij}^3$  are defined as product of matrix  $b_{f,ij}$ :  $b_{f,ij}^2 = b_{f,ik} b_{f,kj}$  and  $b_{f,ij}^3 = b_{f,ik} b_{f,kl} b_{f,lj}$ .

Several forms of  $G_{fp,ij}$  can be chosen for the modelling of fluid turbulence viewed by the particles derivating from stochastic monophasic Lagrangian models of turbulence (Pope, 1994b). Three models are tested in this work : the Simplified Langevin Model (SLM), the Isotropization Production Model (IPMb) and the Lagrangian Speziale, Sarkar and Gatski Model (LSSG).

SLM is defined by  $C_0 = 2.1$ , and a diagonal form of  $G_{fp,ij}$ :  $\alpha_1 = -(\frac{1}{2} + \frac{3}{4} C_0)$  and all other coefficients are zero.

IPMb is defined by  $\alpha_1 = -0.9$ ,  $\beta_2 = 0.6$ , all other coefficients are zero.  $C_0$  must vary due to the consistency with the evolution of turbulent kinetic energy:

$$C_0 = \frac{2}{3} (-2\alpha_1 + \frac{P}{\varepsilon_f} \frac{\beta_2}{2} - 1) \quad (10)$$

where  $P$  is the production rate of  $q_f^2$ :

$$\frac{P}{\varepsilon_f} = -b_{f,ij} \frac{q_f^2}{\varepsilon_f} \left( \frac{\partial U_{f,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial U_{f,j}}{\partial x_i} \right) \quad (11)$$

LSSG model is specified by  $C_0 = 2.1$ , the non zero coefficients are given by:

$$\alpha_1 = -\frac{1}{2} - \frac{3}{4} C_0 - \frac{3}{8} (C_3 - C_3^* \sqrt{b_{ii}^2}) \frac{P}{\varepsilon_f} - \frac{1}{4} C_2 b_{ii}^2 + (3\alpha_2 - \frac{3}{4} C_2) b_{ii}^3$$

$$\begin{aligned}
 \alpha_2 &= 4.0 - 1.7 \frac{P}{\varepsilon_f} & \alpha_3 &= -8.85 + 5.1 \frac{P}{\varepsilon_f} \\
 \beta_2 &= 0.8 - \frac{3}{8} \sqrt{b_{ii}^2} & \beta_3 &= -0.2 - \frac{3}{8} \sqrt{b_{ii}^2} \\
 \gamma_5 &= -\gamma_6 = 1.2
 \end{aligned} \tag{12}$$

The values of coefficients  $C_2$ ,  $C_3$  and  $C_3^*$  are respectively 4.2, 0.8 and 1.0.

### 2.3 Collision modelling

Considering only binary collisions, the collision operator in Eq. (1) can be written :

$$\left( \frac{\partial f_{fp}}{\partial t} \right)_{coll} = -d_p^2 \int_{(\mathbf{g}, \mathbf{k} < 0)} \Delta f_{fp}^{(2)}(\mathbf{c}_f, \mathbf{c}_p, \mathbf{x}, \mathbf{c}_{f*}, \mathbf{c}_{p*}, \mathbf{x} + d_p \mathbf{k}, t)(\mathbf{g}, \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{c}_{p*} d\mathbf{c}_{f*} \tag{13}$$

where  $f_{fp}^{(2)}$  is the pair fluid-particle distribution function,  $\Delta f_{fp}^{(2)}$  represents the variation of  $f_{fp}^{(2)}$  induced by collision,  $\mathbf{k}$  is the unit vector directed along the colliding particle center line and  $\mathbf{g}$  is the relative velocity between the colliding particles. Assuming that the particles are rigid smooth spheres with identical diameter, equations governing a binary collision between the particles are :

$$\mathbf{c}_p'' = \mathbf{c}_p + \frac{1 + e_c}{2} (\mathbf{g}, \mathbf{k}) \cdot \mathbf{k} \tag{14}$$

$$\mathbf{c}_{p*}'' = \mathbf{c}_{p*} - \frac{1 + e_c}{2} (\mathbf{g}, \mathbf{k}) \cdot \mathbf{k} \tag{15}$$

where  $\mathbf{c}_p''$  and  $\mathbf{c}_{p*}''$  are the post-collisional velocities of the particles and  $e_c$  is the normal restitution coefficient ( $0 < e_c \leq 1$ ). In this frame of collision modelling approach  $\Delta f_{fp}^{(2)}$  is written :

$$\Delta f_{fp}^{(2)} = \frac{1}{e_c^2} f_{fp}^{(2)}(\mathbf{c}_f, \mathbf{c}_p', \mathbf{x}, \mathbf{c}_{f*}', \mathbf{c}_{p*}', \mathbf{x} + d_p \mathbf{k}, t) - f_{fp}^{(2)}(\mathbf{c}_f, \mathbf{c}_p, \mathbf{x}, \mathbf{c}_{f*}, \mathbf{c}_{p*}, \mathbf{x} + d_p \mathbf{k}, t) \tag{16}$$

with  $\mathbf{c}_p'$  and  $\mathbf{c}_{p*}'$  given by :

$$\mathbf{c}_p' = \mathbf{c}_p + \frac{\mathbf{c}_p'' - \mathbf{c}_p}{e_c} \quad \mathbf{c}_{p*}' = \mathbf{c}_{p*} + \frac{\mathbf{c}_{p*}'' - \mathbf{c}_{p*}}{e_c} \tag{17}$$

In the frame of the kinetic theory of dilute gases, the pair distribution is written in term of the single distribution function assuming that colliding particles are completely independent (molecular chaos type assumption ie.  $f_{fp}^{(2)} = f_{fp} f_{fp}$ ). This assumption is not appropriate for particles interacting with a turbulent flow which will induce correlations between positions and velocities of particles. In addition, the particle diameter being smaller than the Taylor length scale ( $d_p \ll \lambda$ ) and the response time of the particle larger than the Kolmogorov time scale ( $\tau_p \gg \tau_K$ ), the effective fluid velocities viewed by the neighboring particle may be assumed to be nearly identical. Following Laviéville et al. (1995) and assuming that the obstruction function  $g_0$  is equal to 1, the closure assumption called correlated colliding particle closure is written:

$$f_{fp}^{(2)}(\mathbf{c}_f, \mathbf{c}_p, \mathbf{c}_{f*}, \mathbf{c}_{p*}) = f_p(\mathbf{c}_p | \mathbf{c}_f) f_p(\mathbf{c}_{p*} | \mathbf{c}_{f*}) \delta(\mathbf{c}_f - \mathbf{c}_{f*}) f_f(\mathbf{c}_f) \tag{18}$$

where  $f_p(\mathbf{c}_p | \mathbf{c}_f)$  is the particle probability density function conditioned by the fluid velocity  $\mathbf{c}_f$  and  $f_f(\mathbf{c}_f)$  is the probability for having a fluid velocity  $\mathbf{c}_f$  at any particle position, thus we have by definition the relation :  $f_{fp}(\mathbf{c}_f, \mathbf{c}_p) = f_p(\mathbf{c}_p | \mathbf{c}_f) f_f(\mathbf{c}_f)$  By integrating  $f_{fp}^{(2)}$  modeled by Eq. 18 on whole fluid and particles velocities  $\mathbf{c}_f$  and  $\mathbf{c}_p$ ,  $f_{fp}(\mathbf{c}_{f*}, \mathbf{c}_{p*})$  is found.

### 3 Moment method

Transport equations for velocity moments (number density  $n_p$ , mean velocity, kinetic stresses, ...) are obtained by multiplying the microscopic kinetic equation (Eq. 1) governing  $f_{fp}$  by an appropriate function of fluid and particle velocities and integrating over an appropriate fluid and particle velocity spaces. See for example Moreau et al. (2003).

#### 3.1 Single particle conditional averages

Laviéville (1997) introduces several conditional averages of the particle-particle, fluid-fluid, fluid-particle velocity scalar product. Assuming a Gaussian form for  $f_{fp}$  in Isotropic Homogeneous Turbulence this quantities depend only on  $\xi_{fp}$  the fluid particle correlation coefficient ( $\xi_{fp} = \frac{q_{fp}}{2\sqrt{q_f^2 q_p^2}}$ , with the covariance  $q_{fp} = \langle u'_{f,i} u'_{p,i} \rangle_p$ ) and follow:

$$\left\langle \frac{\mathbf{c}_f \mathbf{c}_f}{2q_f^2} \middle| \frac{\mathbf{c}_p \mathbf{c}_p}{2q_p^2} = X \right\rangle_p = \left\langle \frac{\mathbf{c}_p \mathbf{c}_p}{2q_p^2} \middle| \frac{\mathbf{c}_f \mathbf{c}_f}{2q_f^2} = X \right\rangle_p = 1 - \xi_{fp}^2 (1 - X) \quad (19)$$

$$\left\langle \frac{\mathbf{c}_f \mathbf{c}_p}{2\sqrt{q_f^2 q_p^2}} \middle| \frac{\mathbf{c}_p \mathbf{c}_p}{2q_p^2} = X \right\rangle_p = \left\langle \frac{\mathbf{c}_f \mathbf{c}_p}{2\sqrt{q_f^2 q_p^2}} \middle| \frac{\mathbf{c}_f \mathbf{c}_f}{2q_f^2} = X \right\rangle_p = \xi_{fp} X \quad (20)$$

Eqs. 19 and 20 must be verified for the neighboring particles because the integration of  $f_{fp}^{(2)}$  over all the fluid and particle velocity spaces of one of the two particle involve in  $f_{fp}^{(2)}$  is equal to  $f_{fp}$ .

#### 3.2 Two particle conditional averages

Laviéville introduces also several two points conditional averages on the particles which are allowed to collide each other. Using the correlated colliding particle closure and a gaussian form for pdf of velocities in Homogeneous Isotropic Turbulence, model predictions of this conditional averages are given by:

$$\left\langle \frac{\mathbf{c}_{p1} \mathbf{c}_{p2}}{2q_p^2} \middle| \frac{\mathbf{c}_f \mathbf{c}_f}{2q_f^2} = X \right\rangle_p = \left\langle \frac{\mathbf{c}_{p1} \mathbf{c}_{p2}}{2q_p^2} \middle| \frac{\mathbf{c}_{p1} \mathbf{c}_{p1}}{2q_p^2} = X \right\rangle_p = \left\langle \frac{\mathbf{c}_{p1} \mathbf{c}_{p2}}{2q_p^2} \middle| \frac{\mathbf{c}_{p2} \mathbf{c}_{p2}}{2q_p^2} = X \right\rangle_p = \xi_{fp}^2 X \quad (21)$$

$$\left\langle \frac{\mathbf{c}_{p2} \mathbf{c}_{p2}}{2q_p^2} \middle| \frac{\mathbf{c}_{p1} \mathbf{c}_{p1}}{2q_p^2} = X \right\rangle_p = \left\langle \frac{\mathbf{c}_{p1} \mathbf{c}_{p1}}{2q_p^2} \middle| \frac{\mathbf{c}_{p2} \mathbf{c}_{p2}}{2q_p^2} = X \right\rangle_p = 1 - \xi_{fp}^4 (1 - X) \quad (22)$$

### 4 Stochastic Lagrangian simulation

Stochastic Lagrangian methods have been extensively developed in the frame of kinetic theory of rarefied gases (Bird, 1969) but also in gas-solid turbulent flows (Sommerfeld, 1999; Hylkema and Villedieu, 1999). These methods are very interesting because they allow to simulate a huge number of real particles ( $N_p$ ) by tracking few numerical particles ( $\mathcal{N}_p$ ) of weight  $\kappa$  ( $N_p = \kappa \mathcal{N}_p$ ). To solve Eq. (1) with stochastic Lagrangian method, a splitting method is used such as the particles transport is evaluated first and, next, a collision step is performed (Fede et al., 2002).

The numerical particles follow the same transport equations as the real particles (Eq. 2 and 3). According to the closure of turbulence effects and particle path in Eq. (1), the Langevin equation (Eq. 7) is used for computing the fluid velocity viewed by the particle along their path.

The collision step consist in a Monte Carlo collision algorithm. Two different types of algorithm have been implemented and tested.

#### 4.1 "Monte Carlo Collision Correlated" algorithm

The "Monte Carlo Collision Correlated" algorithm called M3C algorithm is a Bird-type (DSMC) algorithm and was proposed by Fede et al. (2002) to account for the correlated colliding particle closure (Eq. 18). It works as follow:

Table 1: Correlation conditions in M3C algorithm

1	$ u_{f,A} - u_{f,B}  \leq \beta \sqrt{\frac{2}{3} q_f^2}$
2	$ u_{f,A} - u_{f,B}  \leq \beta( u_{f,A}  +  u_{f,B} )$
3	$ u_{f,B}  \in [ u_{f,A}  - \Delta_\beta,  u_{f,A}  + \Delta_\beta]$ and $\frac{u_{f,A} \cdot u_{f,B}}{ u_{f,A}   u_{f,B} } \leq \gamma$ ; with $\Delta_\beta$ following: $\int_{ u_{f,A}  - \Delta_\beta}^{ u_{f,A}  + \Delta_\beta} f_f( c_f ) d c_f  = \beta$ , where $f_f(\mathbf{c}_f)$ is assumed to be a maxwellian

1. The time  $t_k^c$  where a new collision may occur according to a Poisson law is given by :  $t_k^c = t_{k-1}^c - \ln \hat{x} / [\frac{\kappa}{V_D} \frac{\mathcal{N}_p(\mathcal{N}_p - 1)}{2} \lambda]$  where  $V_D$  is the volume of the computational domain,  $\lambda$  is a raising of the collision frequency,  $\hat{x}$  is an uniform random variable such that :  $\hat{x} \in [0, 1]$ .
2. Two particles  $A$  and  $B$  are randomly chosen. If their fluid velocities  $\mathbf{u}_{f,A}$  and  $\mathbf{u}_{f,B}$  are in agreement with the correlation conditions, the algorithm goes to the next step, else two new particles are randomly chosen.
3. The collision probability  $q(A, B) = \frac{\pi d_p^2 |\mathbf{u}_{p,A} - \mathbf{u}_{p,B}|}{\lambda}$  is calculated and we use the following rejection method : a new random number  $\hat{y}$  is computed following a uniform law ( $\hat{y} \in [0, 1]$ ).
  - (a) if  $\hat{y} \leq q(A, B)$  then collision is performed, and the new particle velocities are computed in agreement with Eq. 14 and 15.
  - (b) if  $\hat{y} > q(A, B)$  then collision is 'fictious' and the particle velocities are unchanged
4. A new  $t_{k+1}^c$  is computed and the algorithm is repeated while  $t_{k+1}^c \leq \Delta t$ .

A crucial question in this algorithm is the way to detect the particles which are correlated. Several correlation conditions are given in Tab. 1. The idea of the correlation condition 3 is that the pdf  $f_{fp}$  associated with one of the particle of the pair of particle which could enter into collision must have the same form than  $f_{fp}$  of all the particles.

## 4.2 Monte Carlo Babovsky-type algorithm

A method inspired by the algorithm proposed by Babovsky (1986) for the resolution of the Boltzmann equation for rarefied gas dynamics has been adapted to account for the correlated colliding particle closure (Eq. 18) by Villedieu and Simonin (2002).

1. All the particles are classed by their fluid velocities in  $N_{Cell}$  identical cubic cells.
2. In each cell  $i$ , the  $\mathcal{N}_p^i$  particles are randomly paired.
3. The collision probability of each pair of particles A & B is calculated:  
 $q(A, B) = \frac{\pi d_p^2 |\mathbf{u}_{p,A} - \mathbf{u}_{p,B}| \kappa \mathcal{N}_p^i \Delta t}{V_D Prob_f}$ ; if  $\mathcal{N}_p^i$  is even;  $\mathcal{N}_p^i$  is replaced by  $\mathcal{N}_p^i - 1$  for  $\mathcal{N}_p^i$  odd.  $Prob_f$  is the probability of having a fluid velocity included in the cell of discretisation  $i$  and  $V_D$  is the volume of the computational domain.
4. A rejection method is used to validate the collision: a random number  $\hat{y}$  is computed following a uniform law ( $\hat{y} \in [0, 1]$ ).
  - (a) if  $\hat{y} \leq q(A, B)$  then collision is performed, and the new particle velocities are computed.
  - (b) if  $\hat{y} > q(A, B)$  then collision is 'fictious' and the particle velocities are unchanged.

Two restrictions have to be imposed: one on the time step and the other on the number of particles in each cell of discretisation of the fluid velocity space:

$$\Delta t \leq \frac{V_D Prob_f}{\pi d_p^2 |\mathbf{u}_{p,A} - \mathbf{u}_{p,B}| N_p} \quad \text{for all couples of particles} \quad \text{and} \quad N_{Cell} \ll \mathcal{N}_p \quad (23)$$

Table 2: Particle, fluid conditions and results in homogeneous isotropic turbulence.

Particle properties	
Particle diameter, $d_p$ (m)	$656 \cdot 10^{-6}$
Particle density, $\rho_p$ ( $kg/m^3$ )	100
Volumetric fraction, $\alpha_p$	0.0125
Stokes relaxation time, $\tau_p$ (s)	$139.8 \cdot 10^{-3}$
Particle Reynolds number, $Re_p$	19.4
Particle statistics	
Fluctuating kinetic energy, $q_p^2$ ( $m^2/s^2$ )	0.039
Fluid-particle covariance, $q_{fp}$ ( $m^2/s^2$ )	0.078
Mean particle relaxation time, $\tau_{fp}^F$ (s)	$76.3 \cdot 10^{-3}$
Fluid properties	
Fluid density, $\rho_f$ ( $kg/m^3$ )	1.17
Molecular viscosity, $\nu_f$ ( $m^2/s$ )	$1.47 \cdot 10^{-5}$
Fluid statistics	
Turbulent kinetic energy, $q_f^2$ ( $m^2/s^2$ )	0.12
Lagrangian integral time $\tau_{fp}^t$ (s)	$36.7 \cdot 10^{-3}$

## 5 Simulation conditions

Simulations in homogeneous isotropic turbulence and in homogeneous turbulent shear flows have been performed without gravity effect for the particle initial conditions described in Tab. 2 and for lighter particles ( $\rho_p = 50 kg/m^{-3}$ ,  $\alpha_p = 0.02$ ). The same behavior of models and algorithms have been observed, so that just results with the particles described in Tab. 2 are presented here. The computational domain is a cubic box (length of the box :  $L_b = 0.192 m$ ). Periodic boundary conditions are used for the fluctuating part of the fluid and the particle velocities.  $q_f^2/\varepsilon_f$  needed in the Langevin equation (Eq. 8) can be calculated using monophasic turbulence model. In order to avoid a bias due to this modelling and to better compare stochastic results with LES/DPS results,  $q_f^2/\varepsilon_f$  is taken from LES results.

Simulations were performed with 1000 numerical particles in Isotropic Homogeneous Turbulence. Statistics have been done on 20000 iterations. The parameters for conditioning were chosen in order to have approximately the same selectivity in M3C algorithm and Babovsky-type algorithm (1% of whole possible couple of particles). Numerical tests with more numerical particles or with smaller parameters of conditioning show no significant difference.

Simulations of homogeneous shear flows were performed for a uniform and constant shear rate. The mean flow direction is the  $x_1$ -direction and the mean shear is following the  $x_3$ -direction. The mean fluid velocity  $\mathbf{U}_f$  and the mean particle velocity  $\mathbf{U}_p$  are given by

$$U_{f,i} = S_f x_3 \delta_{i1} \quad S_f = \frac{\partial U_{f,1}}{\partial x_3} \quad (24)$$

$$U_{p,i} = S_p x_3 \delta_{i1} \quad S_p = \frac{\partial U_{p,1}}{\partial x_3} \quad (25)$$

$S_f$  and  $S_p$  denote the constant and uniform mean shear flow rates, in the following,  $S_f = S_p = 50 s^{-1}$ . The initial conditions for the gas and particle velocities are taken from numerical simulations of homogeneous and isotropic turbulent flows (Tab. 2). The particles were allowed to disperse sufficiently

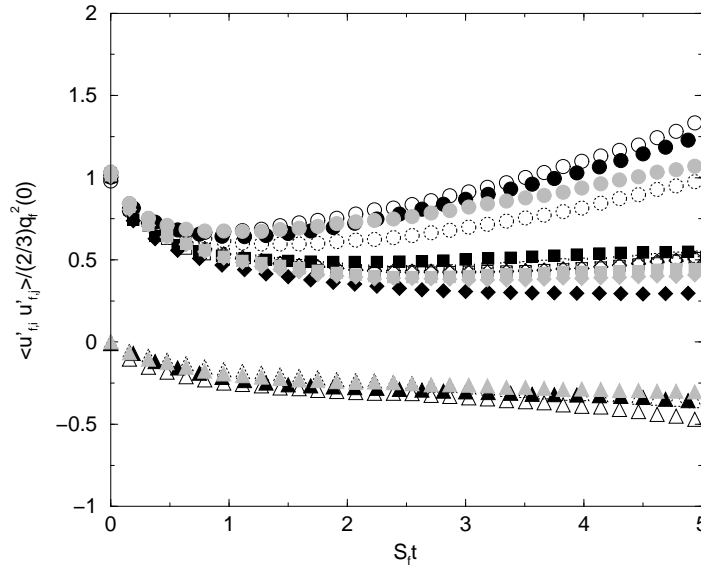


Fig. 1: Time development of the fluid kinetic stresses viewed by the particle in homogeneous turbulent shear flow. Symbols are the Monte Carlo simulation results with SLM (empty symbols) or with LIPM (dotted symbols) or with LSSG model (gray filled symbols); or DPS/LES results (filled symbols) (circles: streamwise components, squares and diamonds: transverse components, triangles: shear stress components).

before to endure the mean shear rate in order to be in equilibrium with the fluid turbulence. Initial fluid and particle velocities are taken as the sum of the turbulent component from the homogeneous isotropic simulation and the mean component from the homogeneous shear with respect to the initial particle position. In homogeneous turbulent shear flows, the collision algorithm for correlated collisions used in stochastic simulation is the M3C algorithm with the condition of collision detection 1 or 2. Those conditions give the same results on macroscopic quantities  $\langle u'_{f,i} u'_{f,j} \rangle_p$ ,  $\langle u'_{p,i} u'_{p,j} \rangle_p$ ,  $\langle u'_{f,i} u'_{p,j} \rangle_p$  (see section 6.2 for more details). The stochastic simulation results with a uncorrelated collision model (ie. with a molecular chaos-type model on  $f_{fp}^{(2)}$ ) are performed with a Bird algorithm without any conditioning on the fluid velocity viewed by the particles which could enter into collision.

## 6 Results

### 6.1 Performance of Langevin models in homogeneous shear flows

In homogeneous isotropic turbulence, the SLM model can well reproduce the fluid, particle and fluid particle velocity correlation simulated by LES/DPS (Fede et al., 2002). The time development of the fluid turbulence stresses viewed by the particles (averaged on the particle distribution) in homogeneous shear flow (Fig 1) is independent of the collision effects. The behaviour of each component of the Reynolds tensor are well predict by all Langevin models. The stochastic simulations with the different Langevin equations (SLM, IPMb and LSSG) cannot capture the difference in the transverse directions (squares and diamonds). Maximum error of the models are approximately: SLM 50 % on shear stress component; IPMb 40 % on transverse component (diamond symbol); and LSSG 15 % on streamwise component. LSSG model seems to be well adapted to simulate the fluid turbulence in the studied case.

In Fig. 2 the turbulent energy, the particle kinetic energy and the fluid-particle covariance predicted by the different models of turbulence along the particle path are compared with LES/DPS results in turbulent homogeneous shear flow without collision effects. The turbulent energy is over-predicted by SLM model (maximum 10%). IPMb and LSSG models which have been validated for



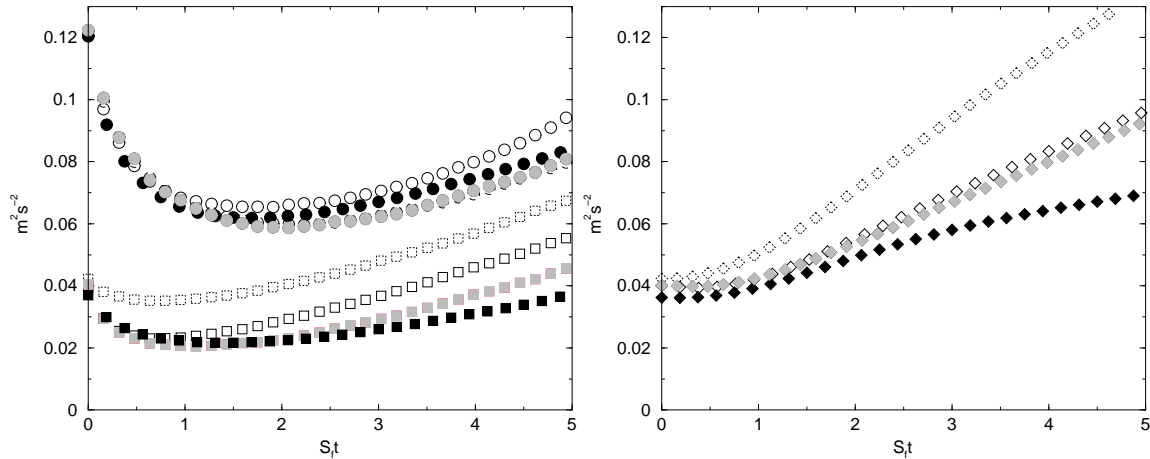


Fig. 2: Time development of the fluid turbulent kinetic energy (circle), the half of fluid-particle covariance (square) on the left and particle kinetic energy (diamond) on the right in homogeneous turbulent shear flow without collisions effects. Symbols are the Monte Carlo simulation results with SLM (empty symbols) or with LIPM (dotted symbols) or with LSSG model (gray filled symbols) or DPS/LES results (filled symbols).

monophasic turbulent shear flows (Pope, 1994b) well predict the turbulent kinetic energy (less than 5% of error). SLM, IPMb and LSSG overestimate the fluid-particle covariance respectively +50%, +80% and less than +20%. The particle kinetic energy is also strongly overestimated (a bit less than 100% with IPMb). The modelling choice of the fluid velocity viewed by the particle is critical not only for estimating the Reynolds tensor components but also the separate fluid particle velocity correlations which will directly affect the particle kinetic correlation predictions. But from the particle kinetic stress transport equation (Simonin et al., 1995), it can be shown that the prediction of the particle kinetic energy is very dependant of the modelling of the separate fluid, particle and fluid-particle velocity correlation. The accuracy of the modelling of such velocity correlations by a Langevin approach is presented and discussed in the rest of this section for the most accurate model : the LSSG model.

The comparisons between particle kinetic stresses from stochastic Lagrangian simulations, moment method predictions and DPS/LES with and without collision effects is shown in Fig 3. The good agreement between stochastic simulation results and moment method prediction using the same closures validate the numerical treatment of Eq. 1 in the stochastic code. The streamwise velocity correlation and shear stress are dominated by both the interaction with the fluid turbulence and the production by the mean particle velocity gradient. In contrast, without collision effect, transverse components of the particle kinetic stress tensor are dominated by the interaction with the fluid turbulence, only. The most noticeable effect of the interparticle collisions measured in DPS/LES is to reduce the anisotropy of the particle kinetic stress tensor by decreasing the streamwise component and increasing the tranverse components. When performing decorrelated collision modelling (dashed symbols), the streamwise components of the fluid-particle velocity correlation and particle kinetic stress tensors breakdown (Fig. 3 and 4). This effect is mainly due to the destruction of the fluid-particle covariance by the collisions as shown by Fig. 4 and is similar to the effect found in homogeneous isotropic turbulence (Berlemont et al., 1995; Fede et al., 2002). So that the decorrelated collision model is not satisfactory in homogeneous turbulent gas-solid shear flow even for such inertial particles,  $S_p \tau_{fp}^F \approx 3.5$ .

Fig 4 shows the time development of the fluid-particle kinetic correlations with and without collision. A slight increase of the fluid-particle velocity correlation is measured in DPS/LES when

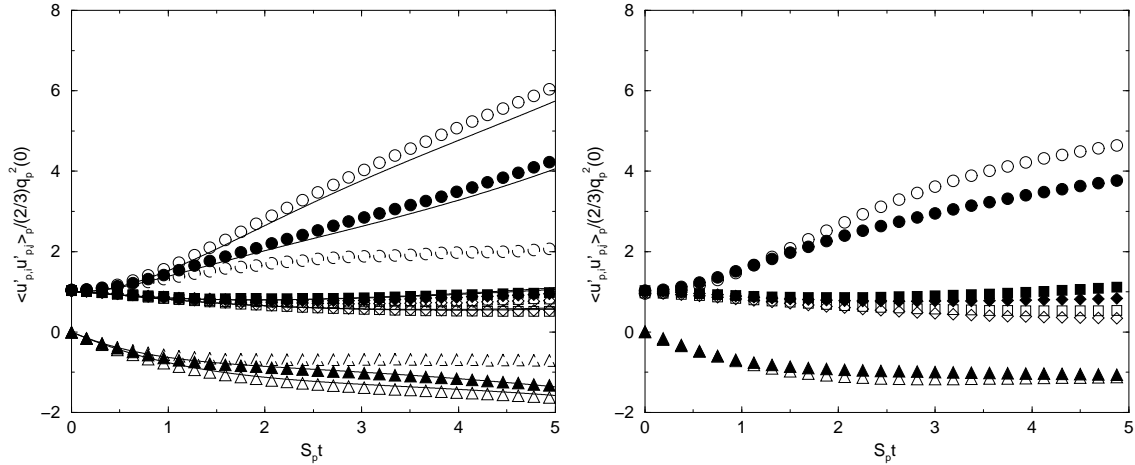


Fig. 3: Time development of the particle kinetic stresses. Comparison between Monte Carlo simulation results and model prediction issued from the moment method with LSSG model without collision effect (empty symbols), with decorrelated collisions (dashed symbols), with correlated collisions (filled symbols) on the left; DPS/LES results (on the right) without collision effect (empty symbols) and with collision effect (filled symbols). (streamwise components  $\langle u'_{p,1} u'_{p,1} \rangle_p$ : circles, transverse components:  $\langle u'_{p,2} u'_{p,2} \rangle_p$  squares and  $\langle u'_{p,3} u'_{p,3} \rangle_p$  diamonds, shear stress components  $\langle u'_{p,1} u'_{p,3} \rangle_p$ : triangles )

accounting for interparticle collisions. Following Laviéville et al. (1997) this effect does not come directly from collisions but from an increase of the eddy particle interaction time  $\tau_{fp}^t$  due to the instantaneous particle distribution with respect to the fluid turbulence velocity field and this effect is not accounting for in the modelling approaches of the fluid velocity viewed by the particles. Stochastic results are in good agreement with LES/DPS results except for  $\langle u'_{f,3} u'_{p,1} \rangle_p$  (symbols  $\nabla$  and  $\blacktriangledown$ ). This overestimation of  $\langle u'_{f,3} u'_{p,1} \rangle_p$  leads to an overestimation of the streamwise component of the particle kinetic stress tensor. This limitation excepted, the LSSG model can accurately predict the fluid-particle kinetic correlations especially with collision effects.

## 6.2 Comparison of collision algorithms results in Homogeneous Isotropic Turbulence

A problem in stochastic modelling of inter-particle collision is the way to translate a collision operator closed by an appropriate closure into a Monte-Carlo algorithm. Two types of algorithm have been presented (see Section 4). According to Villedieu and Simonin (2002), the Babovsky type presented here is really solving the collision operator of Eq. 1 closed by the correlated colliding particle assumption. For the M3C algorithm several correlation conditions are proposed in Tab. 1. In Isotropic Homogeneous Turbulence, the different correlation conditions give the same results (with appropriated parameters values) for  $q_f^2$ ,  $q_p^2$ ,  $q_{fp}$  and the collision time. These quantities solved by the stochastic simulation (with the M3C or the Babovsky-type collision algorithm) and given by the moment method are very similar. Nevertheless the conditional averages presented in section 3 have been investigated in more details and show some differences.

A statistical treatment of stochastic simulation results on all the particles shows that the single particle conditional averages (Eq. 19 and 20) are in perfect agreement with model predictions (Fig. 5).

Single particle conditional averages of potentially colliding particle (detected as correlated by the M3C algorithm) algorithm are presented in Fig 6. The same quantity is not available in the Babovsky-type due to the form of the algorithm, which does not separate the detection of the particles whose could enter into collision and the detection of the collision. The conditional averages are increasing with the parameter  $X$  as expected by moment method predictions (Eq. 19 and 20). If the Monte-Carlo collision algorithm is really a translation of the correlated collision closure then the single "potentially

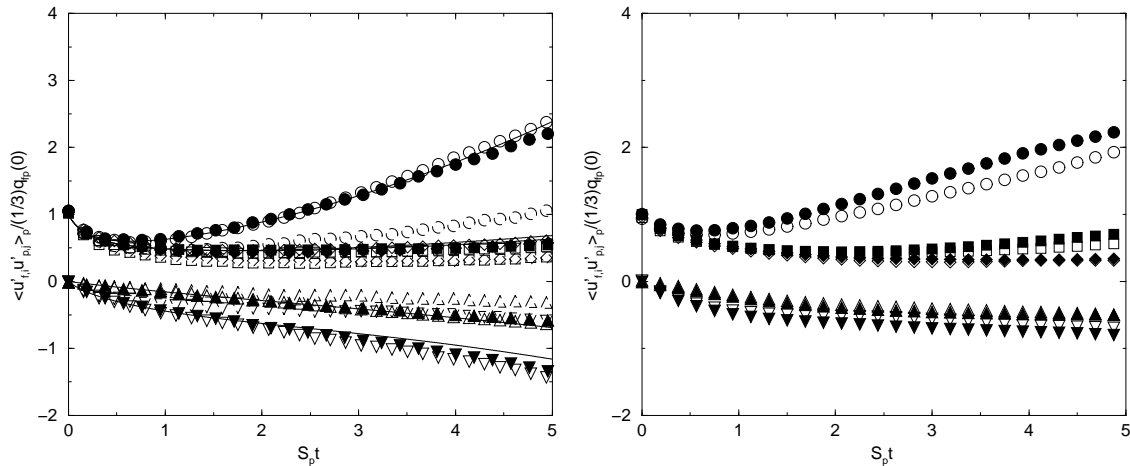


Fig. 4: Time development of the fluid-particle velocity correlation. Comparison between Monte Carlo simulation results and model prediction issued from the moment method with LSSG without collisions effect (empty symbols), with decorrelated collisions (dashed symbols), with correlated collisions (filled symbols) on the left; DPS/LES results (on the right) without collision effect (empty symbols) and with collision effect (filled symbols). (streamwise components  $\langle u'_{f,1} u'_{p,1} \rangle_p$ : circles, transverse components:  $\langle u'_{f,2} u'_{p,2} \rangle_p$  squares and  $\langle u'_{f,3} u'_{p,3} \rangle_p$  diamonds, shear stress components:  $\langle u'_{f,1} u'_{p,3} \rangle_p$  triangles up and  $\langle u'_{f,3} u'_{p,1} \rangle_p$  triangles down)

colliding” particle conditional averages must be equal to the single particle conditional averages on all the simulated particles. The averages conditioned by the fluid velocities (symbols  $\blacktriangledown$  and  $\triangledown$ ) are well predicted for the three correlation conditions. The correlation condition 3 is the only one which can reproduce the single particle averages conditioned by the particle velocities.

Two particle conditional averages are presented in Fig 7. The correlation condition 3 seems to be the only one of the three presented here which can accurately predict this quantities. Finally the choice of the correlation condition in M3C is crucial when the conditioned averages are analyzed.

## 7 Conclusions

A statistical description of gas-particle turbulent flows based on joint fluid particle pdf equation has been presented. The evolution equation of this pdf needs closures in terms accounting for fluid velocity along the particle path and inter-particle collisions. The first term is closed by a Langevin equation and the second term by using a specific closure for the pair joint fluid particle pdf (Laviéville et al., 1995) in the collision operator. The equation on pdf can be solved by a Lagrangian stochastic simulation approach.

Three different Langevin equations have been tested in homogeneous turbulent shear flow. The LSSG model can accurately predict the fluid-particle kinetic correlations especially with collision effects, while other models (SLM and IPMb) strongly overestimate the fluid-particle covariance.

Two types of collision algorithms accounting for the correlated colliding particle closure have been presented and tested. The way to detect the correlated particles in M3C algorithm is critical when conditioned averages of pdf are analysed, but the macroscopic quantities are not affected by the correlation conditions and are equal to whom calculated using the Babovsky-type algorithm which can be considered as a reference.

Numerical predictions have been successfully compared with moment method predictions and results from Deterministic Particle Simulation coupled with Large Eddy Simulations of the gas turbulence (DPS/LES).

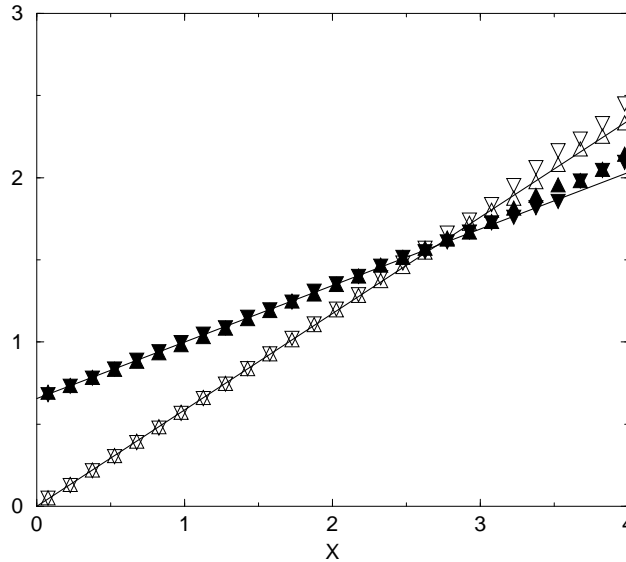


Fig. 5: Single particle conditional averages of particle velocities. Symbols are Stochastic simulation results ( $\blacktriangledown < \frac{\mathbf{c}_f \mathbf{c}_f}{2q_f^2} | \frac{\mathbf{c}_p \mathbf{c}_p}{2q_p^2} = X >_p$ ,  $\blacktriangle < \frac{\mathbf{c}_f \mathbf{c}_f}{2q_f^2} | \frac{\mathbf{c}_p \mathbf{c}_p}{2q_p^2} = X >_p$ ,  $\triangle < \frac{\mathbf{c}_f \mathbf{c}_p}{2\sqrt{q_f^2 q_p^2}} | \frac{\mathbf{c}_p \mathbf{c}_p}{2q_p^2} = X >_p$ ,  $\triangledown < \frac{\mathbf{c}_f \mathbf{c}_p}{2\sqrt{q_f^2 q_p^2}} | \frac{\mathbf{c}_f \mathbf{c}_f}{2q_f^2} = X >_p$ ). Lines are model predictions (Eqs. 19 and 20).

## References

- Babovsky, H., 1986. On a simulation scheme for the boltzmann equation. Mth. Meth. In the Appl. Sc. 8, 223–233.
- Berlemont, A., Simonin, O., Sommerfeld, M., 1995. Validation of inter-particle collision models based on large eddy simulation. In: Gas-Solid Flows. ASME FED.
- Bird, G. A., 1969. Direct numerical and the boltzmann equation. Phys. fluids 11, 2676–2681.
- Fede, P., Simonin, O., Villedieu, P., 2002. Monte carlo simulation of colliding particles in gas-solid turbulent flows from a joint fluid-particle pdf equation. In: 5th Symp. on Numerical Methods for Multiphase Flows. ASME FED.
- Haworth, D. C., Pope, S. B., 1986. A generalized langevin model for turbulent flows. Phys. Fluids 2, 738–744.
- Hylkema, J., Villedieu, P., 1999. A random particle method to simulate coalescence phenomena in dense liquid sprays. In: Proc. 16th Int. Conf. on Num. Meth. in Fluid Dyn., Lecture Notes in Physics 515, Springer-Verlag.
- Laviéville, J., 1997. Simulations numérique des interactions entre l'entraînement par la turbulence et les collisions interparticulaires en écoulements gaz-solide. Ph.D. thesis, Université de Rouen.
- Laviéville, J., Deutsch, E., Simonin, O., 1995. Large eddy simulation of interactions between colliding particles and a homogeneous isotropic turbulence field. In: 6<sup>th</sup> Symposium on Gas-Solid Flows. ASME FED.
- Laviéville, J., Simonin, O., Berlemont, A., Chang, Z., 1997. Validation of inter-particle collision models based on large-eddy simulation in gas-solid turbulent shear flow. In: Proc. 7<sup>th</sup> Int. Symp. on Gas-Particle Flows. ASME FED.

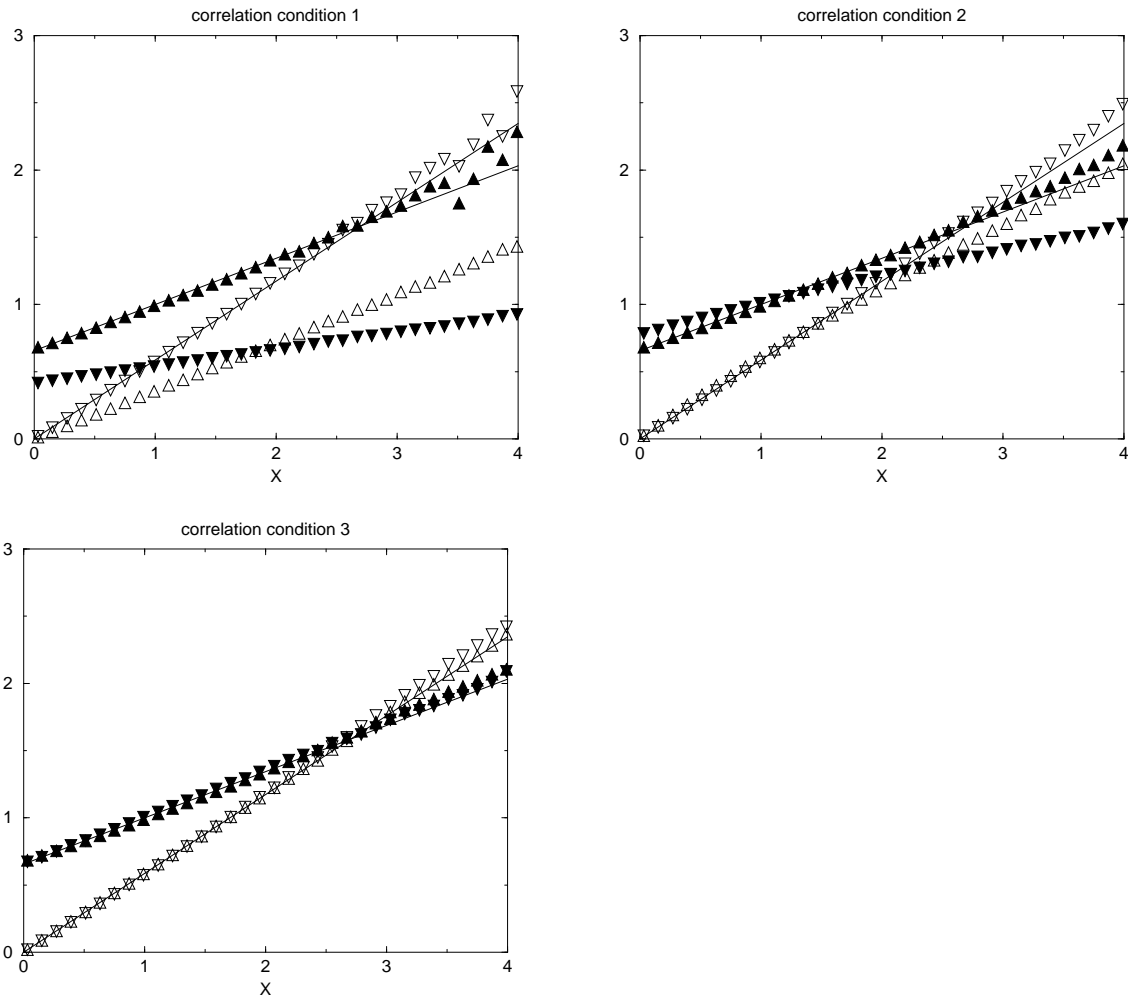


Fig. 6: Single "potentially colliding" particle conditional averages using the M3C algorithm with correlation conditions given in Tab. 1. Same symbol legend as Fig. 5

Moreau, M., Fede, P., Simonin, O., Villedieu, P., 2003. Monte carlo simulation of colliding particles in gas-solid homogeneous turbulent shear flows. In: 4th ASME-JSME Joint Fluids Engineering Conference. ASME FED.

Pope, S. B., 1994a. Lagrangian pdf methods for turbulent flows. *Annu. Rev. Phys. Mech.* 26, 23–63.

Pope, S. B., 1994b. On the relationship between stochastic lagrangian models of turbulence and second-moment closures. *Phys. Fluids* 6, 973–985.

Schiller, L., Nauman, A., 1935. A drag coefficient correlation. *V.D.I. Zeitung* 77, 318–320.

Simonin, O., 1996. Combustion and turbulence in two-phase flows. In: *Lecture Series 1996-02*. von Karman Institute for Fluid Dynamics.

Simonin, O., Deutsch, E., Boivin, M., 1995. Comparison of large eddy simulation and second-moment closure of particle fluctuating motion in two-phases turbulent shear flow. *Turbulent Shear Flow* 9, 85–115.

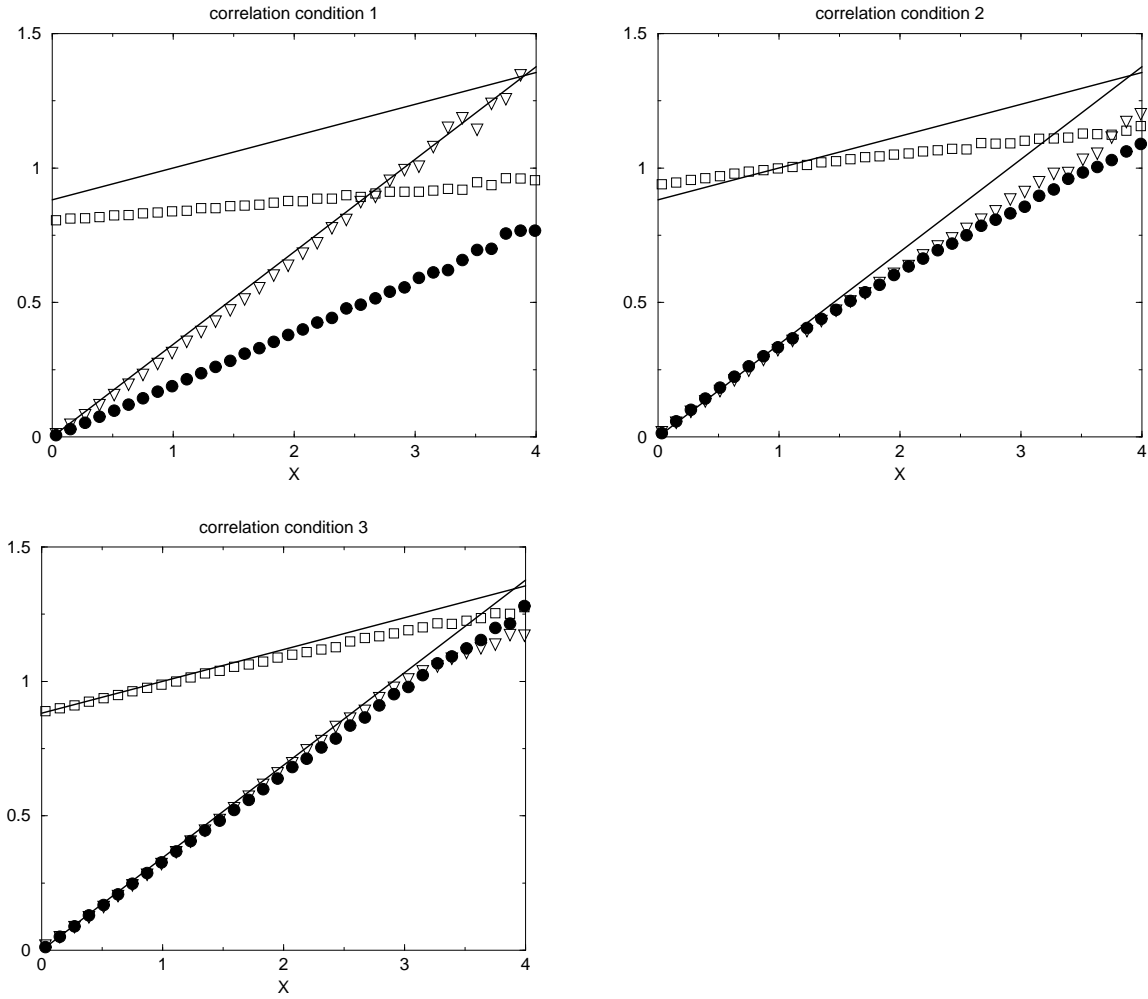


Fig. 7: Two particle conditional averages of particles detected correlated using the M3C algorithm with correlation conditions given in Tab. 1. Symbols are Stochastic simulation results ( $\nabla < \frac{\mathbf{c}_{p1}\mathbf{c}_{p2}}{2q_p^2} | \frac{\mathbf{c}_f\mathbf{c}_f}{2q_f^2} = X >_p$ ,  $\bullet < \frac{\mathbf{c}_{p1}\mathbf{c}_{p2}}{2q_p^2} | \frac{\mathbf{c}_{p1}\mathbf{c}_{p1}}{2q_p^2} = X >_p$ ,  $\square < \frac{\mathbf{c}_{p2}\mathbf{c}_{p2}}{2q_p^2} | \frac{\mathbf{c}_{p1}\mathbf{c}_{p1}}{2q_p^2} = X >_p$ ). Lines are model predictions (Eq. 21 and 22).

Simonin, O., Deutsch, E., Minier, J., 1993. Eulerian prediction of the Fluid/Particle correlated motion in turbulent two-phase flows. *App. Sci. Res.* 51, 275–283.

Sommerfeld, M., 1999. Inter-particle collisions in turbulent flows : a stochastic lagrangian model. In: *Proc. Turbulence and Shear Flow Phenomena - 1*. Santa Barbara.

Villedieu, P., Simonin, O., 2002. Kinetic modelling and monte-carlo simulation of droplet coalescence in turbulent gas flow. In: *Proc. Open Forum in Multiphase Flows : Work in progress*. ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting, FEDSM2002-31385.

**FEDSM2003-45736**

**MONTE CARLO SIMULATION OF COLLIDING PARTICLES SUSPENDED IN  
GAS-SOLID HOMOGENEOUS TURBULENT SHEAR FLOWS**

**Mathieu Moreau, Pascal Fede and Olivier Simonin**

Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse  
UMR CNRS-INPT-UPS 5502  
Allée du Professeur Camille Soula  
31400 Toulouse, FRANCE  
Email : simonin@imft.fr

**Philippe Villedieu**

ONERA-Toulouse  
2 Avenue Edouard Belin  
31500 Toulouse, FRANCE  
Email : villedieu@onecert.fr

**ABSTRACT**

The purpose of this paper is the modelling of particle-particle collisions by Stochastic Lagrangian approach in gas-solid turbulent shear flows. A generalized Monte Carlo algorithm is introduced which takes into account the correlation between the colliding particles. Particle-particle and fluid-particle velocity correlations from Stochastic Lagrangian simulations are compared with results from Deterministic Particles Simulation coupled with Large Eddy Simulation of a gas turbulent shear flow (DPS/LES), and with predictions computed in the frame of the moment method using separate transport equation for the fluid and particle velocity correlations.

**INTRODUCTION**

Gas-particle turbulent flows are found in very wide range of applications as for example in fluidized bed, rocket propulsor and sand transport. The effective methods for dispersed phase computation can be separated in two general approaches, the Lagrangian approach (discrete particulate method) and the two-fluid approach (moments method). Both approaches need closures for fluid-particle and particle-particle interactions. To account for the collisions in deterministic Lagrangian simulation of gas-solid flows, a huge number of particles is needed. This limitation can be avoided by using Monte Carlo method developed in the frame of kinetic theory of rarefied gases. These algorithms are very efficient but need to be adapted in gas-solid turbulent flows. Indeed the standard Monte Carlo algorithms are based

on the molecular chaos assumption which assume that positions and velocities of colliding particles are not correlated. But this assumption is no longer valid if particles are interacting with a turbulent flow. For example, as pointed out by Berlemont *et al.* [1], in homogeneous isotropic turbulent gas-solid flows stochastic Lagrangian approaches based on molecular chaos assumption lead to an appreciable underestimation of the particle kinetic energy. This phenomenon can be avoided by using specific closures for collision operator (see for example, Sommerfeld [2]; Hylkema & Villedieu [3]). In particular, following Laviéville *et al.* [4], a Monte Carlo algorithm for gas particle turbulent flows has been developed by Fede *et al.* [5] assuming that the colliding particles are viewing the same fluid velocity. This paper is dedicated to the validation of this Monte Carlo algorithm in homogeneous turbulent shear flows. Results are compared with DPS/LES results (Laviéville *et al.* [6]) and the predictions issued from the moment method. In order to focus our study on the particle-particle interaction, the modulation of the fluid by the particles is not taking into account.

**STATISTICAL DESCRIPTION OF GAS SOLID FLOW**

This approach is derived by analogy between the random motion of particles induced by turbulent fluid flow and the thermal motion of molecules in gas. Particle statistics are given in terms of the particle probability density function (pdf) :  $f_p(\mathbf{c}_p, \mathbf{x}, t)$ . To account for the fluid turbulence effect, Simonin [7] proposed an approach based on the joint fluid-particle proba-

bility density function  $f_{fp}(\mathbf{c}_f, \mathbf{c}_p, \mathbf{x}, t)$ .  $f_{fp}(\mathbf{c}_f, \mathbf{c}_p, \mathbf{x}, t)d\mathbf{c}_f d\mathbf{c}_p d\mathbf{x}$  is the number of particles at time  $t$ , with center of mass  $\mathbf{x}$  located in  $[\mathbf{x}, \mathbf{x} + d\mathbf{x}]$ , with velocity  $\mathbf{c}_p \in [\mathbf{c}_p, \mathbf{c}_p + d\mathbf{c}_p]$ , viewing a fluid velocity  $\mathbf{c}_f \in [\mathbf{c}_f, \mathbf{c}_f + d\mathbf{c}_f]$ . Thus,  $f_{fp}$  obeys a Boltzmann type equation :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{fp}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [c_{p,i} f_{fp}] &= - \frac{\partial}{\partial c_{p,i}} \left[ \left\langle \frac{du_{p,i}}{dt} \middle| \mathbf{c}_p, \mathbf{c}_f \right\rangle f_{fp} \right] \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial c_{f,i}} \left[ \left\langle \frac{du_{f,i}}{dt} \middle| \mathbf{c}_p, \mathbf{c}_f \right\rangle f_{fp} \right] \\ &\quad + \left( \frac{\partial f_{fp}}{\partial t} \right)_{coll} \end{aligned} \quad (1)$$

The first term of the right hand side represents the effects of external forces on the particle path, the second term account for the fluid turbulence evolution along the particle path, the last term represents the joint fluid-particle pdf modification induced by collisions (also called collision operator).

### Particle path computation

The present work is focussed on gas-solid flows with particle diameter  $d_p$  comparable with the Kolmogorov characteristic length scale ( $d_p \leq \eta_K$ ). But according to the large particle to fluid density ratio considered ( $\rho_p \gg \rho_f$ ), the response time of the particle remains much larger than the Kolmogorov time scale ( $\tau_p \gg \tau_K$ ). In such flows, the drag force is dominant, hence particle position and velocity equations can be written as :

$$\frac{dx_{p,i}}{dt} = u_{p,i} \quad (2)$$

$$\frac{du_{p,i}}{dt} = - \frac{u_{p,i} - u_{f,i}}{\tau_{fp}^F} + \rho_p g_i \quad (3)$$

$\mathbf{u}_p$  is the particle velocity,  $\mathbf{u}_f$  the fluid velocity viewed by the particle,  $\rho_p$  is the density of the particle and  $\mathbf{g}$  is the gravity acceleration.  $\tau_{fp}^F$  is the particle relaxation time :

$$\tau_{fp}^F = \frac{4 \rho_p d_p}{3 \rho_f C_D} \frac{1}{|\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_f|} \quad (4)$$

$\rho_f$  is the density of the fluid and  $C_D$  is the local drag coefficient which can be written following Schiller & Nauman [8] :

$$C_D = \frac{24}{Re_p} \left( 1 + 0.15 Re_p^{0.684} \right) \quad Re_p = \frac{d_p |\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_f|}{\nu_f} \quad (5)$$

$Re_p$  is the particle Reynolds number with  $\nu_f$  the kinematic viscosity of the fluid. From Eq. (3) the first term of the right hand

side of Eq. (1) can be written explicitly :

$$\left\langle \frac{du_{p,i}}{dt} \middle| \mathbf{c}_p, \mathbf{c}_f \right\rangle f_{fp} = - \frac{1}{\tau_{fp}^F} (c_{p,i} - c_{f,i}) f_{fp} \quad (6)$$

### Fluid turbulence Lagrangian modelling

During the last decades, the Lagrangian simulation of turbulent fluid flow has been extensively studied. Haworth & Pope [9], Pope [10] have purposed a Langevin equation for the fluid velocity along the fluid elements trajectory. They show that Langevin process is efficient for modelling the dispersion of passive scalar and allows to ensure consistency with Reynolds Stress transport Model (RSM). By analogy with the single phase approach, Simonin *et al.* [11] propose the following Langevin equation for the fluid velocity along the particle path :

$$\begin{aligned} du_{f,i} &= - \frac{1}{\rho_f} \frac{\partial P_f}{\partial x_i} dt \\ &\quad + (u_{p,j} - u_{f,j}) \frac{\partial U_{f,i}}{\partial x_j} dt \\ &\quad + G_{fp,ij} (u_{f,j} - U_{f,j}) dt + H_{fp} \delta W_{fp,i} \end{aligned} \quad (7)$$

where  $P_f$  is the mean fluid pressure,  $\mathbf{U}_f$  is the mean fluid velocity,  $\delta W_{fp,ij}$  is a Wiener process and  $H_{fp}$  is a model coefficient depending on turbulence statistics. This coefficient can be linked to the fluid dissipation  $\epsilon_f$  and the Kolmogorov's constant ( $C_0 = 2.1$ ) through the Lagrangian structure function ( $H_{fp} = \sqrt{\epsilon_f C_0}$ ).  $G_{fp,ij}$  is a second order tensor of fluid statistics viewed by the particles. For non settling particles, Simonin *et al.* [11] propose a spherical form for this tensor.

$$G_{fp,ij} = - \frac{1}{\tau_{fp}^t} \delta_{ij} \quad (8)$$

where  $\tau_{fp}^t$ , the eddy particle interaction time is written

$$\tau_{fp}^t = \frac{1}{\beta_1} \frac{q_f^2}{\epsilon_f} \quad \beta_1 = \frac{1}{2} + \frac{3}{4} C_0 \quad (9)$$

The second term of the right hand side in Eq. (1) can be written :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial c_{f,i}} \left[ \left\langle \frac{du_{f,i}}{dt} \middle| \mathbf{c}_p, \mathbf{c}_f \right\rangle f_{fp} \right] &= \frac{\partial}{\partial c_{f,i}} \left[ \left( - \frac{1}{\rho_f} \frac{\partial P_f}{\partial x_i} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + [c_{p,m} - c_{f,m}] \frac{\partial U_{f,i}}{\partial x_m} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + G_{fp,im} [c_{f,m} - U_{f,m}] \right) f_{fp} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\partial}{\partial c_{f,i}} \left( \frac{1}{2} H_{fp} f_{fp} \right) \right] \end{aligned} \quad (10)$$



Other forms of the Langevin equation can be chosen to simulate the fluid velocity along the particle path (see for example Simonin [7]). In particular Minier & Peirano [12] write the mean fluid shear term of Eq. (7) in function of the mean relative velocity, so that the Langevin equation is written :

$$\begin{aligned} du_{f,i} = & -\frac{1}{\rho_f} \frac{\partial P_f}{\partial x_i} dt \\ & + (U_{p,j} - \langle u_{f,j} \rangle_p) \frac{\partial U_{f,i}}{\partial x_j} dt \\ & + G_{fp,ij}^* (u_{f,j} - U_{f,j}) dt + H_{fp}^* \delta W_{fp,i} \end{aligned} \quad (11)$$

using the same closure for  $G_{fp,ij}^*$  and  $H_{fp}^*$  than for  $G_{fp,ij}$  and  $H_{fp}$ , respectively.

### Collision operator closure

Considering only binary collisions, the collision operator in Eq. (1) can be written :

$$\left( \frac{\partial f_{fp}}{\partial t} \right)_{coll} = -d_p^2 \int_{(\mathbf{g}, \mathbf{k} < 0)} \Delta f_{fpfp}(\mathbf{c}_{fA}, \mathbf{c}_{pA}, \mathbf{x}_A, \mathbf{c}_{fB}, \mathbf{c}_{pB}, \mathbf{x}_A + d_p \mathbf{k}, t) (\mathbf{g}, \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{c}_{pB} d\mathbf{c}_{fB} \quad (12)$$

where  $f_{fpfp}$  is the pair fluid-particle distribution function,  $\Delta f_{fpfp}$  represents the variation of  $f_{fpfp}$  induced by collision,  $\mathbf{k}$  is the unit vector directed from the center of particle  $A$  to the center of particle  $B$  and  $\mathbf{g}$  is the relative velocity between the colliding particles  $\mathbf{g} = \mathbf{c}_{p,B} - \mathbf{c}_{p,A}$ . Assuming that the particles are rigid smooth spheres with identical diameter, equations governing a binary collision between a particle  $A$  and a particle  $B$  are :

$$\mathbf{c}_{p,A}^* = \mathbf{c}_{p,A} + \frac{1+e_c}{2} (\mathbf{g}, \mathbf{k}) \cdot \mathbf{k} \quad (13)$$

$$\mathbf{c}_{p,B}^* = \mathbf{c}_{p,B} - \frac{1+e_c}{2} (\mathbf{g}, \mathbf{k}) \cdot \mathbf{k} \quad (14)$$

where  $\mathbf{c}_{pA}^*$  and  $\mathbf{c}_{pB}^*$  are the post-collisional velocities of the particles and  $e_c$  is the normal restitution coefficient ( $0 < e_c \leq 1$ ). In this frame of collision modelling approach  $\Delta f_{fpfp}$  is written :

$$\begin{aligned} \Delta f_{fpfp} = & \frac{1}{e_c^2} f_{fpfp}(\mathbf{c}_{fA}, \hat{\mathbf{c}}_{pA}, \mathbf{x}_A, \mathbf{c}_{fB}, \hat{\mathbf{c}}_{pB}, \mathbf{x}_A + d_p \mathbf{k}, t) \\ & - f_{fpfp}(\mathbf{c}_{fA}, \mathbf{c}_{pA}, \mathbf{x}_A, \mathbf{c}_{fB}, \mathbf{c}_{pB}, \mathbf{x}_A + d_p \mathbf{k}, t) \end{aligned} \quad (15)$$

with  $\hat{\mathbf{c}}_{pA}$  and  $\hat{\mathbf{c}}_{pB}$  given by :

$$\hat{\mathbf{c}}_{pA} = \mathbf{c}_{pA} + \frac{\mathbf{c}_{pA}^* - \mathbf{c}_{pA}}{e_c} \quad \hat{\mathbf{c}}_{pB} = \mathbf{c}_{pB} + \frac{\mathbf{c}_{pB}^* - \mathbf{c}_{pB}}{e_c} \quad (16)$$

In the frame of the kinetic theory of dilute gases, the pair distribution is written in term of the single distribution functions assuming that colliding particles are completely independent (molecular chaos assumption). This assumption is not appropriate for particles interacting with a turbulent flow which will induce correlations between positions and velocities of particles. In addition, the particle diameter being smaller than the Taylor length scale ( $d_p \ll \lambda$ ) and the response time of the particle larger than the Kolmogorov time scale ( $\tau_p \gg \tau_K$ ), the effective fluid velocities viewed by the neighboring particle may be assumed to be nearly identical. Following Laviéville *et al.* [4], a closure assumption called correlated colliding particle closure is proposed:

$$f_{fpfp}(\mathbf{c}_{fA}, \mathbf{c}_{pA}, \mathbf{c}_{fB}, \mathbf{c}_{pB}) = f_p(\mathbf{c}_{pA} | \mathbf{c}_{fA}) f_p(\mathbf{c}_{pB} | \mathbf{c}_{fB}) \delta(\mathbf{c}_{fA} - \mathbf{c}_{fB}) f_{fp}(\mathbf{c}_{fA}) \quad (17)$$

where  $f_p(\mathbf{c}_{pA} | \mathbf{c}_{fA})$  is the particle probability density function conditioned by the fluid velocity  $\mathbf{c}_{fA}$  and  $f_{fp}(\mathbf{c}_{fA})$  is the probability for having a fluid velocity  $\mathbf{c}_{fA}$  at any particle position, thus we have by definition the relation :  $f_{fp}(\mathbf{c}_{fA}, \mathbf{c}_{pA}) = f_p(\mathbf{c}_{pA} | \mathbf{c}_{fA}) f_{fp}(\mathbf{c}_{fA})$

### MOMENT METHOD

Transport equations for velocity moments (number density  $n_p$ , mean velocity, kinetic stresses, ...) are obtained by multiplying the microscopic kinetic equation (Eq. 1) governing  $f_{fp}$  by an appropriate function of fluid and particle velocities and integrating over all fluid and particle velocity spaces.

### Fluid Reynolds stress transport equations

Restricting our attention to non settling particles suspended in turbulent gas flows with a uniform mean velocity shear, the equation governing the fluid Reynolds stress tensor components viewed by the particles (average on the particle distribution) is found to be nearly identical to the one derived in the frame of single-phase fluid turbulence modelling :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle u'_{f,i} u'_{f,j} \rangle_p = & - \langle u'_{f,i} u'_{f,m} \rangle_p \frac{\partial U_{f,j}}{\partial x_m} \\ & - \langle u'_{f,j} u'_{f,m} \rangle_p \frac{\partial U_{f,i}}{\partial x_m} \\ & + G_{fp,im} \langle u'_{f,j} u'_{f,m} \rangle_p \\ & + G_{fp,jm} \langle u'_{f,i} u'_{f,m} \rangle_p + C_0 \varepsilon_f \delta_{ij} \end{aligned} \quad (18)$$

where  $\mathbf{u}'_f$  is the fluctuating part of the fluid velocity. The three last terms on the right hand side of Eq. (18) represent pressure-strain correlations and viscous dissipation rate. The two first terms represent the production by the mean velocity shear. We

can point out that, when using the alternative Langevin equation (Eq. 11), the production terms are written as proportional to the fluid-particle velocity correlations instead of the fluid ones.

### Particle kinetic stress transport equations

The equation governing the particle kinetic stress tensor components may be written as

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle u'_{p,i} u'_{p,j} \rangle_p = \Pi_{p,ij} - \left[ \langle u'_{p,i} u'_{p,m} \rangle_p \frac{\partial U_{p,j}}{\partial x_m} + \langle u'_{p,j} u'_{p,m} \rangle_p \frac{\partial U_{p,i}}{\partial x_m} \right] + C_{p,ij} \quad (19)$$

Where  $\mathbf{U}_p$  is the mean particle velocity,  $\mathbf{u}'_p$  is the fluctuating part of the particle velocity. The first term on the right hand side of the above equation  $\Pi_{p,ij}$  represents the effect of the fluid turbulence on the particles. Following [13] the non linear dependence of the drag coefficient on the instantaneous relative velocity is modelled by introducing a mean particle relaxation time  $\langle \tau_{fp}^F \rangle_p$ ,

$$\Pi_{p,ij} = -\frac{1}{\langle \tau_{fp}^F \rangle_p} [ 2 \langle u'_{p,i} u'_{p,j} \rangle_p - \langle u'_{f,i} u'_{f,j} \rangle_p - \langle u'_{f,j} u'_{f,i} \rangle_p ] \quad (20)$$

where the mean particle relaxation time is approximated :

$$\frac{1}{\langle \tau_{fp}^F \rangle_p} = \frac{3}{4} \frac{\rho_f \langle C_D \rangle_p}{\rho_p d_p} \langle |\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_f| \rangle_p \quad (21)$$

The second term of Eq. (19) is exact and represents the production due to the mean particle velocity gradient. The last term  $C_{p,ij}$  accounts for particle-particle collision and needs to be modelled from Eq. (12).

### Fluid-particle velocity correlation equations

The transport equation of the fluid-particle velocity correlation may be written as,

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle u'_{f,i} u'_{p,j} \rangle_p = \Pi_{fp,ij} - \left[ \langle u'_{f,i} u'_{p,m} \rangle_p \frac{\partial U_{p,j}}{\partial x_m} + \langle u'_{p,j} u'_{f,m} \rangle_p \frac{\partial U_{f,i}}{\partial x_m} \right] + G_{fp,im} \langle u'_{f,m} u'_{p,j} \rangle_p + C_{fp,ij} \quad (22)$$

The first term on the right hand side represents the effect of

particle interaction with the fluid turbulence and is written

$$\Pi_{p,ij} = -\frac{1}{\langle \tau_{fp}^F \rangle_p} [ \langle u'_{f,i} u'_{p,j} \rangle_p - \langle u'_{f,i} u'_{f,j} \rangle_p ] \quad (23)$$

The second term of Eq. (22) represents the production due to the mean fluid and particle velocity gradient. The third term accounts for velocity-pressure correlation, crossing-trajectory effects and viscous dissipation, with  $G_{fp,ij}$  given by Eq. (8). The last term  $C_{fp,ij}$  accounts for particle-particle collision effects.

### Collision terms

In the frame of kinetic theory of dry granular flows [14], the collisional term in the kinetic stress equation can be modeled assuming molecular chaos in Eq. (15) and using a Grad's development of  $f_{fp}$ . In the case of correlated colliding particle closure (Eq. 17) Laviéville *et al.* [4] are using a Grad's development of  $f_{fp}$  in term of both the particle and fluid velocities, for elastic collisions ( $e_c = 1$ ),  $C_{fp,ij}$  and  $C_{p,ij}$  are written :

$$C_{fp,ij}(u'_{f,i} u'_{p,j}) = 0 \quad (24)$$

$$C_{p,ij}(u'_{p,i} u'_{p,j}) = -\frac{4}{5\tau_p^c} [\hat{R}_{p,ij} - 2\gamma_{fp} \hat{R}_{fp,ij} + \gamma_{fp}^2 \hat{R}_{f,ij}] \quad (25)$$

$$\hat{R}_{f,ij} = \langle u'_{f,i} u'_{f,j} \rangle_p - \frac{2}{3} q_f^2 \delta_{ij}$$

$$\hat{R}_{p,ij} = \langle u'_{p,i} u'_{p,j} \rangle_p - \frac{2}{3} q_p^2 \delta_{ij}$$

$$\hat{R}_{fp,ij} = \frac{1}{2} [ \langle u'_{f,i} u'_{p,j} \rangle_p + \langle u'_{p,i} u'_{f,j} \rangle_p ] - \frac{1}{3} q_{fp} \delta_{ij}$$

where  $q_f^2$  is the fluid turbulent kinetic energy,  $q_p^2$  is the particle fluctuating kinetic energy and  $q_{fp}$  is the fluid-particle velocity covariance.  $\tau_p^c$  is the inter-particle collision time given by

$$\tau_p^c = \left[ n_p \pi d_p^2 \sqrt{\frac{16}{\pi} \frac{2}{3} q_p^2 (1 - \xi_{fp}^2)} \right]^{-1} \quad (26)$$

$\gamma_{fp}$  and  $\xi_{fp}$  are written as :

$$\gamma_{fp} = \frac{q_{fp}}{2q_f^2} \quad \xi_{fp}^2 = \frac{q_{fp}}{2q_f^2} \frac{q_{fp}}{2q_p^2} \quad (27)$$

It must be noticed that this form is consistent with the form issued from the kinetic theory of dry granular flows. Indeed, if there is no correlation induced by turbulence the coefficient  $\xi_{fp}$  is equal to zero and  $C_{p,ij}$  reduces to the form proposed by Jenkins & Richmann [14].

## STOCHASTIC LAGRANGIAN SIMULATION

Stochastic Lagrangian methods have been extensively developed in the frame of kinetic theory of rarefied gases [15] but also in gas-solid turbulent flows [2, 3]. These methods are very interesting because they allow to simulate a huge number of real particles by tracking few numerical particles. Covering the computational domain with cells  $C_j$ , the key idea of stochastic methods is to approximate  $f_{fp}$  by a sum of Dirac masses :

$$f_{fp}^{(\mathcal{N}_p)}(\mathbf{c}_p, \mathbf{c}_f, \mathbf{x}, t) = \sum_j \frac{\chi_{C_j}(\mathbf{x})}{V_{C_j}} \sum_{i=1}^{\mathcal{N}_{p_j}} \kappa_i \delta[\mathbf{c}_p - \mathbf{u}_p^i(t)] \times \delta[\mathbf{c}_f - \mathbf{u}_f^i(t)] \quad (28)$$

where  $V_{C_j}$  is the volume of the cell  $C_j$ ,  $\mathcal{N}_p$  is the total number of numerical particle,  $\mathcal{N}_{p_j}$  is the numerical particle number in the cell  $C_j$  where any  $i$ -particle represents  $\kappa_i$  real particles. The function  $\chi_{C_j}(\mathbf{x})$  is defined such that :

$$\chi_{C_j}(\mathbf{x}) = 1 \text{ if } \mathbf{x} \in C_j \quad (29)$$

$$\chi_{C_j}(\mathbf{x}) = 0 \text{ otherwise} \quad (30)$$

To resolve Eq. (1) with the stochastic Lagrangian method, a splitting method is used such as the particles transport is evaluated first and, next, a collision step is performed.

### Transport step

The numerical particles follow the same transport equations as the real particles (Eq. 2 and 3). According to the closure of turbulence effects and particle path in Eq. (1), the Langevin equation (Eq. 7) is used for computing the fluid velocity viewed by the particle along their path.

### Collision step

Classical Monte Carlo algorithms were developed for rarefied gases based on the molecular chaos assumption (Bird [16]; Babovsky [17]). Both algorithms have been used in this work. Previously they were tested for inter-particle collision numerical treatment in Homogeneous Isotropic gas-solid turbulent flow. As expected, comparison with DPS/LES results show an underestimation of the particle kinetic energy due to the destruction of the fluid-particle covariance by the collision numerical treatment [18].

To avoid such an effect, the Monte-Carlo Correlated Collision (in short M3C) was developed for the collision operator closure given by Eq. (17). Details of M3C algorithm can be found in Appendix A and [5]. Hence, the particle-particle collision is conditioned by the fact that the instantaneous fluid velocities viewed by the particles are nearly identical.

Table 1. PARTICLE INITIAL CONDITIONS.

Particle properties	
Particle diameter, $d_p$ (m)	$656 \cdot 10^{-6}$
Particle density, $\rho_p$ ( $kg/m^3$ )	100
Volumetric fraction, $\alpha_p$	0.0125
Stokes relaxation time, $\tau_p$ (s)	$139.8 \cdot 10^{-3}$
Particle Reynolds number, $Re_p$	19.4
Initial particle statistics	
Fluctuating kinetic energy, $q_p^2$ ( $m^2/s^2$ )	0.039
Fluid-particle covariance, $q_{fp}$ ( $m^2/s^2$ )	0.078
Mean particle relaxation time, $\tau_{fp}^F$ (s)	$76.3 \cdot 10^{-3}$

Table 2. FLUID INITIAL CONDITIONS.

Fluid properties	
Fluid density, $\rho_f$ ( $kg/m^3$ )	1.17
Molecular viscosity, $\nu_f$ ( $m^2/s$ )	$1.47 \cdot 10^{-5}$
Initial fluid statistics	
Turbulent kinetic energy, $q_f^2$ ( $m^2/s^2$ )	0.12
Lagrangian integral time $\tau_{fp}^t$ (s)	$36.7 \cdot 10^{-3}$

### Simulation conditions

Simulations of homogeneous shear flows were performed for a uniform and constant shear rate without gravity effect. The mean flow direction is the  $x_1$ -direction and the mean shear is following the  $x_3$ -direction. The mean fluid velocity  $\mathbf{U}_f$  and the mean particle velocity  $\mathbf{U}_p$  are given by

$$U_{f,i} = S_f x_3 \delta_{i1} \quad S_f = \frac{\partial U_{f,1}}{\partial x_3} \quad (31)$$

$$U_{p,i} = S_p x_3 \delta_{i1} \quad S_p = \frac{\partial U_{p,1}}{\partial x_3} \quad (32)$$

$S_f$  and  $S_p$  denote the constant and uniform mean shear flow rates and, in the following,  $S_f = S_p = 50 \text{ s}^{-1}$ .

The initial conditions for the gas and particle velocities are taken from numerical simulations of homogeneous and isotropic turbulent flows (Tables 1 and 2). The particles were allowed to disperse sufficiently before to endure the mean shear rate in order to be in equilibrium with the fluid turbulence. Initial fluid and particle velocities are taken as the sum of the turbulent component from the homogeneous isotropic simulation and the mean

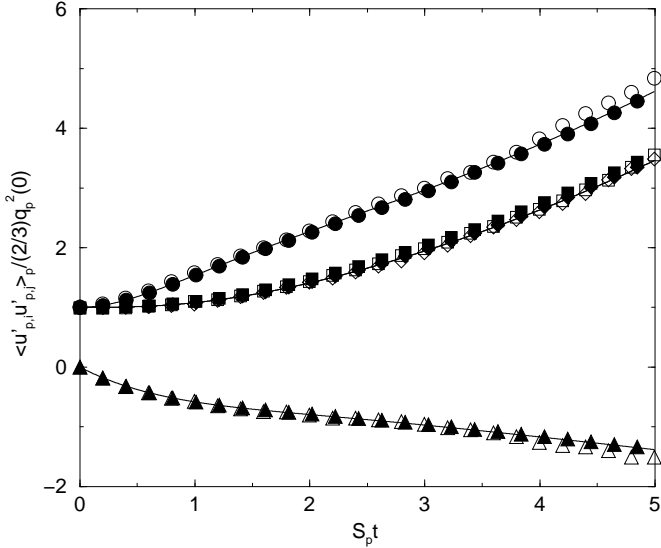


Figure 1. Time development of the particle kinetic stresses in homogeneous dry granular shear flow with elastic particle-particle collisions. Empty symbols are the Monte Carlo simulation results, filled symbols are DPS results : streamwise component (circles), transverse components (squares and diamonds), shear stress component (triangles) and the lines are model predictions from the kinetic theory of dry granular flows.

component from the homogeneous shear with respect to the initial particle position :

$$u_{f,i}(\mathbf{x}, t = 0) = S_f x_3 \delta_{i1} + u'_{f,i}(\mathbf{x}) \quad (33)$$

$$u_{p,i}(\mathbf{x}, t = 0) = S_p x_3 \delta_{i1} + u'_{p,i}(\mathbf{x}) \quad (34)$$

The computational domain is a cubic box (length of the box :  $L_b = 0.192 \text{ m}$ ). Periodic boundary conditions are used for the fluctuating part of the fluid and the particle velocities. Any particle crossing one edge of the computational domain is replaced by a new one entering through the symmetrical side with corrected instantaneous velocities according to the mean velocities distribution. The flow being statistically homogeneous, the Monte Carlo algorithm is considering only one cell for representing the computational domain. But, to insure an homogeneous distribution of particle turbulent properties, the collisions are performed considering only the fluctuating part of the fluid and particle velocities associated to each colliding particle and obtained by subtraction of the mean shear contributions with respect to the instantaneous particle position.

The time step  $\Delta t$  of the simulation was tested on the fluid Reynolds stresses variance leading to choose  $\Delta t = 6.25 \cdot 10^{-5} \text{ s}$  (with a relative error of 2% for 10000 numerical particles with  $\kappa_i = 60$ ). The random number are computed using the generator describe by Knuth [19].

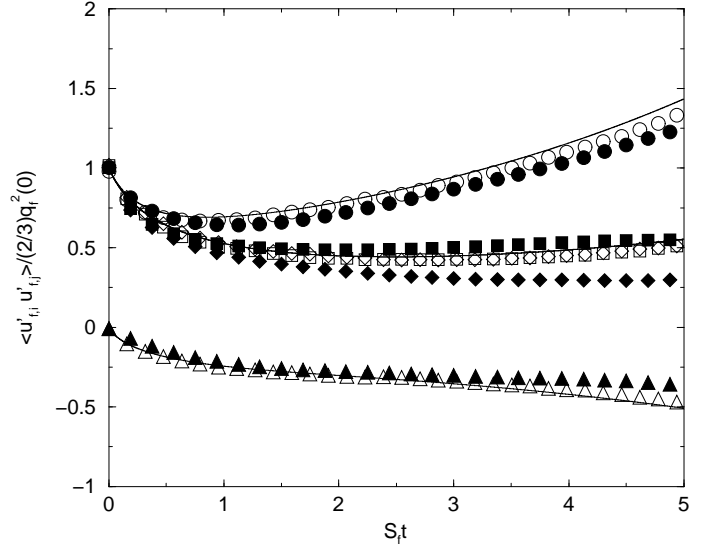


Figure 2. Time development of the fluid Reynolds stresses viewed by the particles in homogeneous turbulent shear flow, stochastic simulation results (empty symbols) or DPS/LES results (filled symbols) (symbol legend : see Fig. 1) and the lines are predictions from the moment method (Eq. 18).

## RESULTS AND DISCUSSIONS

### Dry granular flow predictions

To validate the collision algorithm, simulations of dry granular shear flows have been performed. Figure 1 shows the comparison of Monte Carlo simulation results with predictions of the moment approach and with Deterministic Particle Simulation (DPS) results. According to the corresponding transport equation given by the moments method, the streamwise velocity correlation (circles) and shear stress (triangles) are produced by the mean velocity gradient production. The collisions effect is to redistribute the fluctuating motion to the transverse components (square and diamond). The good agreement between stochastic and DPS results is validating the numerical accuracy of the Monte-Carlo algorithm. In addition, the good agreement between the moment predictions and the stochastic Lagrangian simulation results is validating the Grad's development used for the collision operator modelling.

### Fluid flow predictions

Single-phase analysis have been done to validate the Langevin model for turbulent shear flow. As point out by Laviéville *et al.* [6], the fluid turbulence viewed by the particles is nearly identical to the standard fluid turbulence computed by LES. In order to compare stochastic results with Deterministic Particle Simulation/Large Eddy Simulation performed by Laviéville *et al.* [6],  $q_f^2/\epsilon_f$  needed in the Langevin equation (see Eq. 9) is taken from LES results. Figure 2 shows the good agree-

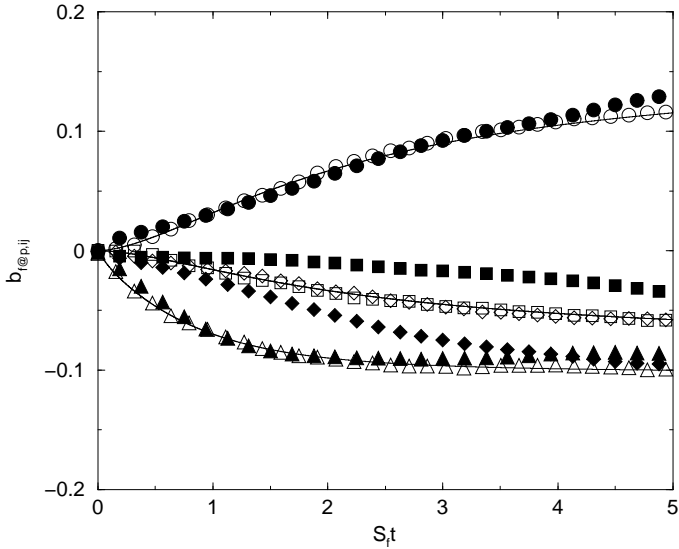


Figure 3. Time development of the normalised fluid turbulence anisotropy tensor, viewed by the particles in homogeneous turbulent shear flow. Empty symbols are the stochastic simulation results and filled symbols are DPS/LES results (symbol legend : see Fig. 1) and the lines are predictions from the moment method.

ment between DPS/LES and stochastic simulation results. As expected, the gap between the two transverse velocity correlations (square and diamond) measured in LES is not predicted by the stochastic simulation and the moment method. This is due to the spherical form for  $G_{fp,ij}$  which leads to a simple Rotta isotropisation model in the fluid Reynolds stress transport equation.

The normalised fluid turbulence anisotropy tensor viewed by the particles  $b_{f@p}$  is shown by Fig. 3, where  $b_{f@p}$  is written

$$b_{f@p,ij} = \frac{\langle u'_{f,i} u'_{f,j} \rangle_p}{2q_f^2} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \quad (35)$$

The agreement between model predictions (from stochastic Lagrangian simulation and moment method) and DPS/LES results is very satisfactory. The transverse component anisotropy is found to be approximately the average of the separate contributions measured from DPS/LES.

The comparison of fluid turbulent kinetic energy model predictions with DPS/LES results shows an overprediction increasing with time until 15 % (Fig. 5). Such discrepancy might be reduced by using more sophisticated forms for the pressure-strain correlations through the modelling of the  $G_{fp,ij}$  term [10].

Figure 4 shows the comparison of the predictions using the two proposed forms for the Langevin equation : Eq. 7 and Eq. 11. We can see that the Langevin equation (Eq. 11) given by Minier & Peirano [12] leads to underestimate appreciably the streamwise and shear stress components. Such modelling ap-

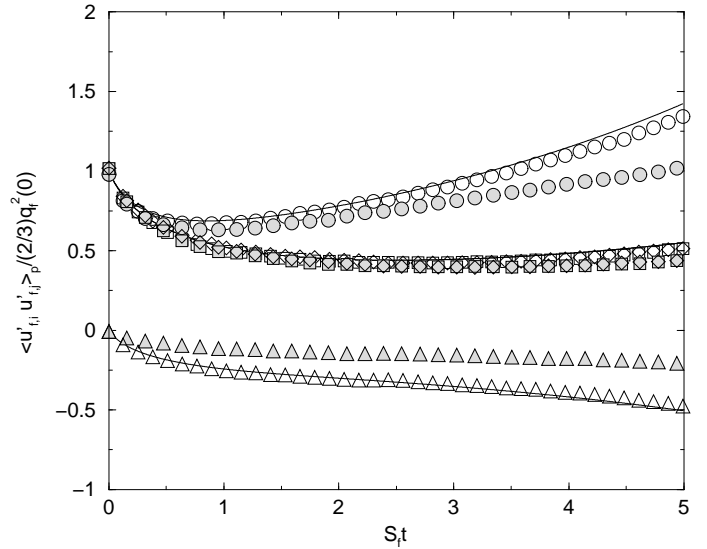


Figure 4. Time development of the fluid Reynolds stresses in homogeneous turbulent shear flow, stochastic simulation results with Eq. (7) (empty symbols) or with Eq. (11) (gray filled symbols) for the Langevin equation of the fluid velocity along the particle paths (symbol legend : see Fig. 1) and the lines are predictions from the moment method (Eq. 18).

proach does not insure the same predicted values for the standard fluid Reynolds stresses and the ones viewed by the particles, in contradiction with DPS/LES results.

### Particle and fluid-particle correlations

Figures 7 and 8 show the comparisons between particle-particle and fluid-particle velocity correlations from stochastic Lagrangian simulations, moment method predictions and DPS/LES with and without collision effect.

The good agreement between stochastic simulation and moment method predictions for particle-particle and fluid-particle velocity correlations without collision effects is validating the modelling of the mean particle relaxation time  $\langle \tau_{fp}^f \rangle_p$  (Eq. 21). The streamwise velocity correlation and shear stress are dominated by both the interaction with the fluid turbulence and the production by the mean particle velocity gradient. In contrast, without collision effect, transverse components of the particle kinetic stress tensor are dominated by the interaction with the fluid turbulence, only, whose the efficiency is decreasing with the partial inertia. The evolution of fluid-particle covariance and the particle kinetic energy is qualitatively the same for DPS/LES results, moment method predictions and stochastic simulations results (Fig. 5). But stochastic simulations and moment method predictions appreciably overestimate the fluid-particle covariance and the particle kinetic energy with respect to DPS/LES results. The discrepancies concerning the particle kinetic stress model prediction are due to the overestimation of the

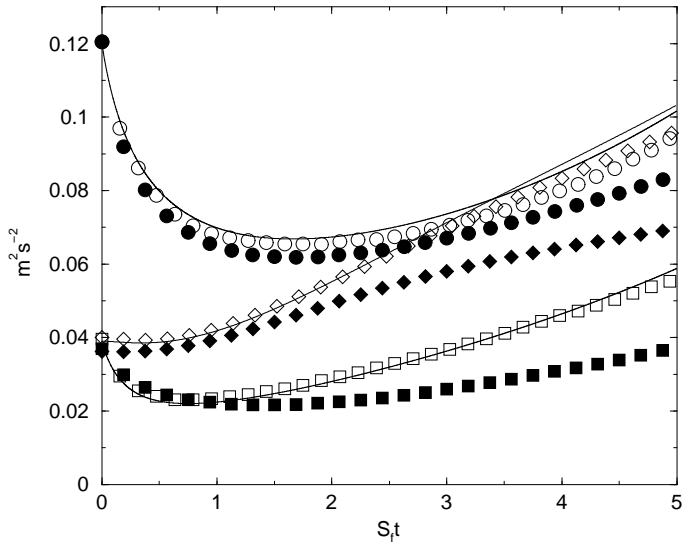


Figure 5. Time development of the fluid turbulent kinetic energy (circle), particle turbulent kinetic energy (diamond) and half the fluid-particle covariance (square) in homogeneous turbulent shear flow without collision effects. Lagrangian stochastic simulation results are empty symbols. DPS/LES results are filled symbols and the lines are predictions from the moment method.

fluid-particle velocity correlations. Indeed moment predictions of particle kinetic stresses using fluid-fluid and fluid-particle velocity correlations measured from DPS/LES are in very good agreement with DPS/LES results [4]. Unfortunately, the overestimation of particle kinetic energy, due to the lack of accuracy of the fluid turbulence model, will not allow a quantitative validation of collision modelling.

Figure 7 shows that the most noticeable effect of the interparticle collisions measured in DPS/LES is to reduce the anisotropy of the particle kinetic stress tensor by decreasing the streamwise component and increasing the transverse components. This result is consistent with the detailed analysis of the budgets of particle kinetic stress transport equations showing that the collisions lead to a redistribution mechanism between the separate diagonal kinetic stress components without modification of the whole kinetic energy. In addition, the collisions induce a reduction of the kinetic shear stress which, through the production by the mean shear rate, leads to a slight decrease of the particle kinetic energy  $q_p^2$ . Figure 8 shows a slight increase of the fluid-particle velocity correlation measured in DPS/LES when accounting for interparticle collisions. Following Laviéville *et al.* [6] this effect does not come directly from collisions but from an increase of the eddy particle interaction time  $\tau_{fp}^t$  due to the instantaneous particle distribution with respect to the fluid turbulence velocity field and this effect is not accounting for in the modelling approaches (Eq. 9).

When performing decorrelated collision modelling (dashed

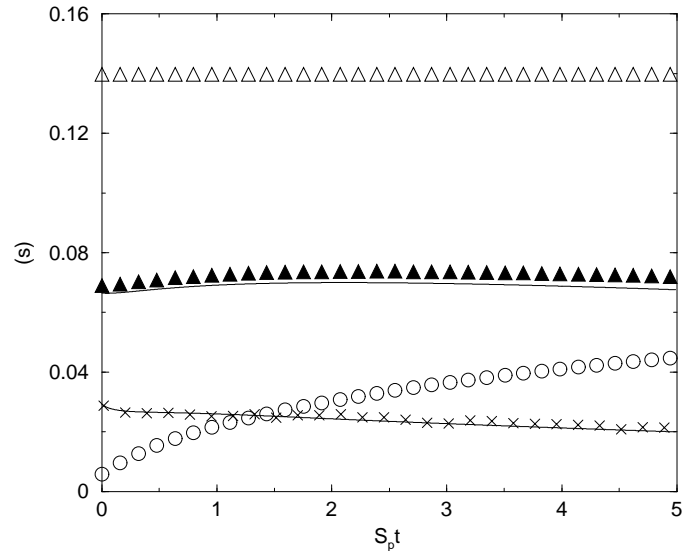


Figure 6. Time development of the particle relaxation time and the collision time in homogeneous turbulent shear flow with particle-particle collision influence. Symbols are the stochastic simulation results : mean particle relaxation time  $\tau_{fp}^F$  (filled triangles), collision time (cross), eddy particle interaction time  $\tau_{fp}^t$  (circle), Stokes relaxation time (empty triangles) and the lines are predictions from the moment method.

symbols), the streamwise components of the fluid-particle velocity correlation and particle kinetic stress tensors breakdown (Fig. 7 and 8). This effect is mainly due to the destruction of the fluid-particle covariance by the collisions as shown by Fig. 8 and is similar to the effect found in homogeneous isotropic turbulence [1, 5]. So that the decorrelated collision model is not satisfactory in homogeneous turbulent gas-solid shear flow even for such inertial particle,  $S_p \tau_{fp}^F \approx 3.5$ . In contrast, Fig. 8 shows that the correlated collision modelling approaches (stochastic Lagrangian simulation and moment method) allow to reproduce a correct behaviour for the fluid-particle velocity correlations. And, as shown by Fig. 7, the modelling of collision effects on the particle kinetic stresses looks in much better agreement with respect to DPS/LES results. The measured collision time is varying from about 1/2 to 1/3 of the particle relaxation time during the simulation (Fig. 6). The collision time given by stochastic simulations using M3C algorithm is identical to the one computed in the frame of the moment method using correlated collision closure (Eq. 26), this agreement is validating the numerical treatment of the collisions with M3C algorithm.

## CONCLUSIONS

This work is considering a statistical description of gas-solid turbulent flows based on pdf equation. Two approaches based on the same pdf equation are used for the prediction of colliding particle statistics in homogeneous turbulent shear flow. The La-

grangian stochastic simulation approach is a particulate numerical resolution method, while the moment method is based on transport equations derived from the pdf equation. The correlation between colliding particle velocities is accounted for in both approaches using a specific closure for the pair particle pdf in the collision operator proposed by Laviéville et al. [4]. Stochastic Lagrangian simulations using a correlated collision Monte Carlo algorithm (M3C) have been performed in gas-solid homogeneous turbulent shear flows. Numerical predictions have been successfully compared with moment method predictions and results from Deterministic Particle Simulation coupled with Large Eddy Simulations of the gas turbulence (DPS/LES). A limit of the present work is due to the stochastic modelling of the fluid turbulence along the particle path, using a Langevin equation, which leads to overestimate the fluid-particle velocity correlations. More sophisticated approaches are under evaluation.

## REFERENCES

- [1] A. Berlemont, O. Simonin, and M. Sommerfeld. Validation of inter-particle collision models based on large eddy simulation. In *Gas-Solid Flows*. ASME FED, 1995.
- [2] M. Sommerfeld. Inter-particle collisions in turbulent flows : a stochastic lagrangian model. In *Proc. Turbulence and Shear Flow Phenomena - 1*. Santa Barbara, 1999.
- [3] J. Hylkema and P. Villedieu. A random particle method to simulate coalescence phenomena in dense liquid sprays. In *Proc. 16th Int. Conf. on Num. Meth. in Fluid Dyn., Lecture Notes in Physics 515*, Springer-Verlag, 1999.
- [4] J. Laviéville, E. Deutsch, and O. Simonin. Large eddy simulation of interactions between colliding particles and a homogeneous isotropic turbulence field. In *6<sup>th</sup> Symposium on Gas-Solid Flows*. ASME FED, 1995.
- [5] P. Fede, O. Simonin, and P. Villedieu. Monte carlo simulation of colliding particles in gas-solid turbulent flows from a joint fluid-particle pdf equation. In *5th Symp. on Numerical Methods for Multiphase Flows*. ASME FED, 2002.
- [6] J. Laviéville, O. Simonin, A. Berlemont, and Z. Chang. Validation of inter-particle collision models based on large-eddy simulation in gas-solid turbulent shear flow. In *Proc. 7<sup>th</sup> Int. Symp. on Gas-Particle Flows*. ASME FED, 1997.
- [7] O. Simonin. Combustion and turbulence in two-phase flows. In *Lecture Series 1996-02*. von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1996.
- [8] L. Schiller and A. Nauman. A drag coefficient correlation. *V.D.I. Zeitung*, 77:318–320, 1935.
- [9] D. C. Haworth and S. B. Pope. A generalized langevin model for turbulent flows. *Phys. Fluids*, 2:738–744, 1986.
- [10] S. B. Pope. Lagrangian pdf methods for turbulent flows. *Annu. Rev. Phys. Mech.*, 26:23–63, 1994.
- [11] O. Simonin, E. Deutsch, and J.P. Minier. Eulerian prediction of the Fluid/Particle correlated motion in turbulent two-phase flows. *App. Sci. Res.*, 51:275–283, 1993.
- [12] J. P. Minier and E. Peirano. The pdf approach to turbulent polydispersed two-phase flows. *Physic Report*, 352:1–214, 2001.
- [13] O. Simonin. Prediction of the dispersed phase turbulence in particle-laden jets. In *Gas-Solid Flows*. ASME FED, 1991.
- [14] J.T. Jenkins and M.W. Richman. Grad's 13-moments system for dense gas of inelastic spheres. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 87:355–377, 1995.
- [15] G. A. Bird. Direct numerical and the boltzmann equation. *Phys. fluids*, 11:2676–2681, 1969.
- [16] G. A. Bird. *Molecular Gas Dynamics*. Clarendon Press, Oxford, 1976.
- [17] H. Babovsky. On a simulation scheme for the boltzmann equation. *Mth. Meth. In the Appl. Sc.*, 8:223–233, 1986.
- [18] P. Fede, O. Simonin, and P. Villedieu. Description statistique et méthode de monte-carlo appliquée aux écoulements turbulents gaz-particules. In *XV<sup>eme</sup> Congrès français de Mécanique*, 2001.
- [19] D. E. Knuth. *Seminumerical Algorithms*. Addison-Wesley, Reading, 1981.

## Appendix A : "Monte Carlo Collision Correlated" algorithm

1. The time  $t_k^c$  where a new collision may occur according to a Poisson law is given by :  $t_k^c = t_{k-1}^c - \ln \hat{x} / [\frac{\kappa}{V_C} \frac{\mathcal{N}_p(\mathcal{N}_p-1)}{2} \lambda]$  where  $\hat{x}$  is an uniform random variable such that :  $\hat{x} \in [0, 1]$ .
2. Two particles A and B are randomly chosen. If their fluid velocities  $\mathbf{u}_{f,A}$  and  $\mathbf{u}_{f,B}$  are in agreement with the correlations conditions following each direction  $\alpha = 1$  to 3 :

$$|u_{f,A,\alpha} - u_{f,B,\alpha}| \leq \beta \sqrt{\langle u'_{f,\alpha} u'_{f,\alpha} \rangle_p}$$

, the algorithm goes to the next step, else two new particles are randomly chosen. The correlation parameter  $\beta$  is fixed to 0.36.

3. The collision probability  $q(A,B) = \pi d_p^2 |\mathbf{u}_{p,A} - \mathbf{u}_{p,B}|$  is calculated and we use the following rejection method : a new random number  $\hat{y}$  is computed following a uniform law ( $\hat{y} \in [0, 1]$ ).
  - (a) if  $\lambda \cdot \hat{y} \leq q(A,B)$  then collision is performed, and the new particle velocities are computed with Eq. (13) and Eq. (14)
  - (b) if  $\lambda \cdot \hat{y} > q(A,B)$  then collision is 'fictitious' and the particle velocities are unchanged
4. A new  $t_{k+1}^c$  is computed and the algorithm is repeated while  $t_{k+1}^c \leq \Delta t$ .

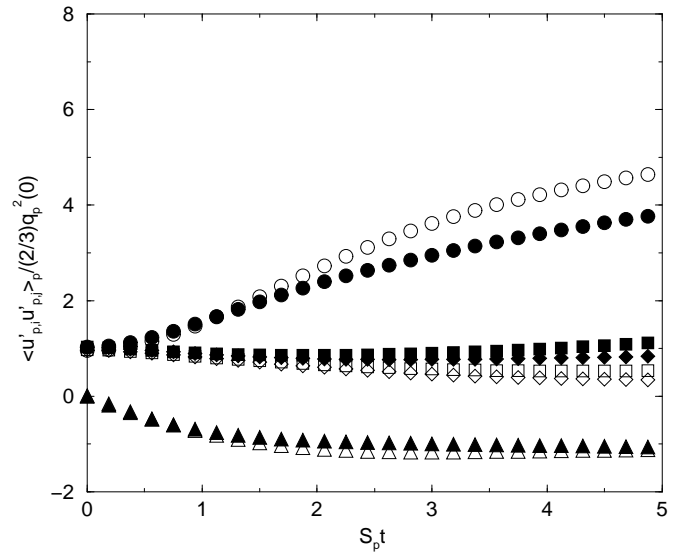
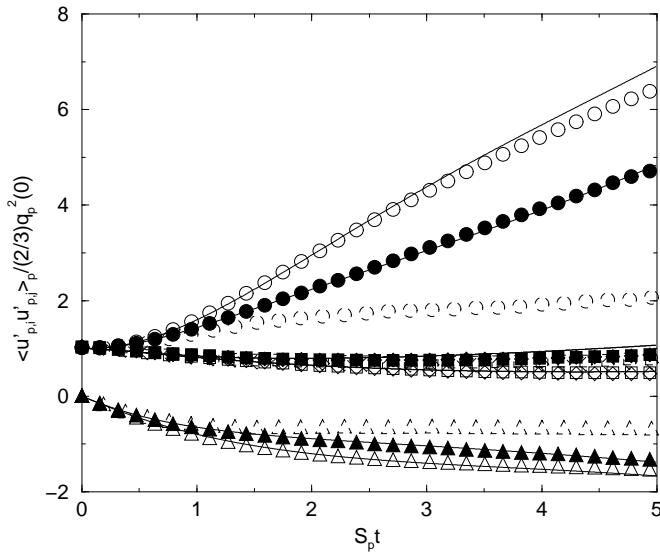


Figure 7. Time development of the particle kinetic stresses. On the left, comparison between stochastic simulation results (symbols) and model predictions from the moment method (lines) without collision effect (empty symbols), with uncorrelated collisions (dashed symbols), with correlated collisions (filled symbols). On the right, DPS/LES results without collision effect (empty symbols) and with collision effect (filled symbols). streamwise component,  $\langle u'_{p,1} u'_{p,1} \rangle_p$  : circles, transverse components,  $\langle u'_{p,2} u'_{p,2} \rangle_p$  and  $\langle u'_{p,3} u'_{p,3} \rangle_p$  : squares and diamonds respectively, shear stress component,  $\langle u'_{p,1} u'_{p,3} \rangle_p$  : triangles

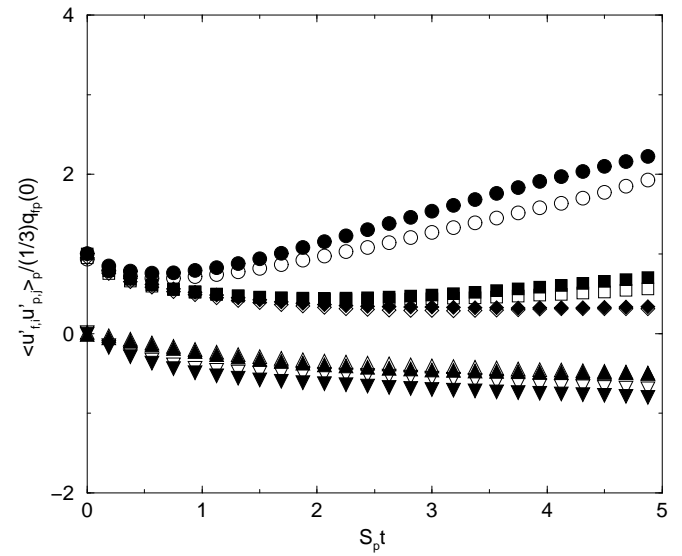
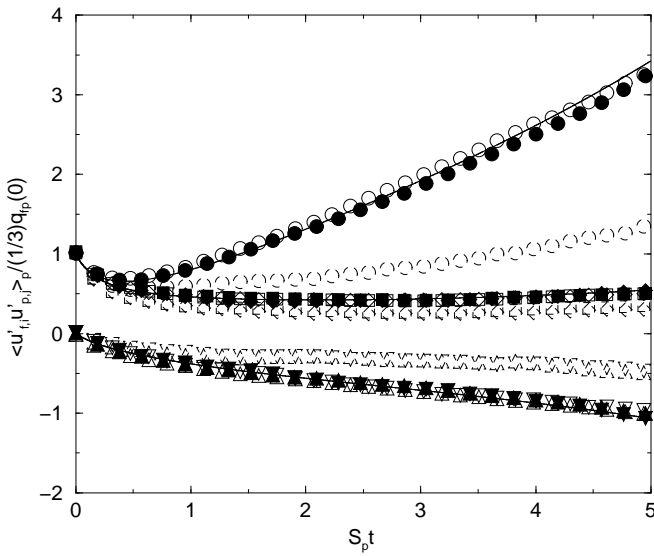


Figure 8. Time development of the fluid-particle velocity correlation. On the left, comparison between stochastic simulation results (symbols) and model predictions from the moment method (lines) without collisions effect (empty symbols), with decorrelated collisions (dashed symbols), with correlated collisions (filled symbols). On the right DPS/LES results without collision effect (empty symbols) and with collision effect (filled symbols). streamwise component,  $\langle u'_{f,1} u'_{p,1} \rangle_p$  : circles, transverse components,  $\langle u'_{f,2} u'_{p,2} \rangle_p$  and  $\langle u'_{f,3} u'_{p,3} \rangle_p$  : squares and diamonds respectively, shear stress components,  $\langle u'_{f,1} u'_{p,3} \rangle_p$  and  $\langle u'_{f,3} u'_{p,1} \rangle_p$  : triangles up and triangles down respectively